

УДК 517.958

О МОДЕЛИ ОНЗАГЕРА В ОКРЕСТНОСТИ КРИТИЧЕСКОЙ ТОЧКИ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА

Л. У. Бахтиева

Аннотация

В малой окрестности критической точки изучается решение нелинейного интегрального уравнения Онзагера, описывающего ориентационный фазовый переход из изотропной в анизотропную (нематическую) фазу в системе сильно вытянутых немагнитных стержней. Исследуется термодинамическое состояние системы в указанной окрестности.

Ключевые слова: нелинейное интегральное уравнение, модель Онзагера, фазовый переход.

Введение

Термодинамические свойства системы сильно вытянутых цилиндрических стержней ($\delta = d/l \ll 1$, d – диаметр, l – длина стержня) с парным взаимодействием типа стерического отталкивания исследовались Онзагером в 1949 г. (модель Онзагера исключенного объема). Результаты этих исследований подробно изложены в монографии [1]. 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. Все термодинамические свойства изотропной фазы описываются равномерной функцией распределения ориентаций осей частиц (сокращенно ОФР – ориентационная функция распределения) $f(\mathbf{n}) = 1$ (\mathbf{n} – орт оси стержня). Термодинамические свойства нематической фазы описываются отличной от единицы ОФР, имеющей единственный максимум в направлении директора (направлении преимущественной ориентации осей частиц) и инвариантной относительно поворотов вокруг этого направления и замены \mathbf{n} на $-\mathbf{n}$. Для ОФР $f(\mathbf{n})$ Онзагер из условия минимума свободной энергии системы, вычисленной в приближении второго вириального коэффициента, получил нелинейное интегральное уравнение

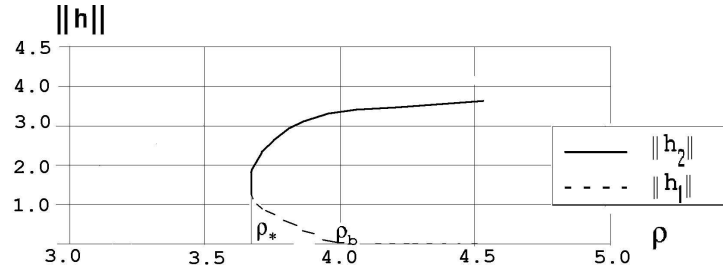
$$\nu + \ln f(\mathbf{n}') + \lambda \int B(\mathbf{n}, \mathbf{n}') f(\mathbf{n}) d\mathbf{n} = 0, \quad (1)$$

где ядро $B(\mathbf{n}, \mathbf{n}') = \sqrt{1 - (\mathbf{nn}')^2}$, \mathbf{nn}' – скалярное произведение ортов \mathbf{n} и \mathbf{n}' , $\lambda = 8\eta/(\pi\delta)$ – функция объемной концентрации $\eta = V_0\rho$, $V_0 = \pi d^2 l/4$ – объем частицы, $\rho = N/V$ – плотность системы. Интегрирование в (1) производится по поверхности сферы с элементом поверхности $d\mathbf{n}$, который в сферической системе координат с полярной осью, совпадающей с директором нематика, задается соотношением

$$d\mathbf{n} = (4\pi)^{-1} \sin \theta d\varphi d\theta.$$

Неизвестная постоянная ν определяется условием нормировки для $f(\mathbf{n})$

$$\int f(\mathbf{n}) d\mathbf{n} = 1. \quad (2)$$

Рис. 1. Зависимость $\|h_i\|$ от плотности ρ

Поскольку ОФР $f(\mathbf{n})$ описывает нематик, она должна быть решением уравнения (1), удовлетворяющим, кроме условия нормировки (2), еще и следующим условиям: а) $f(\mathbf{n}) = f(\theta)$ ($f(\mathbf{n})$ не зависит от угла φ),

б) $f(\theta) = f(\pi - \theta)$,

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

Заметим, что в силу условия б) $f(\mathbf{n})$ разлагается в ряд Фурье по полиномам Лежандра с четными индексами $P_{2s}(\mathbf{n}) = P_{2s}(\cos \theta)$, причем условию в) удовлетворяет лишь полином P_2 .

Введем для удобства функцию $h(\mathbf{n}) = f(\mathbf{n}) - 1$. Потенцируя в обеих частях уравнения (1), получим с учетом нормировки (2) уравнение

$$h(\mathbf{n}) = -1 + \frac{\exp\left(-\lambda \int B(\mathbf{n}, \mathbf{n}') h(\mathbf{n}) d\mathbf{n}\right)}{\int \exp\left(-\lambda \int B(\mathbf{n}, \mathbf{n}') h(\mathbf{n}) d\mathbf{n}\right) d\mathbf{n}}. \quad (3)$$

Исследования [2] показали, что глобальное решение $h(\mathbf{n})$ уравнения (3) имеет три ветви. Изотропная фаза системы описывается ветвью $h_0(\mathbf{n}) = 0$. Ветвь $h_1(\mathbf{n}) \neq 0$ описывает анизотропную фазу и ответвляется от изотропной ветви в точке бифуркации $\rho = \rho_b$ влево. В окрестности точки бифуркации она разлагается в сходящийся ряд по целым степеням $\alpha = \rho - \rho_b$, это разложение получено в [1] с точностью до членов порядка $O(\alpha^{40})$ включительно. Анизотропная ветвь $h_2(\mathbf{n})$ ответвляется от ветви $h_1(\mathbf{n})$ вправо (вторичная бифуркация) в критической точке (точке фазового перехода) $\rho = \rho_* < \rho_b$. Для вычисления ветви $h_2(\mathbf{n})$ в [1] была предложена итерационная процедура, которая оказалась эффективной вне малой окрестности критической точки ρ_* . На рис. 1 представлена зависимость функций $h_i(\mathbf{n})$ ($i = 0, 1, 2$) от плотности ρ , полученная в [1] при $V_0/\delta = 1$. Здесь $\|h_i\| = \sqrt{\int h_i^2(\mathbf{n}) d\mathbf{n}}$ – нормы функций h_i .

В окрестности точки ρ_* значения норм $\|h_1\|$ и $\|h_2\|$ меняются очень быстро, поэтому в этой окрестности необходимо иметь асимптотические представления обеих анизотропных ветвей при $\rho \rightarrow \rho_* + 0$.

В настоящей работе развит алгоритм вычисления критической точки ρ_* , построены асимптотические представления ветвей $h_1(\mathbf{n})$, $h_2(\mathbf{n})$ и исследовано термодинамическое состояние системы в окрестности этой точки. Указанный алгоритм предложен Л.Д. Эскиным и был ранее применен при исследовании термодинамических свойств системы немагнитных эллипсоидальных частиц (модель Парсонса [3]). Эффективность алгоритма была показана также в случае модели ориентационного фазового перехода в системе магнитных стержней [4]. В обоих случаях задача решалась в приближении P_2 , P_4 . Численный эксперимент, проведенный

в настоящей работе, показал, что удержание в ядре $B(\mathbf{n}, \mathbf{n}')$ интегрального уравнения (1) слагаемых с P_6, P_8, \dots не приводит к существенному повышению точности расчетов. Статья является продолжением серии работ по исследованию фазовых переходов в системах осесимметричных частиц, написанных в соавторстве с Л.Д. Эскиным.

1. Вычисление критической точки фазового перехода

Ядро $B(\mathbf{n}, \mathbf{n}')$ интегрального уравнения (1) может быть разложено в ряд Фурье по полиномам Лежандра [5]

$$B(\mathbf{n}, \mathbf{n}') = \sum_{k=1}^{\infty} b_k P_{2k}(\mathbf{nn}').$$

Полагая

$$f(\mathbf{n}) = 1 + h(\mathbf{n}) = 1 + \sum_{s=1}^{\infty} a_s P_{2s}(\mathbf{n}), \quad (4)$$

найдем с учетом соотношений ортогональности и теоремы сложения для полиномов Лежандра:

$$\int B(\mathbf{n}, \mathbf{n}') h(\mathbf{n}) d\mathbf{n} = \frac{\pi}{2} \sum_{s=1}^{\infty} C_s a_s P_{2s}(\mathbf{n}'),$$

$$C_1 = -\frac{1}{16}, \quad C_s = -\frac{(2s-3)!!(2s-1)!!}{2^{2s+1}s!(s+1)!}, \quad s > 1.$$

Потенцируя в обеих частях равенства (1), умножая затем полученное равенство на $P_{2s}(\mathbf{n}')$ ($s = 0, 1, 2, \dots$) и интегрируя по \mathbf{n}' , получим бесконечную систему уравнений для определения коэффициентов a_s Фурье-Лежандра ОФР $f(\mathbf{n})$:

$$a_s = (4s+1) \exp(\nu + \lambda) \int \exp(-\lambda A) P_{2s}(\mathbf{n}') d\mathbf{n}', \quad s = 0, 1, 2, \dots, \quad (5)$$

где для краткости обозначено

$$A(\mathbf{n}', a_1, a_2, \dots) = \frac{\pi}{2} \left(-\frac{a_1}{16} P_2(\mathbf{n}') - \frac{a_2}{128} P_4(\mathbf{n}') - \dots \right) = \sum_{s=1}^{\infty} C_s a_s P_{2s}(\mathbf{n}').$$

Величина $A(\mathbf{n}', a_1, a_2, \dots)$ не зависит от φ' . Проинтегрировав в правой части (5) по φ' и обозначив $\cos \theta' = u$, найдем

$$a_s = (4s+1) \exp(\nu + \lambda) \int_0^1 \exp(-\lambda A) P_{2s}(u) du, \quad s = 0, 1, 2, \dots$$

Положив $s = 0$ ($a_0 = 1, P_0 = 1$), получим:

$$\exp(\nu + \lambda) = \left(\int_0^1 \exp(-\lambda A) du \right)^{-1}.$$

Уравнения для неизвестных a_1, a_2, \dots, a_m ($m > 1$) примут вид

$$\sigma_s = -a_s + (4s + 1) \frac{\int_0^1 \exp(-\lambda A) P_{2s}(u) du}{\int_0^1 \exp(-\lambda A) du} = 0, \quad s = 1, \dots, m. \quad (6)$$

При $\lambda < \lambda_*$ ($\lambda_* = 8V_0\rho_*/(\pi\delta)$, ρ_* – подлежащая определению критическая плотность – точка фазового перехода) система уравнений (6) имеет единственное вещественное решение $a_1 = a_2 = \dots = a_m = 0$, приводящее к изотропной ветви ОФР $f_0(\mathbf{n}) = 1$, так что при $\lambda < \lambda_*$ интегральное уравнение (1) не имеет анизотропных вещественных решений. При $\lambda > \lambda_*$ существуют, кроме изотропной ветви $f_0(\mathbf{n}) = 1$, еще две анизотропные ветви $f_1(\mathbf{n})$ и $f_2(\mathbf{n})$. Это означает, что в точке $a_1 = a_1(\lambda_*)$, $a_2 = a_2(\lambda_*)$, \dots , $a_m = a_m(\lambda_*)$, удовлетворяющей системе (6) при $\lambda = \lambda_*$, не выполняются условия теоремы о неявной функции. В результате для определения неизвестных a_1, a_2, \dots, a_m и λ_* получаем систему из $(m + 1)$ уравнений

$$\sigma_s = 0, \quad D(a_1, a_2, \dots, a_m, \lambda_*) = 0, \quad s = 1, 2, \dots, m, \quad (7)$$

где

$$D = \begin{vmatrix} \frac{\partial \sigma_1}{\partial a_1} & \dots & \frac{\partial \sigma_1}{\partial a_m} \\ \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial \sigma_m}{\partial a_1} & \dots & \frac{\partial \sigma_m}{\partial a_m} \end{vmatrix}$$

есть якобиан.

Систему (7) необходимо решать численно. Расчеты, проведенные методом итераций для значений $m = 2, 3, 4, 5$, привели при $V_0/\delta = 1$ к результату $\lambda_* = 9.45$ ($\rho_* = 3.71$). Разница между значениями λ_* при $m = 2$ и $m = 5$ не превысила 0.4%. Коэффициенты a_s в точке $\lambda = \lambda_*$ также практически не изменялись с ростом числа уравнений m . Таким образом, приближение P_2 , P_4 для ядра $B(\mathbf{n}, \mathbf{n}')$ (случай $m = 2$) приводит к достаточно точным результатам, позволяя избежать громоздких вычислений.

2. Построение решений f_1 и f_2

Система уравнений (6) в случае $m = 2$ имеет вид

$$\sigma_1 = \frac{\int_0^1 F P_2(u) du}{\int_0^1 F du} - \frac{x}{\lambda_1} = 0, \quad \sigma_2 = \frac{\int_0^1 F P_4(u) du}{\int_0^1 F du} - \frac{ky}{\lambda_1} = 0, \quad (8)$$

где $x = a_1\lambda/16$, $y = a_2\lambda/128$, $F = \exp(xP_2 + yP_4)$, $\lambda_1 = 5\lambda/16$, $k = 40/9$.

Элементы якобиана $D = \begin{vmatrix} \alpha_1 & \beta_1 \\ \alpha_2 & \beta_2 \end{vmatrix}$ вычисляются по формулам

$$\alpha_1 = \frac{\partial \sigma_1}{\partial x} = \frac{I_{20}I_{00} - I_{10}^2}{I_{00}^2} - \frac{1}{\lambda_1}, \quad \alpha_2 = \frac{\partial \sigma_1}{\partial y} = \frac{I_{11}I_{00} - I_{01}I_{10}}{I_{00}^2},$$

$$\beta_1 = \frac{\partial \sigma_2}{\partial x} = \frac{I_{11}I_{00} - I_{01}I_{10}}{I_{00}^2}, \quad \beta_2 = \frac{\partial \sigma_2}{\partial y} = \frac{I_{02}I_{00} - I_{01}^2}{I_{00}^2} - \frac{k}{\lambda_1},$$

где обозначено $I_{ij} = \int_0^1 P_2^i P_4^j F du$.

В силу равенства $D = 0$ в критической точке $\lambda_1 = \lambda_1^*$, $x_0 = x(\lambda_1^*)$, $y_0 = y(\lambda_1^*)$ строки определителя пропорциональны:

$$\frac{\alpha_2}{\alpha_1} = \frac{\beta_2}{\beta_1} = \mu. \quad (9)$$

Уравнения

$$I_{10}/I_{00} = x/\lambda_1, \quad I_{01}/I_{00} = ky/\lambda_1, \quad (10)$$

получающиеся из уравнений (8), дают совместно с уравнением (9) систему трех трансцендентных уравнений относительно неизвестных x_0 , y_0 , λ_1^* . Решая систему численно, получаем коэффициенты $a_1 = x_0/\lambda_1^*$, $a_2 = (ky_0)/\lambda_1^*$, а затем из системы (6) и остальные коэффициенты разложения (4) в критической точке $\lambda_1 = \lambda_1^*$, что позволяет вычислить нормы $\|h_i\|$ в этой точке: $\|h_1\| = \|h_2\| = 1.7$ ($\lambda_1^* = 2.95$).

Положим теперь

$$\lambda_1 = \lambda_1^* + \Delta\lambda, \quad x = x_0 + \Delta x, \quad y(\lambda) = y_0 + \Delta y \quad (11)$$

и построим асимптотические решения $x(\lambda_1)$, $y(\lambda_1)$ системы уравнений (8) при $\lambda_1 \rightarrow \lambda_1^* + 0$, что позволит найти коэффициенты a_s в разложении (4) для верхней и нижней анизотропных ветвей решения $f(\mathbf{n})$ в окрестности критической точки.

При $\Delta\lambda \rightarrow 0$ будем иметь $\Delta x \rightarrow 0$, $\Delta y \rightarrow 0$. Подставим равенства (11) в уравнения (8) и разложим обе части полученных равенств по степеням $\Delta\lambda$, Δx , Δy . В результате достаточно громоздких выкладок, которые опустим, придем с учетом уравнений (10) к следующей системе уравнений для Δx , Δy :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\lambda_1^*} \left(\Delta x - \frac{x_0 \Delta\lambda}{\lambda_1^*} \right) \psi &= \left(\alpha_1 + \frac{1}{\lambda_1^*} \right) \Delta x + \beta_1 \Delta y + \sum_{i=2}^{\infty} \xi_i(\Delta x, \Delta y), \\ \frac{k}{\lambda_1^*} \left(\Delta y - \frac{y_0 \Delta\lambda}{\lambda_1^*} \right) \psi &= \alpha_2 \Delta x + \left(\beta_2 + \frac{k}{\lambda_1^*} \right) \Delta y + \sum_{i=2}^{\infty} \nu_i(\Delta x, \Delta y), \end{aligned} \quad (12)$$

где $\psi = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \left(\frac{\Delta\lambda}{\lambda_1^*} \right)^k$, ξ_i , ν_i – формы i -й степени относительно Δx , Δy .

С помощью тождества $\psi = 1 - \frac{\Delta\lambda}{\lambda_1^*} \psi$ перепишем систему (12) в виде

$$\begin{aligned} -\frac{\Delta\lambda}{\lambda_1^{*2}} \psi(x_0 + \Delta x) &= \alpha_1 \Delta x + \beta_1 \Delta y + \sum_{i=2}^{\infty} \xi_i(\Delta x, \Delta y), \\ -\frac{k\Delta\lambda}{\lambda_1^{*2}} \psi(y_0 + \Delta y) &= \mu(\alpha_1 \Delta x + \beta_1 \Delta y) + \sum_{i=2}^{\infty} \nu_i(\Delta x, \Delta y). \end{aligned} \quad (13)$$

В дальнейшем нам понадобятся квадратичные формы ξ_2 , ν_2 , для которых получаем представления

$$\begin{aligned} \xi_2 &= a_{11}(\Delta x)^2 + 2a_{12}\Delta x\Delta y + a_{22}(\Delta y)^2, \\ \nu_2 &= b_{11}(\Delta x)^2 + 2b_{12}\Delta x\Delta y + b_{22}(\Delta y)^2, \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
a_{11} &= \frac{1}{2}\sigma_{00}^{-1} \left(\sigma_{30} - 3\frac{x_0}{\lambda_1^*}\sigma_{20} + 2\left(\frac{x_0}{\lambda_1^*}\right)^2 \sigma_{10} \right), \\
b_{11} &= \frac{1}{2}\sigma_{00}^{-1} \left(\sigma_{21} - \frac{ky_0}{\lambda_1^*}\sigma_{20} + 2\left(\frac{x_0}{\lambda_1^*}\right)^2\sigma_{01} - 2\frac{x_0}{\lambda_1^*}\sigma_{11} \right), \\
a_{12} &= \frac{1}{2}\sigma_{00}^{-1} \left(\sigma_{21} - 2\frac{x_0}{\lambda_1^*}\sigma_{11} + 2\frac{kx_0y_0}{(\lambda_1^*)^2}\sigma_{10} - \frac{ky_0}{\lambda_1^*}\sigma_{20} \right), \\
b_{12} &= \frac{1}{2}\sigma_{00}^{-1} \left(\sigma_{12} - 2\frac{ky_0}{\lambda_1^*}\sigma_{11} + 2\left(\frac{ky_0}{\lambda_1^*}\right)^2 \sigma_{01} - \frac{x_0}{\lambda_1^*}\sigma_{02} \right), \\
a_{22} &= \frac{1}{2}\sigma_{00}^{-1} \left(\sigma_{12} - \frac{x_0}{\lambda_1^*}\sigma_{02} + 2\frac{ky_0x_0}{(\lambda_1^*)^2}\sigma_{01} - 2\frac{ky_0}{\lambda_1^*}\sigma_{11} \right), \\
b_{22} &= \frac{1}{2}\sigma_{00}^{-1} \left(\sigma_{03} - 3\frac{ky_0}{\lambda_1^*}\sigma_{02} + 2\left(\frac{ky_0}{\lambda_1^*}\right)^2 \sigma_{01} \right).
\end{aligned}$$

Нетрудно заметить, что ненулевое решение системы уравнений (13) следует искать в виде ряда по целым степеням $(\Delta\lambda)^{1/2}$, то есть в виде

$$\Delta x = \sum_{k=1}^{\infty} l_k (\Delta\lambda)^{k/2}, \quad \Delta y = \sum_{k=1}^{\infty} m_k (\Delta\lambda)^{k/2}. \quad (14)$$

Подставляя ряды (14) в систему уравнений (13) и сравнивая в обеих частях равенств (13) коэффициенты при $(\Delta\lambda)^{1/2}$, получим для коэффициентов l_1, m_1 одно уравнение $\alpha_1 l_1 + \beta_1 m_1 = 0$, откуда $l_1 = -\frac{\beta_1}{\alpha_1} m_1$, m_1 пока остается неопределенным.

Сравнивая в обеих частях равенств (13) коэффициенты при первой степени $\Delta\lambda$, получим неоднородную систему нелинейных алгебраических уравнений для определения коэффициентов l_2, m_2 разложений (14):

$$\alpha_1 l_2 + \beta_1 m_2 = -\frac{x_0}{(\lambda_1^*)^2} - \left(a_{11} \left(\frac{\beta_1}{\alpha_1} \right)^2 - 2a_{12} \frac{\beta_1}{\alpha_1} + a_{22} \right) m_1^2, \quad (15)$$

$$\mu\alpha_1 l_2 + \mu\beta_1 m_2 = -\frac{ky_0}{(\lambda_1^*)^2} - \left(b_{11} \left(\frac{\beta_1}{\alpha_1} \right)^2 - 2b_{12} \frac{\beta_1}{\alpha_1} + b_{22} \right) m_1^2. \quad (16)$$

Отношение левых частей в (15) и (16) равно μ , следовательно равно μ и отношение правых частей, что позволяет определить m_1 . Можно показать, что $\beta_1 = \alpha_2$. В результате найдем

$$m_1 = \pm \frac{1}{\lambda_1^*} \sqrt{\frac{ky_0 - \frac{\alpha_2}{\alpha_1} x_0}{\left(\frac{\alpha_2}{\alpha_1} a_{11} - b_{11} \right) \left(\frac{\alpha_2}{\alpha_1} \right)^2 - 2 \left(\frac{\alpha_2}{\alpha_1} a_{12} - b_{12} \right) \frac{\alpha_2}{\alpha_1} + \frac{\alpha_2}{\alpha_1} a_{22} - b_{22}}}, \quad (17)$$

$$l_1 = -\frac{\alpha_2}{\alpha_1} m_1.$$

Таким образом, построен старший член асимптотических представлений Δx и Δy при $\lambda_1 \rightarrow \lambda_1^*$.

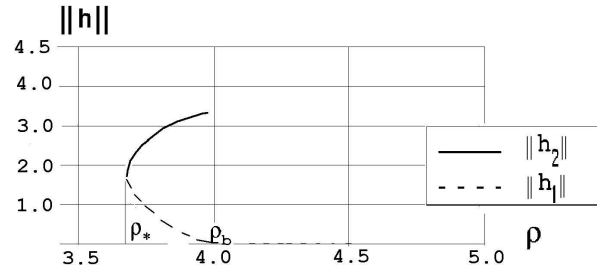


Рис. 2. Зависимость $\|h\|$ от плотности ρ в окрестности критической точки

Система (15), (16) после определения m_1 сводится лишь к одному неоднородному уравнению и позволяет выразить l_2 через m_2 . Чтобы определить m_2 , надо сравнить в обеих частях равенств (13) коэффициенты при $(\Delta\lambda)^{3/2}$, для чего понадобятся явные выражения для форм ξ_3 , ν_3 , и выписать аналогичную (15), (16) неоднородную систему для коэффициентов l_3 , m_3 . Условие разрешимости этой системы снова сводится к требованию, чтобы отношение правой части второго уравнения к правой части первого уравнения равнялось μ , это условие и дает необходимое уравнение для определения коэффициента m_2 , а вместе с ним и l_2 во втором члене асимптотики Δx , Δy . Этот процесс может быть аналогично продолжен и далее.

Подставляя полученные значения Δx , Δy в (11) и вычисляя соответствующие коэффициенты a_1 , a_2 в разложении (4), найдем решения h_1 и h_2 (знак плюс в (17) соответствует решению h_2 , а знак минус – решению h_1 с меньшей нормой). Результаты вычислений с точностью до двух слагаемых в разложениях (14) представлены на рис. 2.

Использование полученных в настоящей работе результатов построения асимптотик Δx , Δy позволило значительно точнее определить $\|h_1\|$, $\|h_2\|$ вблизи ρ_* , чем это удавалось сделать ранее [1].

3. Уравнение состояния системы в окрестности критической точки

Полученные в п. 1 и 2 результаты позволяют исследовать термодинамические свойства рассматриваемой системы в окрестности критической точки фазового перехода.

Свободная энергия системы (с точностью до слагаемого, содержащего неизвестную функцию температуры и не влияющего на дальнейшие выкладки) выражается формулой [6]

$$F = NkT(\ln \eta + \int f(\mathbf{n}) \ln f(\mathbf{n}) d\mathbf{n} + \frac{\lambda}{4} \int B(\mathbf{n}, \mathbf{n}') f(\mathbf{n}) f(\mathbf{n}') d\mathbf{n} d\mathbf{n}'). \quad (18)$$

Воспользовавшись формулой $P = -\partial F / \partial V$, из (18) получаем соотношение, определяющее давление в системе

$$\bar{P} = \beta P = \rho \left(1 + \frac{2V_0 \rho}{\pi \delta} I \right), \quad (19)$$

где \bar{P} – безразмерное давление, $\beta = 1/kT$, k – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура, через I обозначен интеграл

$$I = \int B(\mathbf{n}, \mathbf{n}') f(\mathbf{n}) f(\mathbf{n}') d\mathbf{n} d\mathbf{n}' = \frac{\pi}{2} \left(1 - \frac{a_1^2}{80} - \frac{a_2^2}{1152} - \dots \right) = \frac{\pi}{2} \left(1 - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{C_s a_s^2}{4s+1} \right).$$

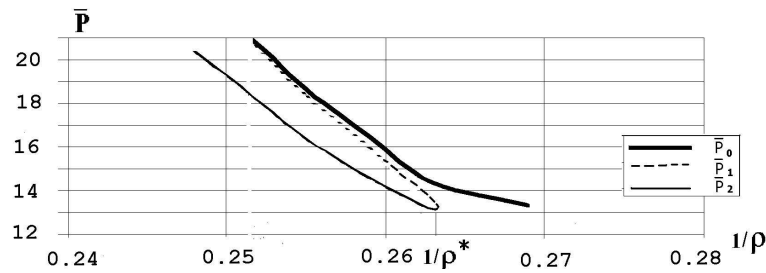


Рис. 3. Зависимость безразмерного давления \bar{P} от обратной плотности $1/\rho$ в окрестности критической точки ρ^*

Результаты расчетов по формуле (19) до слагаемых $s = 10$ включительно представлены на рис. 3 в виде зависимости безразмерного давления \bar{P} от обратной плотности $1/\rho$ (уравнение состояния) в окрестности критической точки фазового перехода. Давление \bar{P}_0 соответствует решению f_0 , давления \bar{P}_1 и \bar{P}_2 – решениям f_1 и f_2 .

Summary

L.U. Bakhtieva. On the Onsager's Model in the Neighborhood of the Phase Transition Point.

A global solution of the nonlinear integral Onsager's equation is studied in the small neighborhood of the critical point. The equation models the orientational phase transition from isotropic to anisotropic (nematic) phase in the system of stiff-elongated rods. The thermodynamic state of this system is studied.

Key words: nonlinear integral equation, Onsager's model, phase transition.

Литература

1. *Kayser R.F., Raveche H.J.* Bifurcation in Onsager's model of the isotropic-nematic transition // *Phys. Rev.* – 1978. – V. A17, No 6. – P. 2067–2072.
2. *Эскин Л.Д.* Уравнение Онзагера как уравнение Ляпунова-Шмидта // *Изв. вузов. Математика.* – 1998. – № 8. – С. 71–78.
3. *Бахтиева Л.У., Эскин Л.Д.* О модели Парсонса в окрестности критической точки ориентационного фазового перехода в системе эллипсоидальных частиц // *Исслед. по прикл. матем.* – 2004. – Вып. 25. – С. 48–54.
4. *Бахтиева Л.У., Эскин Л.Д.* Приближение P_2, P_4 в теории ориентационных фазовых переходов в системе магнитных стержней // *Исслед. по прикл. матем.* – 2006. – Вып. 26. – С. 51–59.
5. *Эскин Л.Д.* Об интегральном уравнении теории фазовых переходов в системе магнитных стержней // *ТМФ.* – 1996. – Т. 109, № 3. – С. 427–440.
6. *Де Жен П.Ж.* Физика жидких кристаллов. – М.: Мир, 1977. – 400 с.

Поступила в редакцию
24.09.08

Бахтиева Ляля Узбековна – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры прикладной математики Казанского государственного университета.

E-mail: edib@yandex.ru