

01;06;11

©1994 г.

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИКИ ОРИЕНТАЦИОННЫХ ДОМЕНОВ В ПЛЕНКАХ

А.С.Трофимов

Институт теоретической физики им. Н.Н.Боголюбова АН Украины,
252143, Киев, Украина
(Поступило в Редакцию 7 февраля 1994 г.)

Рассматриваются пленки, состоящие из ориентационных доменов, подверженные облучению. Показано, что внешнее воздействие приводит к изменению формы и размеров домена. Изучается влияние характера внешнего воздействия и структуры пленки на динамику ориентационных доменов.

Введение

В данной работе проведено численное моделирование процессов структурных переходов в пленках. В некоторых молекулярных пленках, полученных по методу Лэнгмюра-Блоджетт, наблюдается доменная структура [1]. Это имеет место и во многих жидкокристаллических пленках. Под воздействием внешнего возмущения (например, электромагнитного облучения) молекулы в слое переориентируются и доменная структура изменяется. Предлагаемая в работе модель и ее численный анализ позволяет изучить процессы возникновения в пленках анизотропных ориентационных структур. Возможность индуцирования таких структур с помощью внешнего воздействия делает эти пленки перспективными для использования в функциональных узлах электроники. Создавая в пленке анизотропию в заданном направлении, а затем "считывая" ее, можно на таком материале получить многобитовую ячейку памяти. Численное моделирование этих процессов позволяет провести их анализ при изменении характеризующих их параметров в широком диапазоне значений.

Рассмотрим двумерный слой, образованный из одинаковых молекул. Будем считать, что каждая молекула характеризуется выделенным направлением, но при этом не обладает собственным дипольным моментом. Это может иметь место, например, если молекулы образуют эксимеры. В ориентационном взаимодействии между молекулами такого типа можно выделить две наиболее существенные части: дисперсионную и анизотропную. С одной стороны, в некоторых молекулярных пленках дисперсионное и анизотропное взаимодействие дает основной вклад в энергию ориентационного взаимодействия. С другой стороны, как показано в [2], именно оно ответственно за процессы возникновения оптически анизотропных структур при воздействии электромагнитным облучением.

Дисперсионное взаимодействие в зависимости от параметров молекул стремится ориентировать их или параллельно друг другу, или взаимно перпендикулярно. В дальнейшем рассматриваются параллельно ориентирующиеся молекулы. Анизотропное взаимодействие между молекулами отражает симметрию двумерной решетки. В случае, например, квадратной решетки анизотропная часть взаимодействия выделяет в пленке четыре эквивалентных направления, в случае гексагональной решетки — шесть эквивалентных выделенных направлений, и т.д. Конкуренция между дисперсионным и анизотропным взаимодействием приводит к тому, что в пленке среди энергетически выгодных структур оказываются и доменные структуры. При этом в случае упаковки центров тяжести молекул в виде квадратной решетки в слое возникают домены с взаимно перпендикулярной ориентацией молекул. При гексагональной упаковке центров молекул имеется три энергетически эквивалентных типа доменов.

Математическая модель структурного перехода в облученной пленке

Ряд ориентационных свойств двумерных структур, состоящих из молекул описанного типа, можно смоделировать стационарным синус-Гордон уравнением

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \varphi(x, y) + a^2 \sin(m \cdot \varphi(x, y)) = 0. \quad (1)$$

В этом уравнении переменная φ определяет ориентацию в плоскости отдельной молекулы или комплекса молекул, например димера. Коэффициент m задает симметрию плоской решетки, которую образуют центры тяжести молекул ($m = 4$ — для квадратной решетки, $m = 6$ — для гексагональной решетки). В этой работе исследуется случай квадратной решетки. Параметр a имеет размерность обратной длины. В случае однородной структуры величина этого параметра не существенна, в неоднородных структурах она обратно пропорциональна размеру переходной области. Например, в доменных структурах a определяет толщину доменной стенки.

Метод Хироты [3] позволил авторам работ [4,5] найти ряд двумерных вихревых решений уравнения (1). Из этого класса решений для

данного исследования целесообразно использовать два следующих решения, полученных для квадратной решетки:

$$\varphi = \frac{\pi}{4} + \operatorname{arctg} \frac{\operatorname{sh}(\sqrt{2}ay)}{\operatorname{sh}(\sqrt{2}ax)}, \quad (2)$$

$$\varphi = \frac{\pi}{4} + \operatorname{arctg} \frac{\operatorname{sc}(\tau_0 ay)}{\operatorname{sc}(\tau_0 ax)}, \quad (3)$$

где

$$\operatorname{sc}(z) = \frac{\operatorname{sn}(z; \tau)}{\operatorname{cn}(z; \tau)}$$

— эллиптическая функция Якоби,

$$\tau_0 = \sqrt{\frac{2}{2 - \tau^2}}.$$

Первое из этих двух выражений описывает непериодическую структуру, составленную из четырех ориентационных доменов двух типов. В доменах одного типа молекулы преимущественно ориентированы под углом $\pi/4$, в доменах другого типа — под углом $3\pi/4$. В окрестности точки стыковки доменов (начало координат) решение (2) описывает вихрь. Это решение использовано в работе [6] при описании динамики перехода молекулярной пленки из оптически изотропного состояния в анизотропное при электромагнитном облучении. Выражение (3) описывает периодическую в двух взаимно перпендикулярных направлениях структуру, в которой равные по площади домены двух названных типов образуют “шахматную доску”. В узлах такой “шахматной доски” последовательно чередуются вихри и антивихри. Период этой структуры задается внешними условиями. В исследованиях, опубликованных в [2], это решение использовано для описания деформации доменных стенок в пленках, облученных светом. При этом показано, что искажение двумерной ориентационной структуры под внешним воздействием описывается уравнением типа двумерного двойного синус-Гордон уравнения.

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \varphi + (a^2 + \mathcal{E}(1 + \cos(2\varphi - 2\varphi_0))) \sin(m\varphi) = 0. \quad (4)$$

Уравнение (1) описывает высокосимметричную плоскую структуру с осью симметрии C_m . Отклик такой структуры на макроскопическое внешнее воздействие можно считать изотропным. Структура, соответствующая уравнению (4), имеет более низкую симметрию с осью симметрии C_2 . Величина \mathcal{E} играет роль управляющего параметра понижения симметрии ориентационной структуры. Если в качестве внешнего воздействия используется поляризованный в плоскости пленки свет с частотой в области собственного поглощения молекул, то величина \mathcal{E} , как показано в [6], пропорциональна плотности возбужденных светом молекул, изменению энергии их взаимодействия с окружением при

возбуждения и обратно пропорциональна энергии дисперсионного взаимодействия между молекулами. Симметрия структуры облученной пленки понижается. В ее плоскости появляется выделенное направление, определяемое поляризацией света. В дальнейшем отклик облученной пленки на оптическое воздействие является анизотропным.

В более общем случае уравнение (4) моделирует процессы, происходящие в ориентационно-изотропной плоской структуре под влиянием анизотропного внешнего воздействия (его ось анизотропии ориентирована под углом φ_0). Величина управляющего параметра \mathcal{E} пропорциональна поглощенной энергии внешнего воздействия, эффективности ее влияния на перестройку структуры и обратно пропорциональна энергии взаимодействия между молекулами, которая определяет структуру пленки.

Нелинейное уравнение (4) описывает процесс коллективной перестройки ориентаций молекул. При малых значениях управляющего параметра в пленке появляются области, ориентационная структура в которых отличается от структуры невозмущенной пленки. В этих областях доменные стенки прогибаются и общая площадь ориентационных доменов одного типа увеличивается за счет уменьшения площади доменов другой ориентации. При этом решетка вихрей и антивихрей, задаваемая решением (3), сохраняется. Однако из-за различной доли общей площади доменов каждого типа эти области обладают пониженной симметрией структуры — появляется выделенное направление, которое задается осью анизотропии внешнего возмущения. С увеличением \mathcal{E} число возникающих в пленке областей более низкой симметрии растет и при значениях параметра \mathcal{E} , сопоставимых со значениями параметра a^2 , происходит структурный фазовый переход 1-го рода. Ориентационная структура всей пленки становится анизотропной.

К описанию модели следует добавить два замечания. Во-первых, как показано в работе [7], процесс релаксации доменных стенок к невозмущенному состоянию после прекращения внешнего воздействия определяется иными физическими механизмами и не описывается уравнением (4). Это обычный диссипативный процесс, и время его протекания, определяемое переводом в невозмущенное состояние макроскопически большого числа молекул ($0.2-5 \cdot 10^4$ молекул на каждый домен), значительно. Кроме того, из экспериментов [1] следует, что имеет место фиксация деформации доменной стенки. Причиной ее может быть "связывание" стенок с примесями, дефектами и т.п. аналогично тому, как это происходит в магнитных кристаллах. В этом случае в пленке сохраняется после прекращения воздействия некоторое число областей с анизотропными свойствами. Это будет приводить к старению пленки: после некоторого числа переориентаций молекул в пленке во взаимноперпендикулярных направлениях она будет в основном состоять из анизотропных областей, однако в целом ее отклик на внешнее воздействие будет изотропным. Чувствительность пленки к ориентирующему внешнему воздействию при этом сильно уменьшится.

Во-вторых, как показано ниже, периодическое решение уравнения (4) при больших значениях параметра \mathcal{E} перестает быть устойчивым и предельное значение \mathcal{E} определяется периодом доменной структуры.

Для исследования структурных изменений в слое под действием внешнего анизотропного возмущения проведено численное решение двумерного двойного синус-Гордон уравнения (4). Решение нелинейного уравнения облегчается тем, что оно ищется методом возмущающего параметра, а в качестве нулевого приближения используется выражение (3). Решение уравнения (4) получено для фрагмента слоя, представляющего собой квадрат со стороной, равной $L/\sqrt{2}$, где L — период доменной структуры. Диагональ этого квадрата совпадает с серединой доменной стенки, к которой примыкают четверти доменов двух различных типов. Из-за периодичности доменной структуры весь слой можно получить повторением выбранной квадратной области. Поэтому все результаты исследований, проведенных для выбранной области, будут справедливы для всего слоя с учетом нормировки характеристик на площадь слоя.

В исходном невозмущенном состоянии ориентации молекул в выбранной области описываются выражением (3) и представлены на рис. 1. Точками обозначены молекулы, образующие доменную стенку. Они ориентированы под углом приблизительно 90° по отношению к горизонтальной оси (отклонение от 90° -ной ориентации не превышает 5%). В данном исследовании несущественно изменение структуры в непосредственной близости точек двойникования доменов. Это позволило обойти трудности при решении уравнения в точках вихря и антивихря структуры (угловые точки квадрата на рис. 1, соединенные стенкой), удалив из рассмотрения δ -окрестности этих точек ($\delta < 0.005L$). Чтобы исследовать периодическую доменную структуру, были использованы периодические граничные условия: предполагалось, что на границе выбранного фрагмента слоя ориентации молекул описываются выражением (3) независимо от величины внешнего воздействия.

Направление анизотропии внешнего воздействия выбрано совпадающим с направлением преимущественной ориентации молекул в одном из доменов $\varphi_0 = \pi/4$.

На рис. 1–3 проиллюстрированы результаты решения уравнения (4) при различных значениях управляющего параметра. При составлении разностной схемы для уравнения (4) в качестве шага дискретизации использовался такой физический параметр, как среднее расстояние между молекулами в слое. С ростом периода доменной структуры пропорционально возрастало число молекул в домене и, следовательно, ранг матрицы системы разностных уравнений. При изменении периода структуры от 4 до 12 (в качестве единицы длины выбрана ширина доменной стенки) число молекул в домене увеличивалось от 1600 до 14400. Как видно из рис. 2 и 3, с ростом воздействия на слой внешнего возмущения, характеризуемого величиной управляющего параметра, доменная стенка сильнее искажается и площадь одного домена возрастает за счет площади другого домена.

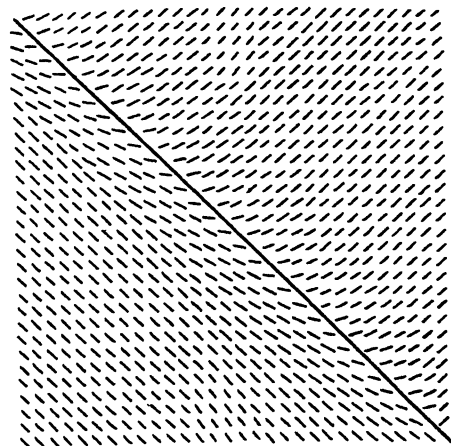


Рис. 1. Фрагмент доменной структуры необлученной пленки.

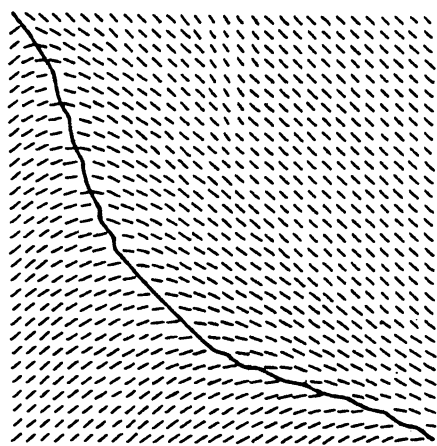
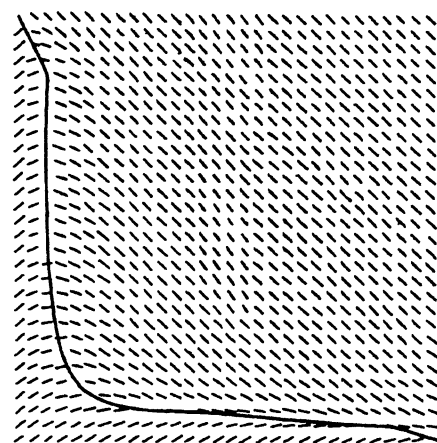


Рис. 2. Фрагмент доменной структуры облученной пленки (интенсивность облучения 0.2 в отн. ед.).

Рис. 3. Фрагмент доменной структуры облученной пленки (предельная интенсивность облучения устойчивой структуры).



В качестве характеристики наведенной в слое анизотропии выбрана величина

$$\Delta = \frac{1}{N} / \sum_i \left(\cos^2 \left(\varphi_i - \frac{\pi}{4} \right) - \cos^2 \left(\varphi_i - \frac{3\pi}{4} \right) \right) / . \quad (5)$$

Здесь N — полное число молекул в исследуемом фрагменте слоя, суммирование выполняется по всем узлам решетки. Если индуцированная в слое анизотропия носит оптический характер, то параметр анизотропии определяет разницу в поглощении слоем света, поляризованного в двух взаимно перпендикулярных направлениях.

На рис. 4 приведена зависимость параметра анизотропии от величины управляющего параметра в слоях с различным периодом доменной структуры. Если при малых значениях интенсивности внешнего воздействия с ее увеличением параметр анизотропии линейно возрастает, то затем эта зависимость становится более слабой и имеет тенденцию к насыщению. Однако полное насыщение не наступает, так

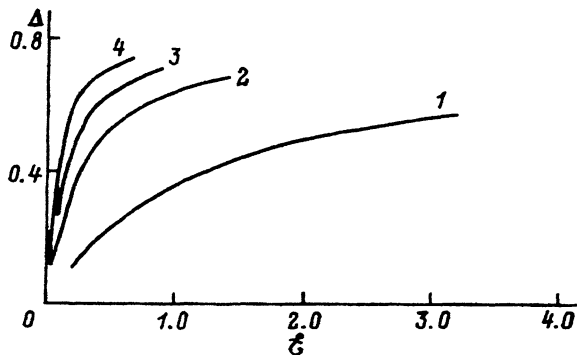


Рис. 4. Зависимость анизотропии пленки от интенсивности облучения.

L , отв. ед.: 1 — 3, 2 — 6, 3 — 8, 4 — 10.

как существует некоторое критическое значение интенсивности внешнего воздействия, при котором достигается максимально возможное значение параметра анизотропии в данной периодической доменной структуре. При воздействии на слой более интенсивными полями периодическая структура становится неустойчивой. В области малых значений интенсивности воздействующего на пленку поля зависимость параметра анизотропии носит пороговый характер. Величина порога определяется интенсивностью внешнего поля, необходимого для смещения доменной стенки на расстояния порядка параметра решетки.

На рис. 5 приведена зависимость параметра анизотропии от периода доменной структуры при различных величинах внешнего возмущения. Из графика следует, что при одном и том же значении внешнего возмущения более существенная анизотропия достигается в крупномасштабных доменах. В крупномасштабных доменах структурно устойчивые точки (точки двойникования) расположены реже. В результате доменная стенка становится менее упругой и сильнее подвержена искажению при внешнем воздействии.

На рис. 6 приведена зависимость величины управляющего параметра, соответствующего предельно достижимой анизотропии в перио-

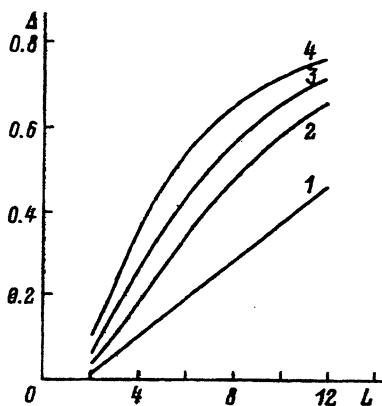


Рис. 5. Зависимость анизотропии пленки от периода доменной структуры.

ξ , отв. ед.: 1 — 0.1, 2 — 0.2, 3 — 0.3, 4 — 0.5.

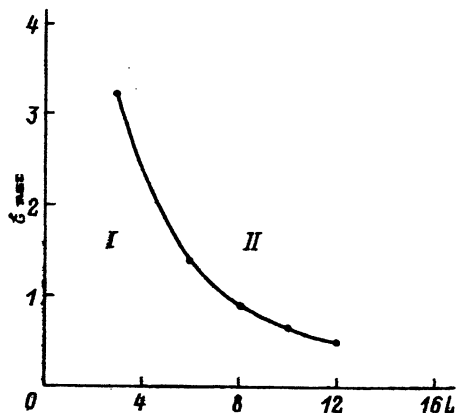


Рис. 6. Устойчивость доменной структуры облученной пленки (I — область устойчивости).

дической структуре от размера домена. Чем больше период доменной структуры, тем ниже максимально допустимое значение интенсивности внешнего возмущения, при котором структура сохраняет еще устойчивость. Физическое истолкование этого факта не совсем ясно. Можно, однако, предположить, что это отражает процесс отталкивания между доменными стенками, который эффективно учитывается периодически граничными условиями.

В заключение еще раз подчеркну, что исследуемые структуры можно использовать в качестве элементов функциональных устройств электроники. Приведенные результаты подтверждают это и могут быть базовыми для расчета оптимальных параметров импульсов переключения, записи и считывания или стирания информации.

Автор благодарен Ю.Б.Гайдидею за постоянный интерес к данному исследованию.

Список литературы

- [1] *Barnik M.I., Kozenkov B.M., Shtykov N.M. et al. // J. Mol. Electr. 1989. Vol. 5. P. 53-56.*
 - [2] *Гайдидей Ю.Б., Трофимов А.С. // ЖТФ. 1991. Т. 61. Вып. 7. С. 76-83.*
 - [3] *Hirota R. // J. Phys. Soc. Jap. 1973. Vol. 35. P. 1566-1567.*
 - [4] *Takeno S. // Prog. Theor. Phys. 1982. Vol. 68. P. 992-995.*
 - [5] *Borisov A.B., Kiselev V.V. // Physica D. 1988. Vol. 31. P. 49-64.*
 - [6] *Gaididei Yu.B., Trofimov A.S. // J. Mol. Electr. 1989. Vol. 5. P. 239-245.*
 - [7] *Вазненко А.А. // ЖТФ. 1990. Т. 60. Вып. 10. С. 1-4.*
-