Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Л. Д. Эскин, Об интегральном уравнении, описывающем фазовые переходы в системе магнитных стержней, *Функц. анализ и его прил.*, 1999, том 33, выпуск 1, 92–95

DOI: <https://doi.org/10.4213/faa347>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.92.164.108

26 апреля 2023 г., 18:03:17

функционального анализа в математической физике. Новосибирск, СО АН СССР, 1962. 7. Сансоне Дж. Обыкновенные дифференциальные уравнения. Т. 1, ИЛ, М. 1953.

Институт математики
и механики АН Азербайджана

Поступило в редакцию
13 мая 1994

В переработанном виде
21 июля 1997 г.

УДК 517.988+517.968.4

Об интегральном уравнении, описывающем фазовые переходы в системе магнитных стержней*

© 1999. Л. Д. Эскин

1. В 1949 г. Л. Онзагер [1] показал, что в системе тонких неполярных цилиндрических стержней ($\delta = d/l \ll 1$, d — диаметр, l — длина стержня) с парным взаимодействием типа стерического отталкивания, изотропной при низких концентрациях, с увеличением концентрации происходит фазовый переход первого рода (со скачком концентрации) в анизотропную (ориентационно упорядоченную) нематическую фазу. Термодинамические свойства анизотропной фазы (нематика) полностью описываются отличной от единицы плотностью распределения ориентаций стержней $f(\mathbf{n})$ ($\mathbf{n}$ — орт оси стержня), для которой Онзагер получил нелинейное интегральное уравнение $\nu + \ln f(\mathbf{n}') + \sigma T f = 0$, где $\sigma = 2cdl^2$ (c — плотность системы), T — линейный интегральный оператор, $Tf = \int B_1(\mathbf{n}, \mathbf{n}') f(\mathbf{n}) d\mathbf{n}$, с ядром $B_1 = (1 - (\mathbf{nn}')^2)^{1/2}$, $\mathbf{nn}'$ — скалярное произведение ортов $\mathbf{n}$ и $\mathbf{n}'$, а неизвестная константа ν определяется условием нормировки $\int f(\mathbf{n}) d\mathbf{n} = 1$, $d\mathbf{n} = (4\pi)^{-1} \sin \theta d\theta d\varphi$ (φ, θ — сферические координаты орта $\mathbf{n}$). Для изотропной фазы $f(\mathbf{n}) = 1$. Нематик обладает аксиальной и зеркальной симметрией. Направление оси симметрии совпадает с единственным направлением преимущественной ориентации осей частиц. Отсюда следует [2, 3], что в сферической системе координат с полярной осью, совпадающей с осью симметрии нематика, плотность $f(\mathbf{n})$ анизотропной фазы должна удовлетворять следующим дополнительным условиям: (а) $f(\mathbf{n})$ не зависит от угла φ ($f(\mathbf{n}) = f(\theta)$); (б) $f(\theta) = f(\pi - \theta)$; следовательно, $f(\mathbf{n})$ разлагается в ряд Фурье по полиномам Лежандра P_{2s} с четным индексом; (с) $f(0) = f(\pi) = \max$ и других максимумов f не имеет. Решение уравнения Онзагера, удовлетворяющее условию нормировки и условиям (а)–(с), изучалось во многих физических работах (соответствующие ссылки можно найти в монографии [2]). Большой интерес представляет изучение системы магнитных стержней (с магнитным моментом $\mathbf{m}$ на единицу длины стержня), в которой помимо стерического отталкивания необходимо учитывать и диполь-дипольное взаимодействие

* Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 95-01-00270а).

стержней [4, 5]. Интегральное уравнение для плотности $f(\mathbf{n})$ в случае антиферромагнитного нематика найдено в [4]. В безразмерной форме оно имеет вид

$$\nu + \ln f(\mathbf{n}') + \frac{\lambda\delta}{2\pi\gamma} T f - \frac{\gamma\lambda}{\pi^2} \int \frac{B_2(\mathbf{n}, \mathbf{n}', \mathbf{k}, z) f(\mathbf{n}) d\mathbf{n} d\mathbf{k} dz}{z^2(1 + 2\lambda z^{-2} \int f(\mathbf{n}) \sin^2(\mathbf{k}\mathbf{n}z/2) d\mathbf{n})} = 0. \quad (1)$$

В (1) $\lambda = 8\pi c m^2 l^2 / k_B T_0$ и $\gamma = 2(\mathbf{m}l)^2 / k_B T_0 l^3$ — безразмерные положительные параметры, $B_2 = \sin^2(\mathbf{k}\mathbf{n}z/2) \sin^2(\mathbf{k}\mathbf{n}'z/2)$, где $\mathbf{k}$ — орт со сферическими координатами φ_0, θ_0 , $d\mathbf{k} = \sin\theta_0 d\varphi_0 d\theta_0$, интеграл по $\mathbf{n}$ и $\mathbf{k}$ в (1) берется по поверхности сферы, а по z — от 0 до ∞ , k_B — константа Больцмана, T_0 — абсолютная температура. В случае $\mathbf{m} = 0$ (стержни немагнитны) уравнение (1) совпадает с уравнением Онзагера, но оно значительно сложнее последнего. Для любых λ, γ, δ уравнение (1) при подходящем выборе неизвестной постоянной ν имеет изотропное решение $f(\mathbf{n}) = 1$. Анизотропные решения ответвляются от изотропного в точках бифуркации $\lambda = \lambda_b$. В настоящей работе с помощью идей теории Ляпунова–Шмидта изучаются близкие к изотропному анизотропные решения уравнения (1), удовлетворяющие условиям (а)–(с), т. е. описывающие нематик. Полностью описана аналитическая структура этих решений в окрестности невырожденной точки бифуркации (теорема 1), полностью исследован и вопрос об их направлении бифуркации (теорема 2).

2. Полагая $f = 1 + h(\mathbf{n})$ и линеаризуя уравнение (1) около $h = 0$, получим линейное интегральное уравнение $h - \int B(\mathbf{n}, \mathbf{n}') h(\mathbf{n}) d\mathbf{n} = 0$, где

$$B = -\frac{\lambda\delta}{2\pi\gamma} B_1 + \frac{\lambda\gamma}{\pi^2} \int_0^\infty \frac{\int B_2(\mathbf{n}, \mathbf{n}', \mathbf{k}, z) d\mathbf{k} dz}{z^2(1 + \lambda\rho(z))^2}, \quad \rho = \frac{1}{z^2} \left(1 - \frac{\sin z}{z}\right).$$

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 1. Собственными функциями ядра B , удовлетворяющими условиям (а) и (б), являются полиномы Лежандра P_{2s} , причем

$$\int B(\mathbf{n}, \mathbf{n}'; \lambda) P_{2s}(\mathbf{n}) d\mathbf{n} = N_s(\lambda, \gamma, \delta) P_{2s}(\mathbf{n}'),$$

$$N_s(\lambda, \gamma, \delta) = \frac{(2s-3)!!(2s-1)!!\lambda\delta}{2^{2s+3}s!(s+1)!\gamma} + \frac{\lambda\gamma}{2} \int_0^\infty \frac{J_{2s+1/2}^2(z) dz}{z^3(1 + \lambda\rho)^2}, \quad s \geq 1$$

($J_\nu(z)$ — бесселева функция).

Из предложения 1 следует, что точками бифуркации уравнения (1) являются корни $\lambda_b(\gamma, \delta, s)$ любого из уравнений $N_s(\lambda, \gamma, \delta) = 1$.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ. Точку бифуркации $\lambda_b(\gamma, \delta, s)$ будем называть невырожденной, если она не является корнем ни одного из уравнений $N_k(\lambda, \gamma, \delta) = 1$ с $k \neq s$. В противном случае точку бифуркации будем называть вырожденной.

ЗАМЕЧАНИЕ 1. Среди полиномов P_{2s} условию (с) удовлетворяет лишь P_2 .

С учетом замечания 1 можно показать, что анизотропное решение, ответвляющееся от изотропного в невырожденной точке бифуркации $\lambda_b(\gamma, \delta, s)$, может удовлетворять условию (с) лишь в случае $s = 1$. Поэтому ниже рассматриваются лишь точки бифуркации $\lambda_b(\gamma, \delta) = \lambda_b(\gamma, \delta, 1)$ и решения уравнения (1), ответвляющиеся от изотропного в этих точках. Уравнение для точек

бифуркации $\lambda_b(\gamma, \delta)$ удобно записать в виде $g_1 = g_2$, где

$$g_1 = \frac{\lambda}{\gamma} \left(1 - \frac{\lambda\delta}{64\gamma} \right), \quad g_2 = \frac{\lambda^2}{\pi} \int_0^\infty \frac{F^2(z) dz}{z^2(1 + \lambda\rho)^2}, \quad F = \frac{3 \sin z - 3z \cos z - z^2 \sin z}{z^3}.$$

Таким образом, точками бифуркации являются абсциссы точек пересечения параболы $y = g_1(\lambda)$ и кривой $y = g_2(\lambda)$, $\lambda > 0$. Кривая $g_2(\lambda)$ монотонно возрастает и имеет точку перегиба $\lambda = \lambda_\pi$ (λ_π без труда находится численно). При $0 < \lambda < \lambda_\pi$ кривая выпукла вниз, при $\lambda > \lambda_\pi$ — вверх [4, 5]. Кривая g_1 при фиксированных γ, δ — парабола, вершина которой при возрастании γ перемещается вправо по прямой $y = 16/\delta$. При $\delta < \delta_0$ (δ_0 достаточно мало) и некоторых $\gamma = \gamma_R$ и $\gamma = \gamma_Q$ восходящая (левая) ветвь параболы касается выпуклой вверх части кривой g_2 сначала извне в точке R , а затем изнутри в точке Q ; кроме того, при некотором $\gamma = \gamma_P$ вершина параболы совпадает с точкой пересечения P кривой $g_2(\lambda)$ и прямой $y = 16/\delta$. С учетом сказанного можно показать, что существуют три непрерывные ветви точек бифуркации $\lambda_b(\gamma, \delta)$. Первую ветвь $\lambda_b^{(1)}$ образуют абсциссы точек пересечения нисходящей ветви параболы g_1 с кривой g_2 . Эта ветвь определена (как функция аргумента γ) при $0 < \gamma \leq \gamma_P \sim 2^9/\delta$, монотонно возрастает по аргументу γ и убывает по аргументу δ , причем $32\gamma/\delta \leq \lambda_b^{(1)}(\gamma, \delta) \leq \lambda_P \sim 2^{14}\delta^{-2}$ ($\delta \ll 1$). Вторую ветвь образуют абсциссы лежащих левее R точек пересечения восходящей ветви параболы g_1 с кривой g_2 . Эта ветвь определена при $\gamma_R < \gamma < \infty$ и монотонно убывает по каждому из аргументов γ, δ , причем справедлива очевидная оценка $0 < \lambda_b^{(2)} < \lambda_R$ и $\lambda_b^{(2)} \rightarrow 0$ при $\gamma \rightarrow \infty$. Наконец, третью ветвь $\lambda_b^{(3)}(\gamma, \delta)$ образуют абсциссы лежащих правее R точек пересечения восходящей ветви параболы g_1 с g_2 . Эта ветвь определена при $\gamma_R < \gamma < \gamma_Q$ и монотонно возрастает по каждому из аргументов γ, δ , причем $\lambda_R < \lambda_b^{(3)} < \lambda_Q$ ($\lambda_Q < \lambda_P$). Точки бифуркации $\lambda_R(\gamma_R, \delta)$ и $\lambda_Q(\gamma_Q, \delta)$ удобно рассматривать отдельно. Справедлива

ТЕОРЕМА 1. Пусть $\delta_0 > 0$ достаточно мало, $\delta \leq \delta_0$. Тогда решение уравнения (1), удовлетворяющее условию нормировки и условиям (а), (b) и отвечающее от изотропного в невырожденной точке бифуркации $\lambda_b(\gamma, \delta)$ разлагается в окрестности этой точки в степенной ряд по целым степеням $\mu = \lambda - \lambda_b$, сходящийся для достаточно малых $|\mu|$. В окрестности точек $\lambda_R(\gamma_R, \delta)$ и $\lambda_Q(\gamma_Q, \delta)$ имеем $f(\mathbf{n}) = 1 + \mu^2(-L_{12}/L_{20})P_2 + O(\mu^3)$, в окрестности остальных точек бифуркации $\lambda_b(\gamma, \delta)$ получаем $f(\mathbf{n}) = 1 + \mu(-L_{11}/L_{20})P_2 + O(\mu^2)$, где

$$L_{11} = \frac{\delta}{64\gamma} + \frac{\gamma}{\pi} \int_0^\infty \frac{(1 - \lambda_b\rho)F^2 dz}{z^2(1 + \lambda_b\rho)^3}, \quad L_{12}(\lambda_b, \gamma) = \frac{\gamma}{\pi} \int_0^\infty \frac{(\lambda_b\rho - 2)\rho F^2 dz}{z^2(1 + \lambda_b\rho)^3},$$

$$L_{20} = \frac{1}{7} \left(1 - \frac{2\gamma\lambda_b^2}{\pi} \int_0^\infty \frac{F^3 dz}{z^4(1 + \lambda_b\rho)^3} \right).$$

ЗАМЕЧАНИЕ 2. Для построения формального разложения анизотропной плотности $f(\mathbf{n})$ в ряд по целым степеням μ следует разложить левую часть уравнения (1) в интегро-степенной ряд по h и μ , а затем, положив $\nu =$

$\sum_{k=1}^{\infty} \nu_k \mu^k$, $h = \sum_{k=1}^{\infty} h_k(\mathbf{n}) \mu^k$, воспользоваться методом неопределенных коэффициентов для определения ν_k и $h_k(\mathbf{n})$.

Остается выяснить, когда анизотропные решения уравнения (1), ответвляющиеся от изотропного в невырожденной точке бифуркации $\lambda_b(\gamma, \delta)$ и удовлетворяющие условиям (а) и (b), будут удовлетворять и условию (с). Окончательный ответ на этот вопрос дает

ТЕОРЕМА 2. Пусть δ_0 достаточно мало. Тогда при любом $\delta \leq \delta_0$

1) анизотропное решение $f(\mathbf{n})$, удовлетворяющее условию нормировки и условиям (а), (b) и ответвляющееся в любой невырожденной точке бифуркации $\lambda_b(\gamma, \delta)$, принадлежащей первой или второй ветви, имеет левое направление бифуркации (т. е. удовлетворяет условию (с) лишь слева от точки бифуркации (при $\mu < 0$));

2) наоборот, анизотропная плотность, ответвляющаяся от изотропной в произвольной невырожденной точке третьей ветви, имеет правое направление бифуркации;

3) при $\gamma = \gamma_R$ в точке бифуркации $\lambda_b = \lambda_R$ ответвляется анизотропная плотность $f(\mathbf{n})$, удовлетворяющая условиям (а)–(с) в полной окрестности точки λ_R (т. е. как слева, так и справа от λ_R);

4) при $\gamma = \gamma_Q$ в точке бифуркации λ_Q ответвляется плотность $f(\mathbf{n})$, удовлетворяющая условиям (а), (b), но не удовлетворяющая условию (с) ни справа, ни слева от λ_Q (следовательно, и не описывающая нематик).

Ситуация, в которой, как в случаях 1) и 2) теоремы 2, ответвляющееся решение оказывается определенным лишь в полукрестности точки бифуркации, широко распространена в теории ветвления и обычно связана с требованием вещественности решения. Однако в рассматриваемой нами задаче эта ситуация обусловлена именно требованием, чтобы анизотропное решение удовлетворяло условию (с) (т. е. описывало нематическую фазу системы). Важную роль теоремы 2 для теории фазовых переходов в системе магнитных стержней обуславливает то обстоятельство, что, как хорошо известно из физической литературы [3], именно в окрестности точки бифуркации с левым направлением бифуркации происходит фазовый переход первого рода.

ЛИТЕРАТУРА

1. Onsager L. Ann. New York Acad. Sci., **51**, 627 (1949).
2. Де Жен П.-Ж. Физика жидких кристаллов. Мир, М., 1972.
3. Kayser R. F., Raveche H. J. Phys. Rev. A., **17**, No. 6, 2067–2072 (1978).
4. Корнев К. Г., Эскин Л. Д. Изв. АН СССР, сер. физич., **55**, вып. 6, 1050–1054 (1991).
5. Цеберс А. О. Магнитная гидродинамика, № 2, 39–44 (1983).