

立方晶体中残余应力的 光弹分析方法

周佐平 章小民 李文江

(华南工学院物理系)

摘要——本文根据 $43m$ 、 432 、 $m3m$ 立方晶体光弹各向异性规律, 提出任意晶面任意方向上主应力的弹光方程和压光系数的推导方法; 推导出(111)、(100)、(110)面所对应的二维光弹方程; 并提出对于(100)、(110)面的各向异性平面光弹分析方法。

一、前 言

鉴于立方晶体器件的重要性, 对硅、锗、磷化镓等晶体的残余应力的研究随之发展起来^[1~4], 然而, 对晶体残余应力分析与研究还存在许多不足之处; 有的仅限于分析(111)晶面^[2, 5]; 有的仅给出某些特殊方向弹光方程^[3]; 文献[7]只讨论外加单向应力对应的弹光系数; 文献[6]虽考虑了晶体各向异性, 但仅讨论在特殊条件下主应力方向和光率体主轴重合的情况; 文献[3、4]对主应力在(110)、(100)面上的情况不合理地采用各向同性材料的光弹方法。我们则致力于寻找对各向异性晶体预先不知道主应力方向的平面残余应力的分析方法。

根据张量的矩阵理论, 我们得到立方晶体(111)、(100)、(110)面上任意方向互相正交的主应力所对应的弹光方程和压光系数; 证明了对于(111)面, 可以采用各向同性光弹分析方法; 对(100)、(110)面提出了各向异性的光弹分析方法。这些方法原则上也适用于任何晶体的光弹性分析。

二、基本理论

在线性范围内, 晶体弹光效应矩阵方程的简化表示为^[8, 9, 12]

$$4\beta_m = \pi_{mn}\sigma_n, \quad (m, n=1, 2, 3\cdots 6); \quad (1)$$

β 为介电不渗透性张量; σ 为应力张量; π 为应力弹光系数张量。对具有 $43m$ 、 432 、 $m3m$

对称的立方晶体, 若选晶轴 [100] [010]、[001] 为坐标 (分别为 x_{01} 、 x_{02} 、 x_{03}), 则 π_{mn} 的矩阵

元中只有 π_{11} 、 π_{12} 、 π_{44} 三个独立分量^[8, 9, 12]。

$[\pi_{mn}]$ 的分块矩阵 q_{11} 、 q_{22} 见文献[12]。

对主应力所在的平面选新坐标 x_2 、 x_3 , 而 x_1 垂直于此平面 (见图 1)。设主应力沿 x_2 、 x_3 方向; 光沿 x_1 方向传播; 进行张量的一次变换得坐标系的弹光系数矩阵为

$$\pi'_{mn} = B_{\sigma} \pi_{mn} B_{\sigma}^{-1}; \quad (2)$$

式中变换矩阵 B_{σ} 、 B_{σ}^{-1} 由新坐标 x_1 、 x_2 、 x_3 与旧坐标 x_{01} 、 x_{02} 、 x_{03} 之间的方向余弦 l_1 、 l_2 、 l_3 , m_1 、 m_2 、 m_3 ,

n_1 、 n_2 、 n_3 决定。其中, B_{σ} 、 B_{σ}^{-1} 及其分块矩阵 A_{11} 、 A_{12} 、 A_{21} 、 A_{22} 和相应的转置矩阵 A'_{11} 、 A'_{12} 、 A'_{21} 、 A'_{22} 见文献[12]。

为了取得主应力在 x_2x_3 平面上任意方向的弹光方程, 引入一个反映平面主应力方向的参变量 θ ; 进行张量的二次变换, 选 x'_2 、 x'_3 分别绕 x_1 相对 x_2 、 x_3 转动角 θ , 而令 $x'_1 = x_1$ 。对 $x'_2x'_3x'_1$ 坐标系, 弹光系数矩阵方程为

$$\pi''_{mn} = B_{\sigma'} \pi'_{mn} B_{\sigma'}^{-1} = B_{\sigma'} (B_{\sigma} \pi_{mn} B_{\sigma}^{-1}) B_{\sigma'}^{-1}; \quad (3)$$

式中,

$$B_{\sigma'} = \begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{bmatrix}; \quad B_{\sigma'}^{-1} = \begin{bmatrix} B'_{11} & 2B'_{21} \\ \frac{1}{2} B'_{12} & B'_{22} \end{bmatrix};$$

其中, B'_{11} 、 B'_{12} 、 B'_{21} 、 B'_{22} 是 B_{11} 、 B_{12} 、 B_{21} 、 B_{22} 的转置矩阵; 而

$$B_{11} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos^2 \theta & \sin^2 \theta \\ 0 & \sin^2 \theta & \cos^2 \theta \end{bmatrix}; \quad B_{12} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sin 2\theta & 0 & 0 \\ -\sin 2\theta & 0 & 0 \end{bmatrix};$$

$$B_{21} = \begin{bmatrix} 0 & -\frac{1}{2} \sin 2\theta & \frac{1}{2} \sin 2\theta \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}; \quad B_{22} = \begin{bmatrix} \cos 2\theta & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & -\sin \theta \\ 0 & \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix}。$$

用矩阵分块乘法可得分块表示

$$\pi''_{mn} = \begin{bmatrix} Q_{11} & Q_{12} \\ Q_{21} & Q_{22} \end{bmatrix}; \quad (4)$$

可推得

$$Q_{11} = \left[(B_{11}A_{11} + B_{12}A_{21})q_{11}A'_{11} + (B_{11}A_{12} + B_{12}A_{22})q_{22} \frac{A'_{12}}{2} \right] B'_{11}$$

$$+ \left[(B_{11}A_{11} + B_{12}A_{21})2q_{12}A'_{21} + (B_{11}A_{12} + B_{12}A_{22})q_{22}A'_{22} \right] \frac{B'_{12}}{2}; \quad (5)$$

最后可得到矩阵

$$Q_{21} = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} \\ b_{31} & b_{32} & b_{33} \end{bmatrix}; \quad (6)$$

而

$$Q_{21} = \left[(B_{21}A_{11} + B_{22}A_{21})q_{11}A'_{11} + (B_{21}A_{12} + B_{22}A_{22})q_{22} \frac{A'_{12}}{2} \right] B'_{11} \\ + \left[(B_{21}A_{11} + B_{22}A_{21})2q_{11}A'_{21} + (B_{21}A_{12} + B_{22}A_{22})q_{22}A'_{22} \right] \frac{B'_{12}}{2}; \quad (7)$$

最后可得到矩阵

$$Q_{21} = \begin{bmatrix} b'_{11} & b'_{12} & b'_{13} \\ b'_{21} & b'_{22} & b'_{23} \\ b'_{31} & b'_{32} & b'_{33} \end{bmatrix}. \quad (8)$$

设所讨论的平面主应力 σ_2 和 σ_3 分别沿 x'_2 和 x'_3 方向, 应力张量分块表示为

$$\sigma''_n = \begin{bmatrix} \Sigma \\ 0 \end{bmatrix}; \quad \text{而 } \Sigma = \begin{bmatrix} 0 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \end{bmatrix}.$$

在新坐标系:

$$\Delta\beta'_m = \sigma''_{mn} \sigma''_n \quad (9)$$

分块表示为

$$\begin{bmatrix} \Delta\beta_I \\ \Delta\beta_{II} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Q_{11} & Q_{12} \\ Q_{21} & Q_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Sigma \\ 0 \end{bmatrix};$$

其中,

$$\Delta\beta_I = \begin{bmatrix} \Delta\beta'_1 \\ \Delta\beta'_2 \\ \Delta\beta'_3 \end{bmatrix} = Q_{11}\Sigma; \quad \Delta\beta_{II} = \begin{bmatrix} \Delta\beta'_4 \\ \Delta\beta'_5 \\ \Delta\beta'_6 \end{bmatrix} = Q_{21}\Sigma;$$

因此,

$$\Delta\beta'_2 = b_{22}\sigma_2 + b_{23}\sigma_3 \\ \Delta\beta'_3 = b_{23}\sigma_2 + b_{33}\sigma_3 \\ \Delta\beta'_4 = b'_{12}\sigma_2 + b'_{13}\sigma_3 \quad (10)$$

因为晶体存在应力时折射率椭球方程为

$$\beta'_1 x_1'^2 + \beta'_2 x_2'^2 + \beta'_3 x_3'^2 + 2\beta'_4 x_2' x_3' + 2\beta'_5 x_1' x_3' + 2\beta'_6 x_1' x_2' = 1; \quad (11)$$

垂直于 x'_1 轴且通过原点的椭球截面方程为

$$\beta'_2 x_2'^2 + \beta'_3 x_3'^2 + 2\beta'_4 x_2' x_3' = 1; \quad (12)$$

而无应力时的椭球方程为

$$\beta'_0 x_1'^2 + \beta'_0 x_2'^2 + \beta'_0 x_3'^2 = 1;$$

所以, $\Delta\beta'_1 = \beta'_1 - \beta'_0$; $\Delta\beta'_2 = \beta'_2 - \beta'_0$; $\Delta\beta'_4 = \beta'_4$ 。由此可得:

(1) 当 $\Delta\beta'_4 = 0$ 时, 主应力方向与两支偏振光的振动方向一致, 截面椭圆长短半轴差与 $\beta'_2 - \beta'_3$ 的关系为

$$\beta'_2 - \beta'_3 = \Delta\beta'_2 - \Delta\beta'_3 = \frac{1}{n_l^2} - \frac{1}{n_\perp^2} \doteq -\frac{2\Delta n}{n_0^3}; \quad (13)$$

n_0 为无应力时的折射率; n_l 和 n_\perp 分别为平行和垂直于应力方向的折射率。 $\Delta n = n_l - n_\perp$ 为双折射率差。

(2) 当 $\Delta\beta'_4 \neq 0$ 时, 主应力方向 (x'_2 和 x'_3) 与对应的两偏振光振动方向 (D_2 和 D_3) 不一致; β'_2 和 β'_3 不直接对应椭圆长短半轴。可证明, 这时

$$n_{\parallel} - n_{\perp} = \frac{n_0^3}{2} (\Delta\beta'_2 - \Delta\beta'_3) \quad (14)$$

而

$$\Delta\beta'_2 - \Delta\beta'_3 = [(\Delta\beta'_2 - \Delta\beta'_3)^2 + 4\Delta\beta'_4]^2 \quad (15)$$

设主应力与偏振光电矢量夹角为 α , 可证明^[9]

$$\tan 2\alpha = \frac{2\Delta\beta'_4}{\Delta\beta'_2 - \Delta\beta'_3} \quad (16)$$

可见, 从所计算的 $\Delta\beta'_2 - \Delta\beta'_3$ 及 $\Delta\beta'_4$ 就可得到弹光双折射方程。此方程可用于偏振光干涉测量。双折射光程差为

$$\Delta R = (n_{\parallel} - n_{\perp})d = N\lambda \quad (17)$$

式中, d 是光所通过的晶体厚度; N 为干涉条纹级次; λ 为光波波长。通过光强级次测量可以研究晶体内部应力分布情况, 但当 $\Delta\beta'_4 \neq 0$ 时, 不能采用各向同性的光弹方法。

三、一些重要晶面上的应力双折射

1. 主应力在(111)面上, 观察方向为[111]

取 [111]、 $[\bar{1}10]$ 、 $[\bar{1}\bar{1}2]$ 为三维正交坐标系 $x_1x_2x_3$; 设主应力 σ_2, σ_3 分别沿 x'_2, x'_3 方向, 并分别与 x_2, x_3 成夹角 θ ; 这时 $l_1 = m_1 = n_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}, l_2 = \frac{-1}{\sqrt{2}}, m_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}, n_2 = 0, l_3 = m_3 = -\frac{1}{\sqrt{6}}, n_3 = \frac{2}{\sqrt{6}}$ 。

用上述理论可计算得:

$$\Delta\beta'_4 = 0;$$

$$\Delta\beta'_2 - \Delta\beta'_3 = \frac{1}{3} [\pi_{11} - \pi_{12} + 2\pi_{44}] (\sigma_2 - \sigma_3);$$

因此,

$$\Delta n = -\frac{n_0^3}{6} (\pi_{11} - \pi_{12} + 2\pi_{44}) (\sigma_2 - \sigma_3) = c_{\lambda} (\sigma_2 - \sigma_3) \quad (18)$$

可见方程与 θ 角无关, 即与各向同性物质性质相似, 主应力在(111)面上, 在不同方位, 双折射率差及压光系数不变。因此, 可以用简单的各向同性光弹方法处理; 由于大部分硅、锗单晶器件在(111)面上制作, 这一点很重要。即可以用简单的各向同性光弹方法来研究器件制作过程的加工残余应力以及它对器件性能的影响^[1,2]。

2. 主应力在(100)面上, 观察方向为[100]

取 [100]、 $[010]$ 、 $[001]$ 为三维正交坐标系 $x_1x_2x_3$; 设主应力 σ_2, σ_3 分别沿 x'_2, x'_3 方向, 它分别和 x_2, x_3 的夹角为 θ , 这时 $l_1 = m_2 = n_3 = 1; m_1 = n_1 = l_2 = n_2 = l_3 = m_3 = 0$ 。

用上述方法可得:

$$\Delta\beta'_2 - \Delta\beta'_3 = [(\pi_{11} - \pi_{12}) \cos^2 2\theta + \pi_{44} \sin^2 2\theta] (\sigma_2 - \sigma_3);$$

$$\Delta\beta'_4 = -\frac{\sin 4\theta}{4} (\pi_{11} - \pi_{12} - \pi_{44}) (\sigma_2 - \sigma_3) \quad (19)$$

$G = \left| \frac{\Delta\beta'_4}{\sigma_2 - \sigma_3} \right|$ 与 θ 角的关系见图 2, 图中数值以硅来计算^[12]; 当光波长 $\lambda = 1.11 \mu\text{m}$

$$\pi_{11} - \pi_{12} = -12.22 \times 10^{-13} \text{ m}^2/\text{N};$$

$$\pi_{44} = -6.50 \times 10^{-13} \text{ m}^2/\text{N};$$

$$\Delta\beta'_2 - \Delta\beta'_3 = [(\pi_{11} - \pi_{12})^2 \cos^2 2\theta + \pi_{44}^2 \sin^2 2\theta]^{1/2} (\sigma_2 - \sigma_3);$$

双折射率差

$$\Delta n = \frac{n_0^3}{2} [(\pi_{11} - \pi_{12})^2 \cos^2 2\theta + \pi_{44}^2 \sin^2 2\theta]^{1/2} (\sigma_2 - \sigma_3) = C_\lambda (\sigma_2 - \sigma_3); \quad (27)$$

所以,

$$\tan 2\alpha = - \frac{\sin 4\theta (\pi_{11} - \pi_{12} - \pi_{44})}{2[(\pi_{11} - \pi_{12}) \cos^2 2\theta + \pi_{44} \sin^2 2\theta]}; \quad (21)$$

可见, Δn 和 α 均与方位角 θ 有关, θ 确定后, Δn 与主应力差有简单的线性关系, 而 α 与主应力大小无关。 C_λ 也是 θ 的函数, 它有三个极值点(对应于 $\theta = 0, 90^\circ, 45^\circ$)。对硅来说, $(\pi_{11} - \pi_{12})^2 > \pi_{44}^2$, 因而当 $\theta = 0, 90^\circ$ 时, $|C_\lambda|$ 为极大值,

$$|C_\lambda| = \frac{n_0^3}{2} (\pi_{11} - \pi_{12});$$

而 $\theta = 45^\circ$ 时, 为极小值,

$$|C_\lambda| = \frac{n_0^3}{2} \pi_{44}.$$

$|C_\lambda|$ 与 θ 的关系见图 3(具体数值以硅来计算, 如上, 在 $\lambda = 1.11 \mu\text{m}$ 时, $n_0 = 3.548$ ^[10])。 $|C_\lambda|$ 的大小反映了光弹的灵敏度的大小, 所以从图 3 即可见光弹灵敏度与方位角 θ 的关系, 根据我们的测量条件^[1, 2, 12], 可测量的硅最小主应力差为 $\sigma_1 - \sigma_2 = \frac{\lambda/1000}{C_\lambda} \doteq 41 \text{ N/m}^2$ 。

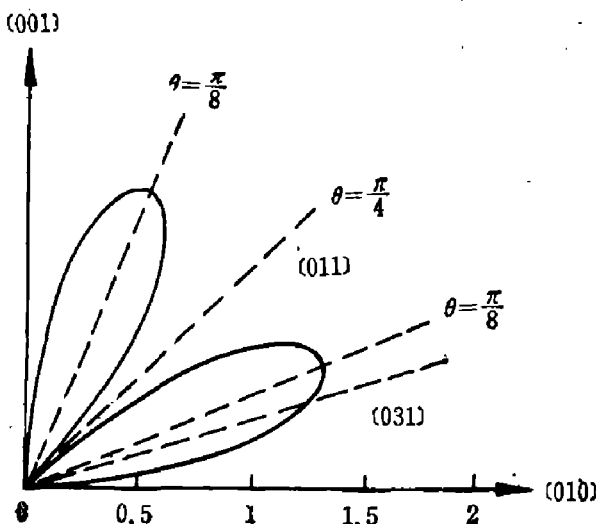


图 2 $G-\theta$ 关系曲线 $G(\times 10^{-13} \text{ m}^2/\text{N})$

Fig. 2 Curve of $G-\theta$ relation.

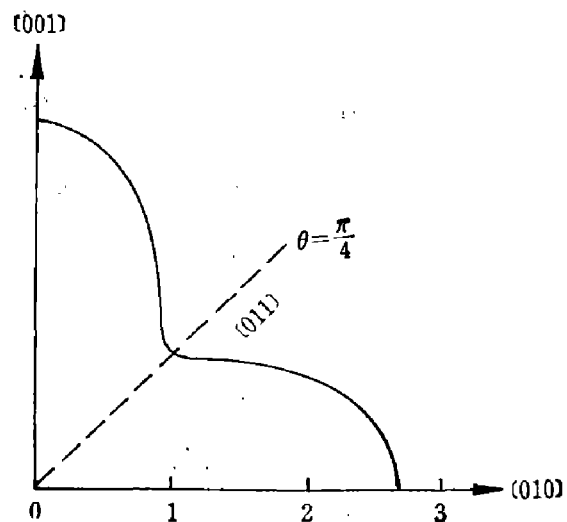


图 3 $|C_\lambda|-\theta$ 关系曲线

Fig. 3 Curve of $|C_\lambda|-\theta$ relation.

在 $|C_\lambda|$ 极值处 $\Delta\beta'_4 = 0$, 晶体的快(或慢)轴与主应力方向一致, 测量时可用各向同性光弹方法进行。但对于其它情况, $\Delta\beta'_4 \neq 0$, 这时要用偏振光干涉测量残余应力, 必须注意到: 根据等倾线测得的方向不直接是主应力方向, 而是快(或慢)轴的倾角 φ 。文献[4]没有考虑到这一点, 因而结果须修正。我们认为, 若选取偏振系统坐标方向为 $[001]$, 则 α, φ, θ 三者关

系如图 4 所示。

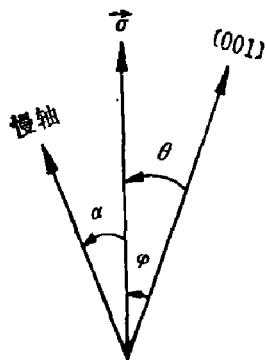


图 4 α, φ, θ 关系
Fig. 4 Relation among α, φ, θ .

$$\varphi = \alpha + \theta. \quad (22)$$

按照上述计算用的坐标系, α, φ, θ 相对起点逆时针为正, 顺时针为负。根据晶体的 $\pi_{11} - \pi_{12}, \pi_{44}$ 的数据和符号以及式(21)可以确定 α 的正、负。

根据式(21)与式(22), 通过计算机可解出 α , 用测出的 φ 可以计算得主应力的方向角 $\theta = \varphi - \alpha$ 。通过干涉图的等差线测定条纹级次 N , 从式(17)可得 Δn , 从式(20)得主应力差 $(\sigma_2 - \sigma_3)$, 因而该平面的光弹分析问题基本得以解决。

3. 主应力在(110)面, 观察方向为[110]

取 $[110], [\bar{1}10], [001]$ 为三维正交坐标 $x_1 x_2 x_3$, 设主应力 σ_2, σ_3 方向分别沿 x'_2, x'_3 方向, 并分别与 x_2, x_3 成夹角 θ 。这时

$$l_1 = m_1 = n_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad l_2 = -\frac{1}{\sqrt{2}}, \quad n_3 = 1, \\ n_1 = n_2 = l_3 = m_3 = 0.$$

根据上述方法可得:

$$\Delta\beta'_2 - \Delta\beta'_3 = \left[(\pi_{11} - \pi_{12}) \left(\frac{1}{2} \cos^4 \theta + \sin^4 \theta - \frac{3}{8} \sin^2 2\theta \right) + \pi_{44} \left(\frac{1}{2} \cos^4 \theta + \frac{7}{8} \sin^2 2\theta \right) \right] \sigma_2 \\ + \left[(\pi_{11} - \pi_{12}) \left(\frac{3}{8} \sin^2 2\theta - \frac{1}{2} \sin^4 \theta - \cos^4 \theta \right) - \pi_{44} \left(\frac{7}{8} \sin^2 2\theta + \frac{1}{2} \sin^4 \theta \right) \right] \sigma_3; \quad (23)$$

$$\Delta\beta'_4 = \sin 2\theta (\pi_{11} - \pi_{12} - \pi_{44}) \left[\left(\frac{1}{2} \sin^2 \theta - \frac{1}{4} \cos^2 \theta \right) \sigma_2 - \left(\frac{1}{4} \sin^2 \theta - \frac{1}{2} \cos^2 \theta \right) \sigma_3 \right]; \quad (24)$$

因为

$$\Delta\beta''_2 - \Delta\beta''_3 = [(\Delta\beta'_2 - \Delta\beta'_3)^2 + 4\Delta\beta_4'^2]^{1/2}, \\ \Delta n = \frac{n_0^3}{2} (\Delta\beta''_2 - \Delta\beta''_3) = f_1(\theta, \sigma_2, \sigma_3), \quad (25)$$

$$\tan 2\alpha = \frac{2\Delta\beta'_4}{\Delta\beta'_2 - \Delta\beta'_3} = f_2(\theta, \sigma_2, \sigma_3), \quad (26)$$

所以在一般情况下弹光方程与主应力在此面上的方位角 θ 有关, 而且双折射率不再和主应力差成正比, 光率体主轴与主应力方向也不一致, 这时用偏振光干涉研究应力分布就比较复杂。我们认为可以根据立方晶体材料的压光系数的色散关系^{[4][12]}, 利用带边与远离带边光弹系数的差别, 用两个不同波长进行测量, 相应得到 $\Delta n'$ 与 $\Delta n''$ 两个方程, 然后用等倾线测出快轴夹角 $\varphi = \alpha + \theta$, 如此得到三个方程, 原则上可解出 θ, σ_2 与 σ_3 。

若已知主应力方向, 求解可以简化。例如当 $\theta = 0$, 即主应力分别沿 $[001], [\bar{1}10]$ 方向, 则 $\Delta\beta'_4 = 0$,

$$\Delta n = -\frac{n_0^3}{2} \left[\frac{1}{2} (\pi_{11} - \pi_{12} + \pi_{44}) \sigma_2 - (\pi_{11} - \pi_{12}) \sigma_3 \right]. \quad (27)$$

只要用两个波长测量, 得到两个方程, 便能解出 σ_2 和 σ_3 。

四、结 论

1. 应用张量矩阵变换的方法,可以推得上述三类立方晶体任意晶面上任意方向主应力的弹光方程,这使得研究晶体弹光性质可在更一般的情况下进行。这一方法原则上可用于其它非立方晶体。

2. 在(111)和(100)晶面上,双折射率差和主应力差成比例。在(111)面上,沿垂直于晶面的方向观察,弹光方向、压光系数与平面主应力方向无关,可以采用熟知的各向同性材料的平面光弹分析方法;对于(100)晶面,应用本文的分析方法和结果,结合常规的光弹方法,仍可以定量测出晶面上的残余应力;对于(110)面,则要用两个波长单色光,利用光弹性的色散,结合本文导出的结果,通过计算机处理,才能定出主应力和主应力差。

参 考 文 献

- [1] 周佐平等,红外研究,2 (1983), 3: 219~222.
- [2] 周佐平,红外研究,2 (1983), 4: 271~274.
- [3] Kotake H. and Takusu S., *Solid-State Science and Technology*, 127 (1980), 179.
- [4] Kotake H. et al., *Journal of Crystal Growth*, 50 (1980), 743~751.
- [5] Koechner W. and Rice D. K., *IEEE J. Quantum Electron*, QE-6 (1970), 557.
- [6] Joiner R. E. et al., *Appl. Phys. Letters*, 30 (1977), 485.
- [7] Schmidt-Tiedmann K. J., *Appl. Phys.* 32 (1961), 2058.
- [8] 蒋民华,晶体物理,山东科学技术出版社,(1980)。
- [9] Narasim Hamuty T. S., *Photoelastic and Electro-optic properties of crystals*, plenum press, N. Y. and LONDON, (1981), 198~205.
- [10] Higginbotham C. W. et al., *Phys. Rev.*, 184 (1969), 821.
- [11] Calvin D. Salzberg and John J. Villa, *J. Opt. Soc. Am.*, 47 (1957), 244.
- [12] 周佐平等,红外研究,5 (1986), 1: 51~58.

PHOTOELASTIC ANALYSIS OF RESIDUAL STRESS IN CUBIC CRYSTALS

ZHOU ZUOPING ZHANG XIAOMIN LI WENGJIANG

(Physics Department, South China Institute of Technology)

ABSTRACT

Derivation method for the relative piezo-optic coefficients and elasto-optic equations of the principal stresses in arbitrary directions on arbitrary planes of cubic crystals with symmetries of $\bar{4}3m$, 432 , $m\bar{3}m$ is presented. The two-dimensional elasto-optic equations corresponding to (111), (100), (110) planes are derived. A method for analysing the anisotropic planar photoelasticity on the (100) (110) planes is proposed.