

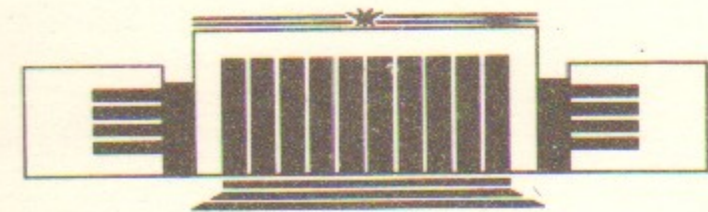


18
ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ СО АН СССР

Б.И. Шумило

О ФАЗОВОМ ПЕРЕХОДЕ
НЕМАТИЧЕСКИЙ ЖИДКИЙ
КРИСТАЛЛ — ИЗОТРОПНАЯ ЖИДКОСТЬ

ПРЕПРИНТ 87-125



НОВОСИБИРСК

О фазовом переходе нематический жидкий
кристалл — изотропная жидкость

Б.И. Шумило

Институт ядерной физики
630090, Новосибирск 90, СССР

АННОТАЦИЯ

Предлагается метод расчета статистических свойств нематика без использования разложения Ландау — де Жена для эффективного гамильтониана системы. Метод позволяет регулярным образом учитывать флуктуации, что необходимо для выяснения характера сингулярности в точке фазового перехода ориентационный порядок — беспорядок. Исследуются статистические свойства одноосного тензорного поля d_{ij} с фиксированными инвариантами с гамильтонианом (3). Показано, что система характеризуется малым параметром. Это позволяет вычислять флуктуационные поправки по теории возмущений. Найдены зависимости сингулярных частей обратной интенсивности рассеяния света (39) и теплоемкости (41) от температуры с точностью до поправок младших по параметру задачи. Сравнение этих зависимостей с экспериментальными позволит судить об адекватности модели физическим системам.

Для статистических систем, обладающих локальной анизотропией свойств, типичен фазовый переход ориентационный порядок — беспорядок. Низкотемпературная фаза такой системы анизотропна как целое, высокотемпературная же фаза — глобально изотропна. Таковы, в частности, нематики — вещества, образованные молекулами, пространственная структура которых имеет ярко выраженную анизотропию. Ориентационно упорядоченная фаза нематика есть жидкий кристалл, ориентационно разупорядоченная — изотропная жидкость. При описании фазового превращения нематический жидкий кристалл — изотропная жидкость обычно рассматривают лишь ориентационные степени свободы системы, т. е. исследуют статистические свойства поля параметра ориентационного порядка. При таком описании нематик отличается от, скажем, изотропного магнетика лишь законом изменения параметра ориентационного порядка при преобразованиях группы вращений. В случае магнетика параметр ориентационного порядка есть вектор, тогда как для нематика это симметричный бесследовый тензор второго ранга. Такого отличия достаточно для того, чтобы в окрестности точки ориентационного фазового перехода свойства упомянутых статистических систем существенно различались. Ориентационное упорядочение гейзенберговского магнетика детально описано в рамках теории подобия [1], вопрос же о характере сингулярности в точке фазового перехода нематический жидкий кристалл — изотропная жидкость остается открытым [2, 3]. В литературе высказаны различные гипотезы: допускается, что фазовое превращение может быть как переходом первого рода, так в слу-

чае сильных флуктуаций и переходом второго рода [2, 3]; рассматривается также вариант теории, основывающийся на предположении о близости системы к трикритической точке [3]. Данные эксперимента не позволяют отдать предпочтение какой-либо из возможностей, хотя, по-видимому, и отклоняются от предсказаний теории среднего поля [3, 4].

Теоретическое описание перехода нематик—изотропная жидкость основывается, как правило, на стандартном разложении термодинамического потенциала в ряд по параметру ориентационного порядка d_{ij} ($d_{ii}=0$, $d_{ij}=d_{ji}$) [2, 3, 4]. Для того, чтобы обеспечить качественное согласие теории и эксперимента, приходится предполагать специальную малость величины некоторых из коэффициентов этого разложения. Расчет в приближении среднего поля показывает, что фазовый переход нематический жидкий кристалл—изотропная жидкость должен быть переходом первого рода. Для более реалистического описания свойств системы необходимо, однако, учесть флуктуаций, так как в окрестности точки перехода обе фазы близки к границе абсолютной неустойчивости относительно локальных флуктуаций инвариантов поля параметра порядка. Для системы пространственной размерности $d=3$ такое исследование до настоящего времени не было выполнено.

Цель работы—исследовать вне рамок приближения среднего поля модель фазового перехода нематик—изотропная жидкость. Будем понимать тензор $d_{ij}(\mathbf{R})$ не как характеристику локальной анизотропии системы, усредненную по малому элементу объема, а как матрицу, которая задает пространственную ориентацию молекулы в точке \mathbf{R} . В этом случае инварианты тензора d_{ij} определяют форму молекулы. Ниже тензор d_{ij} для простоты предполагается одноосным. Используемый метод вычислений применим и в общем случае. Для одноосной молекулы:

$$d_{ij} = d \left(n_i n_j - \frac{1}{3} \delta_{ij} \right); \quad \mathbf{n}^2 = 1, \quad (1)$$

где \mathbf{n} —директор. Мы будем пренебрегать флуктуациями формы молекул. В этом случае величина d есть постоянная, которую можно положить равной единице, что приведет лишь к переопределению параметров гамильтониана. Если считать взаимодействие молекул парным, то простейшее выражение для энергии заданной их конфигурации имеет следующий вид:

$$H = - \sum_{\substack{\mathbf{r}, \mathbf{r}' \\ \mathbf{r} \neq \mathbf{r}'}} \frac{1}{2} d_{ij}(\mathbf{r}) J_{ijkl}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d_{kl}(\mathbf{r}'). \quad (2)$$

Суммирование в формуле (2) проводится по всем парам молекул; тензор J_{ijkl} описывает их взаимодействие. Будем пренебрегать также и флуктуациями плотности молекул; примем за единицу среднее расстояние между ними. Предполагая монотонное убывание функции J_{ijkl} с расстоянием, перейдем в (2) к интегрированию:

$$H = - \int dV dV' \frac{1}{2} d_{ij}(\mathbf{r}) J_{ijkl}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d_{kl}(\mathbf{r}'). \quad (3)$$

Пренебрежение флуктуациями формы молекул представляется вполне оправданным. Роль флуктуаций их плотности требует исследования, что, однако, выходит за рамки настоящей работы.

Нетрудно видеть, что при конечном радиусе взаимодействия между молекулами выражение (3) фактически совпадает с известным эффективным гамильтонианом Ландау—де Жена, который для жестких одноосных молекул в одноконстантном приближении имеет следующий вид [2]:

$$H = \int dV \frac{J}{2} (\partial_i n_j)^2. \quad (4)$$

Пусть в рассматриваемой модели взаимодействие молекул определяется тензором

$$J_{ijkl}(\mathbf{r}) = J(\mathbf{r}) \delta_{ik} \delta_{jl}. \quad (5)$$

разложив функцию $d_{ij}(\mathbf{R}')$ в ряд вблизи точки \mathbf{R} и воспользовавшись (1), найдем, что с точностью до членов более высокого порядка по пространственным производным поля директора выражение (3) совпадает с (4). Статистические свойства системы с гамильтонианом (4) изучались для пространства, размерность которого близка к двум ($d=2+\epsilon$) [5]. Для трехмерной системы эти свойства не выяснены. Ниже вычисляются статистические характеристики трехмерной системы с гамильтонианом (3) вблизи точки фазового перехода ориентационный порядок—беспорядок.

ПРОИЗВОДЯЩИЙ ФУНКЦИОНАЛ СИСТЕМЫ

В этом разделе производящий функционал корреляционных функций параметра ориентационного порядка рассматриваемой системы представлен в виде функционального интеграла по конфигурациям формальной переменной — тензорного поля второго ранга. Этот функционал преобразуется к форме, которая позволяет при вычислении статистических характеристик нематика регулярным образом учитывать флуктуации.

Максимум информации о статистических свойствах системы заключает в себе производящий функционал корреляционных функций параметра порядка:

$$Z\{\lambda_{ij}\} = \int D d_{ij} \exp \left\{ -\frac{H}{T} + \int \lambda_{ij} d_{ij} dV \right\}, \quad (6)$$

где H — гамильтониан (3). Интегрирование в (6) должно быть выполнено по всем пространственным конфигурациям поля параметра порядка $d_{ij}(\mathbf{R})$ (1), с учетом того, что в каждой точке пространства директор $\mathbf{n}(\mathbf{R})$ удовлетворяет условию $\mathbf{n}^2(\mathbf{R}) = 1$. Воспользуемся известным приемом и перепишем выражение (6) в следующей эквивалентной форме:

$$Z\{\lambda_{ij}\} = N \int D d_{ij} D h_{ij} \exp \left\{ -\frac{T}{2} \int dV [h_{ij} \hat{J}_{ijkl}^{-1} h_{kl}] + \int dV (h_{ij} + \lambda_{ij}) d_{ij} \right\}. \quad (7)$$

Здесь N — нормирующий множитель; тензор \hat{J}_{ijkl}^{-1} — дифференциальный оператор обратный функции J_{ijkl} :

$$\hat{J}_{ijkl}^{-1} J_{klmn} = \delta_{im} \delta_{jn}.$$

На компоненты введенного нами тензорного поля h_{ij} не наложено каких-либо связей. Нетрудно убедиться, вычислив гауссов интеграл по полю h_{ij} , что при должной нормировке выражение (7) совпадает с (6). В переменных $\tilde{h}_{ij} = h_{ij} + \lambda_{ij}$ имеем:

$$Z\{\lambda_{ij}\} = N \int D \tilde{h}_{ij} \prod_r \Phi(\tilde{h}_{ij}(\mathbf{r})) \exp \left\{ -\frac{T}{2} \int dV (\tilde{h}_{ij} - \lambda_{ij}) \hat{J}_{ijkl}^{-1} (\tilde{h}_{kl} - \lambda_{kl}) \right\}, \quad (8)$$

где

$$\Phi(\tilde{h}_{ij}) = \int \exp(\tilde{h}_{ij} d_{ij}) d\Omega / 4\pi. \quad (9)$$

Ниже знак тильды опускаем. Интегрирование в (9) проводится по

группе вращений, т. е. по всем возможным пространственным ориентациям директора $\mathbf{n}(\mathbf{n}^2 = 1)$. Запись производящего функционала в форме (7) позволяет выполнить интегрирование по конфигурациям поля $d_{ij}(\mathbf{R})$, вычислив интеграл (9) по ориентациям директора независимо в каждой точке пространства. При этом производящий функционал принимает согласно формулам (8), (9) вид:

$$Z\{\lambda_{ij}\} = N \exp \left\{ -\frac{T}{2} \int dV \lambda_{ij} \hat{J}_{ijkl}^{-1} \lambda_{kl} \right\} \cdot \int D h_{ij} \exp[-\tilde{H}(h_{ij}) + \int dV \chi_{ij} h_{ij}], \quad (10)$$

совпадающий по форме (с точностью до фиксированного множителя) со статсуммой по конфигурациям поля $h_{ij}(\mathbf{R})$ с эффективным гамильтонианом

$$\tilde{H}(h_{ij}) = \int dV \left[\frac{T}{2} h_{ij} \hat{J}_{ijkl}^{-1} h_{kl} - \ln \Phi(h_{ij}) \right] \quad (11)$$

во внешнем поле

$$\chi_{ij} = T \cdot \hat{J}_{ijkl}^{-1} \lambda_{kl} \quad (12)$$

и при единичной эффективной температуре. Очевидно, функционал (10) в пределе $\lambda_{ij} = 0$ есть статсумма исследуемой статистической системы; средние по ансамблю поля параметра порядка выражаются через соответствующие средние поля h_{ij} , вычисленные с весом, задаваемым функционалом (11). Например:

$$\langle d_{ij} \rangle_H \equiv T \langle \hat{J}_{ijkl}^{-1} h_{kl} \rangle_{\tilde{H}}.$$

Таким образом, статсумма кирального поля $d_{ij}(\mathbf{R})$ представлена в форме функционального интеграла по конфигурациям поля $h_{ij}(\mathbf{R})$, на компоненты которого не наложено каких-либо связей. Это достигнуто введением весовой функции (11) (эффективного гамильтониана), к вычислению и исследованию которой мы переходим.

Найдем функцию (9). Очевидно, она зависит лишь от симметричной и бесследовой части тензора h_{ij} . Если не оговорено обратное, ниже полагаем $h_{ii} = 0$, $h_{ij} = h_{ji}$. Представим (9) в виде ряда:

$$\Phi(h_{ij}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} h_{i_1 j_1} \dots h_{i_n j_n} \langle d_{i_1 j_1} \dots d_{i_n j_n} \rangle_{\Omega}. \quad (13)$$

Здесь угловыми скобками обозначено среднее по группе вращений от прямого произведения тензоров. В силу изотропии пространства

эти средние должны выражаться через кронекеровы δ -функции, т. е. n -ое среднее есть сумма $(2n-1)!!$ членов, каждый из которых есть произведение n δ -функций. Суммирование по индексам в (13) дает всевозможные свертки

$$t_n = \text{tr}[(\hat{h})^n].$$

В пространстве $d=3$ среди сверток t_n бесследового симметричного тензора второго ранга независимы лишь две, т. е. все величины t_n ($n \geq 4$) выражаются через $t_2 = (h_{ij})^2$ и $t_3 = h_{ij}h_{jk}h_{ki}$, что значительно упрощает ряд (13). Выпишем несколько его младших членов:

$$\begin{aligned} \Phi(h_{ij}) = & 1 + a_2 t_2 + a_3 t_3 + \frac{3}{4} a_4 t_2^2 + \frac{5}{4} a_5 t_2 t_3 + a_6 \left(\frac{15}{32} t_2^3 + \frac{1}{2} t_3^2 \right) + \\ & + \frac{35}{32} a_7 t_2^2 t_3 + a_8 \left(\frac{35}{128} t_2^4 + \frac{5}{6} t_2 t_3^2 \right) + a_9 \left(\frac{105}{128} t_2^3 t_3 + \frac{5}{24} t_3^3 \right) + \\ & + a_{10} \left(\frac{175}{192} t_2^2 t_3^2 + \frac{315}{2048} t_2^5 \right) + \dots; \quad a_n = \frac{2^{n-1}}{n(2n+1)!!}. \end{aligned} \quad (14)$$

Детали вычисления ряда (14) и формулы для справок приведены в Приложении 1. Как будет ясно из дальнейшего, для исследования свойств рассматриваемой системы при температурах, близких к температуре фазового перехода, поведение эффективного функционала (11) достаточно знать лишь в области не слишком больших значений инвариантов h_{ij} ($t_{2,3} < 10$). Коэффициенты ряда (14) быстро убывают с номером, поэтому в указанной области значений инвариантов $t_{2,3}$ отброшенные члены пренебрежимо малы.

Найдем однородные конфигурации поля h_{ij} , для которых функционал (11) достигает абсолютного минимума. В силу изотропии пространства имеем

$$\hat{f}_{ijkl}^{-1}(\mathbf{q})|_{q=0} = \frac{3}{2J} \delta_{ik} \delta_{jl}. \quad (15)$$

Здесь J — некоторый параметр размерности температуры; численный множитель введен из соображений удобства. Таким образом, необходимо найти абсолютный минимум выражения:

$$\begin{aligned} \frac{\tilde{H}(h_{ij})}{V} = & \frac{3T}{4J} t_2 - \ln \Phi(t_2, t_3), \\ h_{ij} = & u e_i^{(1)} e_j^{(1)} + v e_i^{(2)} e_j^{(2)} - \frac{u+v}{3} \delta_{ij}, \end{aligned} \quad (16)$$

где $e^{(k)}$ ($k=1, 2, 3$) — орты пространства состояний переменной h_{ij} . На рис. 1 функция (16) изображена линиями уровня при $T=T_c$ ($T_c=0,09786\dots J$). При этой температуре она имеет четыре равноглубоких минимума. Минимум в начале координат отвечает изотропной фазе; три других минимума физически эквивалентны (переходят друг в друга при переобозначении базисных векторов пространства состояний тензора h_{ij}) и соответствуют жидкокристаллическому состоянию. Как видно из рисунка, h_{ij}^{min} является одноосным тензором:

$$h_{ij}^{\text{min}} = h \left(e_i e_j - \frac{1}{3} \delta_{ij} \right). \quad (17)$$

Последнее справедливо при произвольной температуре, поскольку в любом из возможных фазовых состояний симметрия $\langle d_{ij} \rangle$ относительно преобразований группы вращений должна быть не ниже симметрии параметра порядка. Подставив (17) в (16) и проварьировав полученное выражение по параметру h , получим следующие результаты (см. также Приложение 2):

- в области низких температур ($T < T_c = 0,09786\dots J$) абсолютному минимуму эффективного функционала (11) отвечает значение $h_0 \neq 0$, т. е. равновесна анизотропная нематическая фаза $\langle d_{ij} \rangle \neq 0$;
- при $T > T_c$ абсолютный минимум эффективного функционала достигается при $h_0 = 0$; равновесно изотропное состояние $\langle d_{ij} \rangle = 0$;
- при $T = T_c$ экстремальное значение параметра h_0 меняется скачком на конечную величину ($\Delta h_0 = 2,92\dots$, $\Delta \bar{d} = 0,429$), т. е. фазовое превращение есть переход первого рода;
- для температур T_n^* и T_{is}^* абсолютной неустойчивости нематической и изотропной фаз, соответственно, имеем

$$\frac{T_n^* - T_c}{T_c} = 1,2\dots \cdot 10^{-2}; \quad \frac{T_c - T_{is}^*}{T_c} = 9,17\dots \cdot 10^{-2}. \quad (18)$$

Перечисленные результаты получены в приближении, эквивалентном приближению среднего поля, и согласуются с известными.

Как видно из проведенного анализа, для вычисления статистических характеристик рассматриваемой системы при температурах, близких к температуре фазового перехода, достаточно знать эффективный функционал (11) в области не слишком больших значений инвариантов $t_{2,3}$. Это обстоятельство позволяет преобразо-

вать функционал (11) к простой форме, удобной для вычислений вне рамок приближения среднего поля. Запишем (11) в виде суммы двух членов:

$$\tilde{H}\{h_{ij}\} = \int dV \left\{ \frac{1}{2} h_{ij} (T \hat{f}_{ijkl}^{-1} - T_c \hat{f}_{ijkl}^{-1} |_{q=0}) h_{kl} + G(t_2, t_3) \right\}, \quad (19)$$

$$G(t_2, t_3) = \frac{3}{4} \frac{T_c}{J} t_2 - \ln \Phi(t_2, t_3), \quad (20)$$

где $\Phi(t_2, t_3)$ определена формулой (14). Всю информацию о характере взаимодействия молекул системы содержит ядро квадратичной формы в (19); функция $G(t_2, t_3)$ (20) универсальна. Она определяется только законом изменения параметра порядка при преобразованиях группы вращений и не зависит от каких-либо параметров. Функцию (20) удобно аппроксимировать полиномом $P(t_2, t_3)$. Коэффициенты x_ν полинома:

$$P(t_2, t_3) = \frac{\lambda_c \tau_0}{2} \left[t_2 + x_3 \frac{t_2^{(0)}}{t_3^{(0)}} t_3 + x_4 \frac{(t_2)^2}{t_2^{(0)}} + x_5 \frac{t_2 t_3}{t_3^{(0)}} + x_6^{(1)} \frac{(t_2)^3}{(t_2^{(0)})^2} + \right. \\ \left. + x_6^{(2)} \frac{t_2^{(0)}}{(t_3^{(0)})^2} t_3^2 + x_7 \frac{(t_2)^2 t_3}{t_2^{(0)} t_3^{(0)}} + x_8^{(1)} \frac{(t_2)^4}{(t_2^{(0)})^3} + x_8^{(2)} \frac{t_2 (t_3)^2}{(t_3^{(0)})^2} + \dots \right]; \quad (21)$$

$$\lambda_c = \frac{3T_c}{2J}, \quad \tau_0 = \frac{T_c - T_{is}^*}{T_c}, \quad t_2^{(0)} = \frac{2}{3} h_0^2, \quad t_3^{(0)} = \frac{2}{9} h_0^3.$$

определим, потребовав, чтобы в окрестности точек минимумов функции (20) разложения аппроксимирующего полинома и точной функции в ряд совпадали до членов заданного порядка. Детали вычисления коэффициентов полиномов, аппроксимирующих функцию (20), изложены в Приложении 2. Нетрудно убедиться, что в области вероятных значений инвариантов $t_{2,3}$ уже простейший аппроксимирующий полином

$$P_4(t_2, t_3) = \frac{\lambda_c \tau_0}{2} \left[t_2 - 2 \frac{t_2^{(0)}}{t_3^{(0)}} t_3 + \frac{(t_2)^2}{t_2^{(0)}} \right] \quad (22)$$

приближает функцию (20) с точностью не хуже нескольких процентов. Ненулевые коэффициенты x_ν в этом случае есть: $x_3 = -2$, $x_4 = 1$. Полином (21) с коэффициентами

$$x_3 = -1.83785, \quad x_4 = 0.53713, \quad x_5 = 0.37396, \quad x_6^{(1)} = -0.03634, \\ x_6^{(2)} = 0.06228, \quad x_7 = -0.13306, \quad x_8^{(1)} = 0.02673, \quad x_8^{(2)} = 0.00714 \quad (23)$$

в этой области практически совпадает с точной функцией (см. Приложение 2).

Из сказанного ясно, что при температурах $T \sim T_c$ относительный вес конфигураций поля h_{ij} , вероятных в обоих фазовых состояниях, можно правильно задать, используя в эффективном гамильтониане вместо функции (20) аппроксимирующий полином. В простейшем приближении соответствующий полином содержит лишь три члена; несколько более громоздкое выражение (21) с коэффициентами (23) обеспечивает очень высокую точность аппроксимации. Как видим, коэффициенты аппроксимирующего полинома численно невелики по сравнению с коэффициентом при квадратичном по h_{ij} члене и быстро убывают с номером. Очевидно, дальнейшее уточнение аппроксимирующего полинома приведет в конечном счете к пренебрежимо малым поправкам к значениям статистических характеристик системы. Таким образом, в выражении (10) для производящего функционала корреляционных функций параметра ориентационного порядка эффективный гамильтониан $\tilde{H}\{h_{ij}\}$ в общем случае может быть записан в следующем виде:

$$\tilde{H}\{h_{ij}\} = \int dV \left[\frac{1}{2} h_{ij} (T \hat{f}_{ijkl}^{-1} - T_c \hat{f}_{ijkl}^{-1} |_{q=0}) h_{kl} + P_k(t_2, t_3) \right], \quad (24)$$

где порядок k аппроксимирующего полинома определяется необходимой точностью вычислений. Напомним, что аппроксимирующий полином есть функция симметричной бесследовой части поля h_{ij} , тогда как в первом члене в (24) фигурирует тензор h_{ij} общего вида. Нетрудно видеть, однако, что интегралы в (10) по антисимметричной части поля h_{ij} и его следу гауссовы и легко вычисляются. При этом ядро формы, квадратичной по симметричной части поля h_{ij} , в общем случае перенормируется. Если (как это будет сделано ниже) описывать взаимодействие молекул в одноконстантном приближении, то интегралы по симметричной, антисимметричной частям поля h_{ij} и его следу факторизуются, и два последних могут быть включены в нормирующий множитель. При этом эффективный гамильтониан (24) можно считать функцией только симметричной относительно перестановки индексов и бесследовой части поля $h_{ij}(\mathbf{R})$.

Таким образом, производящий функционал (6) системы взаимодействующих одноосных жестких молекул сведен к интегралу (10) по полю $h_{ij}(\mathbf{R})$ с эффективным гамильтонианом (24), в котором полином P_k есть функция симметричной части тензора h_{ij} .

ОДНОКОНСТАНТНОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

Ради компактности формул в этом разделе тензор $J_{ijkl}(\mathbf{R})$, описывающий взаимодействие молекул системы, выбирается простейшим по структуре.

Тензор $J_{ijkl}(\mathbf{R})$, фигурирующий в формуле (3), для изотропного пространства и симметричного бесследового поля параметра порядка d_{ij} в общем случае есть

$$J_{ijkl}(\mathbf{q}) = \frac{1}{2} J_1(\mathbf{q}) (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) + \frac{1}{4} J_2(\mathbf{q}) \times \\ \times (q_j q_l \delta_{ik} + q_j q_k \delta_{il} + q_i q_k \delta_{jl} + q_i q_l \delta_{jk}) + J_3(q) q_i q_j q_k q_l.$$

Будем, однако, полагать

$$J_{ijkl}(\mathbf{q}) = \frac{2}{3} J \cdot f(q) \delta_{ik} \delta_{jl}; \quad f(0) = 1. \quad (25)$$

В этом случае первый член в эффективном гамильтониане (24) принимает следующий вид:

$$\int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{\lambda_c}{2} \left[\frac{T}{T_c} f^{-1}(q) - 1 \right] h_{ij}(\mathbf{q}) h_{ij}(-\mathbf{q}). \quad (26)$$

После интегрирования в выражении (10) по антисимметричной части поля $h_{ij}(\mathbf{R})$ и его следу (тензор λ_{ij} согласно (6) можно считать симметричным и бесследовым) производящий функционал принимает следующую форму:

$$Z\{\lambda_{ij}\} = \tilde{N} \exp \left\{ - \frac{3T}{4J} \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} f^{-1}(q) \lambda_{ij}(\mathbf{q}) \lambda_{ij}(-\mathbf{q}) \right\} \times \\ \times \int Dh_{ij} \delta(h_{ii}) \delta(h_{ij} - h_{ji}) \cdot \exp \left[- \tilde{H}(h_{ij}) + \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} x_{ij} h_{ij} \right]. \quad (27)$$

δ -функции под знаком функционального интеграла в (27) обеспечивают интегрирование по конфигурациям, для которых поле $h_{ij}(\mathbf{R})$ симметрично относительно перестановки индексов и бесследово в каждой точке \mathbf{R} . Для дальнейших вычислений удобно воспользоваться стандартным представлением δ -функции, а именно, вместо δ -функций под знаком интеграла включим в эффективный гамильтониан следующие члены:

$$\lambda_c \tau_0 \int dV \left[\frac{1}{4\alpha} (h_{ij} - h_{ji})^2 + \frac{1}{2\beta} h_{ii}^2 \right]. \quad (28)$$

Параметры α и β после вычисления физических характеристик системы следует положить равными нулю, что обеспечит выполнение упомянутых требований. Функцию $f^{-1}(\mathbf{q})$ в (26) естественно разложить в ряд, ограничившись членами до квадратичных по \mathbf{q} :

$$f^{-1}(\mathbf{q}) = 1 + q^2 a^2 + \dots$$

Здесь a — характерный радиус взаимодействия частиц, измеренный в единицах среднего межмолекулярного расстояния. Положим $T = T_c$ всюду, кроме члена нулевой степени по \mathbf{q} ; при этом квадратичная по h_{ij} часть эффективного гамильтониана (с учетом квадратичного члена аппроксимирующего полинома (21)) примет вид

$$\frac{\lambda_c}{2} \int dV \left[a^2 (\partial_k h_{ij})^2 + \tau^* h_{ij}^2 + \frac{\tau_0}{2\alpha} (h_{ij} - h_{ji})^2 + \frac{\tau_0}{\beta} h_{ii}^2 \right], \\ \tau^* = \tau + \tau_0 = \frac{T - T_{is}}{T_c}. \quad (29)$$

Как видно из формул (21) и (29), поле h_{ij} , удобно нормировать на величину h_0 , а линейный размер измерять в единицах величины $a/\sqrt{\tau_0}$. Выполнив замены:

$$\frac{h_{ij}}{h_0} \rightarrow h_{ij}, \quad \frac{\sqrt{\tau_0}}{a} x \rightarrow x,$$

окончательно получим

$$Z\{\lambda_{ij}\} = \tilde{N} \exp \left\{ - \frac{1}{2\theta h_0^2 \tau_0} \int dV [\tau_0 (\partial_k \lambda_{ij})^2 + \lambda_{ij}^2] \right\} \times \\ \times \int Dh_{ij} \exp \left[- \frac{\tilde{H}(h_{ij})}{\theta} + \frac{1}{\theta h_0 \tau_0} \int dV (\tau_0 \partial_k h_{ij} \partial_k \lambda_{ij} + h_{ij} \lambda_{ij}) \right], \quad (30)$$

где

$$\tilde{H}(h_{ij}) = \int dV \left\{ \frac{1}{2} \left[(\partial_k h_{ij})^2 + \kappa(\tau) t_2 + \frac{1}{2\alpha} (h_{ij} - h_{ji})^2 + \frac{1}{\beta} (h_{ii})^2 \right] + \right. \\ \left. + \sum_{v=3}^k g_v Q_v(t_2, t_3) \right\}; \quad \kappa(\tau) = 1 + \frac{\tau}{\tau_0}; \quad \theta = \frac{\tau_0^{1/2}}{\lambda_c h_0^2 a^3}. \quad (31)$$

Коэффициенты g_ν определяются из (21) при выполнении указанной замены переменных. Для простейшего аппроксимирующего полинома (22) ненулевые коэффициенты имеют следующие значения:

$$g_3 = -3, \quad g_4 = 0.75. \quad (32)$$

В случае полинома (21) с коэффициентами (23) получим:

$$\begin{aligned} g_3 &= -2.757, & g_4 &= 0.403, & g_5 &= 0.841, & g_6^{(1)} &= -0.041, \\ g_6^{(2)} &= 0.420, & g_7 &= -0.449, & g_8^{(1)} &= 0.045, & g_8^{(2)} &= 0.047. \end{aligned} \quad (33)$$

Значения коэффициентов в (33) приведены с точностью до 0.001.

Параметр θ , фигурирующий в (30), естественно назвать эффективной температурой. Эта величина:

$$\theta = \frac{\tau_0^{1/2}}{\lambda_e h_0^2 a^3} = \frac{0.24}{a^3},$$

зависит от единственного параметра задачи a — характерного масштаба взаимодействия молекул нематика, измеренного в единицах среднего расстояния между ними. Параметр a заведомо не может быть существенно меньше единицы, также как не должен быть для реальных систем и слишком большим. Наиболее вероятные его значения лежат в пределах от одной до нескольких единиц. Для таких значений a эффективная температура θ мала по сравнению с единицей. Поскольку коэффициенты эффективного гамильтониана по величине порядка единицы, то можно надеяться, что статистические характеристики системы могут быть вычислены в виде низкотемпературного разложения по θ .

Таким образом, производящий функционал корреляционных функций поля параметра ориентационного порядка $d_{ij}(\mathbf{R})$ (6) (и, в частности, статсумма системы) сведен к выражению (30) с эффективным гамильтонианом формальной переменной $h_j(\mathbf{R})$. При этом статистические характеристики поля параметра ориентационного порядка могут быть вычислены с учетом флуктуаций в виде разложений по параметру θ — эффективной температуре. Очевидно, что используемый подход допускает обобщения задачи на случай неодносных молекул, более сложных законов их взаимодействия, позволяет учитывать взаимодействие с другими степенями свободы системы.

АНОМАЛИИ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК СИСТЕМЫ В ТОЧКЕ ПЕРЕХОДА

В этом разделе устанавливается критерий применимости приближения среднего поля для рассматриваемой модели и в младшем порядке по параметру задачи вычисляются флуктуационные поправки интенсивности рассеяния излучения и аномальной части теплоемкости.

После выполненных преобразований статсумма рассматриваемой системы:

$$Z = \tilde{N} \int Dh_{ij} \exp\left\{-\frac{\tilde{H}}{\theta}\right\}, \quad (34)$$

где $\tilde{H}(h_{ij})$ — эффективный гамильтониан (31). Как было показано выше в приближении среднего поля, система, описываемая этой статсуммой, испытывает фазовый переход первого рода, что, очевидно, верно в пределе $\theta \rightarrow 0$. При конечной величине параметра θ возникает вопрос о справедливости этого и других результатов приближения среднего поля. Для выяснения степени их корректности и оценки величины флуктуационных поправок необходимо получить критерий, аналогичный критерию Гинзбурга — Ландау. Приближение среднего поля отвечает полному пренебрежению флуктуациями поля $h_j(\mathbf{R})$ при интегрировании в статсумме (34). Его можно считать хорошим, если коэффициенты эффективного гамильтониана крупномасштабных степеней свободы системы, получаемого интегрированием в статсумме по вероятным флуктуациям меньших масштабов, мало отличаются от своих исходных значений. Предположим параметр θ малым и вычислим в младшем порядке теории возмущений перенормировку коэффициентов эффективного гамильтониана, выполнив в статсумме интегрирование по флуктуациям поля $h_j(\mathbf{R})$ конечных масштабов. Для полноты картины такой подсчет необходимо проделать для каждого из возможных фазовых состояний. Мы, однако, ограничимся исследованием изотропной фазы, причем аппроксимирующий полином в гамильтониане будем предполагать простейшим.

Линейные по параметру θ поправки к кубичным и четверным по полю $h_j(\mathbf{R})$ вершинам эффективного гамильтониана определяются однопетлевыми графиками рис. 3. Математическое выражение, соответствующее в импульсном представлении данному графику, вычисляется по следующим правилам:

- внешним линиям графика сопоставляются нулевые фурье-гармоники поля $h_{ij}(\mathbf{R})$;
- внутренним линиям сопоставляются функции:

$$G_{ijkl} = \frac{\theta}{q^2 + \kappa(\tau)} \cdot S_{ijkl},$$

$$S_{ijkl} = \frac{1}{2} \left(\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \delta_{kl} \right);$$

- по протекающему по петле импульсу проводится интегрирование;
- кубичной и четверной вершинам сопоставляются множители:

$$\frac{g_3}{\theta}; \quad -\frac{g_4}{\theta},$$

- соответственно; кронекеровы δ -функции вершин свертывают индексы, приписываемые линиям, которые заканчиваются в этой вершине;
- каждый график домножается на соответствующий комбинаторный множитель.

Простые выкладки дают следующие величины перенормировки коэффициентов g_3 и g_4 :

$$\frac{\delta g_3}{g_3} = -\frac{3\theta}{\pi\sqrt{\kappa}} \left(g_4 + \frac{3g_3^2}{64\kappa} \right),$$

$$\frac{\delta g_4}{g_4} = -\frac{\theta}{2\pi\sqrt{\kappa}} \left(13g_4 - \frac{33}{8} \frac{g_3^2}{\kappa} + \frac{225}{512} \frac{g_3^4}{\kappa^2 g^4} \right). \quad (35)$$

В приближении среднего поля области равновесного существования изотропной фазы соответствуют значения $\kappa(\tau) \geq 1$. Подставив значения коэффициентов g_3, g_4 в выражения (35) и положив $\kappa=1$, получим следующие численные оценки величин их относительных поправок:

$$\left. \frac{\delta g_3}{g_3} \right|_{\kappa=1} \simeq -\theta; \quad \left. \frac{\delta g_4}{g_4} \right|_{\kappa=1} \simeq -3\theta. \quad (36)$$

Таким образом, критерием применимости приближения среднего поля действительно является численная малость параметра θ . Как уже отмечалось, для реальных физических систем наиболее вероятны значения этого параметра в пределах 0.1—0.01, так как ха-

рактерный радиус взаимодействия молекул должен быть сравним со средним расстоянием между ними. Для таких значений параметра θ приближение среднего поля является хорошим нулевым приближением для описания фазового перехода в пространстве размерности $d=3$, а физические характеристики рассматриваемой модельной системы могут быть представлены в виде разложений в ряд по этому параметру.

Для того, чтобы выяснить, насколько адекватно рассматриваемая модель описывает переход нематик—изотропная жидкость в реальных физических системах, вычислим некоторые ее измеримые характеристики, удерживая младшие по параметру задачи флуктуационные поправки. В окрестности точки перехода подробно измерялись интенсивность рассеяния поляризованного света и удельная теплоемкость [3, 4]. Как хорошо известно, первая из этих величин определяется неприводимым парным коррелятором поля параметра порядка $d_{ij}(\mathbf{R})$, а вторая аналогичным коррелятором поля плотности энергии. Согласно формулам (10, 11) упомянутые корреляторы связаны с неприводимыми парными корреляторами поля $h_{ij}(R)$ и его квадрата следующим образом:

$$\langle\langle d_{ij}(\mathbf{R}) d_{kl}(\mathbf{R}') \rangle\rangle_H \sim \langle\langle \hat{f}_{ijmn}^{-1} h_{mn}(\mathbf{R}) \hat{f}_{klpq}^{-1} h_{pq}(\mathbf{R}') \rangle\rangle_{\bar{H}},$$

$$C \sim \langle\langle \int dV dV' \frac{1}{2} h_{ij} \hat{f}_{ijkl}^{-1} h_{kl} \frac{1}{2} h_{mn} \hat{f}_{mnpq}^{-1} h_{pq} \rangle\rangle_{\bar{H}},$$

где двойные угловые скобки обозначают неприводимое среднее по ансамблю, задаваемому указанным гамильтонианом. Здесь мы ограничимся вычислением этих величин для изотропной фазы. Начнем с вычисления парного коррелятора поля $h_{ij}(\mathbf{R})$. В графической форме соответствующее разложение с точностью до линейных по параметру θ членов дано на рис. 4. Приведенными графиками можно ограничиться, если κ не слишком мало по сравнению с θ . Для достаточно малых κ это разложение, очевидно, неприменимо и не может быть использовано, например, для определения перенормированной температуры абсолютной неустойчивости фазы. Заметим, что при конечных флуктуациях в системе само понятие температуры абсолютной неустойчивости фазы теряет строгий смысл. Чисто формально она может быть определена из условия обращения в нуль знаменателя перенормированного парного коррелятора поля h_{ij} при $|q|=0$. Известно, однако, что физически неустойчивой система становится раньше благодаря флуктуациям конечных масштабов. Очевидно, сингулярную часть теплоемкости

(также, как и другие физические характеристики) следует представлять как функцию разности текущей температуры и температуры равновесного перехода. Для определения последней необходимо найти в соответствующем порядке по θ термодинамические потенциалы обеих фаз, чем мы, однако, здесь заниматься не будем. В общем случае парный коррелятор поля h_{ij} в импульсном представлении есть

$$\frac{\theta S_{ijkl}}{q^2 + \sum(\mathbf{q}, T, \theta)} \quad (37)$$

Для ожидаемых значений параметра θ использование упомянутого разложения справедливо в интервале температур, охватывающем как равновесные, так и слабометастабильные состояния изотропной фазы. В этом интервале знаменатель выражения (37) в пределе малых \mathbf{q} имеет, согласно графикам рис. 4, следующий вид:

$$\sum(0, T, \theta) = \frac{T - \tilde{T}^*}{\tau_0} - \theta \frac{21g_3^2}{16\pi^2} \left(\frac{T - \tilde{T}^*}{\tau_0} \right)^{-1/2} + \dots \quad (38)$$

Величина \tilde{T}^* , фигурирующая в (38), учитывает сдвиг относительно T_{is}^* обусловленный первым из графиков рис. 4. Очевидно, этот параметр не может рассматриваться как перенормированная температура абсолютной неустойчивости фазы.

Данные экспериментов по рассеянию излучения в окрестности точки перехода нематик—изотропная жидкость представляют, как правило, в виде зависимости обратной интенсивности аномального рассеяния от температуры. Согласно сказанному, эта зависимость в изотропной фазе должна иметь следующий вид:

$$I^{-1} \sim \chi(T) = \frac{\alpha}{\sqrt{\chi(T)}}; \quad \chi(T) = \frac{T - \tilde{T}^*}{\tau_0}; \quad \alpha = c \cdot \theta; \quad c \sim 1, \quad (39)$$

где параметры τ_0 и α подбираются из условия наилучшего соответствия экспериментальным точкам. Найденное такой аппроксимацией значение коэффициента α позволит судить о величине параметра θ в реальной системе. Выражение (39) справедливо в области значений температуры, в которой поправками более высокого порядка по θ можно пренебречь, т. е. для не слишком малых χ . Если для реальной физической системы параметр θ действительно имеет ожидаемое малое значение, то зависимость (39) должна хорошо описывать ход экспериментальной кривой, по крайней мере вплоть до температуры равновесного фазового перехода.

Рассмотрим флуктуационные поправки к аномальной части теплоемкости системы. Если использовать вместо затравочного коррелятора $G_{ijkl}(\mathbf{q})$ его перенормированное выражение (37), то разложение аномальной части теплоемкости в ряд с точностью до младших по параметру θ поправок задается графиками рис. 5. При свертывании по индексам третий из этих графиков обращается в нуль, а два других имеют противоположные знаки. Вычислив эти вклады и учитывая перенормировку парного коррелятора (38), получим следующее выражение для аномальной части теплоемкости:

$$C_{sing} = A \left[\frac{5}{4\pi\sqrt{\chi}} + \frac{35\theta}{8\pi^2} \left(\frac{13}{48} \frac{g_3^2}{\chi^2} - \frac{g_4}{\chi} \right) \right]. \quad (40)$$

При изменении $(T - \tilde{T}^*)$ от единицы до нуля отношение χ меняется от значения много больше единицы до нуля (при температуре равновесного перехода $\chi \sim 1$). Подставив в (40) значения постоянных $g_{3,4}$, получим, что в изотропной фазе линейная по θ поправка к теплоемкости системы проходит через нулевое значение в близкой окрестности температуры равновесного перехода. Иначе говоря, в окрестности T_c линейная по θ поправка имеет также и численную малость. Известные данные экспериментов по измерению теплоемкости в окрестности перехода нематик—изотропная жидкость следует, согласно полученным результатам, аппроксимировать зависимостью

$$C_{sing} \sim \frac{1}{\sqrt{\chi}} + \theta \left(\frac{\beta}{\chi^2} - \frac{\gamma}{\chi} \right), \quad \chi = (T - \tilde{T}^*)/\tau_0. \quad (41)$$

Проверка в комплексе соответствия предлагаемых выражений (39) и (41) экспериментальным зависимостям позволила бы решить вопрос об адекватности предлагаемой модели реальным физическим системам. Если при этом будет продемонстрирована малость параметра θ (что, по-видимому, проще сделать, проанализировав данные по рассеянию), то предложенным в этой работе методом можно будет выполнять количественный расчет статистических характеристик таких систем.

Автор выражает благодарность А.З. Паташинскому за полезное обсуждение работы и Л.Ф. Хайло за получение графической информации на ЭВМ.

Приложение 1

ФУНКЦИЯ $\Phi(h_{ij})$

Тензор h_{ij} , как было отмечено выше, можно считать симметричным относительно перестановки индексов и бесследовым. В силу этих его свойств ряд (13) принимает следующий простой вид:

$$\Phi(h_{ij}) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} h_{i_1 j_1} \dots h_{i_k j_k} \langle n_{i_1} n_{j_1} \dots n_{i_k} n_{j_k} \rangle_{\Omega}. \quad (\text{П1.1})$$

Мы воспользовались здесь формулой (1), положив $d=1$. Среднее по группе вращений от прямого произведения $2k$ единичных векторов есть

$$\langle n_{i_1} \dots n_{i_{2k}} \rangle_{\Omega} = \frac{1}{(2k+1)!!} \sum_{i_1} \delta_{i_1 i_{2k}} \dots \delta_{i_{2k-1} i_{2k}} \quad (\text{П1.2})$$

суммирование в (П1.2) проводится по всем перестановкам $2k$ индексов. Ненулевые члены ряда (П1.1) степени n по полю h_{ij} имеют, очевидно, следующий вид

$$\frac{1}{n!(2n+1)!!} C_{n_1 \dots n_l}^{k_1 \dots k_l} (t_{n_1})^{k_1} \dots (t_{n_l})^{k_l}, \quad t_n = \text{tr}(\hat{h})^n; \quad k_1 n_1 + \dots + k_l n_l = n, \quad (\text{П1.3})$$

где коэффициент $C_{n_1 \dots n_l}^{k_1 \dots k_l}$ — число способов получить данную свертку n матриц h_{ij} . Число различных способов получить свертку t_n , n матриц h_{ij} равно $2^{n-1} (n-1)!$, тогда, как нетрудно убедиться, числовой коэффициент в выражении (П1.3) равен

$$C_{n_1 \dots n_l}^{k_1 \dots k_l} = \frac{n! 2^{n-(k_1+\dots+k_l)}}{(k_1)! \dots (k_l)! (n_1)^{k_1} \dots (n_l)^{k_l}}. \quad (\text{П1.4})$$

Формулы (П1.3) и (П1.4) определяют произвольный член ряда (П1.1).

Ряд (П1.1) существенно упрощается благодаря тому, что в пространстве $d=3$ свертки t_n ($n > 3$) симметричного бесследового тензора h_{ij} выражаются через величины t_2 и t_3 . Приведем для справок формулы для t_n до $n=10$:

$$t_4 = \frac{1}{2} t_2^2; \quad t_5 = \frac{5}{6} t_2 t_3; \quad t_6 = \frac{1}{4} t_2^3 + \frac{1}{3} t_3^2; \quad t_7 = \frac{7}{12} t_2^2 t_3;$$

$$t_8 = \frac{1}{8} t_2^4 + \frac{4}{9} t_2 t_3^2; \quad t_9 = \frac{3}{8} t_2^3 t_3 + \frac{1}{9} t_3^3; \quad t_{10} = \frac{1}{16} t_2^5 + \frac{5}{12} t_2^2 t_3^2. \quad (\text{П1.5})$$

Формулы (П1.3), (П1.4) и (П1.5) сводят ряд (П1.1) к виду (14).

Приложение 2

ФУНКЦИЯ $G(t_2, t_3)$ И АППРОКСИМИРУЮЩИЕ ПОЛИНОМЫ

Для тензора h_{ij} общего вида

$$h_{ij} = u e_i^{(1)} e_j^{(1)} + v e_i^{(2)} e_j^{(2)} - \frac{u+v}{3} \delta_{ij},$$

$$e_i^{(n)} e_i^{(m)} = \delta^{mn}, \quad n, m = 1, 2, 3 \quad (\text{П2.1})$$

функция $G(t_2, t_3)$ есть функция двух переменных. Она изображена линиями уровня на рис. 1. Минимумы функции $G(u, v)$ отвечают одноосному тензору h_{ij} (18), поэтому исследуем сначала свойства функции $G(h) \equiv G(h, 0) \equiv G(0, h) \equiv G(-h, -h)$:

$$G(h) = \frac{1}{2} P h^2 + \frac{h}{3} - \ln Z(h), \quad Z(h) = \int_0^1 e^{hx^2} dx = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{h^n}{n!(2n+1)},$$

$$P = \frac{T_c}{J}. \quad (\text{П2.2})$$

Функция (П2.2) изображена на рис. 2, она имеет два равноглубоких минимума. Точные значения $P=0.097863\dots$ и $h_0=2.92236\dots$ проще всего найти численно, решив систему уравнений $G(h)=0$, $G'(h)=0$; их приближенные значения можно определить и аналитически. Действительно, из второго из названных уравнений следует, что для не слишком больших h значение постоянной P

$$P = \frac{3Z' - Z}{3hZ} = \frac{4}{45} \cdot \frac{1 + \frac{2}{21}h + \frac{2}{63}h^2 + \dots}{1 + \frac{2}{45}h^2 + \dots} \quad (\text{П2.3})$$

мало ($P \sim 0.1$), так что величина $\lambda = P \cdot h^2 / 2$ существенно меньше единицы. Потенцируя первое из уравнений (П2.3) и раскладывая $\exp \lambda$ в ряд, получим

$$\left(\frac{a_4}{3} - \frac{1}{8}P^2\right)h^2 + \frac{2}{9}a_3h + \left(\frac{2}{3}a_2 - \frac{1}{2}P\right) = 0, \quad a_n = \frac{2^{n-1}}{n \cdot (2n+1)!!} \quad (\text{П2.4})$$

В разложении удержаны члены до h^4 . При искомом значении P уравнение (П2.4) должно иметь кратный корень, т. е. его дискриминант обращается в нуль. Таким образом, получаем

$$P^3 - \frac{4}{3}a_2P^2 - \frac{8}{3}a_4P + \frac{32}{9}a_2a_4 - \frac{16}{81}a_3^2 = 0, \quad h_0 = \frac{a_3}{9\left(\frac{P^2}{8} - \frac{a_4}{3}\right)}$$

Искомый корень кубического уравнения $P=0.09724$ при этом $h_0=2.9612$. Полученные приближенные значения хорошо согласуются с приведенными выше точными.

Найдем полиномы $P(t_2, t_3)$, приближающие точную функцию $G(t_2, t_3)$. Для вычисления статистических характеристик важно наиболее точно приблизить $G(t_2, t_3)$ в окрестности ее минимумов. Потребуем поэтому, чтобы разложение аппроксимирующего полинома в ряд в окрестностях точек минимумов совпадало с разложением точной функции до членов заданного порядка. Успех приближенного вычисления величин P и h_0 позволяет предположить, что функцию $G(t_2, t_3)$ можно с хорошей степенью точности приблизить полиномом невысокой степени. Простейший полином, совпадающий с точной функцией в точках минимумов, есть

$$P_4(t_2, t_3) = \alpha t_2^{(0)} \left[\frac{t_2}{t_2^{(0)}} - 2 \frac{t_3}{t_3^{(0)}} + \left(\frac{t_2}{t_2^{(0)}} \right)^2 \right],$$

$$\alpha = \frac{\lambda_c \tau_0}{2}; \quad t_2^{(0)} = \frac{2}{3} h_0^2; \quad t_3^{(0)} = \frac{2}{9} h_0^3, \quad (\text{П2.5})$$

т. е. в обозначениях, введенных в тексте формулой (21), $x_3 = -2$, $x_4 = 1$. При выбранном значении общего коэффициента в окрестности нуля полином (П2.5) совпадает с разложением точной функции до членов квадратичных по h_{ij} . Значения вторых производных полинома (П2.5) и точной функции в точке $(u, v) = (h, 0)$ следующие:

	G	P_4		(П2.6)
Z_{uu}	0.992 γ	γ		
Z_{uv}	-0.496 γ	-0.5 γ	$\gamma = \frac{4}{3} \alpha$	
Z_{vv}	5.17 γ	7 γ		

т. е. с хорошей степенью точности совпадают. В области вероятных значений переменных u, v уже полином (П2.5) хорошо аппроксимирует точную функцию. Относительная ошибка не превышает нескольких процентов. Приведем коэффициенты полиномов шестой $P_6(t_2, t_3)$ и восьмой $P_8(t_2, t_3)$ степени по полю h_{ij} .

	P_6	P_8	(П2.7)
x_3	-1.83785	-1.83785	
x_4	0.50570	0.53713	
x_5	0.50213	0.37396	
$x_6^{(1)}$	-0.10879	-0.03634	
$x_6^{(2)}$	-0.06119	0.06228	
x_7	0.0	-0.13306	
$x_8^{(1)}$	0.0	0.02673	
$x_8^{(2)}$	0.0	0.00714	

в окрестности минимума $(0, 0)$ разложение этих полиномов в ряд совпадает с разложением точной функции, соответственно, до членов третьей и четвертой степени по h_{ij} ; в окрестности минимумов, отвечающих анизотропной фазе, разложения совпадают, соответственно, до членов второй и третьей степени. Во всей области вероятных значений h_{ij} полином $P_8(t_2, t_3)$ с разумной степенью точности совпадает с функцией $G(t_2, t_3)$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Паташинский А.З., Покровский В.Л. Флуктуационная теория фазовых переходов. — М.: Наука, 1982.
2. Кац Е.И. УФН, 1984, т.142, №1, с.99.
3. Gramsbergen E.F., Longa L., W.H.de Jeu. Phys. Rep., 1986, v.135, N4, p.195.
4. Анисимов М.А. Критические явления в жидкостях и жидких кристаллах. — М.: Наука, 1987.
5. Nelson D.R., Percovits R.A. Phys. Rev. B, 1977, v.16, p.9191.

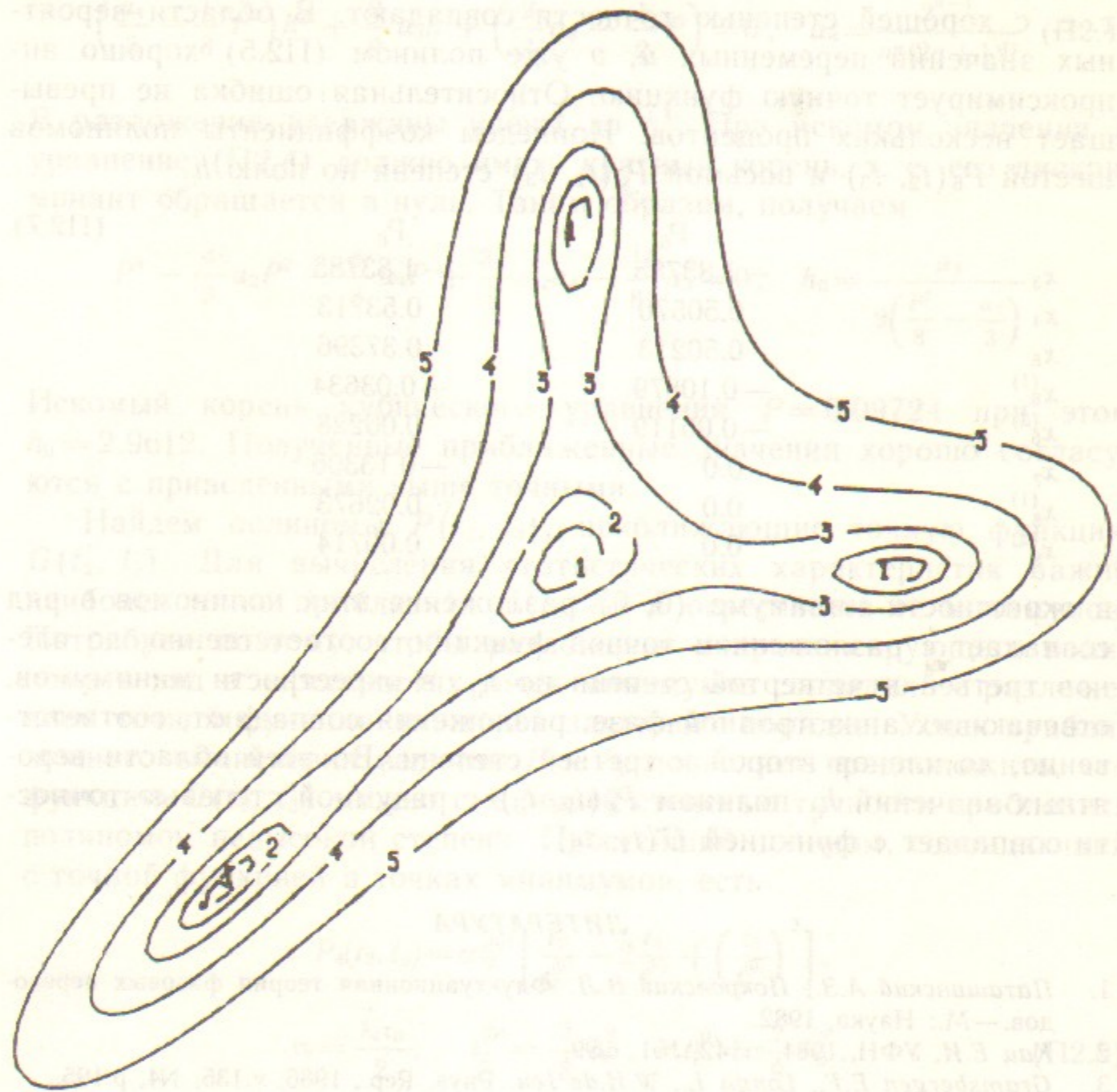


Рис. 1. Функция $G(u, v)$. Линии уровня в порядке нумерации соответствуют значениям функции: $3 \cdot 10^{-4}$; 10^{-3} ; $3 \cdot 10^{-3}$; 10^{-2} ; $3 \cdot 10^{-2}$.

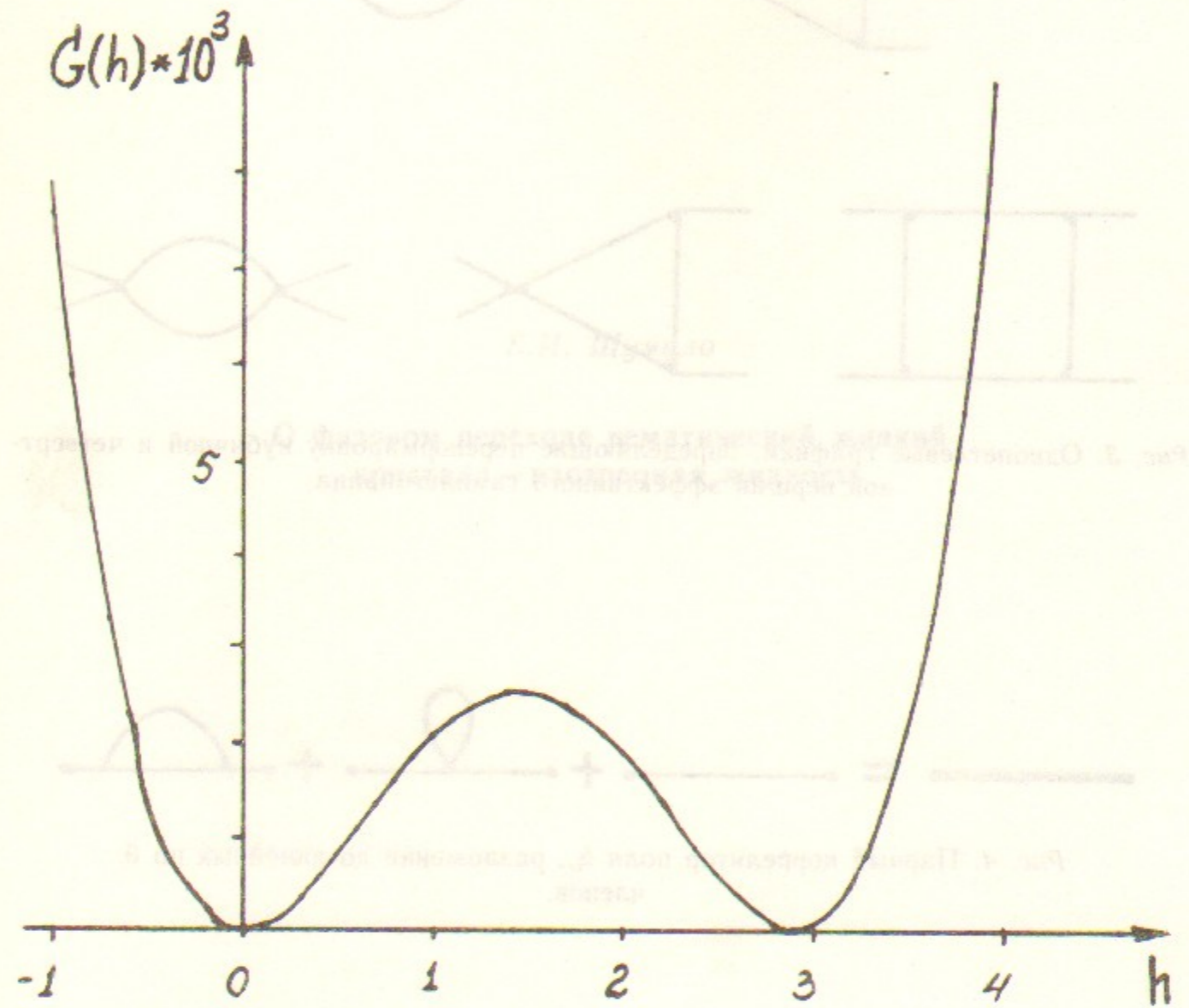


Рис. 2. Функция $G(h)$.

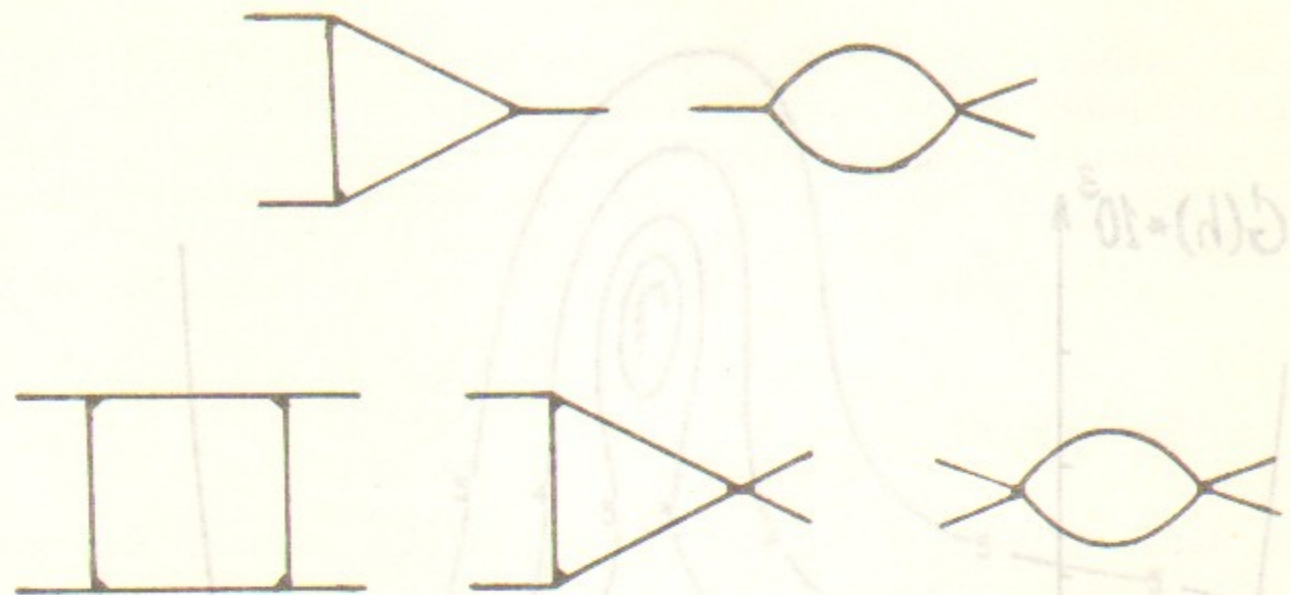


Рис. 3. Однопетлевые графики, определяющие перенормировку кубичной и четвертой вершин эффективного гамильтониана.

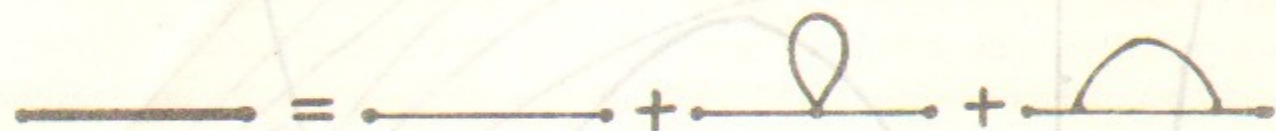


Рис. 4. Парный коррелятор поля h_{ij} , разложение до линейных по θ членов.



Рис. 5. Теплоемкость. Линейные по θ члены.

Б.И. Шумило

О фазовом переходе нематический жидкий кристалл — изотропная жидкость

Ответственный за выпуск С.Г.Попов

Работа поступила 4 сентября 1987 г.
 Подписано в печать 14.9.1987 г. МН 08388
 Формат бумаги 60×90 1/16 Объем 2,3 печ.л., 1,9 уч.-изд.л.
 Тираж 180 экз. Бесплатно. Заказ № 125

Набрано в автоматизированной системе на базе фото-наборного автомата ФА1000 и ЭВМ «Электроника» и отпечатано на ротапинтере Института ядерной физики СО АН СССР,
 Новосибирск, 630090, пр. академика Лаврентьева, 11.