ИЗВЕСТИЯ ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ

2002 МАТЕМАТИКА № 3 (478)

УДК 517.958

Л.Д. ЭСКИН

ОБ ИНТЕГРАЛЬНОМ УРАВНЕНИИ, ОПИСЫВАЮЩЕМ ОРИЕНТАЦИОННЫЕ ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В МОДЕЛИ ПАРСОНСА ДЛЯ СИСТЕМЫ ОСЕСИММЕТРИЧНЫХ ЧАСТИЦ

1. *Введение.* В 1949 г. Онзагер (результаты Онзагера подробно изложены в [1]) исследовал термодинамические свойства системы сильно вытянутых цилиндрических стержней ($\frac{d}{l} = \delta \ll 1$, d — диаметр, l — длина стержня) с парным взаимодействием типа стерического отталкивания. Было показано, что в системе, ориентационно разупорядоченной (изотропной) при низких концентрациях, с увеличением концентрации происходит фазовый переход первого рода (со скачком концентрации) в ориентационно упорядоченную (анизотропную) фазу, трактуемую как жидкокристаллический нематик. В модели Онзагера термодинамические свойства изотропной фазы описываются равномерной функцией распределения ориентаций осей частиц с плотностью $f_0(\mathbf{n}) = 1$ ($\mathbf{n}$ — орт оси стержня), термодинамические свойства нематика — плотностью $f \neq 1$. Для f из условия минимума свободной энергии системы Онзагер получил нелинейное интегральное уравнение, которое исследовалось в основном численными методами во многих физических работах. В [2] для исследования уравнения Онзагера были использованы методы нелинейного анализа. Необходимо отметить, что Онзагер вычислил свободную энергию 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 [3]. Предположив, что парный потенциал и парная корреляционная функция системы зависят лишь от отношения r/σ, где r — расстояние между центрами масс частиц, а σ — функция угловых переменных, характеризующих взаимное расположение частиц (что выполняется для модели Онзагера), Парсонс получил для ориентационной плотности f интегральное уравнение

$$\nu + \ln f(\mathbf{n}') + \lambda \int k(\mathbf{n}, \mathbf{n}') f(\mathbf{n}) d\mathbf{n} = 0, \tag{1}$$

где неизвестная постоянная ν определяется условием нормировки $\int f d\mathbf{n} = 1$, ядро k является симметрической функцией ортов $\mathbf{n}$, $\mathbf{n}'$, коэффициент λ — функция объемной концентрации $\eta = V_0 c$, $c = N/V$ — плотность системы, V_0 — объем частицы. Следствием осесимметричности частиц является инвариантность ядра при одновременном повороте g ортов $\mathbf{n}$ и $\mathbf{n}'$ и при замене $\mathbf{n} \to -\mathbf{n}$

$$k(g\mathbf{n}, g\mathbf{n}') = k(\mathbf{n}, \mathbf{n}') = k(\mathbf{n}', \mathbf{n}) = k(-\mathbf{n}, \mathbf{n}'). \tag{2}$$

Из (2) следует, что ядро k является функцией угла α между ортами $\mathbf{n}$ и $\mathbf{n}'$. Как правило, 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 здесь рассматриваться, для анизотропной плотности f должны выполняться условия [4], [5]: а) $f(\mathbf{n})$

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

не зависит от угла φ ($f = f(\theta)$); б) $f(\theta) = f(\pi - \theta)$. Следовательно, f разлагается в ряд Фурье по полиномам Лежандра с четным индексом P_{2m}. 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. Отметим, что частным случаем уравнения (1) являются уравнение Онзагера ($\lambda = 2c\,dl^2$, $k = (1 - \mathbf{nn}'^2)^{1/2}$, $\mathbf{nn}'$ — скалярное произведение ортов $\mathbf{n}$ и $\mathbf{n}'$) и модель Парсонса [3] для системы частиц, имеющих форму эллипсоида вращения с полуосями $b \geq a$

$$k = (1 - (\chi\mathbf{nn}')^2)^{1/2}, \quad \lambda = 8J(\eta)(1 - \chi^2)^{-1/2}, \tag{3}$$
$$J(\eta) = (4\eta - 3\eta^2)(4(1-\eta)^2)^{-1}, \quad \chi = (b^2 - a^2)(b^2 + a^2)^{-1}, \quad 0 < \eta,\ \chi < 1.$$

Конкретный вид ядра k определяется геометрией частиц и выбором моделей парного потенциала и парной корреляционной функции. Целью данной работы является изучение на основе общих идей теории ветвления решений нелинейных уравнений [6] решений уравнения (1), удовлетворяющих условиям а) и б) и ответвляющихся от изотропного. При этом мы не прибегаем к конкретному выбору вида ядра k (а значит, и конкретной геометрии осесимметричных частиц, парного потенциала и парной корреляционной функции), а налагаем лишь некоторые условия достаточно общего характера на его коэффициенты Фурье–Лежандра. Как известно, основной задачей теории Ляпунова–Шмидта [6] являются ответы 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 степенями μ). В наиболее интересных случаях одномерного и двумерного ветвлений ответы на эти вопросы для уравнения (1) даются соответственно в теоремах 1 и 2.

2. *Бифуркационный анализ.* Всюду ниже полагаем, что непрерывное ядро $k = k(\cos\alpha)$ удовлетворяет условиям симметрии (2) и обозначим $c_m = \frac{1}{2}\int\limits_0^\pi kP_{2m}\sin\alpha\, d\alpha$ — коэффициенты Фурье–Лежандра ядра k.

Предложение 1. *Справедливо соотношение* $\int k(\mathbf{n},\mathbf{n}')P_{2m}(\mathbf{n})d\mathbf{n} = c_m P_{2m}(\mathbf{n}')$.

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

$$h - \lambda\int k_1(\mathbf{n},\mathbf{n}')h(\mathbf{n})d\mathbf{n} = \sum_{m=2}^{\infty}\frac{(-1)^{m-1}}{m}\Big(\int h^m d\mathbf{n} - h^m\Big), \quad k_1 = c_0 - k. \tag{4}$$

Из предложения 1 следует

Предложение 3. *Точками бифуркации уравнения* (4) *являются* $\lambda_m = -c_m^{-1}$, $m \geq 1$.

3. *Случай одномерного ветвления.* Из предложения 3 следует, что точка бифуркации λ_m будет точкой бифуркации одномерного ветвления для уравнения (4) тогда и только тогда, когда $c_m \neq c_s\ \forall s \neq m$.

Теорема 1. *В точке бифуркации* λ_m *одномерного ветвления от изотропного решения* $f_0{=}1$ *ответвляется единственное анизотропное решение уравнения* (1), *удовлетворяющее условию нормировки и условиям* а) *и* б). *Это решение в некоторой окрестности точки* λ_m *представляется в виде сходящегося степенного ряда по целым степеням* $\mu = \lambda - \lambda_m$ *и удовлетворяет условию* в) (*описывает нематик*) *лишь в случае* $m = 1$, $\mu < 0$ *и* $c_1 < 0$.

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

Замечание 1. Условие $c_1 < 0$ связано с тем, что физический смысл имеют лишь значения $\lambda > 0$.

Предложение 4. *В случае ядра k, определенного соотношением* (3), *справедливы неравенства* $0 > c_{m+1} > c_m$.

Из предложения 4 следует справедливость теоремы 1 для модели Парсонса в случае системы эллипсоидальных частиц.

Замечание 2. Для вычисления коэффициентов h_m в сходящемся в силу теоремы 1 разложении $f = 1 + \sum\limits_{m=1}^{\infty} \mu^m h_m(\mathbf{n})$ удобно воспользоваться методом неопределенных коэффициентов.

4. *Двумерный случай ветвления.* В силу предложения 3 уравнение (4) будет иметь точку бифуркации s-мерного ветвления тогда и только тогда, когда совпадают между собой ровно s коэффициентов Фурье–Лежандра ядра k. В этом случае, как показывает нижеследующий результат, имеем увеличение числа решений, ответвляющихся от изотропного и удовлетворяющих условиям а) и б) (условию в) эти решения не удовлетворяют, а следовательно, и не описывают нематическое фазовое состояние системы).

Теорема 2. *Пусть $c_1 = c_2 \neq c_m$, $m > 2$. Тогда в двумерной точке ветвления λ_1 ответвляются от изотропного ровно три анизотропных решения уравнения* (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.*

Замечание 3. Можно построить алгоритм для определения коэффициентов разложений по степеням μ указанных в теореме 2 трех анизотропных плотностей f_i, $i = 1, 2, 3$. Ограничиваясь двучленной асимптотикой, будем иметь

$$f_i = 1 + \xi_i(\sqrt{5}\, r_i P_2(\mathbf{n}) + 3P_4(\mathbf{n}))\frac{\mu}{\lambda_1} + O(\mu^2),$$

где коэффициенты ξ_i, r_i связаны с системой уравнений разветвления интегрального уравнения (1) и могут быть определены лишь численно

$$\xi_1 \approx -0.67, \quad \xi_2 \approx -4.55, \quad \xi_3 \approx -14.41; \quad r_1 \approx 1.13, \quad r_2 \approx -1.27, \quad r_3 \approx -0.42.$$

Можно показать, вычислив значения $F(f_i)$, $i = 0, 1, 2, 3$, свободной энергии F системы, являющейся функционалом плотности f [3], что при $\mu < 0$ наименьшим среди них оказывается $F(f_0)$, а $F(f_3)$ — при $\mu > 0$. Следовательно, из четырех возможных фазовых состоянии системы (изотропного и трех анизотропных) слева от точки бифуркации λ_1 может быть устойчивой лишь изотропная фаза, а справа — анизотропная с распределением ориентаций осей частиц, заданным плотностью f_3.

Литература

1. Де Жен П.Ж. *Физика жидких кристаллов.* – М.: Мир, 1977. – 400 с.
2. Эскин Л.Д. *Уравнение Онзагера как уравнение Ляпунова–Шмидта* // Изв. вузов. Математика. – 1998. – № 8. – С. 71–78.
3. Parsons J.D. *Nematic ordering on a system of rods* // Phys. Rev. A. – 1979. – V. 19. – № 3. – P. 1255–1230.
4. 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.
5. Эскин Л.Д. *Об интегральном уравнении, описывающем фазовые переходы в системе магнитных стержней* // Функц. анализ и его приложения. – 1999. – Т. 33. – № 1. – С. 92–95.
6. Вайнберг М.М., Треногин В.А. *Теория ветвления решений нелинейных уравнений.* – М.: Наука, 1969. – 528 с.

Казанский государственный университет

Поступила 06.06.2000