

CsI: Tl 晶体的结晶习性

王绍华 沈定中 任国浩 殷之文

(中国科学院上海硅酸盐研究所, 上海 201800)

Habit of CsI: Tl Crystals

Wang Shaohua Shen Dingzhong Ren Guohao Yin Zhiwen

(Shanghai Institute of Ceramics Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201800, China)

本文研究了熔体下降法生长大尺寸 CsI: Tl 晶体的结晶习性。从结晶化学角度分析了晶体中的结构基元为 $Cs-I_8$ 立方体, 属于立方紧密堆积型, 根据负离子配位多面体生长基元理论模型, 研究了立方八面体在晶体中的结晶方位和各个面族上相互联结的稳定性, 讨论了晶体各个面族的显露顺序为: $\{001\} > \{110\} > \{111\} > \{210\}$ 。在晶体生长过程中, 同一个面族的面在不同的温度和温度梯度下, 生长速率也有所不同, 表现在固-液界面形状凸与凹的变化上。

界面形状的变化机理是从结晶动力学角度进行分析的。在相同的温度和温度梯度条件下, 不同取向的籽晶固液界面的形状不同, 是由于 $Cs-I_8$ 立方八面体在不同面族上叠合的稳定性不同所致。在轴向和径向温度梯度一定的情况下, 籽晶取向为 $[111]$ 、 $[110]$ 和 $[100]$ 时, 固液界面的凸凹程度有明显的差别: $[111]$ 反应比较敏感, $[110]$ 和 $[100]$ 为其次。固液界面的形状对晶体质量和 Tl 在晶体中的分布均匀性影响很大。在凹界面生长的晶体中微裂纹比较发育, 大多数集中在中部, 沿 $\{110\}$ 、 $\{100\}$ 面族分布和 $Cs-I_8$ 立方面开裂, 并在裂纹处常见有黄褐色杂质充填。当晶体生长过程中, 轴向温度梯度大于径向温度梯度时, 固液界面为凸界面, 晶体中缺陷与界面的凸起程度有关。一般平界面生长的晶体质量较好, 随着界面凹起程度增大, 晶体开始出现微裂纹, 但其密度比凹界面生长时明显减少。Tl 在晶体中代替 Cs 与 I 构成 $Tl-I_8$ 立方配位体, Tl 的分布敏感地受着温度和温度梯度的制约。在凹界面生长的晶体中, Tl 浓度集中于晶体的中部, 从中间到晶体的边缘, Tl 浓度差可达三倍多。在凸界面生长的晶体中, Tl 在晶体中部比边缘略有增高, 一般仅差 20%~25%, 这表明, Cs 与 Tl 和 I 形成配位结构, 其稳定性有差异所致。在凹界面生长的晶体中, Tl 除了与 I 形成立方配位体之外, 还有一部分残留于裂纹中间, 表现为黄褐色。在同一根晶体中, Tl 在晶体中的分布从下而上含量近于直线上升, 这是因为 Tl 的熔点和沸点都比较低的原因, 故可从 Tl 在晶体中的分布规律, 推测出晶体生长时固液界面形状和温度的变化。欲求 Tl 在晶体中的均匀分布, 首先必须严格控制晶体生长时的温度和温度梯度, 籽晶取向也很重要, 提高生长速率有利于 Tl 的介入。

本文还介绍了坩埚直径的大小对温度梯度的影响。随着坩埚直径的加大, 径向温度梯度明显增大, 容易形成凹界面, 特别是在晶体生长初期, 这种现象最为明显。随着晶体生长, 自身导热增加, 轴向温度梯度逐渐拉大, 固液界面形状会有明显改善。笔者认为, 欲生长优质晶体首先要选择籽晶取向, 据晶体的结晶习性确定合理的生长工艺, 主要注意生长系统内轴向和径向温度梯度的匹配合理是至关重要的关键。

关键词: CsI: Tl 晶体, 布里奇曼法, 结晶习性, 温度梯度

Key words: CsI: Tl crystal, Bridgman method, crystalline habit, temperature gradient