

Винахід відноситься до області технології обробки полярних оптично-анізотропних одновісних кристалів і призначений для визначення напрямку орієнтації оптичної вісі кристала. Може бути використаний при виготовленні напівпровідникових приладів для квантової, акусто-, мікро-, оптоелектроніки.

Відомий спосіб визначення напрямку орієнтації оптичної вісі в одновісному кристалі по коноскопічній фігурі (Меланхолин Н.М. Методы исследования оптических свойств кристаллов. - М.: Наука, 1970. - 152с.). Коноскопічний метод побудований на тому, що через пластинку, вирізану із монокристала з відполірованими паралельними гранями, пропускають пучок лінійно-поляризованих променів, які, проходячи через кристал і об'єктив мікроскопа, сходяться в деякій точці на фокальній площині об'єктива, створюючи в даній точці інтерференційне забарвлення. Сукупність таких пучків дає на фокальній площині об'єктива складну картину інтерференції, вигляд якої залежить від різниці ходу та напрямку коливань в різнонаправлених світлових пучках, що пройшли через досліджувану кристалічну пластинку, від орієнтації кристала та значення двозаломлення, товщини пластинки. Спосіб дозволяє наглядно спостерігати її визначати (з точністю до 10%) напрямку орієнтації оптичної вісі в кристалах, які є прозорі у видимій області спектра.

Недоліком даного способу є:

1. Необхідність обробки двох паралельних поверхонь кристала.

2. Використання способу можливе тільки для кристалів, прозорих у видимій області спектра.

3. По вигляду коноскопічної фігури далеко не завжди можна зробити однозначний висновок про напрямку орієнтації оптичної вісі кристала. Для оптично-анізотропних одновісних кристалів таке закінчення можна зробити тільки в тих випадках, коли коноскопічна фігура спостерігається в напрямках, відносно близьких до оптичної вісі кристала, тобто, коли середина ізогіри має вигляд чорного хреста і спостерігається в полі зору в схрещених ніколях.

Існує інший винахід для визначення напрямку орієнтації оптичної вісі полярних оптично-анізотропних одновісних кристалів, побудований на поляризаційних вимірюваннях (Авт. св. СССР №502433, кл. H01S3/12, G01J4/00 от 05.02.76). Електромагнітне випромінювання, що пройшло через аналізатор, фіксують фотоприймачем, сигнал з якого подають на реєструючий прилад. Обертаючи аналізатор визначають напрямок коливань електричного вектора хвилі. Як один із відбивачів резонатора газового лазера використовують одновісний оптично-анізотропний монокристал, що має в області частот генерації лазера коефіцієнт відбивання для звичайного променя більший, ніж для незвичайного. Напрямок коливань електричного вектора випромінювання буде перпендикулярний площині, в якій лежить оптична вісь кристала. В іншому випадку, коли коефіцієнт відбивання для звичайного променя менший коефіцієнта відбивання для незвичайного, коливання електричного вектора випромінювання відбуваються в площині, що містить оптичну вісь кристала. Описаний спосіб використовують при визначенні напрямку орієнтації оптичної вісі одновісного кристала за умови, що оптична вісь розміщена в площині, паралельній до відполірованої поверхні кристала.

Основними недоліками даного способу є неможливість визначення напрямку орієнтації оптичної вісі в кристалі довільної форми, низька точність результатів та висока собівартість способу.

Найбільш близьким по технічній сутності до запропонованого винаходу є спосіб визначення напрямку орієнтації оптичної вісі в полярних оптично-анізотропних кристалах (Авторское свидетельство СССР №1771276, кл. G01N21/17, 21/63 от 30.01.90). Спосіб включає опромінення світлом плоскої поверхні пластини прозорого в інфрачервоній області (ІЧ) кристала. Обертаючи кристал з плоскпаралельними поверхнями навколо вісі, перпендикулярної до опроміневої поверхні, реєструють інтенсивність другої гармоніки (ДГ). В даному випадку користуються двома методами вимірювання: в першому для одержання ДГ реєструють світловий потік, що падає під кутом дзеркального відбивання від поверхні кристала, в другому ДГ в напрямку розповсюдження електромагнітного випромінювання - схема на пропускання. Електромагнітне випромінювання поляризують або в площині падіння (р-поляризація), або перпендикулярно їй (s-поляризація), тобто фіксують р- або s-компоненти інтенсивності ДГ. Поляризацію вданому способі задавалась одна із чотирьох можливих варіантів: s-s; s-p; p-s; p-p, де перший символ вказує напрямки поляризації падаючого електромагнітного випромінювання, а другий - яка компонента поляризації ДГ реєструвалась. За допомогою обчислювальної машини та відомими у літературі рівняннями розраховують криві при різних значеннях кута та вказаних поляризаціях. Для визначення напрямку орієнтації оптичної вісі кристала реєструють експериментальну залежність інтенсивності електромагнітного випромінювання від кута повороту кристала. Одержану поляризаційно-кутову залежність порівнюють з набором модельних залежностей, розрахованих на ЕОМ. Визначення напрямку орієнтації оптичної вісі полярного кристала відбувається при співпаданні теоретичної кривої з експериментальною. Вказаний спосіб використовують при визначенні напрямку орієнтації оптичної вісі в прозорих у ІЧ області одновісних полярних кристалах. Точність визначення напрямку орієнтації оптичної вісі кристала при довільних кутах і вказаних чотирьох поляризаціях електричного вектора E порядку 8 - 10%.

Недоліки прототипа полягають у наступному:

1. Неможливо визначити напрямку орієнтації оптичної вісі кристала при довільній поляризації електромагнітного випромінювання, що пов'язано з відсутністю математичної моделі для розрахунку поляризаційно-кутової залежності.

2. Спосіб має великий час одержання результатів та їх високу собівартість.

3. Математична модель не враховує наявності на поверхні порушеного шару, що існує навіть при високому ступені обробки поверхні кристала та суттєво впливає на інтенсивність другої гармоніки, а, отже, значно погіршує вихідні дані щодо визначення напрямку орієнтації оптичної вісі кристала.

В основу винаходу поставлена задача підвищення чутливості та точності визначення напрямку орієнтації оптичної вісі в оптично-анізотропних полярних одновісних кристалах, розширення типів досліджуваних кристалів, а також спрощення експерименту та скорочення часу одержання результатів.

Поставлена задача досягається тим, що на плоску поверхню оптично-анізотропного одновісного

полярного монокристала направляють пучок лінійно-поляризованого ІЧ світла з області залишкових променів, реєструють залежність коефіцієнта відбивання від частоти світла і по цій залежності визначають значення резонансної частоти ω_R при значенні коефіцієнта відбивання, що визначається із рівняння

$$R(\omega_R) = 0,35 \cdot \exp(\epsilon_{01} - \epsilon_{001}) / (\epsilon_{011} - \epsilon_{0011}),$$

де $\epsilon_{01,11}$; $\epsilon_{001,11}$ - статичні та високочастотні діелектричні проникності оптично-анізотропного кристала при $E \perp C$ і $E \parallel C$. При $E \perp C$ $\omega_R = \omega_{T1}$, а при $E \parallel C$ $\omega_R = \omega_{T11}$. При довільних кутах ϕ значення ω_R змінюється від ω_{T1} до ω_{T11} .

По значенню резонансної частоти (графік, таблиця) шляхом порівняння з розрахунковими даними, роблять висновок про орієнтацію кристалографічної вісі відносно напрямку розповсюдження електричного вектора ІЧ світла.

Авторами вперше встановили, що в області залишкових променів існує залежність коефіцієнта відбивання від напрямку орієнтації оптичної вісі полярного кристала і ця залежність більш чутлива до зміни напрямку орієнтації оптичної вісі в порівнянні з прототипом.

Суть запропонованого винаходу заключається в наступному. Відомий широкий клас полярних кристалів, до яких відносяться більшість подвійних, потрійних та багатокомпонентних діелектричних та напівпровідникових з'єднань, у яких проявляється значна доля (більше 10%) іонного хімічного зв'язку. В таких кристалах існують поздовжні і поперечні коливання. При поздовжніх коливаннях зміщення атомів відбувається паралельно напрямку поширення коливань кристалічної ґратки і дані хвилі являють собою хвилі зсуву. Поперечні коливання можуть бути представлені як суперпозиція двох взаємно ортогональних типів коливань (наприклад, лінійно-поляризованих коливань із взаємно перпендикулярним напрямком зміщення або циркулярно-поляризованих лівої та правої компонент), тобто поперечні коливання можуть бути розкладені на дві взаємно ортогональні компоненти, тоді як поздовжні коливання містять тільки одну компоненту.

Кристали, що відповідають одержаній умові

$$\epsilon_x = \epsilon_y \neq \epsilon_z, \quad (1)$$

називаються одновісними, а напрямок в кристалі, по якому електромагнітне випромінювання не зазнає двозаломлення променя, називається оптичною віссю, ϵ_x , ϵ_y , ϵ_z - проекції діелектричної проникності на вісі x, y, z.

В області залишкових променів для однофононного резонансу частотна залежність оптичних констант в області енергій фотонів поблизу частоти поперечного оптичного фону може бути розрахована по моделі одного елементарного осцилятора.

Діелектрична поляризація кристала P, електричний вектор E світлової хвилі і зведене зміщення іонів відносно один одного без врахування затухання та запізнення пов'язані між собою феноменологічними рівняннями:

$$W \equiv b_{11}w + b_{12}E, \quad (2)$$

$$P = b_{21}w + b_{22}E. \quad (3)$$

Перший член в правій частині рівняння руху (2) являє собою локальну пружну повертальну силу, другий - ефект кулонівської взаємодії з рештою зарядів. Перший член в правій частині рівняння поляризації (3) викликаний відносним зміщенням іонів, а другий - ефектом поляризації іонів. Коефіцієнти b_{11} , b_{12} , b_{21} , b_{22} є скалярами. Лінійність рівняння, подібно закону Гука, є результат нехтування членами порядку вище 2 - го в потенціальних функціях (Борн М., Кунь Х. Динамическая теория кристаллических решеток. - М.: Иностранная литература, 1958. - 488с.).

Закон дисперсії і діелектричної проникності $\epsilon(\omega)$ одержимо із (2) і (3) за допомогою розв'язків:

$$E = E_0 \exp(i\omega t), \quad w = w_0 \exp(i\omega t), \quad (4)$$

$$P = P_0 \exp(i\omega t).$$

Рівняння (2) і (3) з урахуванням (4) набуде вигляду:

$$-\omega^2 w = b_{11}w + b_{12}E, \quad P = b_{21}w + b_{22}E. \quad (5)$$

Виключаючи із останніх рівнянь (5) w і врахувавши рівність $b_{12} = b_{21}$ для P і E, можна написати співвідношення:

$$P = (b_{22} + b_{12}^2 / (-b_{11} - \omega^2)) E. \quad (6)$$

Звідси безпосередньо слідує вираз:

$$\epsilon(\omega) = 1 + 4\pi b_{22} + (4\pi b_{12}^2 / (-b_{11} - \omega^2)) \quad (7)$$

За законом електростатичної індукції:

$$D = E + \epsilon_0^{-1} P = \epsilon(\omega) E.$$

Для представлення $\epsilon(\omega)$ функцією характеристичних параметрів кристала скористаємось мікроскопічною теорією коливання ґратки, з якої слідує:

$$b_{11} = -\chi / M^* + (4\pi / 3) (Ze)^2 (NA / M^*), \quad b_{12} = -b_{21} = Ze(N / M^*)^{1/2} A, \\ b_{22} = N(\alpha_+ + \alpha_-) A, \quad A = [1 - (4\pi / 3) N(\alpha_+ + \alpha_-)^{-1}], \quad (8)$$

де Ze - заряд іона, α_+ і α_- - атомні поляризованості позитивних і негативних іонів; χ - параметр, що пов'язує зміщення іонів та силу їх взаємодії, M^* - ефективна маса іона.

Фізичний зміст першого члена правої частини рівняння руху (2) $b_{11} = -\omega_T^2$; де ω_T - резонансна частота поперечних оптичних коливань ґратки.

Скориставшись співвідношеннями Лоренц - Лорентца і Сігетті, коефіцієнти b_{12} і b_{22} запишемо у вигляді:

$$b_{12} = b_{22} = \omega_T [\epsilon_0 - \epsilon_{00}] / 4\pi^{1/2} = \\ = [\epsilon_{00}(\omega_L^2 - \omega_T^2) / 4\pi]^{1/2}. \quad (9)$$

Формула (7) з урахуванням (9) переписується:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_{00} + \omega_T^2 (\epsilon_0 - \epsilon_{00}) / (\omega_T^2 - \omega^2). \quad (10)$$

Внаслідок оптичної анізотропії кристалічної ґратки сила взаємодії електромагнітного випромінювання з іонами кристала змінюється при зміні напрямку коливань. Отже, в оптично-анізотропних одновісних полярних кристалах при побудові математичної моделі необхідно розглядати чотири характеристичні частоти ω_{T1} ; ω_{L1} ; ω_{T11} ; ω_{L11} (де ω_{T1} ; ω_{T11} - резонансні частоти поперечних, а ω_{L1} ; ω_{L11} - поздовжніх оптичних фононів при орієнтації електричного вектора $E \perp C$ і $E \parallel C$). Характеристичні частоти пов'язані між собою співвідношенням Ліддейна - Сакса - Тейлера:

$$\omega_{L1,11} = \omega_{T1,11} (\epsilon_{01,11} / \epsilon_{001,11})^{1/2}, \quad (11)$$

$\epsilon_{01,11}$; $\epsilon_{001,11}$ - статичні та високочастотні діелектричні проникності оптично-анізотропного кристала при $E \perp C$ і $E \parallel C$.

Для полярних кристалів проміжок в спектрі ІЧ відбивання між частотами поперечного ω_T та поздовжнього ω_L оптичних фононів називається областю залишкових променів. Область залишкових променів можна описати за допомогою залежності оптичних сталих кристала (показника заломлення та коефіцієнта поглинання) від частоти падаючого електромагнітного випромінювання. Показник заломлення $n(\omega) = \epsilon(\omega)^{1/2}$ в області $\omega_T - \omega_L$ є комплексною величиною, тому має місце рівність: $\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)$ (де $\epsilon_1(\omega)$ - дійсна, а $\epsilon_2(\omega)$ - уявна частина діелектричної проникності кристала). Дана область характеризується високим коефіцієнтом відбивання ($\leq 100\%$).

При наявності вільних носіїв зарядів в зоні провідності з плазмовою частотою ω_p і коефіцієнтами згасання плазмонів та фононів γ_p і γ_{ph} рівняння (10) набуває вигляду

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_{00} + [\omega_T^2 (\epsilon_0 - \epsilon_{00}) / (\omega_T^2 - \omega^2 + \\ + i\gamma_{ph}\omega)] - [\omega_p^2 \epsilon_{00} / (\omega(\omega + i\gamma_p))]. \quad (12)$$

Залежність коефіцієнта відбивання від частоти падаючого нормально до поверхні кристала електромагнітного випромінювання можна розрахувати при врахуванні фононної та плазмової підсистем на основі рівності (12)

$$R(\omega) = \{K_0^{1/2} - [2(K_0^{1/2} + \epsilon_1)]^{1/2} + 1\} / \\ / \{K_0^{1/2} + [2(K_0^{1/2} + \epsilon_1)]^{1/2} + 1\}, \quad (13) \\ \epsilon_1 = A + B(1 - y_1) / [(1 - y_1)^2 + Dy_1] - A / (D_p + x_1), \\ \epsilon_2 = B(1 - y_1)^{1/2} / [(1 - y_1)^2 + Dy_1] + \\ + A(D_p/x_1)^{1/2} / (D_p + x_1), \\ K_0 = \epsilon_1^2 + \epsilon_2^2, \\ A = \epsilon_{01,11}, B = \epsilon_{01,11} - \epsilon_{001,11}, \\ y_1 = (\omega / \omega_{T1,11})^2, \\ D = (\gamma_{ph} / \omega_{T1,11})^2, D_p = (\gamma_{ph} / \omega_{T1,11})^2, \\ x_1 = (\omega / \omega_{p1,11})^2.$$

ω - частота ІЧ випромінювання (в см^{-1}).

Рівняння (13) є залежність коефіцієнта відбивання від частоти падаючого нормально до поверхні монокристала електромагнітного випромінювання для одновісного оптично-анізотропного полярного монокристала при двох орієнтаціях $E \perp C$ і $E \parallel C$. Рівняння (13) значно простіше, ніж в прототипі, однак воно має ті ж самі недоліки, що і прототип, а саме: неможливість розрахунку $R(\omega)$ при довільному напрямку орієнтації оптичної вісі кристала відносно напрямку падіння.

Для збільшення функціональних можливостей способу авторами запропонована математична модель, що дозволяє неруйнівним методом визначати напрямки орієнтації оптичної вісі полярного кристала.

Формула (13) справедлива для ортогональних орієнтацій $E \perp C$ і $E \parallel C$, а в запропонованій математичній моделі значення характеристичних параметрів полярного кристала при обчисленні коефіцієнта відбивання по формулі (13) задають як функцію кута φ (де φ - кут між напрямком електричного вектора E та оптичної вісі кристала), тобто:

$$\omega_{Tk}(\varphi) = \omega_{T1} - (\omega_{T1} - \omega_{T11}) \cos(\varphi), \\ \epsilon_{0k}(\varphi) = \epsilon_{011} - (\epsilon_{011} - \epsilon_{01}) \cos(\varphi), \quad (14) \\ \epsilon_{00k}(\varphi) = \epsilon_{0011} - (\epsilon_{0011} - \epsilon_{001}) \cos(\varphi)$$

де $\omega_{T11} = \omega_{Tk}(\varphi)$, $\epsilon_{01} = \epsilon_{0k}(\varphi)$, $\epsilon_{001} = \epsilon_{00k}(\varphi)$

Резонансна частота ω_R в області залишкових променів полярних одновісних оптично-анізотропних кристалів визначається по формулі (13) з урахуванням (14). Для кожного полярного кристала ω_R є величина стала, яка належить ІЧ діапазону, що зручно при реєстрації експериментальних спектрів ІЧ відбивання на промислових приладах вітчизняного та закордонного виробництва з точністю (1 - 2%). При обробці поверхні полярних одновісних оптично-анізотропних монокристалів абразивами з дисперсностями $\varnothing \leq 1 \mu\text{м}$ та послідовним хімічним травленням на поверхні кристалів утворюються порушені шари товщиною $d \ll \lambda$ (λ - довжина хвилі ІЧ випромінювання). Авторами встановлено, що навіть при товщині порушеного шару $\sim 1 \mu\text{м}$ то резонансна частота ω_R визначається тільки параметрами кристалічної ґратки та напрямком орієнтації

оптичної вісі С і точністю визначання напрямку орієнтації оптичної вісі не змінюється. В прототипі кожен із перерахованих параметрів впливає на точність визначення напрямку орієнтації оптичної вісі кристала.

Авторами встановлено, що при коефіцієнті відбивання $R(\omega_R) = 0,35 \cdot \exp(\epsilon_{01} - \epsilon_{001}) / (\epsilon_{011} - \epsilon_{001})$, на значення частоти поперечного оптичного фонона має вплив лише зміна напрямку орієнтації оптичної вісі полярного кристала.

Підвищення чутливості способу та точності визначення напрямку орієнтації оптичної вісі кристала відбувається завдяки високому коефіцієнту відбивання в області залишкових променів (співвідношення сигнал - шум $\geq 10^3$) та використання у розрахунку спектра відбивання $R(\omega)$ розробленої авторами математичної моделі, що дозволяє визначати напрямок орієнтації оптичної вісі на відміну від прототипа при будь-якій поляризації електричного вектора і куті повороту кристала.

Схема досліду по визначенню напрямку орієнтації оптичної вісі одновісних полярних оптично-анізотропних монокристалів достатньо проста і вимагає плоскої поверхні кристала товщиною, що перевищує довжину, падаючої електромагнітної хвилі. Реєстрація коефіцієнта відбивання відбувається в області частоти поперечного оптичного фонона при $E \perp C$ (від $\omega_{T1} - 50$ до $\omega_{T1} + 50 \text{ см}^{-1}$), яка для конкретного полярного кристала є величина стала і відома з літературних джерел. Резонансна частота ω_R поперечного оптичного фонона визначається як частота, що відповідає найбільш крутій точці довгохвильового краю області залишкових променів. Коефіцієнт відбивання в даній точці

$R(\omega_R) = 0,35 \cdot \exp(\epsilon_{01} - \epsilon_{001}) / (\epsilon_{011} - \epsilon_{001})$. Для визначення напрямку орієнтації оптичної вісі одновісних полярних монокристалів експериментальне значення резонансної частоти ω_R порівнюють з розрахунками, проведеними по формулі (13), які представлені в таблиці або на графіку. Співпадання теоретичних і експериментальних значень ω_R свідчить про однозначність визначення напрямку орієнтації оптичної вісі полярного кристала.

Коли експериментальні значення ω_R змінюються від ω_{T1} до ω_{T11} , це значить, що оптична вісь лежить в площині поверхні кристала. Різниця між $|\omega_{T1} - \omega_R|$ і дає можливість визначити напрям оптичної вісі відносно нормалі до кристалу.

Спрощення способу визначення напрямку орієнтації оптичної вісі одновісних полярних кристалів відбувається за рахунок того, що:

1. Реєстрація резонансної частоти ω_R полярного кристала відбувається в вузькому частотному діапазоні ($\omega_{T1} \pm 50 \text{ см}^{-1}$, що є незмінним та відомим для даного кристала).

2. Коефіцієнт відбивання в області резонансної частоти ω_R визначається з точністю 1 - 2% на стандартних промислових приладах без необхідності їх модернізації (заміна фільтрів, ґраток, приставки для відбивання і т.д.), що розширює можливості застосування способу, спрощує та робить спосіб універсальним. В прототипі для визначення ДГ необхідно реєструвати інтенсивність ІЧ випромінювання як при відбиванні від полярного кристала, так і пропусканні через нього. Максимальна точність одержаних результатів 8 - 10%.

3. В запропонованому методі на відміну від прототипа достатньо, щоб одна із сторін монокристала мала плоску поверхню і не потрібно виготовляти тонкі монокристалічні пластини, які повинні мати плоскопаралельні поверхні та бути прозорими в ІЧ діапазоні.

Скорочення часу одержання кінцевих результатів в запропонованому способі відбувається завдяки:

1) використанню більш простих у порівнянні з прототипом формул для визначення напрямку орієнтації оптичної вісі одновісних полярних монокристалів, тоді як у прототипі одержання відповідних залежностей пов'язано з розв'язанням складних рівнянь Фур'є.

2) в прототипі потрібно виготовляти тонкі монокристалічні пластини, що повинні мати плоскопаралельні поверхні, в даному методі достатньо, щоб одна із сторін монокристала мала плоску поверхню.

Таким чином, запропонований спосіб у порівнянні з прототипом має ряд переваг:

1. Потребує вдвічі меншої працевісності обробки монокристалів.

2. Математична модель має значно ширші функціональні можливості і простіша, ніж в прототипі.

3. Експериментальні дані можна одержувати за допомогою стандартних промислових приладів без необхідності їх модернізації.

Приклад. Як приклад вибрані дослідження монокристалів окису цинку. Окис цинку (цинкіт) ZnO є напівпровідником з просторовою групою вюртцита $R6_{3mc}$. Елементарна комірка складається з двох молекул ZnO . Атоми кисню утворюють щільну гексагональну упаковку. Атоми цинку розміщені в центрах тетраедрів, утворених атомами кисню. Періоди комірок за кімнатної температури ($T = 293\text{K}$) $a = 0,3249858 \text{ нм}$, $c = 0,52066 \text{ нм}$. ZnO є одновісним полярним оптично-анізотропним кристалом, в якому 63% іонного хімічного зв'язку. Монокристали окису цинку розмірами $10 \times 8 \times 8 \text{ мм}^3$ (еталонний зразок Z02 - 3) отримані гідротермальним методом.

Експериментальні спектри інфрачервоного відбивання для монокристалів окису цинку реєструвались на спектрофотометрі SPECORD-M80 в області хвильових чисел $200 - 4000 \text{ см}^{-1}$ з використанням приставки для дослідження зразків малих розмірів ПО-SPECORD-M80/85 та еталонного дзеркала, виготовленого із нелегованого ($n_0 = 5 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$) SiC 6Н. Похибка вимірювання коефіцієнта відбивання в поляризованому світлі 0,5 - 1%. Коефіцієнт поляризації 0,98. Напрямок розповсюдження електромагнітного випромінювання в кристалі співпадає з віссю Ох.

Розрахунок спектрів відбивання $R(\omega)$ в області залишкових променів для монокристалів ZnO проведено по одноосциляторній математичній моделі з адитивним вкладом фононної та плазмової підсистем у формулу (13). Параметри фононної та плазмової підсистем для монокристалів окису цинку (зразок Z02 - 3) при розрахунку $R(\nu)$ взяті з роботи: Venger E.F., Melnichuk A.V., Melnichuk L.Ju., Pasechnik Ju.A. "Anisotropy of the ZnO single crystals reflectivity in the region of region of residual rays". Phys. Stat. Solidi (b). - 1995. - 188, №2. - P.118 - 127) і представлені в табл.1.

На фіг.1 представлені одержані авторами експериментальні (1 - 3 точки) та теоретичні спектри ІЧ відбивання $R(\omega)$ (криві 4 - 6 відповідно для $\varphi = 0, 60, 90^\circ$) при різних значеннях кута φ та використанні параметрів зразка Z02 - 3. Експериментальний спектр відбивання (точки 2) зареєстровано від поверхні, одержаної при зрізі монокристала ZnO (зразок Z02 - 3) алмазним диском та поліруванням абразивами з дисперсностями $\varnothing \leq 1\mu\text{м}$ і хімічним травленням в HF 15 хвилин. На поверхні полярного оптично-анізотропного одновісного монокристалу ZnO утворюється порушений шар товщиною $d = 0,2\mu\text{м}$ при $\lambda = 25\mu\text{м}$. Отже, резонансна частота ω_R не залежить від якості обробки поверхні та плазмової підсистеми кристала, а визначається тільки параметрами кристалічної ґратки. Аналіз кривих 4 - 6 показує, що найбільш чутливою ділянкою спектра відбивання до зміни напрямку орієнтації оптичної вісі кристала, є області 350 - 420 та 500 - 650 см^{-1} .

Значення коефіцієнта затухання фононів і плазмонів (зразок Z02 - 3) відповідно $\gamma_{ph} = 11\text{см}^{-1}$ і $\gamma_{p1} = 150\text{см}^{-1}$ при плазмовій частоті електронів $\omega_{p1} = 90\text{см}^{-1}$ (концентрація вільних носіїв зарядів в зоні провідності $9,3 \times 10^{16}\text{см}^{-3}$).

На фіг.2 представлені теоретичні спектри ІЧ відбивання для орієнтації E і C при $\gamma_{ph} = 11\text{см}^{-1}$, даних табл.1 та різних значеннях плазмової частоти і коефіцієнта затухання плазмонів при умові, що $\gamma_p = \omega_p$ (для кривих 1 - 5 відповідно $\omega_p = \gamma_p = 1, 250, 500, 750, 1000\text{см}^{-1}$). Істотні зміни (крива 2 - 5) в спектрах відбивання спостерігаються при концентраціях електронів в ZnO $> 10^{17}\text{см}^{-3}$.

Для ZnO область мінімуму залишкових променів розміщена в діапазоні 500 - 900 см^{-1} і на значення коефіцієнта відбивання має вплив, як концентрація вільних носіїв зарядів, так і напрямок орієнтації оптичної вісі.

Спектр відбивання в області 350 - 420 см^{-1} як видно з фіг.2 малочутливий до ступеня легування кристала. На значення резонансної частоти поперечного оптичного фонона, як слідує з фіг.1 та 2 має вплив лише напрямок орієнтації оптичної вісі.

Для визначення напрямку орієнтації оптичної вісі полярних одновісних оптично-анізотропних монокристалів необхідно визначити експериментальне значення резонансної частоти ω_R при $R(\omega_R) = 0,80 \pm 0,01$ порівняти з графіком або з табличними значеннями.

Авторами вперше запропоновано одержувати проградувану функцію (фіг.3) та дані, представлені в табл.2 і отримані методом дисперсійного аналізу теоретичних та експериментальних спектрів відбивання (фіг.1) в області частоти поперечного оптичного фонона при $R(\omega_R) = 0,80 \pm 0,01$.

Значення резонансної частоти для монокристалів ZnO (зразок Z02 - 3) при різних кутах відповідно рівні:

1. $\omega_R = (412,1 \pm 0,1)\text{см}^{-1}$, точки 1, лінія 4;
2. $\omega_R = (396,2 \pm 0,1)\text{см}^{-1}$, точки 2, лінія 5;
3. $\omega_R = (380 \pm 0,1)\text{см}^{-1}$, точки 3, лінія 6.

Підставляючи отримані значення резонансної частоти ω_R та представлені вище дані для еталонного зразка Z02 - 3 в рівняння (13) за допомогою ЕОМ для ZnO розраховано напрямки орієнтації оптичної вісі. Встановлено, що для $\omega_R = (412,1 \pm 0,1)\text{см}^{-1}$ $\varphi = 0^\circ$, тобто E \perp C; $\omega_R = (380 \pm 0,1)\text{см}^{-1}$ $\varphi = 90^\circ$, тобто E \parallel C; для випадку $\omega_R = (396,2 \pm 0,1)\text{см}^{-1}$ $\varphi = 60^\circ$ оптична вісь монокристала ZnO відхилена на 60° від напрямку розповсюдження електромагнітного випромінювання (вісі Ox). Спектр ІЧ відбивання в області залишкових променів для 3 - х орієнтацій оптичної вісі C відносно електричного вектора E представлено на фіг.1.

Для ZnO по формулі (13) було проведено розрахунок і одержано поляризаційно-кутову залежність з даними, представленими графічно на фіг.3 і систематизованими в табл.2. Для визначення напрямку орієнтації оптичної вісі полярного оптично-анізотропного монокристала необхідно значення резонансної частоти порівняти з табличними даними або графіком на фіг.3.

Таким чином, запропонований спосіб визначення напрямку орієнтації оптичної вісі одновісних оптично-анізотропних полярних кристалів характеризується більш високою чутливістю і точністю за рахунок реєстрації резонансної частоти $R(\omega_R) = 0,35 \cdot \exp(\epsilon_{01} - \epsilon_{001}) / (\epsilon_{011} - \epsilon_{0011})$ в області залишкових променів при коефіцієнті відбивання $R(\omega_R) = 0,80 \pm 0,01$ для якого співвідношення сигнал/шум $\geq 10^3$. Точність визначення напрямку орієнтації оптичної вісі в запропонованому способі 1 - 2%, в той час як у прототипі 8 - 10%.

Висока точність методу визначається за рахунок високої чутливості коефіцієнта відбивання в області частоти поперечного оптичного фонона до зміни напрямку орієнтації оптичної вісі кристала.

У запропонованому винаході на відміну від прототипа не потрібно проводити попередню складну обробку кристала (різання алмазним диском на тонкі прозорі в ІЧ області пластини, слідувати, щоб сторони були плоскопаралельні і т.д.), достатньо, щоб одна із сторін монокристала була плоскою, тому час одержання кінцевого результату у винаході значно менший ніж в прототипі.

Спосіб дозволяє визначати напрямки орієнтації оптичної вісі в полярних монокристалах з порушеним шаром товщиною до 1 $\mu\text{м}$ та концентрації вільних носіїв зарядів $\leq 10^{18}\text{см}^{-3}$, не потребує унікального обладнання і може бути широко використані при виготовленні напівпровідникових приладів для квантової, акусто-, мікро-, оптоелектроніки та в інших галузях вимірювальної техніки, пов'язаної з необхідністю визначення напрямку орієнтації оптичної вісі в полярних оптично-анізотропних монокристалах.

Таблиця 1

Взаємно узгоджені параметри одноосциляторної моделі монокристала ZnO при орієнтації EIC і EHC

ZnO	ϵ_0	ϵ_{00}	$\gamma_T, \text{см}^{-1}$	$\gamma_L, \text{см}^{-1}$
EIC	8,1	3,95	412	591
EHC	9,0	4,05	380	570

Таблиця 2

φ°	ω_R	φ°	ω_R	φ°	ω_R	φ°	ω_R	φ°	ω_R
1	412,0	19	410,3	37	405,6	55	398,5	73	389,6
2	412,0	20	410,1	38	405,3	56	398,1	74	389,1
3	411,9	21	409,9	39	405,0	57	397,6	75	388,5
4	411,9	22	409,7	40	404,6	58	397,1	76	388,0
5	411,9	23	409,5	41	404,3	59	396,7	77	387,5
6	411,8	24	409,3	42	403,9	60	396,2	78	386,9
7	411,8	25	409,1	43	403,5	61	395,7	79	386,4
8	411,7	26	408,8	44	403,1	62	395,2	80	385,8
9	411,6	27	408,6	45	402,7	63	394,7	81	385,3
10	411,5	28	408,3	46	402,3	64	394,2	82	384,7
11	411,4	29	408,0	47	401,9	65	393,7	83	384,2
12	411,3	30	407,8	48	401,5	66	393,2	84	383,6
13	411,2	31	407,5	49	401,1	67	392,7	85	383,1
14	411,1	32	407,2	50	400,7	68	392,2	86	382,5
15	410,9	33	408,9	51	400,3	69	391,7	87	382,0
16	410,8	34	406,6	52	399,8	70	391,2	88	381,4
17	410,6	35	408,3	53	399,4	71	390,6	89	380,7
18	410,5	36	406,0	54	399,0	72	390,1	90	380,0

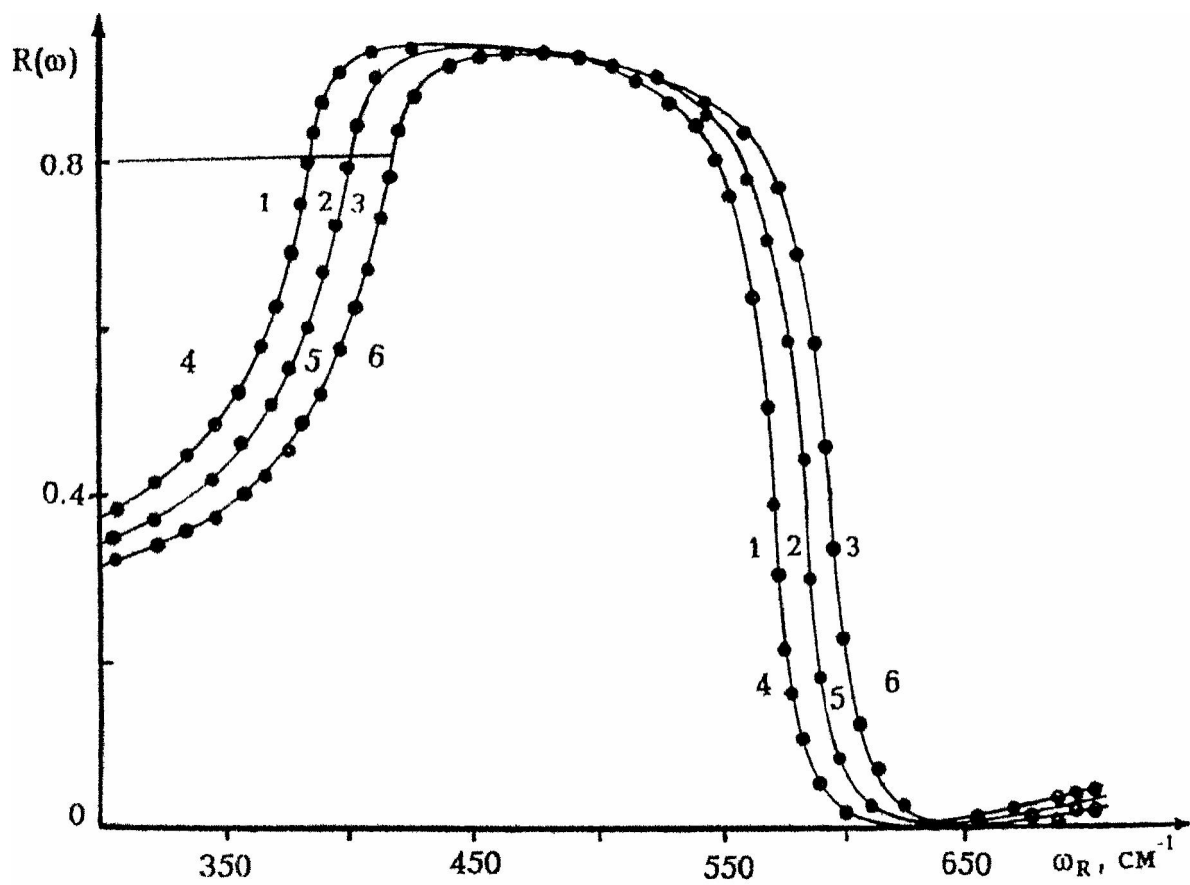


Fig. 1

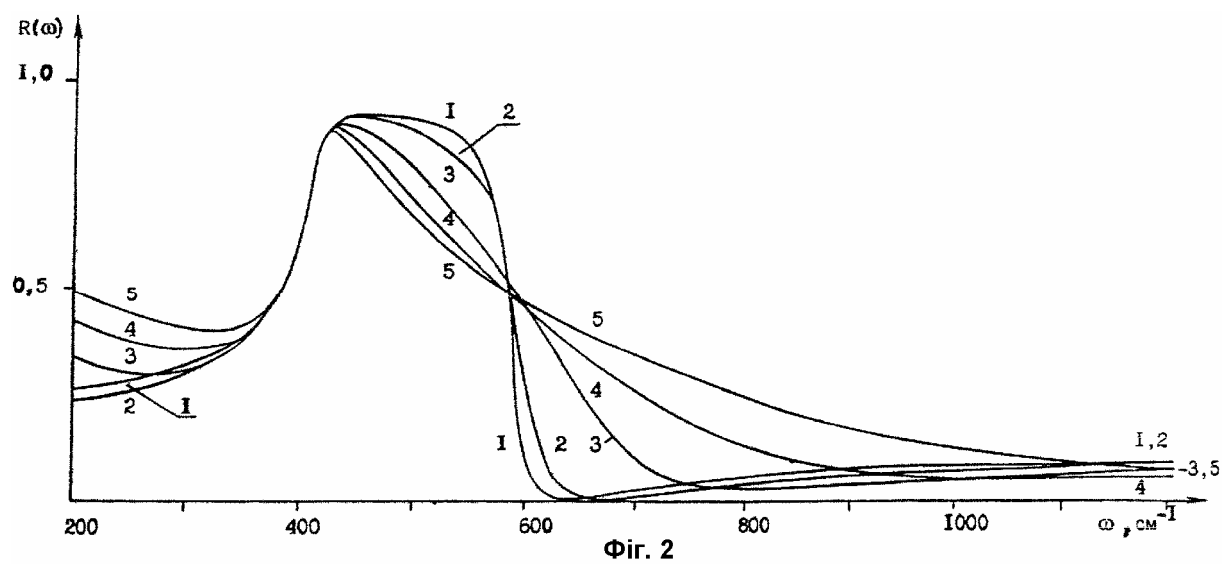
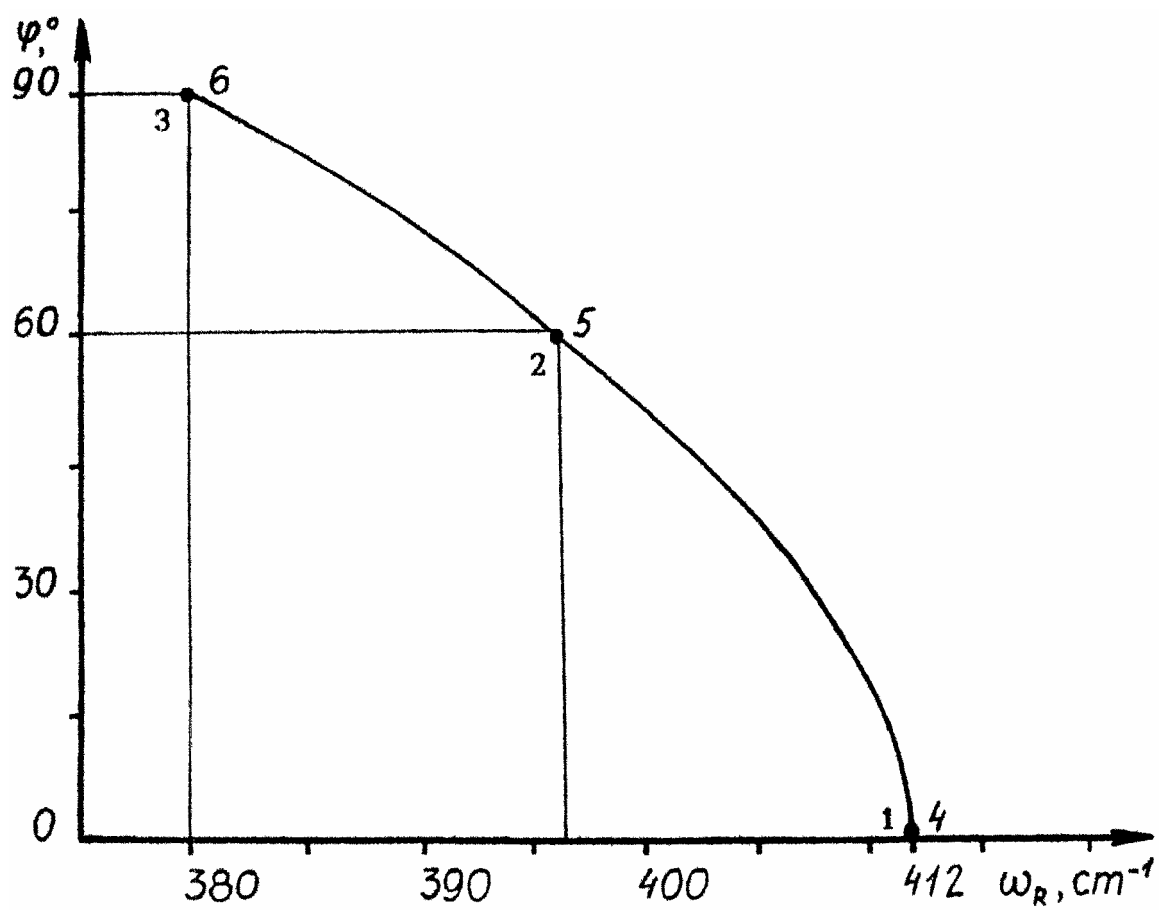


Fig. 2



Фиг. 3