ИЗВЕСТИЯ ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ

1999 МАТЕМАТИКА № 10 (449)

УДК 517.958

Л.Д. ЭСКИН

ОБ ИНТЕГРАЛЬНОМ УРАВНЕНИИ, ОПИСЫВАЮЩЕМ ОРИЕНТАЦИОННЫЕ ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В МОДЕЛИ ПАРСОНСА

1. В 1949 г. Л. Онзагером (изложение результатов Онзагера и их дальнейшее развитие см. в [1]) были подробно исследованы термодинамические свойства системы сильно вытянутых жестких неполярных цилиндрических стержней ($\delta = dl^{-1} \ll 1$, d — диаметр, l — длина стержня) с парным взаимодействием типа стерического отталкивания (модель Онзагера исключенного объема). Было показано, что в системе, ориентационно-разупорядоченной при низких концентрациях, с увеличением концентрации происходит фазовый переход первого рода в анизотропную (ориентационно-упорядоченную) фазу, трактуемую как жидкокристаллический нематик. Все термодинамические свойства изотропной фазы описываются равномерной функцией распределения ориентации осей частиц с плотностью $f(n) = 1$ (n — орт оси стержня), термодинамические свойства нематика описываются отличной от единицы плотностью f, имеющей единственный максимум в направлении директора (направление преимущественной ориентации осей), инвариантной относительно поворотов вокруг этого направления и замены $n \to -n$.

Для $f(n)$ из условия минимума свободной энергии системы стержней, найденной в приближении второго вириального коэффициента, Онзагер получил нелинейное интегральное уравнение, которое исследовалось (в основном, численными методами) во многих физических работах. Достаточно полный обзор полученных в этом направлении результатов приводится в обзоре [2] и монографии [3]. Обобщению модели Онзагера на случай системы магнитных стержней посвящены работы [4], [5].

Необходимо отметить, что Онзагер вычислил свободную энергию системы стержней лишь в приближении второго вириального коэффициента, т. е. в предположении малости концентрации системы. Чтобы ориентационный фазовый переход в системе стержней мог произойти уже при низкой концентрации, необходимо условие $\delta \ll 1$ — условие применимости модели Онзагера.

Модель, свободная от этого ограничения и пригодная для любых осесимметричных частиц, была предложена Парсонсом [6]. В наиболее интересном случае частиц, имеющих форму эллипсоида вращения с полуосями $b \geq a$, интегральное уравнение, полученное Парсонсом для ориентационной функции $f(n)$, имеет вид

$$\nu + \ln f(n') + \lambda \int B(n,n') f(n) dn = 0, \tag{1.1}$$

где ядро $B(n,n') = (1 - \chi^2 (nn')^2)^{1/2}$, nn' — скалярное произведение ортов n и n', $\chi = (b^2 - a^2)(b^2 + a^2)^{-1}$, неизвестная константа ν определяется условием нормировки

$$\int f(n) dn = 1. \tag{1.2}$$

Интегрирование в (1.1) и (1.2) производится по поверхности сферы, в сферической системе координат с полярной осью, направленной вдоль директора нематика, $dn = (4\pi)^{-1} \sin\theta \, d\varphi \, d\theta$, φ, θ — сферические координаты орта n. Параметр λ в уравнении (1.1) определяется соотношением

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 97-01-00375).

$\lambda = 8(1-\chi^2)^{-1/2}J$, где функция J при любом χ $(0<\chi<1)$ является монотонно возрастающей функцией безразмерной переменной $\eta = \frac{4}{3}\pi a^2 bc$ ($c = N/V$ — плотность системы эллипсоидов, η — объемная концентрация системы). Функция J определяется конкретным выбором модели парного потенциала и парной корреляционной функции, относительно которых в модели Парсонса предполагается скейлинговый характер их зависимости от трансляционных и угловых переменных, что и позволило разделить трансляционные и ориентационные степени свободы и получить уравнение (1.1). Отметим, что уравнение Онзагера для $f(n)$ является частным случаем уравнения (1.1), оно получается, если в уравнении (1.1) $\lambda = 2cdl^2$, а ядро $B = (1-(nn')^2)^{1/2}$.

Поскольку ориентационная функция $f(n)$ описывает нематик, то она должна быть решением нелинейного интегрального уравнения (1.1), удовлетворяющим, кроме условия нормировки (1.2), еще и следующим дополнительным условиям:

a) $f(n)$ не зависит от угла φ $(f(n) = f(\theta))$,

b) $f(\theta) = f(\pi-\theta)$, следовательно, $f(n)$ разлагается в ряд Фурье по полиномам Лежандра с четным индексом $P_{2s}(n)$,

c) $f(0) = f(\pi) = \max$, других максимумов $f(n)$ не имеет.

Замечание 1. Среди полиномов P_{2s} условию c) удовлетворяет только полином P_2.

Это замечание весьма важно для дальнейшего.

В данной работе изучаются близкие к изотропному анизотропные решения уравнения (1.1), удовлетворяющие условию нормировки (1.2) и условиям a)–c). Для этих решений доказывается с помощью методов теории ветвления решений нелинейных уравнений (теории Ляпунова–Шмидта [7]), что они в окрестности точки бифуркации $\lambda = \lambda_b$ разлагаются в сходящийся степенной ряд по целым степеням разности $\lambda - \lambda_b$. Этот результат получаем на основе исследования диаграммы Ньютона уравнения разветвления для уравнения (1.1).

В заключительной части работы строится эффективный алгоритм для указанных разложений.

2. Поскольку нас будут интересовать лишь решения уравнения (1.1), описывающие нематик (т. е. удовлетворяющие условию (1.2) и условиям a), b), c)), то будем рассматривать это уравнение в банаховом пространстве C непрерывных функций на сфере ($\|f\| = \sup|f(n)|$), инвариантных относительно поворотов вокруг полярной оси сферической системы координат (т. е. зависящих лишь от угла θ между вектором n и полярной осью (условие a))) и при замене $n \to -n$ ($\theta \to \pi - \theta$, условие b)). Учитывая, что ядро $B(n,n')$ зависит лишь от угла α между векторами n и n' (следовательно, оно инвариантно при их одновременном повороте), причем $B(n,n') = B(-n,n') = B(n,-n')$, а мера dn инвариантна относительно вращений, нетрудно доказать, что интегральный оператор

$$h \to A_\lambda h = \lambda \int B(n,n')h(n)dn$$

отображает пространство C в себя.

Полагая $f = 1 + h(n)$, где $|h(n)|$ мал (напомним, что рассматриваются лишь ориентационные функции f, близкие к изотропным), получим из (1.1) нелинейное интегральное уравнение

$$\nu + \sum_{l=1}^{\infty}(-1)^{l-1}l^{-1}h^l + A_\lambda h = 0 \tag{2.1}$$

для неизвестной функции $h \in C$, удовлетворяющей условию нормировки

$$\int h(n)dn = 0. \tag{2.2}$$

Так как ядро B зависит лишь от угла α, то $\int B(n,n')dn$ не зависит от n', откуда, меняя порядок интегрирования в двукратном интеграле $I = \int A_\lambda h\, dn'$, найдем в силу условия нормировки (2.2), что $I=0$. Интегрируя теперь уравнение (2.1) по n', получим уравнение для h

$$h+A_\lambda h+\sum_{l=2}^{\infty}(-1)^{l-1}l^{-1}\Big(h^l-\int h^l dn\Big)=0. \tag{2.3}$$

Левая часть уравнения (2.3) является интегро-степенным рядом по h и λ, регулярно сходящимся при $\|h\|\le q<1$, $|\lambda|\le\lambda_0$ ($\lambda_0>0$ произвольно). Малые решения таких уравнений исследуются в теории ветвления решений нелинейных интегральных уравнений — теории Ляпунова–Шмидта [7]. При любом λ уравнение (2.3) имеет решение $h=0$. В теории Ляпунова–Шмидта доказывается возможность существования в окрестности точки бифуркации $\lambda=\lambda_b$ ненулевого решения h_λ, стремящегося к нулю при $\lambda\to\lambda_b$.

Ядро B интегрального оператора A_λ разлагается в ряд Фурье по полиномам Лежандра $P_{2s}(\cos\alpha)$

$$B=c_0(\chi)-K_1(n,n'),$$

где

$$\begin{aligned}
c_0(\chi)&=\frac{1}{2}\int_0^1(1-\chi^2x^2)^{1/2}dx,\quad K_1=\sum_{k=1}^{\infty}(4k+1)c_k(\chi)P_{2k}(nn'),\\
c_k(\chi)&=-\frac{1}{4}\int_{-1}^{1}(1-\chi^2x^2)^{1/2}P_{2k}(x)dx.
\end{aligned} \tag{2.4}$$

Согласно известной теореме Гобсона [8] ряд (2.4) для ядра K_1 сходится равномерно по α.

Нетрудно убедиться, что любое решение $h\in C$ уравнения (2.3), удовлетворяющее условию нормировки (2.2), будет удовлетворять и уравнению

$$h-\lambda\int K_1(n,n')h(n)dn=\sum_{l=2}^{\infty}(-1)^l l^{-1}\Big(h^l-\int h^l dn\Big). \tag{2.5}$$

Обратно, любое решение $h\in C$ уравнения (2.5) автоматически удовлетворяет условию нормировки (2.2), следовательно, и уравнению (2.3). Действительно, из (2.4) найдем

$$\int K_1(n,n')dn'=0.$$

Интегрируя теперь по n' в обеих частях уравнения (2.5) и меняя порядок интегрирования в двукратном интеграле

$$\int\Big(\int K_1(n,n')h(n)dn\Big)dn',$$

получим для h условие нормировки (2.2).

Для полиномов Лежандра справедлива теорема сложения [8], [9]

$$P_l(nn')=P_l(n)P_l(n')+2\sum_{m=1}^{l}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}P_l^m(n)P_l^m(n')\cos m(\varphi-\varphi') \tag{2.6}$$

(для сокращения записи снова обозначаем $P_l^m(\cos\theta)=P_l^m(n)$, P_l^m — присоединенные сферические функции, φ, θ, φ', θ' — сферические координаты ортов n и n' соответственно). Поскольку $h\in C$, т. е. удовлетворяет условиям a) и b), то с учетом соотношения (2.6) уравнение (2.5) для h можно переписать в виде

$$h-\lambda\int K(n,n')h(n)dn=\sum_{l=2}^{\infty}(-1)^l l^{-1}\Big(h^l-\int h^l dn\Big), \tag{2.7}$$

где ядро

$$K(n,n') = \sum_{k=1}^{\infty}(4k+1)c_k(\chi)P_{2k}(n)P_{2k}(n'). \tag{2.8}$$

С помощью разложения (2.8) и соотношения ортогональности для полиномов Лежандра найдем

$$\int K(n,n')P_{2k}(n)dn = c_k(\chi)P_{2k}(n').$$

Следовательно, полином P_{2k} является собственной функцией ядра K, принадлежащей собственному значению $c_k(\chi)$. Из (2.7) получаем, что точки бифуркации нелинейного интегрального уравнения (2.7) определяются соотношением $\lambda_b^{(k)}(\chi) = (c_k(\chi))^{-1}$.

Нетрудно доказать, что при $k \geq 1$ и $0 < \chi < 1$ $c_k(\chi) > 0$. С этой целью воспользуемся формулой Родрига ([9], с. 1039) для полиномов Лежандра

$$P_m(x) = \frac{1}{2^m m!}\frac{d^m(x^2-1)^m}{dx^m}. \tag{2.9}$$

Подставляя (2.9) в соотношение (2.4) для c_k, найдем

$$c_k(\chi) = -\frac{1}{2^{2k+2}(2k)!}\int_{-1}^{1}(1-\chi^2x^2)^{1/2}\frac{d^{2k}(x^2-1)^{2k}}{dx^{2k}}dx. \tag{2.10}$$

Интегрируя в правой части равенства (2.10) по частям $2k$ раз, получим

$$c_k(\chi) = -\frac{1}{2^{2k+2}(2k)!}\int_{-1}^{1}(x^2-1)^{2k}\frac{d^{2k}(1-\chi^2x^2)^{1/2}}{dx^{2k}}dx. \tag{2.11}$$

Очевидно, справедливо неравенство

$$\frac{d^{2k}(1-\chi^2x^2)^{1/2}}{dx^{2k}} < 0. \tag{2.12}$$

Из (2.12) и (2.11) и следует указанное неравенство для $c_k(\chi)$.

Далее докажем справедливость неравенств

$$c_k(\chi) > c_{k+1}(\chi), \quad 0 < \chi < 1, \ \ k = 1, 2, \ldots \tag{2.13}$$

Действительно, из соотношения (2.4) для $c_k(\chi)$ получаем с помощью известного рекуррентного соотношения для полиномов Лежандра [8], [9]

$$c_k(\chi) - c_{k+1}(\chi) = \frac{1}{4}\int_{-1}^{1}(1-\chi^2x^2)^{1/2}(P_{2k+2}(x)-P_{2k}(x))dx = \frac{4k+3}{8(k+1)(2k+1)}I_k(\chi),$$

где

$$I_k = \int_{-1}^{1}(1-\chi^2x^2)^{1/2}(x^2-1)\frac{dP_{2k+1}}{dx}dx. \tag{2.14}$$

Снова воспользуемся формулой Родрига (2.9). Подставим (2.9) при $m = 2k+1$ в правую часть соотношения (2.14), а затем проинтегрируем $2k+2$ раза по частям. Получим

$$I_k = \frac{1}{2^{2k+1}(2k+1)!}\int_{-1}^{1}(x^2-1)^{2k+1}\frac{d^{2k+2}}{dx^{2k+2}}[(1-\chi^2x^2)^{1/2}(x^2-1)]dx. \tag{2.15}$$

Разложим выражение в квадратных скобках в последнем интеграле в ряд Маклорена. После простых преобразований найдем

$$(1-\chi^2x^2)^{1/2}(x^2-1) = -1 + (1-\tfrac{1}{2}\chi^2)x^2 - \tfrac{1}{2}\chi^2(1-\tfrac{1}{4}\chi^2)x^4 + \\ + \sum_{m=3}^{\infty}\frac{(2m-5)!!}{(2m-2)!!}\chi^{2m-2}\Big(\frac{2m-3}{2m}\chi^2 - 1\Big)x^{2m}. \quad (2.16)$$

Поскольку

$$\frac{2m-3}{2m}\chi^2 - 1 < 0 \quad (0<\chi<1,\ \ m\geq 3),$$

то из (2.16) легко следует неравенство

$$\frac{d^{2k+2}}{dx^{2k+2}}[(1-\chi^2x^2)^{1/2}(x^2-1)] < 0, \quad k=1,2,\dots,$$

после чего из (2.15) получаем сперва $I_k > 0$, а затем и требуемое неравенство (2.13) для коэффициентов c_k.

Из неравенства (2.13) следует, что каждая из точек бифуркации $\lambda_b^{(k)}(\chi)$ при любом $\chi \in (0,1)$ является точкой бифуркации с одномерным ветвлением. Ниже будем рассматривать лишь решение $h \in C$ нелинейного интегрального уравнения (2.7), ответвляющееся от изотропного решения $h = 0$ в точке бифуркации $\lambda_b(\chi) = \lambda_b^{(1)}(\chi)$, т. к. только это решение будет давать ориентационную функцию $f = 1 + h(n)$, удовлетворяющую как условию нормировки (1.2), так и всем трем условиям a), b), c). Из дальнейшего будет ясно, что решения, ответвляющиеся в точках бифуркации $\lambda_b^{(k)}(\chi)$, $k \geq 2$, не будут удовлетворять условию c), следовательно, и не будут описывать нематик.

Обозначим $\varphi_k(n) = (4k+1)^{1/2}P_{2k}$, так что

$$\int \varphi_m(n)\varphi_k(n)dn = \delta_{km}$$

(δ_{km} — символ Кронекера), и положим $\lambda = \lambda_b + \mu$,

$$E(n,n') = \lambda_b K(n,n') - \varphi_1(n)\varphi_1(n')$$

и

$$\xi = \int h(n)\varphi_1(n)dn \quad (2.17)$$

(в физике величина ξ называется параметром порядка и представляет большой самостоятельный интерес).

Уравнение (2.7) в новых обозначениях можно переписать в виде

$$h - \int E(n,n')h(n)dn = \xi\varphi_1 + \mu\int K(n,n')h(n)dn + \sum_{l=2}^{\infty}(-1)^l l^{-1}\Big(h^l - \int h^l dn\Big). \quad (2.18)$$

Поскольку, как мы показали выше, каждая из точек бифуркации является точкой одномерного ветвления для уравнения (2.7), то в силу леммы Шмидта [7] единица не является собственным значением ядра $E(n,n')$, и из теории Ляпунова–Шмидта в силу регулярной сходимости интегро-степенного ряда в правой части уравнения (2.18) получаем, что уравнение (2.7) при достаточно малых $|\xi|$ и $|\mu|$ имеет единственное малое решение $h(n) \in C$ (следовательно, h удовлетворяет условиям a) и b); очевидно, оно удовлетворяет и условию нормировки (2.2)), которое представляется в виде равномерно сходящегося ряда

$$h(n) = \xi\varphi_1 + \sum_{r+s=2}\xi^r\mu^s a_{rs}(n), \quad \int a_{rs}(n)dn = 0. \quad (2.19)$$

Здесь пока неизвестны и параметр порядка ξ (он выражается через искомое решение h с помощью соотношения (2.17)) и коэффициенты $a_{rs}(n)$. Подставляя (2.19) в правую часть соотношения (2.17), получим для ξ уравнение разветвления

$$\sum_{m=2}^{\infty} \mathcal{L}_{m0}\xi^m + \sum_{m=0}^{\infty} \xi^m \sum_{r=1}^{\infty} \mathcal{L}_{mr}\mu^r = 0, \tag{2.20}$$

где

$$\mathcal{L}_{ij} = \int a_{ij}(n)\varphi_1(n)dn$$

(ξ является малым решением уравнения разветвления).

Уравнение (2.20) не содержит слагаемого с первой степенью ξ (и нулевой степенью μ), поэтому его решения разлагаются в сходящиеся при малых μ ($|\mu| \leq \mu_0$) степенные ряды по положительным, вообще говоря, дробным, степеням μ (в теории метода Ньютона [7] доказывается, что в этих разложениях показатели степени — рациональные дроби, имеющие конечный общий знаменатель).

Покажем, что ненулевое малое решение $\xi = \xi(\mu)$ уравнения разветвления (2.20) для интегрального уравнения (2.18) единственно и разлагается в сходящийся степенной ряд по целым степеням $\mu = \lambda - \lambda_b$ в некоторой окрестности точки бифуркации $\lambda_b(\chi)$. С учетом (2.19) отсюда будет следовать, что существует единственное ненулевое малое решение $h(n) \in C$ уравнения (2.18), разлагающееся в некоторой окрестности точки бифуркации λ_b по целым положительным степеням $\lambda - \lambda_b$ с коэффициентами, зависящими лишь от угла θ сферической системы координат. Эффективный метод построения этого решения укажем в п. 3.

Нам понадобятся некоторые из коэффициентов $\mathcal{L}_{ij}$ уравнения разветвления (2.20). Прежде всего покажем, что $\mathcal{L}_{0j} = 0$, $j = 1, 2, \ldots$ С этой целью подставим решение (2.19) в уравнение (2.18). Положим $\xi = 0$ в полученном тождестве и сравним коэффициенты при одинаковых степенях μ в левой и правой частях полученных разложений по целым степеням μ. Если при этом $a_{02} \neq 0$, то левая часть будет содержать единственное слагаемое второй степени по μ, а именно слагаемое

$$\Big(a_{02}(n') - \int E(n,n')a_{02}(n)dn\Big)\mu^2.$$

Поскольку единица не является собственным значением ядра E, то коэффициент при μ^2 в этом слагаемом будет отличен от нуля. В то же время нетрудно заметить, что правая часть в случае $a_{02} \neq 0$ будет содержать лишь слагаемые не ниже третьей степени μ. Следовательно, $a_{02} = 0$, а значит, и $\mathcal{L}_{02} = 0$. Если теперь $a_{03} \neq 0$, то в левой части полученного разложения будет содержаться слагаемое

$$\Big(a_{03}(n') - \int E(n,n')a_{03}(n)dn\Big)\mu^3,$$

т. к. снова коэффициент при μ^3 в этом слагаемом будет отличен от нуля. В то же время правая часть будет содержать лишь слагаемые не ниже четвертой степени относительно μ. Следовательно, $a_{03} = 0$, а значит, и $\mathcal{L}_{03} = 0$. Продолжая эти рассуждения, получим $a_{0j} = 0$, а значит, и $\mathcal{L}_{0j} = 0$.

Вычислим теперь коэффициент $\mathcal{L}_{20}$ уравнения разветвления (2.20). С этой целью снова подставим ряд (2.19) в уравнение (2.18) и сравним коэффициенты при ξ^2 в обеих частях полученного тождества. Получим линейное неоднородное интегральное уравнение для определения коэффициента a_{20}

$$a_{20}(n') - \int E(n,n')a_{20}(n)dn = \frac{1}{2}(\varphi_1^2(n') - 1). \tag{2.21}$$

Ниже используем формулу Клебша–Гордана ([10], с. 192)

$$P_mP_n = \sum_{l=|m-n|}^{m+n} \frac{(2l+1)(l+m-n)!(l-m+n)!(m+n-l)!g!^2}{(1+m+n+l)![(g-m)!(g-n)!(g-l)!]^2} P_l, \tag{2.22}$$
$$g = 2^{-1}(m+n+l)$$

(суммирование в (2.22) распространяется лишь на целые l той же четности, что и $m+n$). С помощью соотношения (2.22) найдем

$$2^{-1}(\varphi_1^2 - 1) = (\sqrt{5}\varphi_1 + \varphi_2)/7. \tag{2.23}$$

Полиномы Лежандра P_{2k}, а следовательно, и φ_k являются собственными функциями ядра E, т. к.

$$\int E(n,n')\varphi_k(n)dn = \lambda_b c_k(\chi)\varphi_k(n'), \quad k \geq 2; \quad \int E(n,n')\varphi_1(n)dn = 0. \tag{2.24}$$

Поэтому из (2.23) следует, что единственное решение уравнения (2.21) (напомним, что единица не является собственным значением ядра E, и приведенное однородное уравнение для (2.21) имеет в пространстве C лишь нулевое решение) следует искать в виде

$$a_{20} = \alpha_1\varphi_1 + \alpha_2\varphi_2. \tag{2.25}$$

Подставляя (2.25) в уравнение (2.21), с учетом соотношений (2.23) и (2.24) найдем

$$\alpha_1 = \sqrt{5}/7, \quad \alpha_2 = (7(1-\lambda_b c_2))^{-1}.$$

Таким образом, оба коэффициента α_1, α_2 определены и положительны (в силу неравенств (2.13) и определения точки бифуркации λ_b справедлива оценка $1 - \lambda_b c_2 > 0$). Теперь окончательно получаем $\mathcal{L}_{20} = \sqrt{5}/7$.

Чтобы найти $a_{11}(n)$, надо после подстановки ряда (2.19) в уравнение (2.18) сравнить в обеих частях полученного тождества коэффициенты при произведении $\xi\mu$. В результате получим уравнение для определения коэффициента $a_{11}(n)$

$$a_{11} - \int E(n,n')a_{11}(n)dn = c_1(\chi)\varphi_1(n') = \lambda_b^{-1}\varphi_1(n'),$$

откуда $a_{11}(n) = \varphi_1(n)/\lambda_b$, $\mathcal{L}_{11} = \lambda_b^{-1}$. Итак, $\mathcal{L}_{0j} = 0$, $j \geq 2$, но $\mathcal{L}_{20} \neq 0$, $\mathcal{L}_{11} \neq 0$ ($\chi \in (0,1)$). Отсюда следует, что убывающая часть диаграммы Ньютона уравнения разветвления (2.20), определяющая его малые решения $\xi = \xi(\mu)$, состоит из одного отрезка, соединяющего точки $(1,1)$ и $(2,0)$. В этом случае, как известно [7], уравнение разветвления (2.20), кроме решения $\xi = 0$, имеет единственное ненулевое решение $\xi(\mu)$, разлагающееся в некоторой окрестности точки $\mu = 0$ в сходящийся степенной ряд по целым положительным степеням μ

$$\xi = \tau_1\mu + \tau_2\mu^2 + \cdots, \tag{2.26}$$

где

$$\tau_1 = -\mathcal{L}_{11}/\mathcal{L}_{20} = -\frac{7}{\sqrt{5}\lambda_b} < 0.$$

После замены параметра ξ в ряде (2.19) решением (2.26) получим близкое к изотропному решение $f = 1 + h(n)$ уравнения Парсонса (1.1) в виде сходящегося в некоторой окрестности точки бифуркации λ_b ряда по целым неотрицательным степеням $\mu = \lambda - \lambda_b$. Это решение ответвляется от изотропного в точке $\lambda = \lambda_b$ (т. е. $\lim f(n) = 1$, $\lambda \to \lambda_b$), удовлетворяет условию нормировки (1.2) и условиям a) и b). Из (2.19), (2.26) и замечания 1 следует, поскольку $\tau_1 < 0$, что это решение при достаточно малых $|\mu|$ будет удовлетворять условию c) тогда и только тогда, когда

$\mu < 0$, т. е. при $\lambda < \lambda_b$. Это означает, что направление бифуркации в точке λ_b левое. Из физической литераторы хорошо известно, что точке бифуркации с левым направлением бифуркации соответствует фазовый переход первого рода со скачком концентрации.

Замечание 2. Аналогично строятся и малые решения $h(n)$ (а вместе с ними и $f(n)$), ответвляющиеся от тривиального $h = 0$ в точках бифуркации $\lambda_b^{(k)}$, $k \geq 2$. Эти решения также будут представляться в виде рядов (2.19), в которых, однако, в первом слагаемом множитель $\varphi_1(n)$ придется заменить на $\varphi_k(n) = \sqrt{4k+1}P_{2k}(n)$, соответственно изменятся и остальные коэффициенты $a_{rs}(n)$. Так как при $k \geq 2$ полином P_{2k} в отличие от P_2 имеет локальные максимумы внутри отрезка $0 \leq \theta \leq \pi$, то для решений, ответвляющихся от тривиального при $\lambda = \lambda_b^{(k)}$, $k \geq 2$, условие c) не будет выполняться как при $\lambda < \lambda_b^{(k)}$, так и при $\lambda > \lambda_b^{(k)}$, следовательно, такие решения не будут описывать нематик.

3. Здесь будет указан эффективный алгоритм для построения разложения анизотропной плотности $f(n) = 1 + h(n)$, близкой к изотропной и удовлетворяющей условию нормировки (1.2) и условиям a), b), c), в ряд по целым степеням $\mu = \lambda - \lambda_b$. Сходимость этого разложения уже была доказана в п. 2. С этой целью воспользуемся уравнением (2.7), предварительно переписав его в виде

$$Ah = h - \lambda_b \int K(n,n')h(n)dn = \sum_{l=2}^{\infty}(-1)^l l^{-1}\Big(h^l - \int h^l dn\Big) + \mu \int K(n,n')h(n)dn, \qquad (3.1)$$

и положим

$$h = \sum_{i=1}^{\infty} h_i(n)\mu^i. \qquad (3.2)$$

Для определения неизвестных коэффициентов формального степенного ряда (3.2) воспользуемся методом неопределенных коэффициентов. Подставляя (3.2) в (3.1) и сравнивая коэффициенты при одинаковых степенях μ в обеих частях полученного равенства, найдем для определения h_i линейное неоднородное интегральное уравнение с симметрическим ядром и правой частью, зависящей лишь от коэффициентов $h_1, \ldots, h_{i-1}$. Условием разрешимости этого уравнения будет условие ортогональности правой части уравнения к решению однородного уравнения $Ah = 0$. Сравнивая коэффициенты при первой степени μ, получим однородное уравнение $Ah_1 = 0$, откуда $h_1 = \tau_1\varphi_1$. Величина τ_1 будет определена при построении следующего приближения h_2, уравнение для которого получим, сравнивая коэффициенты при μ^2. Будем иметь с учетом (2.22) уравнение

$$Ah_2 = \tau_1\Big(c_1 + \frac{\sqrt{5}}{7}\tau_1\Big)\varphi_1 + \tau_1^2\varphi_2/7. \qquad (3.3)$$

Коэффициент при φ_1 в правой части уравнения (3.3) должен быть равен нулю (правая часть должна быть ортогональна φ_1). Отсюда $\tau_1 = -7c_1/\sqrt{5}$ (если $\tau_1 = 0$, то и $h = 0$). Решение h_2 уравнения следует искать в виде

$$h_2 = \tau_2\varphi_1 + \alpha_{21}\varphi_2. \qquad (3.4)$$

Подставляя (3.4) в уравнение (3.3), находим

$$\alpha_{21} = \frac{\tau_1^2}{7(1-\lambda_b c_2)}$$

(напомним, что $1 - \lambda_b c_2 > 0$ $(0 < \chi < 1)$), а τ_2 найдем при построении третьего приближения h_3, для которого получаем уравнение

$$Ah_3 = \int K(n,n')h_2(n)dn + h_1h_2 - \int h_1h_2dn + \frac{1}{3}\Big(\int h_1^3dn - h_1^3\Big). \qquad (3.5)$$

С помощью формулы Клебша–Гордана (2.22) найдем

$$\begin{aligned} \varphi_1\varphi_2 &= \frac{6}{7}\varphi_1 + \frac{20\sqrt{5}}{77}\varphi_2 + \frac{15}{11}\sqrt{5/13}\varphi_3, \\ \varphi_1^3 &= \frac{\sqrt{5}}{7}\Big(2 + 3\sqrt{5}\varphi_1 + \frac{36}{11}\varphi_2 + \frac{90}{11}\sqrt{1/13}\varphi_3\Big). \end{aligned} \tag{3.6}$$

Соотношения (3.6) позволяют представить правую часть уравнения (3.5) в виде линейной комбинации

$$\beta_{31}(\tau_1,\tau_2)\varphi_1 + \beta_{32}\varphi_2 + \beta_{33}\varphi_3,$$

где

$$\beta_{32} = (22\tau_1\tau_2 + 20\sqrt{5}\tau_1\alpha_{21} + 77c_2\alpha_{21} - 12\sqrt{5}\tau_1^3)/77, \quad \beta_{33} = \frac{15}{11}\sqrt{5/13}\tau_1\Big(\alpha_{21} - \frac{2}{7}\tau_1^2\Big).$$

Коэффициент $\beta_{31}(\tau_1,\tau_2)$ в силу условия существования решения уравнения (3.5) следует приравнять нулю, откуда получаем

$$\tau_2 = (5\tau_1^2 - 6\alpha_{21})/\sqrt{5}$$

и тем самым коэффициент h_2 разложения (3.2) полностью определен.

Решение h_3 уравнения (3.5) теперь следует искать в виде

$$h_3 = \tau_3\varphi_1 + \alpha_{32}\varphi_2 + \alpha_{33}\varphi_3. \tag{3.7}$$

Коэффициенты α_{32}, α_{33} определяются немедленно в результате подстановки (3.7) в уравнение (3.5). Найдем

$$\alpha_{32} = \frac{\beta_{32}}{1-\lambda_b c_2}, \quad \alpha_{33} = \frac{\beta_{33}}{1-\lambda_b c_3}$$

(здесь снова $1 - \lambda_b c_3 > 0$, $0 < \chi < 1$). Коэффициент τ_3 находится из условия существования приближения h_4, для которого получаем интегральное уравнение

$$Ah_4 = s(n) - \int s(n)dn + \int K(n,n')h_3(n)dn, \tag{3.8}$$

где обозначено

$$s(n) = 4^{-1}h_1^4 + 2^{-1}h_2^2 + h_1h_3 - h_1^2h_2.$$

С помощью формулы Клебша–Гордана и найденных выше выражений для h_1, h_2, h_3 убеждаемся, что правая часть уравнения (3.8) является линейной комбинацией φ_1, φ_2, φ_3, φ_4. Уравнение для определения коэффициента τ_3 получим, приравняв нулю коэффициент при φ_1 в этой линейной комбинации. В результате найдем

$$\tau_3 = \frac{1}{7c_1}\left[\sqrt{5}\Big(\frac{25}{11}\tau_1^4 + \tau_2^2 + 10\alpha_{21}^2\Big) + 6(\alpha_{32} + \tau_2\alpha_{21}) - \tau_1^2\Big(15\tau_2 + \frac{52}{7}\alpha_{21}\Big)\right].$$

Теперь полностью определено третье приближение h_3. Аналогично можно провести вычисление последующих приближений, но выкладки становятся все более громоздкими и мы на них не останавливаемся.

Таким образом, с помощью развитого алгоритма с точностью до слагаемого порядка $O(\mu^4)$ найдена ориентационная функция и параметр порядка

$$\xi = \tau_1\mu + \tau_2\mu^2 + \tau_3\mu^3 + O(\mu^4).$$

Замечание 3. Полученные в этом пункте формулы в явном виде выражают $f(n)$ с точностью до слагаемого порядка $O(\mu^4)$ через коэффициенты Фурье c_1, c_2, c_3 ядра B. Эти коэффициенты задаются с помощью интегралов (2.4) при $k = 1,2,3$ и также вычисляются в явном виде, но получающиеся в результате громоздкие соотношения приводить не будем.

Благодарю за внимание и полезные обсуждения Э.Ю. Лернера.

Литература

1. Kayser R.F., Raveche H.J. *Bifurcation in Onsager's model of the isotropic nematic transition* // Phys. Rev. A. – 1978. – V. 17. – № 6. – P. 2067–2072.
2. Семенов А.Н., Хохлов А.Р. *Статистическая физика жидкокристаллических полимеров* // УФН. – 1988. – Т. 156. – Вып. 3. – С. 427–476.
3. Де Жен П. Ж. *Физика жидких кристаллов.* – М.: Мир, 1977. – 400 с.
4. Корнев К.Г., Эскин Л.Д. *Фазовые переходы в суспензии иглообразных магнитов* // Изв. АН СССР. Сер. физ. – 1991. – Т. 55. – № 6. – С. 1050–1054.
5. Эскин Л.Д. *Об интегральном уравнении теории фазовых переходов в системе магнитных стержней* // ТМФ. – 1996. – Т. 109. – № 3. – С. 427–440.
6. Parsons J.D. *Nematic ordering on a system of rods* // Phys. Rev. A. – 1979. – V. 19. – № 3. – P. 1225–1230.
7. Вайнберг М.М., Треногин В.А. *Теория ветвления решений нелинейных уравнений.* – М.: Наука, 1969. – 528 с.
8. Гобсон Е.В. *Теория сферических и эллипсоидальных функций.* – М.: Ин. лит., 1952. – 476 с.
9. Градштейн И.С., Рыжик И.М. *Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений.* – М.: ГИФМЛ, 1962. – 1100 с.
10. Виленкин Н.Я. *Специальные функции и теория представлений групп.* – М.: Наука, 1965. – 588 с.

Казанский государственный университет

Поступила 10.02.1998