

того в случае исследования достаточно толстых совершенных кристаллов может превысить точность определения этих зависимостей другими методами.

Авторы благодарят А. В. Иродову за помощь в расчетах, а также Г. В. Смирнова, Ю. В. Швыдько, М. В. Зелепухина за предоставление кристалла.

#### С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Laue M. V. Röntgenstrahl—Interferenzen. Frankfurt, 1960. 360 s.
- [2] Zachariazen W. H. Theory of X-ray diffraction in crystals. N. Y., 1945. 255 p.
- [3] Rauch H., Petrascheck D. // Topics in Current Physics. V. 6 / Ed. H. Dachs. Berlin—Heidelberg—N. Y., 1978. P. 303—351.
- [4] Изюмов Ю. А., Озеров Р. П. Магнитная нейтронография. М., 1966. 532 с.
- [5] Diehl R., Jantz W., Noläng B. I., Wettling W. // Current Topics in Mater. Sci. V. 11. Amsterdam, 1984. P. 241—387.
- [6] Зелепухин М. В., Квардаков В. В., Соменков В. А., Шильштейн С. Ш. // ЖЭТФ. 1989. Т. 95. № 4. С. 1530—1536.
- [7] Kotrbova M., Kadečkova S., Novak J., Bradler J., Smirnov G. V., Shvydko Yu. V. // J. Cryst. Growth. 1985. V. 71. N 3. P. 607—614.
- [8] Энтин И. Р., Глазков В. П., Моряков В. П., Наумов И. В., Соменков В. А., Шильштейн С. Ш. // ПТЭ. 1976. № 5. С. 56—58.
- [9] Pernet M., Elmaleh D., Joubert J. C. // Sol. St. Comm. 1970. V. 8. N 20. P. 1583—1587.
- [10] Belova N. E., Eichhorn F., Somenkov V. A., Utemisov K., Shilshstein S. Sh. // Phys. St. Sol. (a). 1983. V. 76. N 1. P. 257—265.
- [11] Malgrange C. // Acta Cryst. A. 1969. V. 25. N 2. P. 356—363.

Институт атомной энергии  
им. И. В. Курчатова  
Москва

Поступило в Редакцию  
5 декабря 1989 г.

УДК 532.783 : 548—14

© Физика твердого тела, том 32, № 6, 1990  
Solid State Physics, vol. 32, N 6, 1990

## О ДИПОЛЬНОМ УПОРЯДОЧЕНИИ В НЕМАТИЧЕСКИХ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛАХ

А. П. Крехов, О. А. Скалдин

В последнее время в исследованиях нематических жидких кристаллов (НЖК) значительное место занимает вопрос о возможностях существования полярной фазы [1]. В НЖК, молекулы которых обладают дипольным моментом, на границе раздела ЖК—свободная или твердая поверхность может возникать полярный слой нематика [2–6]. В результате взаимодействия постоянных дипольных моментов молекул реализуется пространственное распределение поляризации в объеме ЖК. Изучение температурного поведения параметров дипольной ориентационной поляризации представляет интерес для понимания природы и механизмов упорядочения в ЖК и свойств биомембран с жидкокристаллической структурой в живых системах.

В работе [6] в экспериментах по генерации второй оптической гармоники исследовалась температурная зависимость полярного порядка монослоя 40ЦБ на границе раздела нематик—стекло. Поверхностная поляризация оказалась не зависящей от температуры, что естественно для монослоя. Однако для макроскопического слоя ЖК имеет место пространственная неоднородность распределения параметра дипольного упорядочения  $S_1(\mathbf{r})$ , что может приводить к температурным изменениям эффективной толщины поляризованного слоя  $\delta_{\text{эфф}}$  и  $S_1^0$  на границе.

Рассмотрим модель поляризации в ограниченных НЖК в рамках теории нематического состояния Ландау—де Жена [7]. Так как образ-

вание  $S_1^0 \neq 0$  на границе нематика связано с дипольным взаимодействием молекул ЖК с подложкой, в первом приближении можно считать нематический параметр порядка  $S_2$  не зависящим от координаты  $z$  в ячейке. Пусть плоский слой НЖК с гомеотропной ориентацией имеет границу раздела с твердой подложкой при  $z=0$  и свободную поверхность при  $z=d$  (ось  $OZ$  направлена перпендикулярно ограничивающей поверхности). При этом с учетом взаимодействия постоянных дипольных моментов молекул и зависимости  $S_1$  от координаты  $z$  объемная плотность свободной энергии НЖК примет вид

$$F = \varphi(S_2) + (a/2) S_1^2 + (g/2) (dS_1/dz)^2, \quad \varphi(S_2) = 1/2 A S_2^2 - 1/3 B S_2^3 + 1/4 C S_2^4,$$

где  $\varphi(S_2)$  соответствует плотности свободной энергии в модели нематика Ландау—де Жена [7];  $A = A_0(T - T_0)$ ,  $a = a_0(T - T_0)$ ,  $A_0 > 0$ ,  $a_0 > 0$ ,  $g > 0$ ,  $B > 0$ ,  $C > 0$ . Для полной свободной энергии слоя НЖК на единицу площади будем иметь

$$\mathcal{F} = \int_0^d \left[ \varphi(S_2) + \frac{1}{2} a S_1^2 + \frac{1}{2} g \left( \frac{dS_1}{dz} \right)^2 \right] dz + f(S_1^0), \quad (1)$$

где  $f(S_1^0)$  характеризует вклад взаимодействия с подложкой в образование  $S_1^0$  на границе. Минимизация (1) по  $S_2$  дает для нематической фазы

$$S_2 = \frac{B}{2C} \left[ 1 + \left( 1 - \frac{4A_0C}{B^2} \right)^{1/2} \right], \quad T < T_c; \quad T_c = T_0 + \frac{B^2}{4A_0C},$$

где  $T_c$  — температура перехода нематик—изотропная жидкость. Минимизация функционала (1) по  $S_1$  осуществляется в два приема: вначале по функции  $S_1(z)$ , а затем по ее граничному значению  $S_1^0$ . При этом на первом этапе из уравнений Эйлера—Лагранжа получим

$$g(d^2 S_1/dz^2) = a S_1. \quad (2)$$

Уравнение (2) может быть проинтегрировано для полубесконечного слоя, если учесть, что в отсутствие внешнего электрического поля  $S_1|_{z \rightarrow \infty} = 0$  и  $(dS_1/dz)|_{z \rightarrow \infty} = 0$ . При таких граничных условиях (2) имеет решение в интервале  $T_0 < T < T_c$  вида

$$S_1(z) = S_1^0 \exp[-\sqrt{a/g} z]. \quad (3)$$

Для полной энергии с учетом первого интеграла уравнения (2) получим

$$\mathcal{F} = \int_{S_1^0}^0 \sqrt{ag} S_1 dS_1 + f(S_1^0) = \frac{1}{2} \sqrt{ag} (S_1^0)^2 + f(S_1^0),$$

где в (1) опущено слагаемое  $\varphi(S_2)$ , не зависящее от  $S_1$  и  $S_1^0$ . Наиболее естественной формой для энергии взаимодействия на поверхности  $f(S_1^0)$  является  $f = -k S_1^0$ , где  $k > 0$  характеризует взаимодействие подложки с постоянным диполем молекул ЖК. На этом этапе равновесное значение  $S_1^0$  определяется из условия  $d\mathcal{F}/dS_1^0 = 0$

$$S_1^0 = k/\sqrt{ag} = k/\sqrt{a_0 g (T - T_0)}. \quad (4)$$

Используя (3), для температурной зависимости эффективной толщины поляризованного слоя будем иметь

$$\delta_{\text{эфф}} = \sqrt{g/a} = \sqrt{g/a_0 (T - T_0)}. \quad (5)$$

Из (4), (5) можно получить температурную зависимость величины, непосредственно определяемой экспериментально, а именно падения напряжения на слое поверхностной поляризации  $U_\delta$

$$U_\delta \sim P \delta_{\text{эфф}} \sim S_1^0 \delta_{\text{эфф}} = k/a_0 (T - T_0). \quad (6)$$

Для экспериментальной проверки выражения (6) была использована методика, суть которой сводилась к изучению температурной зависимости электрического отклика ЖК-слоя на периодические возмущения акустической волной одной из поверхностей ЖК-ячейки [8]. Изучались гомеотропные слои ЖК толщиной  $d \sim 20$  мкм со спонтанной ориентацией молекул. В качестве объектов исследования был выбран ряд наиболее известных ЖК: МББА ( $n$ -метоксибензильден- $n'$ -бутиланилин), ОЦБ (4-октил-4-цианобифенил), ЦФЭГБК ( $n$ -цианофениловый эфир  $n'$ -гептилбензойной кислоты), НФООБ (4-нитрофенил-4- $n$ -октилоксибензоат), БГАОБ ( $n$ -бутил- $n'$ -гептаноил-азоксибензол).

В случае деформации типа изгиба одной из поверхностей ЖК между проводящими подложками на удвоенной частоте возмущения индуцируется переменная разность потенциалов  $U_{2\omega}$ . При этом регистрируемое

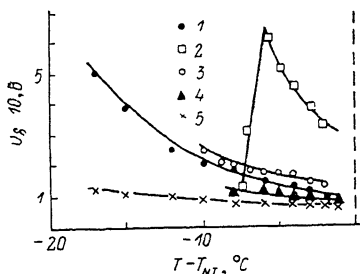


Рис. 1. Температурные зависимости величины падения напряжения  $U_0^i(T)$  для исследуемых ЖК.

$T_{NI}$  — температура перехода нематик — изотропная фаза. 1 — МББА, 2 — ОЦБ, 3 — ЦФЭГБК, 4 — НФООБ, 5 — БГАОБ.

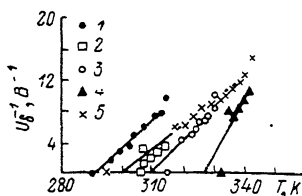


Рис. 2. Температурные зависимости обратной величины  $[U_0^i(T)]^{-1}$  на слое поверхностной поляризации.

Обозначения те же, что и на рис. 1.

напряжение является следствием ориентационного возмущения поляризованного слоя молекул ЖК и связано с его параметрами следующим образом:

$$U_{2\omega} \approx \int_0^d P(z, t) dz = \int_0^d P(1 - \cos \theta) dz = P \delta_{\phi\phi} \langle \theta^2 \rangle e^{i2\omega t},$$

где  $\langle \theta^2 \rangle$  — средний квадрат угла отклонения директора в окрестности колеблющейся поверхности, определяемый из данных акустооптики и эллипсометрии нарушенного полного внутреннего отражения света от границы раздела жидкий кристалл — стеклянная подложка [9, 10].

Таким образом, можно получить температурную зависимость  $U_0^i(T)$  для исследуемых ЖК (рис. 1);  $i$  — номер ЖК. Для выяснения степени приближения экспериментальных данных к расчетным были построены обратные зависимости  $[U_0^i(T)]^{-1}$ , которые достаточно хорошо описываются линейной функцией вида  $U^{-1} = B(T - T_0)$  (рис. 2). Кроме того, согласно (6), из зависимостей  $[U_0^i(T)]^{-1}$  путем их аппроксимации до пересечения с осью абсцисс (рис. 2) определяются параметры  $T_0^i$  разложения свободной энергии ЖК и отношение  $k/a_0$  по тангенсу наклона  $U_0^{-1}$ . Следует также отметить, что для ЖК с положительной диэлектрической анизотропией  $\epsilon_a > 0$  (ЦФЭГБК, ОЦБ, НФООБ) выполняется условие  $T_0^i < T_{KN}$  ( $T_{KN}$  — температура перехода твердое тело — нематик или смектик — нематик), а в случае ЖК с  $\epsilon_a < 0$  (МББА, БГАОБ)  $T_0^i > T_{KN}$ .

#### Список литературы

- [1] Palfy-Muhoray P., Lee M. A., Petschek R. G. // Phys. Rev. Lett. 1988. V. 60. N 22. P. 2303—2306.  
 [2] Yun C. K., Frederickson A. G. Mol. // Cryst. Liq. Cryst. 1973. V. 24. N 1. P. 69—73.

- [3] Petrov A. G., Derzhanski A. Mol. // Cryst. Liq. Cryst. Lett. 1977. V. 41. N 1. P. 41—46.
- [4] Mullen W. // Phys. Rev. A. 1988. V. 38. N 12. P. 6384—6395.
- [5] Чувывров А. Н., Лачинов А. Н. // ЖЭТФ. 1978. Т. 74. № 4. С. 1431—1444.
- [6] Guyot-Sionnest P., Hsiung H., Shen Y. R. // Phys. Rev. Lett. 1986. V. 57. N 23. P. 2963—2966.
- [7] Де Жен Р. Физика жидких кристаллов. М.: Мир, 1977. 400 с.
- [8] Скалдин О. А., Лачинов А. Н., Чувывров А. Н. // ФТТ. 1985. Т. 27. № 4. С. 1219—1221.
- [9] Пшеницын В. И., Абаев М. И., Лызлов Н. Ю. Эллипсометрия в физико-химических исследованиях. Л.: Химия, 1986. 152 с.
- [10] Капустин А. П., Капустина О. А. Акустика жидких кристаллов. М.: Наука, 1986. 247 с.

Башкирский научный центр  
УрО АН СССР  
Отдел физики

Поступило в Редакцию  
5 декабря 1989 г.

УДК 548.4

© Физика твердого тела, том 32, № 6, 1990  
Solid State Physics, vol. 32, N 6, 1990

## МЕХАНИЗМ АННИГИЛЯЦИИ ДИСЛОКАЦИЙ В НАПРЯЖЕННЫХ СВЕРХРЕШЕТКАХ

*М. Ю. Мартисов, А. Е. Романов*

В последнее время в связи с развитием полупроводниковой технологии сильно возрос интерес к получению эпитаксиальных слоев на неизопериодических подложках (например, GaAs на Si) [1-3]. Одной из основных характеристик подобных слоев, в значительной мере определяющей их электрофизические параметры, является плотность наклонных дислокаций (НД) в эпитаксиальном материале, механизм образования которых рассмотрен, например, в [4, 5]. Относительно новым и достаточно эффективным способом снижения плотности дислокаций является получение в процессе роста напряженной сверхрешетки (НСР). В ряде работ [2, 3] экспериментально было показано, что НСР может снизить плотность НД примерно на порядок.

В настоящей работе рассмотрен механизм аннигиляции дислокаций, который состоит в следующем. Под действием механической силы (силы Пича—Келера) дислокации могут загигаться и скользить в своей плоскости скольжения [6]. Поскольку в эпитаксиальном материале существуют дислокации разного знака, движение этих дислокаций происходит в противоположных направлениях и, следовательно, междислокационное расстояние может уменьшаться до величины, меньшей радиуса аннигиляции. В этом случае дислокации аннигилируют, образуя дислокационную петлю, что уменьшает плотность НД. Подобный механизм аннигиляции дислокаций действительно наблюдался в [2].

Рассмотрим гетероэпитаксиальную систему, состоящую из полубесконечной подложки и НСР, содержащей  $N$  слоев толщиной  $h_1$  с величиной несоответствия  $f$ , разделенных между собой  $N-1$  слоем толщиной  $h_2$ , согласованным по параметру решетки с подложкой. Из подложки в НСР проникают НД с плотностью  $\rho$ . Поскольку материалы типа  $A^{III}B^V$  — наиболее интересные с точки зрения приборных приложений — образуют гранецентрированную кубическую решетку, в которой преобладают наклонные  $60^\circ$  дислокации [7], рассмотрим дислокацию с вектором Бюргера, равным  $\mathbf{b} = b/2 (101)$ , где  $b$  — постоянная решетки, и линией  $\tau = = 1/\sqrt{2} (110)$ . Расположение осей показано на рисунке. Заметим, что такие вектор Бюргера и линия дислокации действительно наблюдались в [2].

Под действием силы Пича—Келера, возникающей в напряженных слоях, дислокация может загигаться и скользить в своей плоскости