

Л.Д. ЭСКИН

О МОДЕЛИ ПАРСОНСА В СЛУЧАЕ ТОЧКИ БИФУРКАЦИИ
С ДВУМЕРНЫМ ВЕТВЛЕНИЕМ

1. Введение

В 1979 г. Парсонс [1], изучая ориентационные фазовые переходы из изотропной (“жидкой”) фазы в анизотропную (“нематическую”) фазу в системе произвольных осесимметричных частиц получил для ориентационной функции распределения (ОФР — плотность распределения ориентаций осей частиц) нелинейное интегральное уравнение

$$\nu + \ln f(\mathbf{n}') + \lambda \int K(\mathbf{n}, \mathbf{n}') f(\mathbf{n}) d\mathbf{n} = 0. \quad (1.1)$$

Здесь \mathbf{n} — орт оси частицы, параметр λ — монотонная функция концентрации $\eta = V_0 c$ ($c = N/V$ — плотность системы, V_0 — объем частицы), неизвестная постоянная ν определяется условием нормировки $\int f(\mathbf{n}) d\mathbf{n} = 1$. Ядро K в случае произвольных осесимметричных частиц оказывается произвольным непрерывным ядром, обладающим свойствами симметрии (g — оператор поворота)

$$K(g\mathbf{n}, g\mathbf{n}') = K(\mathbf{n}, \mathbf{n}') = K(\mathbf{n}', \mathbf{n}) = K(-\mathbf{n}, \mathbf{n}'). \quad (1.2)$$

Из (1.2) следует, что ядро K является функцией угла α между ортами \mathbf{n} и \mathbf{n}' . Обычно в физике рассматриваются лишь анизотропные фазовые состояния, обладающие двусторонней осью симметрии бесконечного порядка, которая и принимается за полярную ось (ось Z) сферической системы координат, в которой $d\mathbf{n} = (4\pi)^{-1} \sin \theta d\varphi d\theta$. В этом случае, который и будет исследован в данной статье, для ОФР $f(\mathbf{n})$ должны выполняться условия [2]–[5]:

а) $f(\mathbf{n})$ не зависит от угла φ ($f = f(\theta)$),

б) $f(\theta) = f(\pi - \theta)$, следовательно, $f(\mathbf{n})$ разлагается в ряд Фурье по полиномам Лежандра с четными индексами P_{2m} .

Для изотропной фазы $f(\mathbf{n}) = 1$, для анизотропной $f \neq 1$. Для функции f , описывающей нематическую фазу, должно выполняться еще и условие

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

Условие в) означает, что нематик обладает единственным направлением преимущественной ориентации осей частиц, которое совпадает с направлением его оси симметрии.

Замечание 1. Среди полиномов P_{2m} только полином P_2 удовлетворяет условию в).

Отметим, что частными случаями уравнения (1.1) являются уравнение Онзагера [2], [3], описывающее ориентационные фазовые переходы в системе сильно вытянутых стержней со стерическим взаимодействием (l — длина, d — диаметр стержня, $\delta = d/l \ll 1$, $\lambda = 2cdl^2$,

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект № 00-01-00132.

$K = (1 - \mathbf{nn}'^2)^{1/2}$, $\mathbf{nn}' = \cos \alpha$ — скалярное произведение ортов \mathbf{n} и \mathbf{n}') и модель Парсонса [1] для системы частиц, имеющих форму эллипсоида вращения с полуосями $b > a$

$$\lambda = 8J(\eta)(1 - \chi^2)^{-1/2}, \quad K = (1 - (\chi\mathbf{nn}')^2)^{1/2}, \quad (1.3)$$

$$J(\eta) = (4\eta - 3\eta^2)/(4(1 - \eta^2)), \quad \chi = (b^2 - a^2)/(b^2 + a^2), \quad 0 < \eta, \chi < 1.$$

Конкретный вид ядра K в уравнении (1.1) и коэффициента λ определяется геометрией частиц и выбором модели парного потенциала и парной корреляционной функции. Целью данной работы как раз и является изучение на основе общих идей теории ветвления решений нелинейных уравнений [6] решений уравнения (1.1), удовлетворяющих условиям а) и б) и ответвляющихся от изотропного. При этом (в отличие от работ [7], [8], где изучен случай системы эллипсоидальных частиц, и работ [4], [5], где изучен случай системы магнитных стержней со стерическим отталкиванием и диполь-дипольным взаимодействием) здесь не прибегаем к конкретному выбору ядра K (а значит, и конкретной геометрии осесимметричных частиц, формы парного потенциала и парной корреляционной функции), а налагаем лишь некоторые условия достаточно общего характера на его коэффициенты Фурье–Лежандра. Как известно [6], основной задачей теории Ляпунова–Шмидта является получение ответов на вопрос о числе решений, ответвляющихся в точке бифуркации $\lambda = \lambda_b$, и о структуре разложения решений в ряд по степеням $\mu = \lambda - \lambda_b$ (вообще говоря, решения могут разлагаться в ряд по дробным степеням μ). В наиболее интересных случаях одномерного и двумерного ветвления ответы на эти вопросы для уравнения (1.1) даются соответственно в теореме 1, где рассмотрен случай одномерного ветвления и сформулированы вспомогательные предложения, используемые на протяжении всей статьи и в теореме 2 в случае точки бифуркации с двумерным ветвлением, изучению которого посвящена основная часть данной статьи (именно это обстоятельство определило ее название). Пример конкретной модели, иллюстрирующий теорему 2, рассматривается в заключительной части работы. Этот пример демонстрирует существование ровно одной устойчивой нематической фазы (из возможных шести анизотропных фаз) в окрестности точки бифуркации λ_1 с двумерным ветвлением.

2. Случай точки бифуркации с одномерным ветвлением

Всюду ниже полагаем, что непрерывное ядро $K(\cos \alpha)$ удовлетворяет условиям симметрии (1.2) и обозначаем

$$C_m = 2^{-1} \int_0^\pi K P_{2m}(\cos \alpha) \sin \alpha d\alpha$$

коэффициенты Фурье—Лежандра ядра K . Для сокращения записи будем также обозначать $P_{2m}(\cos \theta) = P_{2m}(\mathbf{n})$ (\mathbf{n} — орт со сферическими координатами θ, φ) и $d\mathbf{n} = (4\pi)^{-1} \sin \theta d\varphi d\theta$.

Предложение 1. *Справедливо соотношение*

$$\int K(\mathbf{n}, \mathbf{n}') P_{2m}(\mathbf{n}) d\mathbf{n} = C_m P_{2m}(\mathbf{n}').$$

Предложение 1 легко доказывается с помощью теоремы сложения для полиномов Лежандра ([9], формула 8.814).

Уравнение (1.1) будем рассматривать в банаховом пространстве C непрерывных на сфере функций с нормой $\|f\| = \sup |f|$, удовлетворяющих условиям а) и б). С учетом свойств симметрии (1.2) ядра K и инвариантности меры $d\mathbf{n}$ относительно поворотов нетрудно показать, что оператор $Af = \int K(\mathbf{n}, \mathbf{n}') f(\mathbf{n}) d\mathbf{n}$ отображает пространство C в себя.

Предложение 2. Решение $f(\mathbf{n}) \in C$ уравнения (1.1), удовлетворяющее условию нормировки и ответвляющееся от изотропного, имеет вид $f = 1+h$, где h — малое решение нелинейного интегрального уравнения

$$h - \lambda \int K_1(\mathbf{n}, \mathbf{n}') h(\mathbf{n}) d\mathbf{n} = \sum_{m=2}^{\infty} (-1)^{m-1} \left(\int h^m d\mathbf{n} - h^m \right) / m \quad (2.1)$$

с ядром $K_1 = - \sum_{k=1}^{\infty} (4k+1) C_k P_{2k}(\mathbf{n}) P_{2k}(\mathbf{n}')$.

При доказательстве предложения 2 снова используется теорема сложения для полиномов Лежандра и их ортогональность.

Правая часть уравнения (2.1) является интегро-степенным рядом по h и λ , регулярно сходящимся при $\|h\| \leq q < 1$, $|\lambda| \leq \lambda_0$ (λ_0 произвольно). Малые по норме решения $h(\mathbf{n})$ таких уравнений исследуются с помощью методов теории ветвления решений нелинейных уравнений — теории Ляпунова–Шмидта [6]. При любом λ уравнение (2.1) имеет решение $h = 0$. В теории Ляпунова–Шмидта доказывается возможность существования в некоторой окрестности точки бифуркации $\lambda = \lambda_b$ ненулевого решения h_λ , стремящегося к нулю при $\lambda \rightarrow \lambda_b$.

Непосредственным следствием предложения 1 является

Предложение 3. Точками бифуркации уравнения (2.1) могут быть лишь характеристические числа $\lambda_m = -C_m^{-1}$ ($m \geq 1$) ядра K_1 .

Отметим, что вопрос об условиях, обеспечивающих бифуркационность характеристических чисел λ_m линейзованного оператора для уравнений в вещественных банаховых пространствах, изучался во многих работах (напр., [10]–[13]). С помощью теоремы 2.1 [13] нетрудно показать, что все нечетнократные характеристические числа λ_m ядра K_1 являются точками бифуркации уравнения (2.1). Из дальнейшего с учетом замечания 1 будет ясно, что решения, ответвляющиеся от изотропного в точках бифуркации $\lambda_m \neq \lambda_1$, не удовлетворяют условию в), т. е. не описывают нематик. С физической точки зрения наиболее интересны случаи, которые и рассматриваются в данной работе.

1) $\lambda_1 \neq \lambda_k$ ($C_1 \neq C_k$), $k \neq 1$ — в этом случае λ_1 — точка бифуркации уравнения (2.1) с одномерным ветвлением.

2) $\lambda_1 = \lambda_2 \neq \lambda_k$ ($C_1 = C_2 \neq C_k$), $k > 2$, из рассуждений п. 3 следует, что и в этом случае λ_1 — точка бифуркации, но обладающая двумерным ветвлением.

Обозначим $\varphi_k(\mathbf{n}) = \sqrt{4k+1} P_{2k}$, $k = \overline{1, \infty}$, так что $\int \varphi_k \varphi_m d\mathbf{n} = \delta_{km}$, и положим

$$\lambda = \lambda_1 + \mu, \quad E(\mathbf{n}, \mathbf{n}') = \lambda_1 K_1 - \varphi_1(\mathbf{n}) \varphi_1(\mathbf{n}'), \quad \zeta = \int h \varphi_1 d\mathbf{n}.$$

В новых обозначениях уравнение (2.1) принимает вид

$$h - \int E(\mathbf{n}, \mathbf{n}') h(\mathbf{n}) d\mathbf{n} = \zeta \varphi_1 + \mu \int K_1 h d\mathbf{n} + \sum_{l=2}^{\infty} (-1)^{l-1} \left(\int h^l d\mathbf{n} - h^l \right) / l. \quad (2.2)$$

Предполагая $\lambda_1 \neq \lambda_k \quad \forall k > 1$ (случай одномерного ветвления), получим в силу леммы Шмидта [6], что единица не является собственным значением ядра E . В этом случае уравнение (2.2) при достаточно малых $|\zeta|$ и $|\mu|$ имеет малое решение $h(\mathbf{n}) \in C$, которое автоматически удовлетворяет условию нормировки и представляется в виде равномерно сходящегося ряда

$$h = \zeta \varphi_1 + \sum_{r+s=2}^{\infty} \zeta^r \mu^s a_{rs}(\mathbf{n}), \quad \int a_{rs}(\mathbf{n}) d\mathbf{n} = 0, \quad (2.3)$$

с неизвестными коэффициентами a_{rs} и параметром ζ — малым решением уравнения разветвления

$$\sum_{m=2}^{\infty} L_{m0} \zeta^m + \sum_{m=0}^{\infty} \zeta^m \sum_{r=1}^{\infty} L_{mr} \mu^r = 0, \quad L_{ij} = \int a_{ij} \varphi_1 d\mathbf{n}. \quad (2.4)$$

Уравнение (2.4) не содержит слагаемого с первой степенью ζ и нулевой степенью μ , и его малые решения (а вместе с ними и решения (2.3) уравнения (2.2)) разлагаются при малых μ ($|\mu| \leq \mu_0$) в сходящиеся ряды по положительным степеням μ с рациональными показателями степени, имеющими один и тот же знаменатель. Покажем, что для решения $h(\mathbf{n})$ уравнения (2.2) эти показатели — целые числа.

Теорема 1. Пусть $C_1 \neq C_k$, $k > 1$. Тогда в точке бифуркации λ_1 с одномерным ветвлением от изотропного решения $f = 1$ ответвляется единственное анизотропное решение уравнения (1.1), удовлетворяющее условию нормировки и условиям а) и б). Это решение в некоторой окрестности точки λ_1 представляется в виде сходящегося степенного ряда по целым степеням $\mu = \lambda - \lambda_1$ и удовлетворяет условию в) (описывает немагик) лишь в случае $\mu < 0$ и $C_1 < 0$.

Доказательство сводится к исследованию убывающей части диаграммы Ньютона уравнения разветвления (2.4), для чего понадобятся некоторые из коэффициентов L_{ij} .

Лемма. Все коэффициенты L_{0j} , $j = \overline{2, \infty}$, уравнения (2.4) равны нулю.

Справедливость леммы для уравнения (2.3) следует из общего результата об уравнениях разветвления нелинейных уравнений в банаховых пространствах, полученного в [13].

Для $\varphi_j(\mathbf{n})$ справедливы следующие соотношения:

$$2^{-1}(\varphi_1^2 - 1) = (\sqrt{5}\varphi_1 + 3\varphi_2)/7, \quad (2.5)$$

$$\varphi_1\varphi_2 = \frac{6}{7}\varphi_1 + \frac{20}{77}\sqrt{5}\varphi_2 + \frac{15}{11}\sqrt{\frac{5}{13}}\varphi_3, \quad (2.6)$$

$$\varphi_2^2 = 1 + \frac{2}{77} \left(10\sqrt{5}\varphi_1 + \frac{243}{13}\varphi_2 \right) + a\varphi_3 + b\varphi_4. \quad (2.7)$$

Численные значения коэффициентов a и b не понадобятся и на их вычислении останавливаться не будем.

Соотношения (2.5)–(2.7) получаются с помощью формулы Клебша–Гордана [14] для полиномов Лежандра.

В силу предложения 1 функции φ_k , $k = \overline{2, \infty}$, являются собственными функциями ядра E

$$\int E(\mathbf{n}, \mathbf{n}') \varphi_k(\mathbf{n}) d\mathbf{n} = \lambda_1 \varphi_k(\mathbf{n}') / \lambda_k. \quad (2.8)$$

Снова подставляя ряд (2.3) в уравнение (2.2) и сравнивая коэффициенты при ζ^2 в обеих частях полученного разложения по целым степеням ζ и μ , для определения a_{20} с учетом соотношения (2.5) получим линейное неоднородное уравнение

$$a_{20} - \int E(\mathbf{n}, \mathbf{n}') a_{20} d\mathbf{n} = (\sqrt{5}\varphi_1 + 3\varphi_2)/7.$$

С помощью соотношения (2.8) из последнего уравнения найдем

$$a_{20} = \alpha_1 \varphi_1 + \alpha_2 \varphi_2, \quad \alpha_1 = \sqrt{5}/7, \quad \alpha_2 = 3 \left(7 \left(1 - \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \right) \right)^{-1},$$

причем в силу предположения об одномерности ветвления в точке $\lambda = \lambda_1$ имеем $1 - \lambda_1/\lambda_2 \neq 0$. В результате находим $L_{20} = \sqrt{5}/7$.

Аналогично находим $a_{11} = \varphi_1/\lambda_1$ и $L_{11} = 1/\lambda_1$.

Итак, $L_{0j} = 0$, $j = \overline{2, \infty}$, а L_{11} , L_{20} отличны от нуля. Следовательно, убывающая часть диаграммы Ньютона уравнения разветвления (2.4), определяющая его малые решения, состоит из одного отрезка, соединяющего точки (1,1) и (2,0). В этом случае [6] уравнение (2.4) имеет единственное малое решение $\zeta = \zeta(\mu)$, и оно разлагается в сходящийся в некоторой окрестности точки $\mu = 0$ степенной ряд по целым степеням μ

$$\zeta = \tau_1 \mu + \tau_2 \mu^2 + \dots, \quad \tau_1 = -L_{11}/L_{20} = -7/(\sqrt{5}\lambda_1), \quad (2.9)$$

откуда следует, что уравнение (2.2) имеет единственное удовлетворяющее условиям а) и б) решение (2.3), разлагающееся в некоторой окрестности точки λ_1 в степенной ряд по целым степеням μ , сходящийся в некоторой окрестности точки $\mu = 0$. Условие $C_1 < 0$ связано с тем, что физический смысл имеют лишь значения $\lambda > 0$, т. е. должно быть $\lambda_1 = -1/C_1 > 0$, откуда вытекает $\tau_1 < 0$. Из замечания 1 и соотношений (2.3), (2.9) теперь следует, что решение $f = 1 + h(\mathbf{n}) = 1 + \sum_{m=1}^{\infty} \mu^m h_m(\mathbf{n})$ ($h_1 = \tau_1 \varphi_1$) удовлетворяет условию в) (т. е. описывает нематик) лишь при $\mu < 0$. Теорема 1 доказана.

Как известно [2], [4], [5], неравенство $\mu < 0$ означает, что плотность f нематической фазы имеет левое направление бифуркации, что автоматически приводит к ориентационному фазовому переходу первого рода в окрестности точки бифуркации λ_1 .

Замечание 2. Для вычисления коэффициентов h_m в сходящемся в силу теоремы 1 разложении $f = 1 + \sum_{m=1}^{\infty} \mu^m h_m(\mathbf{n})$ удобно воспользоваться методом неопределенных коэффициентов по схеме, развитой в [4] для случая системы магнитных стержней.

3. Случай точки бифуркации с двумерным ветвлением

Для модели Парсонса точка бифуркации с одномерным ветвлением является точкой бифуркации общего положения. Однако, поскольку ядро модели (интегрального оператора) зависит от ряда параметров (параметры, определяющие анизотропию формы частицы, парный потенциал, парную корреляционную функцию), то возникают и ситуации со “случайным” вырождением, когда некоторые из точек бифуркации становятся точками бифуркации с многомерным ветвлением. Наиболее типичным и поэтому наиболее интересным с точки зрения приложений случаем вырождения является случай точки бифуркации с двумерным ветвлением (он может возникнуть, вообще говоря, на многообразии коразмерности один в пространстве параметров модели).

Можно показать [2], [7], что как для модели Онзагера, так и для модели Парсонса для системы эллипсоидальных частиц, все точки бифуркации обладают одномерным ветвлением и для этих моделей справедлива теорема 1.

Случай точки бифуркации с многомерным ветвлением в теории ориентационных фазовых переходов в математическом плане существенно более сложен и ранее не рассматривался. Из предложения 3 следует, что уравнение (2.1) может иметь точку бифуркации s -мерного ветвления тогда и только тогда, когда совпадают между собой ровно s коэффициентов Фурье–Лежандра ядра $K(\cos \alpha)$ (если s нечетно, то в силу теоремы 2.1 [13] уравнение (2.1) не только может, но и будет иметь точку бифуркации с s -мерным ветвлением). В вырожденных случаях, как показывает нижеследующий результат, имеем увеличение числа решений, ответвляющихся от изотропного и удовлетворяющих условию нормировки и условиям а) и б) (условию в) эти решения не удовлетворяют, следовательно, и не описывают нематическое фазовое состояние системы). Рассмотрим здесь случай $s = 2$, а именно наиболее интересный случай двумерного ветвления, когда $C_1 = C_2$. Сформулируем основной результат данной работы.

Теорема 2. Пусть $C_1 = C_2 \neq C_m$ ($m > 2$). Тогда в точке бифуркации с двумерным ветвлением $\lambda_1 = -1/C_1$ от изотропного решения ответвляются ровно три анизотропных решения

уравнения (2.1) (три анизотропных плотности распределения ориентаций осей частиц), удовлетворяющих условию нормировки и условиям а) и б). Эти решения разлагаются в степенные ряды по целым степеням $\mu = \lambda - \lambda_1$, сходящиеся в некоторой окрестности точки λ_1 .

Доказательство. Положим

$$E(\mathbf{n}, \mathbf{n}') = \lambda_1 K_1 - \varphi_1(\mathbf{n})\varphi_1(\mathbf{n}') - \varphi_2(\mathbf{n})\varphi_2(\mathbf{n}') \quad (3.1)$$

и получим из (2.1) уравнение

$$h - \int E(\mathbf{n}, \mathbf{n}')h(\mathbf{n})d\mathbf{n} = \zeta_1\varphi_1 + \zeta_2\varphi_2 + \mu \int K_1(\mathbf{n}, \mathbf{n}')h(\mathbf{n})d\mathbf{n} + \sum_{l=2}^{\infty} (-1)^{l-1} \left(\int h^l d\mathbf{n} - h^l \right) / l. \quad (3.2)$$

В силу леммы Шмидта единица не является собственным значением ядра E , и уравнение (3.2) при достаточно малых $|\zeta_1|, |\zeta_2|, |\mu|$ имеет малое решение $h \in C$, которое автоматически удовлетворяет условию нормировки и представляется в виде равномерно сходящегося ряда

$$h = \zeta_1\varphi_1 + \zeta_2\varphi_2 + \sum_{k+m+s \geq 2} \zeta_1^k \zeta_2^m \mu^s a_{kms}(\mathbf{n}), \quad (3.3)$$

где $\int a_{kms}(\mathbf{n})d\mathbf{n} = 0$, а $\zeta_1 = \int h\varphi_1 d\mathbf{n}$, $\zeta_2 = \int h\varphi_2 d\mathbf{n}$ удовлетворяют системе уравнений разветвления

$$\sum_{k+m \geq 2} \zeta_1^k \zeta_2^m L_{km0}^{(i)} + \sum_{k+m \geq 0} \zeta_1^k \zeta_2^m \sum_{s=1}^{\infty} \mu^s L_{kms}^{(i)} = 0, \quad i = 1, 2, \quad (3.4)$$

$L_{kms}^{(i)} = \int a_{kms}\varphi_i d\mathbf{n}$, причем $L_{001}^{(i)} = 0$.

Вычислим необходимые для дальнейшего коэффициенты $L_{kms}^{(i)}$ уравнения разветвления (3.4). Прежде всего отметим, что ядро E (3.1) аннулирует функции φ_1, φ_2 , а соотношение (2.8) остается справедливым при $k = \overline{3, \infty}$. Лемма заменяется утверждением, что $L_{00m}^{(i)} = 0$ [13]. После подстановки в уравнение (3.2) ряда (3.3) имеем, сравнивая коэффициенты при произведениях $\zeta_1\mu$ и $\zeta_2\mu$ в обеих частях полученного равенства, уравнения для определения a_{101} и a_{011}

$$a_{101} - \int E a_{101} d\mathbf{n} = \varphi_1 / \lambda_1, \quad a_{011} - \int E a_{011} d\mathbf{n} = \varphi_2 / \lambda_1,$$

откуда

$$a_{101} = \varphi_1 / \lambda_1, \quad a_{011} = \varphi_2 / \lambda_1, \quad \text{так что } L_{101}^{(1)} = L_{011}^{(2)} = 1 / \lambda_1, \quad L_{101}^{(2)} = L_{011}^{(1)} = 0.$$

Сравнивая коэффициенты при произведении $\zeta_1\zeta_2$ и учитывая соотношение (2.6), получим уравнение

$$a_{110} - \int E a_{110} d\mathbf{n} = \frac{6}{7}\varphi_1 + \frac{20}{77}\sqrt{5}\varphi_2 + \frac{15}{11}\sqrt{\frac{5}{13}}\varphi_3 \quad (3.5)$$

для определения коэффициента a_{110} .

Решение уравнения (3.5) следует искать в виде

$$a_{110} = \frac{6}{7}\varphi_1 + \frac{20}{77}\sqrt{5}\varphi_2 + \frac{15}{11}\sqrt{\frac{5}{13}}\psi$$

с неизвестной функцией ψ . После подстановки этого выражения в уравнение (3.5) для определения неизвестной функции ψ получим

$$\psi - \int E\psi d\mathbf{n} = \varphi_3,$$

откуда с учетом равенства (2.8) для ядра E (3.1) при $k = 3$ найдем $\psi = \varphi_3/(1 - \lambda_1/\lambda_3)$. В результате $L_{110}^{(1)} = \frac{6}{7}$, $L_{110}^{(2)} = \frac{20}{77}\sqrt{5}$. Сравнивая коэффициенты при ζ_1^2 и ζ_2^2 и учитывая соотношения (2.5) и (2.7), получим соответственно уравнения для коэффициентов a_{200} и a_{020} :

$$a_{200} - \int E a_{200} d\mathbf{n} = (\sqrt{5}\varphi_1 + 3\varphi_2)/7, \quad (3.6)$$

$$a_{020} - \int E a_{020} d\mathbf{n} = \frac{1}{77} \left(10\sqrt{5}\varphi_1 + \frac{243}{13}\varphi_2 \right) + \frac{1}{2}(a\varphi_3 + b\varphi_4). \quad (3.7)$$

Из (3.7) находим

$$a_{200} = \frac{1}{7}(\sqrt{5}\varphi_1 + 3\varphi_2),$$

$$a_{020} = \frac{1}{77} \left(10\sqrt{5}\varphi_1 + \frac{243}{13}\varphi_2 \right) + \frac{a\varphi_3}{2(1 - \lambda_1/\lambda_3)} + \frac{b\varphi_4}{2(1 - \lambda_2/\lambda_3)},$$

так что $L_{200}^{(1)} = \frac{\sqrt{5}}{7}$, $L_{200}^{(2)} = \frac{3}{7}$, $L_{020}^{(1)} = \frac{10\sqrt{5}}{77}$, $L_{020}^{(2)} = \frac{243}{13 \cdot 77}$.

Итак, мы полностью вычислили квадратичную по переменным ζ_1, ζ_2, μ совокупность слагаемых в левой части уравнения разветвления (3.4), которое перепишем с учетом полученных результатов в виде

$$F_1(\zeta_1, \zeta_2, \mu) = L_{101}^{(1)}\zeta_1\mu + L_{110}^{(1)}\zeta_1\zeta_2 + L_{200}^{(1)}\zeta_1^2 + L_{020}^{(1)}\zeta_2^2 + O_3 = 0, \quad (3.8)$$

$$F_2(\zeta_1, \zeta_2, \mu) = L_{011}^{(2)}\zeta_2\mu + L_{110}^{(2)}\zeta_1\zeta_2 + L_{200}^{(2)}\zeta_1^2 + L_{020}^{(2)}\zeta_2^2 + O_3 = 0$$

(здесь сохранили лишь ненулевые квадратичные члены и обозначили через O_3 совокупность слагаемых не ниже третьей степени по переменным ζ_1, ζ_2 и μ). Система F_1, F_2 является регулярной [6], [7] относительно ζ_1 , т. к. $L_{200}^{(i)} \neq 0$ ($i = 1, 2$).

С учетом подготовительной теоремы Вейерштрасса [6] можем записать

$$F_i = P_i(\zeta_1, \zeta_2, \mu)S_i(\zeta_1, \zeta_2, \mu), \quad (3.9)$$

где $P_i = \zeta_1^2 + H_1^{(i)}\zeta_1 + H_0^{(i)}$ — отмеченный псевдомногочлен второй степени относительно ζ_1 (т. е. $H_1^{(i)} = H_1^{(i)}(\zeta_2, \mu)$, $H_0^{(i)} = H_0^{(i)}(\zeta_2, \mu)$ — аналитические функции в точке $\zeta_2 = \mu = 0$, обращающиеся в этой точке в нуль), а S_i — аналитические функции в точке $\zeta_1 = \zeta_2 = \mu = 0$, отличные от нуля в этой точке, псевдополиномы P_i и функции S_i определяются функциями F_i однозначно. Из (3.9) следует, что малые решения $\zeta_1(\mu), \zeta_2(\mu)$ уравнения разветвления (3.8) являются малыми решениями системы $P_i = 0$ ($i = 1, 2$), причем малые решения $\zeta_2(\mu)$ будут малыми решениями уравнения $R(\zeta_2, \mu) = 0$, где R — результат псевдомногочленов P_i . Имеем

$$R = (H_0^{(2)} - H_0^{(1)})^2 - (H_1^{(2)} - H_1^{(1)})(H_0^{(2)}H_1^{(1)} - H_0^{(1)}H_1^{(2)}). \quad (3.10)$$

Для исследования малых решений $\zeta_2(\mu)$ необходимо исследовать убывающую часть диаграммы Ньютона уравнения $R = 0$. Из (3.8) находим

$$S_i = L_{200}^{(i)} + a_1^{(i)}\zeta_1 + a_2^{(i)}\zeta_2 + b^{(i)}\mu + O_2,$$

где O_2 — совокупность слагаемых не ниже второй степени по ζ_1, ζ_2, μ , коэффициенты $a_1^{(i)}, a_2^{(i)}, b^{(i)}$ нам не понадобятся, а $L_{200}^{(i)}$ определены выше. Теперь, учитывая, что P_i — отмеченные псевдомногочлены, из (3.8), (3.9) нетрудно найти

$$H_0^{(1)} = (L_{200}^{(1)})^{-1}L_{020}^{(1)}\zeta_2^2 + O_3, \quad H_0^{(2)} = (L_{200}^{(2)})^{-1}(L_{020}^{(2)}\zeta_2^2 + L_{011}^{(2)}\zeta_2\mu + O_3), \quad (3.11)$$

$$H_1^{(1)} = (L_{200}^{(1)})^{-1}(L_{110}^{(1)}\zeta_2 + L_{101}^{(1)}\mu + O_2), \quad H_1^{(2)} = (L_{200}^{(2)})^{-1}L_{110}^{(2)}\zeta_2 + O_2,$$

где O_2 (O_3) — аналитические в точке $\zeta_2 = \mu = 0$ функции, разложения которых по степеням ζ_2, μ начинаются со слагаемых не ниже второй (третьей) степени. Из (3.10) и (3.11) следует,

что разложение по степеням ζ_2, μ результата R начинается со слагаемых не ниже четвертой степени, причем коэффициенты при всех этих слагаемых выражаются через вычисленные выше коэффициенты $L_{200}^{(i)}, L_{020}^{(i)}, L_{110}^{(i)}, L_{101}^{(i)}, L_{011}^{(i)}$. Именно совокупность слагаемых четвертой степени с ненулевыми коэффициентами в результате R определяет убывающую часть его диаграммы Ньютона, следовательно, и структуру разложения по целым или дробным (с общим знаменателем) степеням малого решения $\zeta_2(\mu)$. Итак, вычислим коэффициенты m_0 при ζ_2^4 , m_1 при $\zeta_2^3\mu$, m_2 при $\zeta_2^2\mu^2$ и m_3 при $\zeta_2\mu^3$, коэффициент m_4 при μ^4 равен нулю (это следствие полученного выше равенства $L_{00m}^{(i)} = 0$).

Вычисляя значения коэффициентов в выражениях (3.11) для $H_0^{(i)}, H_1^{(i)}$ с двумя десятичными знаками, найдем

$$\begin{aligned} H_0^{(1)} &\approx 0,91\zeta_2^2 + O_3, & H_0^{(2)} &\approx 0,57\zeta_2^2 + 2,33\zeta_2\nu + O_3, \\ H_1^{(1)} &\approx 2,7\zeta_2 + 3,15\nu + O_2, & H_1^{(2)} &\approx 1,36\zeta_2 + O_2, \quad \nu = \mu/\lambda_1. \end{aligned} \quad (3.12)$$

После подстановки этих выражений в равенство (3.10) окончательно получим

$$R = m_0\zeta_2^4 + m_1\zeta_2^3\nu + m_2\zeta_2^2\nu^2 + m_3\zeta_2\nu^3 + O_5, \quad (3.13)$$

где $m_0 \approx 0,52$, $m_1 \approx 10,21$, $m_2 \approx 40,75$, $m_3 \approx 23,12$, а O_5 — совокупность слагаемых не ниже пятой степени по ζ_2, μ , причем среди этих слагаемых нет слагаемых с нулевой степенью ζ_2 .

Из (3.13) следует, что диаграмма Ньютона результата R имеет вид, изображенный на рис. 1. Такая диаграмма показывает, что все малые решения уравнения $R = 0$ разлагаются в сходящиеся степенные ряды по целым степеням $\mu = \nu\lambda_1$.

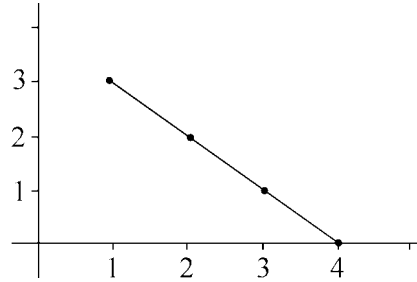


Рис.1. Диаграмма Ньютона результата R

Число вещественных корней $\zeta_2(\mu)$ равно числу вещественных корней уравнения

$$r = m_0\xi^3 + m_1\xi^2 + m_2\xi + m_3 = 0. \quad (3.14)$$

Нетрудно заметить, что уравнение (3.14) имеет три вещественных корня: $\xi_1 \in (-1, 0)$, $\xi_2 \in (-5, -1)$, $\xi_3 \in (-\infty, -5)$ (все три корня без труда находятся численно). Итак, имеем три вещественных малых решения системы уравнений разветвления

$$\zeta_2^{(i)}(\mu) = \xi_i \frac{\mu}{\lambda_1} + \sum_{k=2}^{\infty} b_{ik} \left(\frac{\mu}{\lambda_1} \right)^k, \quad i = 1, 2, 3. \quad (3.15)$$

Малые решения $\zeta_1(\mu)$ уравнения разветвления (3.4) следует искать из системы уравнений

$$\begin{aligned} P_1(\zeta_1, \zeta_2(\mu), \mu) &= \zeta_1^2 + H_1^{(1)}(\zeta_2(\mu), \mu)\zeta_1 + H_0^{(1)}(\zeta_2(\mu), \mu) = 0, \\ P_2(\zeta_1, \zeta_2(\mu), \mu) &= \zeta_1^2 + H_1^{(2)}(\zeta_2(\mu), \mu)\zeta_1 + H_0^{(2)}(\zeta_2(\mu), \mu) = 0 \end{aligned} \quad (3.16)$$

с тождественно равным нулю результатом R . Следовательно, малые решения системы (3.16) являются малыми решениями уравнения $D(\zeta_1, \mu) = 0$, где D — наибольший общий делитель многочленов P_1 и P_2 . С помощью алгоритма Евклида найдем

$$D = (H_1^{(1)} - H_1^{(2)})\zeta_1 + H_0^{(1)} - H_0^{(2)},$$

откуда следует

$$\zeta_1^{(i)}(\mu) = (H_0^{(2)}(\zeta_2^{(i)}, \mu) - H_0^{(1)}(\zeta_2^{(i)}, \mu)) / (H_1^{(1)}(\zeta_2^{(i)}, \mu) - H_1^{(2)}(\zeta_2^{(i)}, \mu)).$$

С учетом соотношений (3.12), (3.15) теперь получаем, что $\zeta_1^{(i)}$ разлагается в сходящийся ряд по целым степеням μ вместе с $\zeta_2^{(i)}(\mu)$ (напомним, что $H_0^{(i)}, H_1^{(i)}$ — аналитические функции) и справедливы асимптотические представления

$$\zeta_1^{(i)}(\mu) = r_i \xi_i \left(\frac{\mu}{\lambda_1} \right) + O(\mu^2), \quad r_i = \frac{s_1 \xi_i + t_1}{s_2 \xi_i + t_2}, \quad (3.17)$$

где $s_1 \approx -0,31$, $t_1 \approx 2,33$, $s_2 \approx 1,34$, $t_2 \approx 3,15$. Без труда находим $s_1 \xi_i + t_1 \neq 0$, $s_2 \xi_i + t_2 \neq 0$, $i = 1, 2, 3$.

Итак, имеем три пары вещественных малых решений уравнения разветвления (3.4) ($\zeta_1^{(i)}(\mu)$, $\zeta_2^{(i)}(\mu)$) и каждая такая пара определяет согласно равенству (3.3) вещественное малое решение интегрального уравнения (3.2), удовлетворяющее условию нормировки, условиям а), б) и разлагающееся в окрестности точки $\mu = 0$ в сходящийся степенной ряд по целым степеням μ . \square

Замечание 3. Бифуркационность точки λ_1 в условиях теоремы 2 легко следует с учетом положительной определенности квадратичной формы $L_{200}^{(2)} \zeta_1^2 + L_{020}^{(2)} \zeta_2^2 + L_{110}^{(2)} \zeta_1 \zeta_2$ и из теоремы 2.2 и замечания 2.1 работы [13].

4. Свободная энергия системы

Из теоремы 2 следует, что в окрестности точки бифуркации λ_1 с двумерным ветвлением определены изотропная плотность распределения ориентаций осей частиц $f_0(\mathbf{n}) \equiv 1$ и три ответвляющиеся от нее анизотропные плотности $f_i(\mathbf{n})$, $i = 1, 2, 3$. Среди них наибольший физический интерес представляет та, на которой свободная энергия F системы имеет наименьшее значение. В модели Парсонса [1] часть энергии F , которая зависит от плотности f , имеет вид

$$F_1(f) = \int f(\mathbf{n}) \ln f(\mathbf{n}) d\mathbf{n} + \frac{\lambda}{2} \iint K(\mathbf{n}, \mathbf{n}') f(\mathbf{n}) f(\mathbf{n}') d\mathbf{n} d\mathbf{n}'. \quad (4.1)$$

Предложение 4. *Справедливо соотношение*

$$\iint K(\mathbf{n}, \mathbf{n}') h(\mathbf{n}') d\mathbf{n} d\mathbf{n}' = \iint K(\mathbf{n}, \mathbf{n}') h(\mathbf{n}) d\mathbf{n} d\mathbf{n}' = 0.$$

Справедливость предложения 4 следует из условия нормировки $\int h d\mathbf{n} = 0$ и свойств симметрии (1.2) ядра K (из (1.2) имеем, что $\int K(\mathbf{n}, \mathbf{n}') d\mathbf{n} = C_0$ не зависит от \mathbf{n}').

С помощью предложения 4 из равенства (4.1) находим

$$F_1 = \frac{\lambda_1 + \mu}{2} C_0 + F_2(h) + F_3(h), \quad (4.2)$$

где

$$F_2 = \frac{1}{2} \int \left(h^2 - \frac{h^3}{3} \right) d\mathbf{n} + O(h^4), \quad F_3 = \frac{\lambda_1 + \mu}{2} \iint K(\mathbf{n}, \mathbf{n}') h(\mathbf{n}) h(\mathbf{n}') d\mathbf{n} d\mathbf{n}'.$$

С учетом соотношений (3.3), (3.15) и (3.17) имеем

$$\begin{aligned} h &= M_1 + M_2 + O(\mu^3), & h^2 &= M_1^2 + 2M_1 M_2 + O(\mu^4), \\ h^3 &= M_1^3 + O(\mu^4), & h^4 &= O(\mu^4), \\ M_1 &= \zeta_1 \varphi_1 + \zeta_2 \varphi_2, & M_2 &= \sum_{k+m+s=2} \zeta_1^k \zeta_2^m \mu^s a_{kms}. \end{aligned} \quad (4.3)$$

После подстановки (4.3) в (4.2) с учетом равенств (2.5)–(2.7), предложения 1 и соотношения $\lambda_1 C_1 = -1$ получим

$$F_2 = \frac{1}{2}(\zeta_1^2 + \zeta_2^2) + A + B + O(\mu^4), \quad F_3 = -\frac{1}{2}\left(1 + \frac{\mu}{\lambda_1}\right)(\zeta_1^2 + \zeta_2^2) - A + O(\mu^4),$$

$$A = \sum_{k+m+s=2} \zeta_1^k \zeta_2^m \mu^s (\zeta_1 L_{kms}^{(1)} + \zeta_2 L_{kms}^{(2)}),$$

$$B = -\frac{1}{21}\left(\sqrt{5}\zeta_1^3 + 9\zeta_1^2\zeta_2 + \frac{30\sqrt{5}}{11}\zeta_1\zeta_2^2 + \frac{243}{143}\zeta_2^3\right).$$

Окончательно находим

$$F_1 = \frac{\lambda_1 + \mu}{2}C_0 - \frac{\mu}{2\lambda_1}(\zeta_1^2 + \zeta_2^2) + B,$$

откуда с учетом соотношений (3.15), (3.17) получаем

$$F_1^{(i)} = \frac{\lambda_1 + \mu}{2}C_0 - \xi_i^2 \left(\frac{\mu}{\lambda_1}\right)^3 \left[\frac{1}{2} + \left(\frac{1}{2} + \frac{3}{7}\xi_i\right)r_i^2 + \frac{81}{1001}\xi_i + \frac{10\sqrt{5}}{77}\xi_i r_i + \frac{\sqrt{5}}{21}\xi_i r_i^3\right],$$

где

$$F_1^{(i)} = F_1(h^{(i)}), \quad h^{(i)} = \zeta_1^{(i)}\varphi_1 + \zeta_2^{(i)}\varphi_2 + \sum_{k+m+s \geq 2} (\zeta_1^{(i)})^k (\zeta_2^{(i)})^m \mu^s a_{kms}.$$

Вычисляя корни уравнения (3.14), находим $\xi_1 \approx -0,67$, $\xi_2 \approx -4,55$, $\xi_3 \approx -14,41$, $r_1 \approx 1,13$, $r_2 \approx -1,27$, $r_3 \approx -0,42$. В результате будем иметь

$$F_1^{(0)} = \frac{\lambda_1 + \mu}{2}C_0, \quad F_1^{(1)} = F_1^{(0)} - 0,18\left(\frac{\mu}{\lambda_1}\right)^3,$$

$$F_1^{(2)} = F_1^{(0)} - 10,8\left(\frac{\mu}{\lambda_1}\right)^3, \quad F_1^{(3)} = F_1^{(0)} - 42\left(\frac{\mu}{\lambda_1}\right)^3. \quad (4.4)$$

Из (4.4) следует, что слева ($\mu < 0$) от точки бифуркации $\lambda_1 > 0$ свободная энергия принимает наименьшее значение для изотропной фазы $f_0 = 1$, а справа ($\mu > 0$) — для анизотропной фазы с плотностью $f_3 = 1 + h^{(3)}$.

Отметим, что помимо анизотропных решений, ответвляющихся от изотропного, уравнение (1.1) может иметь и другие анизотропные решения с большой нормой, исследование которых также играет важную роль при изучении термодинамики системы. Такое исследование придется выполнять с помощью численных методов для каждой конкретной модели (см. [2], [8] и пример раздела 5). Оно совершенно необходимо и для полного решения вопроса об абсолютном минимуме свободной энергии системы (а следовательно, и об устойчивости ее фазовых состояний).

5. Пример точки бифуркации с двумерным ветвлением

Уравнение (1.1), в котором $\lambda = 2cdl^2$, $K = |\sin \mathbf{n} \hat{\mathbf{n}}'|$ (модель Онзагера исключенного объема), описывает ориентационный фазовый переход в системе сильно вытянутых цилиндров ($\delta \ll 1$) в условиях их низкой концентрации. Можно попытаться ослабить эти ограничения, учитывая с помощью метода Парсонса [1] корреляцию между направлениями частиц и положениями их центров, а концевые эффекты (вклад в исключенный объем от концов частицы, при $\delta \ll 1$ он

мал и в модели Онзагера не учитывается) — с помощью известной точной формулы Стралея для исключенного объема двух цилиндров:

$$V_{\text{искл}} = \delta l^3 K(\mathbf{n}, \mathbf{n}', \delta),$$

$$K(\mathbf{n}, \mathbf{n}', \delta) = \left(\frac{\pi}{2} \delta^2 + 2 \right) |\sin \mathbf{n} \hat{\mathbf{n}}'| + \delta \left[\frac{\pi}{2} (1 + |\cos \mathbf{n} \hat{\mathbf{n}}'|) + 2E(\sin \mathbf{n} \hat{\mathbf{n}}') \right], \quad (5.1)$$

где E — полный эллиптический интеграл 2-го рода. Тогда для $f(\mathbf{n})$ получим уравнение, обобщающее уравнение Онзагера

$$\nu + \ln f(\mathbf{n}') + \lambda \int K(\mathbf{n}, \mathbf{n}', \delta) f(\mathbf{n}) d\mathbf{n} = 0, \quad \lambda = 4J(\eta)/\pi\delta, \quad (5.2)$$

где монотонно возрастающая функция $J(\eta)$ ($J(\eta) \sim \eta$ при $\eta \ll 1$) учитывает корреляцию между частицами, а ядро K — концевые эффекты в их исключенном объеме.

Воспользуемся уравнением (5.2) для иллюстрации теремы 2.

Коэффициенты Фурье–Лежандра ядра K имеют вид

$$C_0 = \pi \left[1 + \frac{\delta}{4} (3 + \pi(\delta + 1)) \right],$$

$$C_s = \frac{\pi}{2} \left[- \left(\frac{\pi}{2} \delta^2 + 2 \right) \frac{(2s-3)!!(2s-1)!!}{2^{2s+1} s! (s+1)!} + \delta \frac{(-1)^{s-1} (2s-3)!!}{2^{s+1} (s+1)!} + \right. \\ \left. + \frac{\pi}{2} \delta \frac{(-1)^{s-1} ((2s-1)!!)^3}{2^{3s} (s+1)(2s-1)(s!)^3} \right], \quad s \geq 1, \quad (-1)! = 1.$$

Точки бифуркации уравнения (5.2) определяются соотношением $\lambda_i = -1/C_i$ ($i = \overline{1, \infty}$), и квадратное уравнение $\lambda_1 = \lambda_2$ относительно δ определяет ровно два значения $\delta_1 \approx 0,5257$ и $\delta_2 \approx 2,422$, при которых точка бифуркации $\lambda_1 = \lambda_2$ уравнения (5.2) обладает двумерным ветвлением. Ниже ограничимся рассмотрением случая $\delta = \delta_1$ (случай вытянутых цилиндров) и, следуя Парсонсу [1], положим $J(\eta) = 4^{-1}(4\eta - 3\eta^2)/(1 - \eta)^2$.¹ Тогда бифуркационное значение объемной концентрации будет $\eta_1 \approx 0,794$ (при $\delta = \delta_1$ $\lambda_1 \approx 18,29$). Согласно теореме 2 в окрестности точки бифуркации $\lambda = \lambda_1$ ($\eta = \eta_1$) существуют ровно три решения $f_i(\mathbf{n})$, $i = 1, 2, 3$, ответвляющиеся от изотропного $f_0 = 1$ и разлагающиеся в сходящиеся ряды по целым степеням $\mu = \lambda - \lambda_1$. Эти ряды можно построить с учетом замечания 2. Опустим весьма громоздкие выкладки и приведем окончательный результат с точностью до членов $O(\mu^3)$. Будем иметь

$$f_i = 1 + 10^{-4}(\mu h_{1i} + \mu^2 h_{2i}) + O(\mu^3),$$

где

$$h_{11} = -426\varphi_1 - 370\varphi_2, \quad h_{21} = 12\varphi_1 + 33\varphi_2 + 17\varphi_3 + 7\varphi_4,$$

$$h_{12} = 3300\varphi_1 - 2520\varphi_2, \quad h_{22} = -5217\varphi_1 + 3102\varphi_2 - 552\varphi_3 + 310\varphi_4,$$

$$h_{13} = 3614\varphi_1 - 8031\varphi_2, \quad h_{23} = -32362\varphi_1 + 70512\varphi_2 - 842\varphi_3 + 13144\varphi_4.$$

Отсюда с учетом соотношения $\lambda = 4J(\eta)/\pi\delta$ нетрудно вычислить и разложения решений f_i по степеням $\eta - \eta_1$ с точностью до членов $O((\eta - \eta_1)^3)$. Важно отметить, что в полученных разложениях коэффициент при μ^1 является линейной комбинацией P_2 и P_4 , в то время как в аналогичных разложениях в окрестности точки бифуркации η_1 с одномерным ветвлением этот коэффициент пропорционален P_2 . Вследствие этого решения f_i , $i = 1, 2, 3$, не удовлетворяют условию в) и, таким образом, описывают анизотропные фазы, не являющиеся нематиком.

¹По-видимому, для функции $J(\eta)$ может оказаться полезной и более общая аппроксимация Паде с двумя подгоночными параметрами $J(\eta) = b^{-1}(b\eta - a\eta^2)/(1 - \eta)^2$ ($b > a$), но здесь для определенности остановимся на функции Парсонса ($b = 4$, $a = 3$).

Кроме указанных трех анизотропных решений f_i ($i = 1, 2, 3$), ответвляющихся в точке бифуркации $\eta = \eta_1$ от изотропного решения, уравнение (5.2) с ядром K (5.1) имеет еще в окрестности этой точки и ровно три анизотропных решения f_i ($i = 4, 5, 6$) с большой нормой. Коэффициенты $a_s^{(i)}$ разложения этих решений по полиномам P_{2s} определяются численно с помощью алгоритма, развитого в [8].

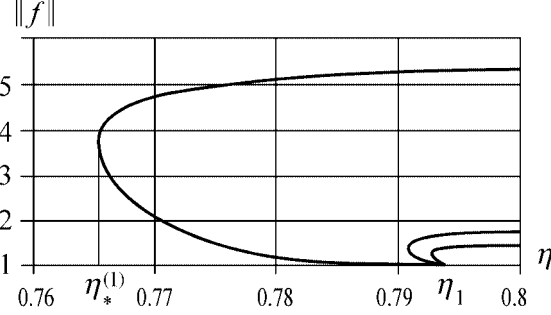


Рис.2. Зависимость $\|f\|$ от концентрации

На рис. 2 представлены графики зависимости от η гильбертовой нормы $\|f_i\| = \sqrt{\int f_i^2(\mathbf{n})d\mathbf{n}}$ всех шести анизотропных решений уравнения (5.2) в окрестности точки бифуркации $\eta = \eta_1$. Отметим, что решения f_1, f_4 определены при $\eta > \eta_*^{(1)} \approx 0,766$, f_2, f_5 при $\eta > \eta_*^{(2)} \approx 0,79$, f_3, f_6 при $\eta > \eta_*^{(3)} \approx 0,793$ ($\eta_*^{(i)}$ — точки возврата на рис. 2).

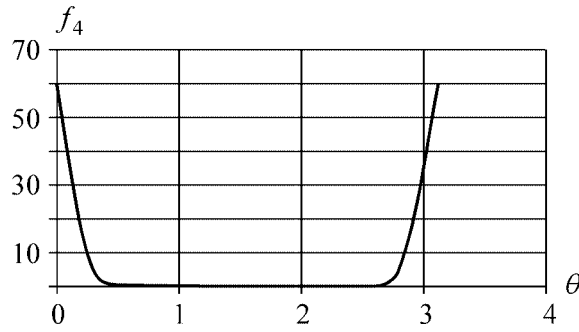


Рис.3. Зависимость f_4 от угла θ

На рис. 3 представлен график зависимости $f_i(\theta, \eta)$ от угла θ при $i = 4$, $\eta = 0,78$, который показывает, что ориентационная плотность f_4 описывает анизотропную фазу, являющуюся нематиком.

Безразмерное давление $\bar{P} = PV_0/kT$ ($V_0 = \pi d^2 l/4$ — объем частицы) в системе цилиндров с распределением ориентаций f_i , удовлетворяющим уравнению (5.2), определяется формулой

$$\bar{P}_i = \bar{P}_0 + \frac{2\eta^2 J'_\eta}{\pi\delta} \sum_{s=1}^{\infty} C_s \frac{(a_s^{(i)})^2}{4s+1}, \quad i = \overline{1, 6},$$

где $\bar{P}_0 = \eta[1 + \frac{\eta J'_\eta}{2\delta}(4 + \delta(3 + \pi + \pi\delta))]$ — давление в изотропной фазе, $a_s^{(i)}(\eta)$ — коэффициенты разложения ориентационной плотности f_i по полиномам Лежандра $f_i = 1 + \sum_{s=1}^{\infty} a_s^{(i)} P_{2s}$. Полученные результаты вычислений коэффициентов $a_s^{(i)}$ позволяют найти уравнение состояния системы, т. е. зависимость безразмерного давления от $1/\eta$. График этой зависимости представлен на рис. 4.

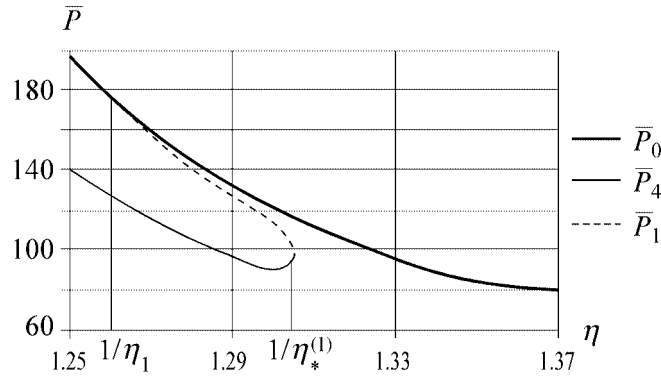


Рис.4. Давление как функция от $1/\eta$

Вычислительный эксперимент показал, в случае $\eta < \eta_*^{(1)}$ свободная энергия рассматриваемой здесь системы цилиндров имеет абсолютный минимум при $f = f_0$, а в случае $\eta > \eta_*^{(1)}$ — при $f = f_4$, так что при $\eta < \eta_*^{(1)}$ устойчива изотропная (“жидкая”) фаза, а при $\eta > \eta_*^{(1)}$ — нематическая фаза с ориентационной плотностью $f = f_4$. Сплошная жирная линия на рис. 4 представляет давление в изотропной фазе, а сплошная тонкая — в нематической, пунктиром представлен график давления в неустойчивой анизотропной фазе с ориентационной плотностью $f = f_1$.

Искренне благодарю Л.У. Бахтиеву за проведение численных экспериментов, результаты которых представлены на рис. 2, 3, 4, и рецензента, указавшего на неточности в первоначальной формулировке предложения 3 и на возможности использования в данной работе результатов работы [13].

Литература

1. Parsons J.D. *Nematic ordering in a system of rods* // Phys. Rev. A. — 1979. — V. 19. — № 3. — P. 1225–1230.
2. 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.
3. Эскин Л.Д. *Уравнение Онзагера как уравнение Ляпунова–Шмидта* // Изв. вузов. Математика. — 1998. — № 8. — С. 71–78.
4. Эскин Л.Д. *Об интегральном уравнении теории фазовых переходов в системе магнитных стержней* // ТМФ. — 1996. — Т. 109. — № 3. — С. 427–440.
5. Эскин Л.Д. *Об интегральном уравнении, описывающем ориентационные фазовые переходы в системе магнитных стержней* // ФАН. — 1999. — Т. 33. — № 1. — С. 92–95.
6. Вайнберг М.М., Треногин В.А. *Теория ветвления решений нелинейных уравнений*. — М.: Наука, 1969. — 528 с.
7. Эскин Л.Д. *Об интегральном уравнении, описывающем ориентационные фазовые переходы в модели Парсонса* // Изв. вузов. Математика. — 1999. — № 10. — С. 63–72.
8. Эскин Л.Д., Бахтиева Л.У. *О модели Парсонса ориентационного фазового перехода в системе эллипсоидальных частиц* // Матем. моделирование. — 2000. — Т. 12. — № 10. — С. 3–18.
9. Градштейн И.С., Рыжик И.М. *Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений*. — М.: ГИФМЛ, 1962. — 1100 с.
10. Красносельский М.А. *Топологические методы в теории нелинейных интегральных уравнений*. — М.: Гостехиздат, 1956. — 392 с.
11. Красносельский М.А., Забрейко П.П. *Геометрические методы нелинейного анализа*. — М.: Наука, 1975. — 512 с.
12. Скрышник И.В. *Нелинейные эллиптические уравнения высшего порядка*. — Киев: Наук. думка, 1973. — 220 с.

13. Треногин В.А., Сидоров Н.А. *Исследование точек бифуркации и непрерывных ветвей решений нелинейных уравнений* // Сб. "Дифференциальные и интегральные уравнения". – Иркутск, 1972. – № 1. – С. 216–247.
14. Виленкин Н.Я. *Специальные функции и теория представлений групп*. – М.: Наука, 1965. – 588 с.

*Казанский государственный
университет*

*Поступили
первый вариант 19.03.2002
окончательный вариант 24.01.2005*