

РОЗПОДІЛ ПАРАМЕТРА ПОРЯДКУ СЛАБОВПОРЯДКОВАНОЇ РІДКОЇ СИСТЕМИ З ДОМІШКАМИ

О. М. Васильєв, Н. О. Голобородько

*Київський університет імені Тараса Шевченка, фізичний факультет,
кафедра теоретичної фізики, просп. Глушкова, 6, Київ, 03022, Україна*
(Отримано 29 червня 2004 р.; в остаточному вигляді — 3 лютого 2005 р.)

Розглянуто модельну систему, що складається зі скінченної кількості прошарків. Кожен такий прошарок характеризується скалярним параметром порядку. У верхньому прошарку в малих концентраціях є макроскопічні домішки. Наявність останніх у межах моделі реалізується за рахунок нульових граничних умов. У результаті розподіл параметра порядку в цьому прошарку має неоднорідний характер. Унаслідок взаємодії параметрів порядку сусідніх прошарків домішки впливають на розподіл параметра порядку всієї системи. Розглянуто особливості такого розподілу залежно від кількості прошарків у системі.

Ключові слова: параметр порядку, фазовий перехід, радіус кореляції, тонка плівка, домішкова частинка.

PACS number(s): 05.70.Fh, 05.70.Jk, 68.15.+e

ВСТУП

Багато практично важливих систем мають прошаркову структуру, тобто складаються з певної кількості прошарків [1–4]. Часто в межах кожного з них поведінку системи характеризують за допомогою скалярного параметра порядку [5]. За таких умов можна стверджувати, що кожен прошарок є квазідвовимірною рідиною, а вся система розглядається як слабвовпорядкована рідка. При цьому її реальна фізична природа може бути різною.

З практичного погляду, зазначені слабвовпорядковані системи з прошарковою структурою можуть мати як штучне походження, так і цілком природне. Зокрема сучасні технології дають змогу отримувати системи плівок, що складаються з великої кількості (близько декількох сотень) прошарків [1]. Багато систем цього класу мають біологічну природу — це різні мембрани та ліпідні структури [2,6–8]. За певних обставин до подібних систем можна віднести й рідкий кристал, що перебуває в смектичній С-фазі [5].

Узагалі вивчення подібних систем передбачає врахування взаємодії між сусідніми прошарками як поправку до взаємодії всередині прошарку. Інакше кажучи, як правило, вважають, що взаємодія між прошарками набагато менша від взаємодії всередині прошарків. Останнє дає змогу розглядати подібні системи як такі, що мають низьку розмірність або є квазідвовимірними. Їм притаманні досить цікаві властивості, які на сьогодні відносно непогано вивчені [9–12]. Однак дуже часто системи містять домішки [3,4,8,13,14]. Особливо актуальна ця проблема для біологічних об'єктів, адже для біологічних систем прості однорідні структури є радше винятком, ніж правилом.

У цій статті розглянуто модель слабвовпорядкованої рідкої системи, що складається з N слабвовзаємодіючих прошарків, причому в першому (верхньому) прошарку наявні макроскопічні домішкові частинки,

що мають форму плоских дисків з радіусом R . Кожен прошарок характеризується рівноважним розподілом параметра порядку. Розглянуто фазу, в якій цей параметр порядку є ненульовим. Наявність домішкової частинки проявляється в тому, що на її межі значення параметра порядку вважається тотожно рівним нулеві. Отже, ці домішки можна було б інтерпретувати як укралення одної фази квазідвовимірної рідини в іншу. Однак такий підхід вимагає врахувати обмеженість розмірів зародку неупорядкованої фази, що виходить за межі нашої статті. Як уже зазначалось, концентрація домішкових частинок є малою, а саме, вона мала настільки, що неоднорідність розподілу параметра порядку, яка виникає внаслідок наявності домішок, в околі кожної окремої домішки визначається тільки нею, а впливом інших домішок можна знехтувати. Тому питання взаємного впливу домішок унаслідок деформації однорідного поля розподілу параметра порядку також є поза межами нашого дослідження.

Крім того, якщо вихідною фізичною системою, що описується цією моделлю, є смектична С-фаза рідкого кристала, як параметр порядку розглядають проєкцію директора на площину смектичного прошарку [5]. Узагалі такий параметр порядку є величиною векторною. Однак для чистої системи, тобто без домішок, у кожній точці напрямком вектора один і той самий, тому можна ввести в розгляд, замість векторного параметра порядку, скалярний. Отже, аби модель була застосовною до системи з домішками, вони мають бути такими, що не впливають на орієнтацію вектора-параметра порядку, а тільки на його модуль. Це досить сильне припущення, але цілком реальне.

Слід також звернути увагу на той факт, що, крім домішок, на характер розподілу параметра порядку можуть суттєво впливати поверхневі ефекти [6]. Тут вони не розглядаються, хоча при бажанні можуть бути враховані. Ще одне зауваження стосується того,

що в статті не аналізується вплив домішок на відстань між сусідніми прошарками. Інакше кажучи, вважається, що товщина домішок дорівнює товщині прошарку, через що його викривлення в напрямку, перпендикулярному площині прошарків, немає. Урахування цього ефекту вимагає застосування складніших моделей [3, 4, 8].

Нижче введено модельний гамільтоніан, на основі якого вивчається рівноважний розподіл параметра порядку системи з домішками. Спочатку знаходимо розподіл параметра порядку для окремого прошарку, що містить домішки. Далі отримуємо розв'язки для часткового випадку системи з $N = 2$ прошарків. Окрім чисто математичного інтересу, подібні результати мають і певне практичне значення, оскільки, скажімо, велика кількість мембран складається саме з двох прошарків. Далі отримані результати поширюються на загальний випадок системи з N прошарків.

МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ

Як базову математичну модель, на основі якої будемо досліджувати слабвовпорядковану рідку систему з домішками, розглянемо спрощений варіант феноменологічної моделі фероелектричного рідкого кристала [5]. Зокрема будемо вважати суттєвою взаємодію тільки сусідніх прошарків. Якщо через $\phi_i(\mathbf{r})$ позначити параметр порядку в точці \mathbf{r} для прошарку з номером i , $\mathbf{r} \in \mathbf{R}^2$, то частина вільної енергії, залежна від розподілу параметра порядку, визначатиметься як

$$\delta F\{\phi\} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \int \left[a\phi_i(\mathbf{r})^2 + \frac{1}{2}c\phi_i(\mathbf{r})^4 + b(\nabla\phi_i(\mathbf{r}))^2 + 2\beta\phi_i(\mathbf{r})(\phi_{i+1}(\mathbf{r}) + \phi_{i-1}(\mathbf{r})) \right] d\mathbf{r}, \quad (1)$$

і в цій формулі для системи з N прошарків слід покласти $\phi_0(\mathbf{r}) = \phi_{N+1}(\mathbf{r}) \equiv 0$. У формулі (1) параметр b визначає взаємодію неоднорідностей розподілу параметра порядку в межах прошарку, параметр β відповідальний за взаємодію параметрів порядку сусідніх прошарків, а коефіцієнти a та c пов'язані зі взаємодією параметра порядку в межах прошарку. Причому в точці фазового переходу для двовимірної системи параметр a залежить від температури, згідно з загальноприйнятими припущеннями, в спосіб $a = a_0(T - T_0)$, де a_0 не залежить від температури, T — температура, а T_0 — температура фазового переходу (наприклад, зі смектичної С-фази в А-фазу).

Шляхом варіації параметра порядку отримуємо таку систему диференціальних рівнянь:

$$-b\Delta\phi_i(\mathbf{r}) + a\phi_i(\mathbf{r}) + c\phi_i(\mathbf{r})^3 + \beta(\phi_{i+1}(\mathbf{r}) + \phi_{i-1}(\mathbf{r})) = 0, \quad (2)$$

$i = 1, 2, \dots, N$. Наявність домішок у прошарку з $i = 1$ врахуємо за допомогою адекватних граничних умов. Зокрема, через малу концентрацію домішок зосере-

димось на вивченні розподілу параметра порядку в околі окремої домішкової частинки i , не обмежуючи загальності, можемо вважати, що центр цієї домішки розташований на початку координат. Останнє дає змогу розглядати параметр порядку залежним лише від модуля відстані, тобто $\phi_i = \phi_i(r)$, а граничні умови записати у вигляді

$$\phi_1(r = R) = 0, \quad (3)$$

де R , як уже зазначалося, є радіусом домішкової частинки. Далі розглянемо декілька часткових випадків.

ДВОВИМІРНА СИСТЕМА

Найпростіший випадок спостерігаємо, коли система складається всього з одного прошарку, тобто коли $N = 1$. Для такої системи маємо рівняння

$$\Delta\phi_1(\mathbf{r}) - \alpha\phi_1(\mathbf{r}) - \gamma\phi_1(\mathbf{r})^3 = 0, \quad (4)$$

де введено позначення $\alpha = a/b$ і $\gamma = c/b$. Рівняння розв'яжемо наближено, поклавши $\phi_1(r) = \phi_{(0)} + \delta\phi(r)$, де $\delta\phi(r)$ є малим відхиленням від рівноважного ненульового значення $\phi_{(0)}$, яке, своєю чергою, є розв'язком рівняння

$$\alpha\phi_{(0)} + \gamma\phi_{(0)}^3 = 0, \quad (5)$$

тобто $\phi_{(0)} = \sqrt{-\alpha/\gamma} = \sqrt{-a/c}$. Цей розв'язок існує, очевидно, при $a < 0$, тобто розглядаємо низькотемпературну фазу. Отже, для $\delta\phi(r)$ маємо в лінійному наближенні таке рівняння:

$$\Delta\delta\phi(r) - (\alpha + 3\gamma\phi_{(0)}^2)\delta\phi(r) = \Delta\delta\phi(r) - \kappa^2\delta\phi(r) = 0, \quad (6)$$

де $\kappa^2 = 2|\alpha|$. Фундаментальний розв'язок рівняння (6) можна записати у вигляді

$$\delta\phi(r) = AK_0(\kappa r) + BI_0(\kappa r), \quad (7)$$

де $K_0(x)$ і $I_0(x)$ є модифікованими функціями Бесселя другого й першого роду, а константи A та B визначаються з граничних умов. Зокрема, розв'язок має бути обмеженим на нескінченності, а з умови $\phi_1(r = R) = 0$ маємо $\delta\phi(r = R) = -\phi_{(0)}$. Отже, отримуємо

$$\delta\phi(r) = -\frac{\phi_{(0)}K_0(\kappa r)}{K_0(\kappa R)}, \quad (8)$$

а

$$\phi_1(r) = \phi_{(0)} \left(1 - \frac{K_0(\kappa r)}{K_0(\kappa R)} \right) \quad (9)$$

при $r \geq R$ і

$$\phi_1(r) = 0 \quad (10)$$

при $r < R$. Слід зауважити, що розподіл параметра порядку суттєво залежить від параметра κ , який, своєю чергою, залежить від температури. Тому при наближенні до точки фазового переходу розподіл параметра порядку змінюється. Така залежність для різних значень κ наведена на рис. 1. При цьому прийнято $R = 1$ нм.

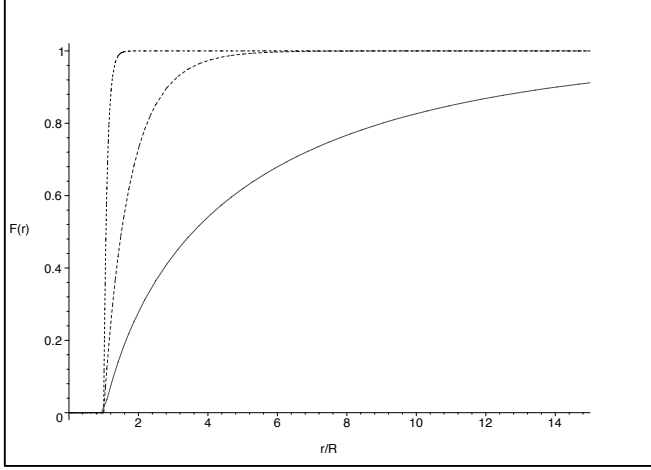


Рис. 1. Розподіл параметра порядку. Позначено $F(r) = \phi_1(r)/\phi_{(0)}$, неперервна лінія для значення $\kappa = 0.1$ нм⁻¹, штрихована для $\kappa = 1$ нм⁻¹ і штрихпунктирна для $\kappa = 10$ нм⁻¹.

Таким чином, зі зменшенням параметра κ (тобто при наближенні до точки фазового переходу) ділянка неоднорідності параметра порядку збільшується. У самій точці переходу, як і слід очікувати, параметр порядку дорівнює нулеві. Із зазначеного, зокрема, впливає, що в близькому okolí фазового переходу слід урахувати взаємний вплив домішок, навіть якщо вони наявні в незначних концентраціях. Тому надалі вважатимемо, що система не перебуває в критичному стані і величина параметра κ^{-1} , який характеризує радіус кореляції в межах прошарку, близько декількох радіусів частинки (або менше).

СИСТЕМА З ДВОХ ПРОШАРКІВ

За наявності двох прошарків маємо систему рівнянь

$$\Delta\phi_1(r) - \alpha\phi_1(r) - \gamma\phi_1(r)^3 - h\phi_2(r) = 0, \quad (11)$$

$$\Delta\phi_2(r) - \alpha\phi_2(r) - \gamma\phi_2(r)^3 - h\phi_1(r) = 0, \quad (12)$$

де позначено $h = \beta/b$. За аналогією до попереднього випадку, запишемо параметр порядку у вигляді $\phi_{1,2} = \phi_{(0)} + \delta\phi_{1,2}(r)$ і $\phi_{(0)}$ при цьому задовольняє рівняння

$$(\alpha + h)\phi_{(0)} + \gamma\phi_{(0)}^3 = 0. \quad (13)$$

Ненульовим розв'язком рівняння (13) є $\phi_{(0)} = \sqrt{-(\alpha + h)/\gamma}$. Звідси, зокрема, впливає, що наявність додаткового прошарку приводить до зміни критичної температури. А саме, нова критична температура $T_0^* = T_0 - h/a_0$. Отже, при додатному значенні параметра міжпрошаркової взаємодії h температура переходу зменшується, при від'ємному — підвищується.

Що стосується розподілу параметра порядку в другому прошарку, то його можна знайти з рівняння (13), записуючи закон розподілу параметра порядку у вигляді $\phi_i = \phi_{(0)} + \delta\phi_i$, $i = 1, 2$ та враховуючи граничні умови в першому прошарку. Отримуємо таке:

$$\delta\phi_1(q) = \frac{\eta}{2} \left(\frac{1}{q^2 + \kappa_+^2} + \frac{1}{q^2 + \kappa_-^2} \right), \quad (14)$$

де константа η визначається з граничних умов, що дає

$$\eta = -\frac{4\pi\phi_{(0)}}{K_0(\kappa_+R) + K_0(\kappa_-R)}, \quad (15)$$

а параметри $\kappa_{\pm}^2 = \kappa^2 \pm h$. Отже, розподіл параметра порядку в першому прошарку має вигляд

$$\phi_1(r) = \phi_{(0)} \left(1 - \frac{K_0(\kappa_+r) + K_0(\kappa_-r)}{K_0(\kappa_+R) + K_0(\kappa_-R)} \right). \quad (16)$$

Фур'є-образ відхилення параметра порядку від рівноважного значення в другому прошарку визначається через Фур'є-образ відхилення параметра порядку від рівноважного значення в першому прошарку (з домішкою) за формулою

$$\delta\phi_2(q) = -\frac{h\delta\phi_1(q)}{q^2 + \kappa^2}. \quad (17)$$

При цьому, строго кажучи, слід узяти до уваги те, що вираз (16) справедливий лише для значень $r \geq R$. Тому формулу (14) треба було б уточнити, а саме, врахувати, що при $r < R$ маємо $\phi_1(r) = -\phi_{(0)}$. Проте, з одного боку, це призведе до суттєвого ускладнення аналітичних виразів, а з іншого — для домішкових частинок невеликого розміру (порівняно з радіусом кореляції в системі), як показує аналіз, поправка є незначною. Через те тут і надалі для спрощення результату як Фур'є-образ відхилення параметра порядку в першому прошарку з домішковою частинкою будемо використовувати вирази, які не враховують особливостей взаємодії прошарків у ділянці, що зайнята домішковою частинкою.

Отже, для відхилення параметра порядку від рівноважного значення в другому прошарку отримуємо

$$\delta\phi_2(q) = \frac{2\pi\phi_{(0)}}{K_0(\kappa_+R) + K_0(\kappa_-R)} \left(\frac{1}{q^2 + \kappa_-^2} - \frac{1}{q^2 + \kappa_+^2} \right). \quad (18)$$

Розподіл параметра порядку в другому прошарку матиме вигляд

$$\phi_2(r) = \phi_{(0)} \left(1 + \frac{K_0(\kappa_- r) - K_0(\kappa_+ r)}{K_0(\kappa_+ R) + K_0(\kappa_- R)} \right). \quad (19)$$

На рис. 2 наведено поверхню розподілу параметра порядку навколо домішкової частинки в першому прошарку, а на рис. 3 — розподіл параметра порядку в другому прошарку.

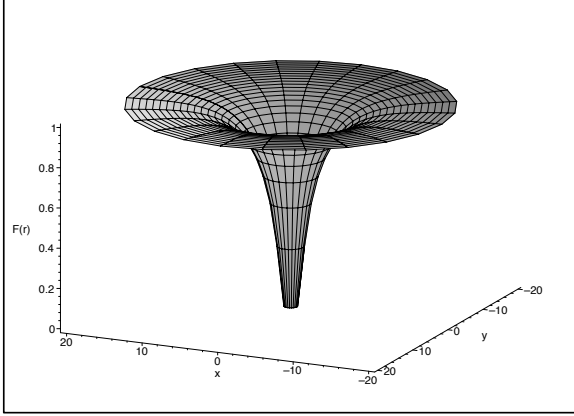


Рис. 2. Розподіл параметра порядку в першому прошарку. Позначено $F(r) = \phi_1(r)/\phi_{(0)}$, значення $\kappa = 0.25 \text{ нм}^{-1}$, радіус домішки $R = 1 \text{ нм}$, параметр $h = 0.01 \text{ нм}^{-2}$.

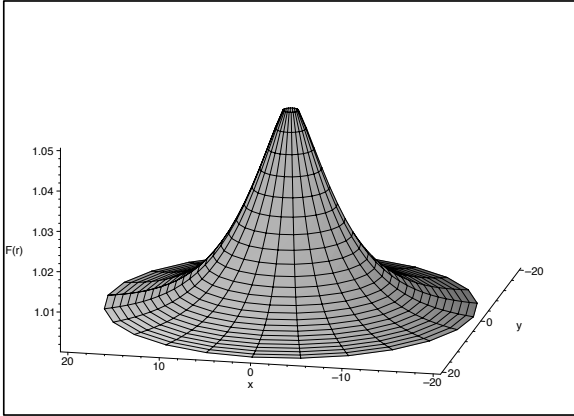


Рис. 3. Розподіл параметра порядку в другому прошарку. Позначено $F(r) = \phi_2(r)/\phi_{(0)}$, значення $\kappa = 0.25 \text{ нм}^{-1}$, радіус домішки $R = 1 \text{ нм}$, параметр $h = 0.01 \text{ нм}^{-2}$.

Для додатного параметра h , що характеризує взаємодію між прошарками, в ділянці під домішковою частинкою значення параметра порядку, як видно на рис. 3, зростає порівняно з рівноважним розподілом. Зокрема, для використаних значень $h = 0.01 \text{ нм}^{-2}$ і $\kappa = 0.25 \text{ нм}^{-1}$ таке зростання становить близько 5 відсотків. Крім того, з порівняння рис. 2 та 3 мож-

на зробити висновок, що в другому прошарку ділянка значного відхилення параметра порядку від рівноважного значення суттєво перевищує розміри частинки, хоча сама деформація, вочевидь, у першому прошарку більша.

Якщо розглянути від'ємне значення h , то для другого прошарку поверхня розподілу параметра порядку буде вигнутою вниз, тобто порівняно з розглянутою вище ситуацією вона буде дзеркально симетричною щодо площини рівноважного значення параметра порядку.

СИСТЕМА З ВЕЛИКОЇ КІЬКОСТІ ПРОШАРКІВ

Розглянемо загальний випадок, коли система складається з N прошарків і в першому прошарку наявна домішкова частинка. Як і раніше, дослідимо відхилення параметра порядку від рівноважного значення для кожного прошарку. Рівноважні значення $\phi_{(0),i}$ є ненульовими розв'язками системи рівнянь

$$\alpha\phi_{(0),i} + \gamma\phi_{(0),i}^3 + h(\phi_{(0),i+1} + \phi_{(0),i-1}) = 0. \quad (20)$$

Розв'язки можна шукати наближеними методами, однак це питання виходить за межі дослідження. Зазначимо тільки, що вони мають певну симетрію. Зокрема, спостерігаємо, що $\phi_{(0),i} = \phi_{(0),N-i}$. Однак надалі будемо для зручності вважати всі $\phi_{(0),i}$ різними — це дасть змогу отримати загальніші результати.

Як зазначалось вище, записуємо функцію розподілу параметра порядку у вигляді $\phi_i(r) = \phi_{(0),i} + \delta\phi_i(r)$. У лінійному за $\delta\phi_i(r)$ наближенні маємо таку систему рівнянь:

$$\Delta\delta\phi_i(r) - \kappa_i^2\delta\phi_i(r) - h(\delta\phi_{i+1}(r) + \delta\phi_{i-1}(r)) = 0, \quad (21)$$

де $\kappa_i^2 = \alpha + 3\gamma\phi_{(0),i}^2$. Стосовно правої частини системи рівнянь (21) слід зробити одне суттєве зауваження. Річ у тому, що для першого прошарку шукаємо розв'язок для $r \geq R$, тому якщо підійти до розв'язку системи формально і шукати його для довільних r , то в правій частині першого рівняння слід замінити нуль на дельта-функцію (з певним коефіцієнтом, який вибирається з граничних умов). Цей технічний прийом дозволить суттєво спростити подальші розрахунки.

Таким чином, розглядаємо систему рівнянь, яку в матричному вигляді можна записати так:

$$\hat{E}\Delta\delta\vec{\phi}(r) - \hat{A}\delta\vec{\phi}(r) = -\eta\epsilon\delta(\mathbf{r}), \quad (22)$$

де через $\delta\vec{\phi}(r)$ позначено вектор-стовпчик, елементами якого є $\delta\phi_i(r)$, $i = 1, 2, \dots, N$. Через \hat{E} позначено одиничну матрицю рангу N , а матриця \hat{A} має тридіагональну структуру: діагональ матриці формується елементами κ_i^2 , а сусідні з діагоналлю елементи однакові й дорівнюють h , тобто

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} \kappa_1^2 & h & 0 & 0 & 0 & 0 \\ h & \kappa_2^2 & h & 0 & 0 & 0 \\ 0 & h & \kappa_3^2 & h & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & h & \kappa_{N-1}^2 & h \\ 0 & 0 & 0 & 0 & h & \kappa_N^2 \end{pmatrix}. \quad (23)$$

Отже, елементи матриці \hat{A} можна зобразити у вигляді $a_{ij} = \kappa_i^2 \delta_{ij} + h(\delta_{ij-1} + \delta_{ij+1})$, де δ_{ij} є символом Кронекера. Крім того, в рівнянні (22) використано, окрім іншого, одиничний вектор-стовпчик \mathbf{e} , перший елемент якого дорівнює одиниці, а всі інші — нулі. Параметр η знаходимо з граничних умов для $\delta\phi_1(r)$.

У зображенні Фур'є матричне рівняння (22) буде таким:

$$(\hat{E}q^2 + \hat{A})\delta\vec{\phi}(q) = \eta\mathbf{e}. \quad (24)$$

Отже, маємо

$$\delta\vec{\phi}(q) = \eta(\hat{E}q^2 + \hat{A})^{-1}\mathbf{e}. \quad (25)$$

Для матриці $(\hat{E}q^2 + \hat{A})^{-1}$ використаємо спектральний розклад [15]. А саме, представимо цю матрицю у вигляді

$$(\hat{E}q^2 + \hat{A})^{-1} = \sum_{m=1}^N \frac{\hat{\alpha}_m}{q^2 + q_m^2}, \quad (26)$$

де q_m^2 є власними числами матриці \hat{A} , а матриці спектрального розкладу визначаються рівностями

$$\hat{\alpha}_m = \prod_{\substack{i=1, \\ i \neq m}}^N \frac{\hat{E}q_i^2 - \hat{A}}{q_i^2 - q_m^2}. \quad (27)$$

Власні числа q_m^2 , враховуючи вигляд матриці \hat{A} , будемо шукати у вигляді ряду за параметром h , обмежившись квадратичними доданками. Слід зазначити, що це лише формальний ряд, який не можна вважати розкладом власних чисел за малим параметром h , оскільки величини κ_i^2 , які є діагональними елементами матриці \hat{A} , самі залежать від h . Тому відповідні доданки треба розглядати як поправку, що виникає за рахунок недіагональності матриці \hat{A} .

Таким чином, шукаємо q_m^2 у вигляді $q_m^2 \approx \lambda_m^{(0)} + h\lambda_m^{(1)} + h^2\lambda_m^{(2)}$. Для цього матрицю \hat{A} запишемо як $\hat{A} = \hat{A}_{(0)} + h\hat{A}_{(1)}$. Тут матриця $\hat{A}_{(0)}$ є діагональною з елементами $a_{ij}^{(0)} = \kappa_i^2 \delta_{ij}$. Матриця $\hat{A}_{(1)}$ має всі елементи нульові, за винятком тих, що стоять поруч із діагоналлю — вони одиничні, тобто її елементи $a_{ij}^{(1)} = \delta_{ij-1} + \delta_{ij+1}$.

Як допоміжну розгляньмо задачу пошуку матриці \hat{S} такої, що матриця $\hat{B} = \hat{S}^T \hat{A} \hat{S}$ є діагональною (символом T позначена операція транспонування). Очевидно, що діагональними елементами матриці \hat{B} будуть шукані власні числа q_m^2 .

Зобразимо шукану матрицю \hat{S} як $\hat{S} = \hat{S}_0 + h\hat{S}_1 + h^2\hat{S}_2$. Використовуючи умову $\hat{S}^T \hat{S} = \hat{E}$, відразу знаходимо $\hat{S} = \hat{E}$. З цієї ж умови випливає антисиметричність матриці \hat{S}_1 , тобто $\hat{S}_1^T = -\hat{S}_1$. Крім того, з урахуванням зазначеного має виконуватись рівність

$$\hat{S}_2^T + \hat{S}_2 = \hat{S}_1^2. \quad (28)$$

Надалі зручно записати матрицю \hat{S}_2 як суму симетричної \hat{S}_{2s} і антисиметричної \hat{S}_{2a} частин, тобто $\hat{S}_2 = \hat{S}_{2s} + \hat{S}_{2a}$, причому $\hat{S}_{2s}^T = \hat{S}_{2s}$ і $\hat{S}_{2a}^T = -\hat{S}_{2a}$. Симетричну частину матриці \hat{S} можна знайти з умови (28), а саме, отримуємо

$$\hat{S}_{2s} = \frac{1}{2}\hat{S}_1^2. \quad (29)$$

З урахуванням того, що $\hat{S}_0 = \hat{E}$, маємо:

$$\begin{aligned} \hat{B} &= \hat{A}_0 + h(\hat{A}_0\hat{S}_1 + \hat{S}_1^T\hat{A}_0 + \hat{A}_1) \\ &+ h^2(\hat{A}_0\hat{S}_2 + \hat{S}_2^T\hat{A}_0 + \hat{A}_1\hat{S}_1 + \hat{S}_1^T\hat{A}_1 + \hat{S}_1^T\hat{A}_0\hat{S}_1). \end{aligned} \quad (30)$$

Звідси випливає, що

$$\lambda_m^{(0)} = \kappa_m^2. \quad (31)$$

Матриця \hat{S}_1 вибирається з умови, щоб була діагональною матриця $\hat{\Phi} = \hat{A}_0\hat{S}_1 + \hat{S}_1^T\hat{A}_0 + \hat{A}_1$. Якщо через s_{ij} позначити елементи матриці \hat{S}_1 (з умови антисиметрії випливає, що $s_{ij} = -s_{ji}$), то елементи Φ_{ij} матриці $\hat{\Phi}$ визначатимуться співвідношеннями

$$\Phi_{ij} = (\kappa_i^2 - \kappa_j^2)s_{ij}, \quad (32)$$

тобто ця матриця є симетричною. Щоб матриця $\hat{\Phi} + \hat{A}_1$ була діагональною, необхідно за рахунок вибору елементів матриці $\hat{\Phi}$ (які, своєю чергою, визначаються елементами матриці \hat{S}_1) занулити недіагональні елементи матриці \hat{A}_1 . Це можна зробити, якщо покласти

$$s_{ij} = \frac{\delta_{ij+1} + \delta_{ij-1}}{\kappa_j^2 - \kappa_i^2} \quad (33)$$

для $i \neq j$ і 0, коли $i = j$. Однак за таких обставин виявляється, що матриця $\hat{\Phi} + \hat{A}_1$ є нульовою і тому в розкладі власних чисел q_m^2 за h лінійний доданок відсутній.

Знаючи матрицю \hat{S}_1 , можна знайти й матрицю \hat{S}_{2a} . Зокрема вираз для матриці \hat{B} суттєво спрощується і має вигляд

$$\hat{B} = \hat{A}_0 + h^2 \left(\hat{F} + \frac{1}{2}(\hat{A}_1\hat{S}_1 - \hat{S}_1\hat{A}_1) \right), \quad (34)$$

де елементи F_{ij} матриці \hat{F} визначаються через елементи $s_{ij}^{(2a)}$ матриці \hat{S}_{2a} в такий спосіб:

$$F_{ij} = (\kappa_i^2 - \kappa_j^2) s_{ij}^{(2a)}, \quad (35)$$

за умови $s_{ij}^{(2a)} = -s_{ji}^{(2a)}$.

З іншого боку, елементи ξ_{ij} матриці $\hat{\Xi} = \hat{A}_1 \hat{S}_1 - \hat{S}_1 \hat{A}_1$ можна записати так:

$$\begin{aligned} \xi_{ij} = & \delta_{ij+2} \left(\frac{1}{\kappa_{i-1}^2 - \kappa_i^2} + \frac{1}{\kappa_{i-1}^2 - \kappa_{i-2}^2} \right) \\ & + \delta_{ij-2} \left(\frac{1}{\kappa_{i+1}^2 - \kappa_i^2} + \frac{1}{\kappa_{i+1}^2 - \kappa_{i+2}^2} \right) \\ & + 2\delta_{ij} \left(\frac{1}{\kappa_{i+1}^2 - \kappa_i^2} + \frac{1}{\kappa_{i-1}^2 - \kappa_i^2} \right). \end{aligned} \quad (36)$$

Тоді для діагоналізації матриці $\hat{F} + 1/2\hat{\Xi}$ досить покласти для недіагональних елементів

$$s_{ij}^{(2a)} = \frac{\xi_{ij}}{\kappa_j^2 - \kappa_i^2}. \quad (37)$$

Таким чином, отримуємо

$$q_m^2 = \kappa_m^2 + h^2 \left(\frac{1}{\kappa_{m+1}^2 - \kappa_m^2} + \frac{1}{\kappa_{m-1}^2 - \kappa_m^2} \right). \quad (38)$$

Повертаючись до Фур'є-образу функції відхилення розподілу параметра порядку від рівноважного значення, для першого прошарку можемо записати

$$\delta\phi_1(q) = \eta \sum_{m=1}^N \frac{[\hat{\alpha}_m \mathbf{e}]_1}{q^2 + q_m^2}, \quad (39)$$

де через $[\hat{\alpha}_m \mathbf{e}]_1$ позначено перший елемент вектора-стовпчика $\hat{\alpha}_m \mathbf{e}$. З урахуванням граничної умови маємо

$$\eta = - \frac{2\pi\phi_{(0),1}}{\sum_{m=1}^N [\hat{\alpha}_m \mathbf{e}]_1 K_0(q_m R)}, \quad (40)$$

а розподіл параметра порядку в першому прошарку визначатиметься співвідношенням

$$\phi_1(r) = \phi_{(0),1} \left(1 - \frac{\sum_{m=1}^N [\hat{\alpha}_m \mathbf{e}]_1 K_0(q_m r)}{\sum_{m=1}^N [\hat{\alpha}_m \mathbf{e}]_1 K_0(q_m R)} \right). \quad (41)$$

Для інших прошарків розподіл матиме вигляд

$$\phi_j(r) = \phi_{(0),j} \left(1 - \frac{\sum_{m=1}^N [\hat{\alpha}_m \mathbf{e}]_j K_0(q_m r)}{\sum_{m=1}^N [\hat{\alpha}_m \mathbf{e}]_j K_0(q_m R)} \right), \quad (42)$$

де через $[\hat{\alpha}_m \mathbf{e}]_j$ позначено j -й елемент вектора-стовпчика $\hat{\alpha}_m \mathbf{e}$.

Незважаючи на свою схожість, вирази (41) і (42) мають суттєву відмінність. Так, для матриць спектрального розкладу справедливе співвідношення [15]

$$\sum_{m=1}^N \hat{\alpha}_m = \hat{E}. \quad (43)$$

З нього, зокрема, випливає, що

$$\sum_{m=1}^N [\hat{\alpha}_m \mathbf{e}] = \mathbf{e}, \quad (44)$$

тобто

$$\sum_{m=1}^N [\hat{\alpha}_m \mathbf{e}]_j = \delta_{1j}. \quad (45)$$

Таким чином, для $j \neq 1$ є

$$\sum_{m=1}^N [\hat{\alpha}_m \mathbf{e}]_j = 0 \quad (46)$$

і вираз (42) можна записати так:

$$\phi_j(r) = \phi_{(0),j} \left(1 - \frac{\sum_{m=2}^N [\hat{\alpha}_m \mathbf{e}]_j (K_0(q_m r) - K_0(q_1 r))}{\sum_{m=1}^N [\hat{\alpha}_m \mathbf{e}]_1 K_0(q_m R)} \right). \quad (47)$$

Звідси, зокрема, видно, що в нулі, тобто при $r = 0$, вираз особливості не має, тобто приймає скінченне значення (якщо його вважати за ліміт).

Отримані вище вирази справедливі, як зазначалось, для довільної кількості прошарків. Остання впливає, наприклад, на рівноважне значення параметра порядку $\phi_{(0),j}$, ($j = 1, 2, \dots, N$), однак не змінює якісного характеру одержаних залежностей. Цікавим є граничний випадок, коли кількість прошарків прямує в нескінченність. У цій ситуації можна отримати низку цікавих результатів. Зокрема, згадане рівноважне значення параметра порядку дорівнюватиме $\phi_{(0),j} = \sqrt{-(\alpha + 2h)/\gamma}$. Однак глибокий аналіз з метою порівняти наслідки моделі з відомими результатами (в тому числі і для моделі Ізинга) вимагає застосування децю іншого математичного апарату дослідження, що виходить за межі цієї статті.

ВИСНОВКИ

Отримано загальний вираз для функції розподілу параметра порядку системи, що складається з довільної кількості прошарків, у першому з яких наявна домішкова частинка. Ділянка суттєвого відхилення

параметра порядку від однорідного розподілу, зумовлена наявністю домішки, істотно залежить від близькості системи до точки фазового переходу. В широкому околі така ділянка майже збігається з ділянкою розміщення частинки, тоді як при наближенні до точки переходу вона значно збільшується, прямуючи до нескінченності в точці переходу. Тому для точнішого аналізу необхідно враховувати, крім іншого, вза-

ємний вплив домішок. В останньому випадку можна очікувати колективної поведінки домішкових частинок за рахунок їх взаємодії через поле деформацій параметра порядку при наближенні системи до фазового переходу. Ця проблема може бути темою подальших досліджень. Наші висновки якісно не залежать від кількості прошарків у системі, хоча для кількісних оцінок, очевидно, й це має значення.

-
- [1] В. Я. Антонченко, А. С. Давыдов, В. В. Ильин, *Основы физики воды* (Наукова думка, Киев, 1991).
 [2] Y. Lyatskaya, Y. Liu, S. Tristram-Nagle, J. Katsaras, J. Nagle, Phys. Rev. E **63**, 011907 (2000).
 [3] P. Sens, M. S. Turner, J. Phys. II France **7**, 1855 (1997).
 [4] P. Sens, M. S. Turner, Europhys. J. E **4**, 115 (2001).
 [5] B. Rovsek, M. Cepic, B. Zeks, Phys. Rev. E **66**, 051701 (2002).
 [6] I. N. Olivera, M. L. Lyra, Phys. Rev. E **65**, 051711 (2002).
 [7] A. Nesrullajev, M. Tepe, N. Kazanci, J. Phys. D **35**, 2994 (2002).
 [8] P. Sens, M. S. Turner, P. Pincus, Phys. Rev. E **55**, 4394 (1997).
 [9] S. V. Fridrikh, E. M. Terentjev, Phys. Rev. Lett. **79**, 4661 (1997).
 [10] Y. K. Yu, P. L. Taylor, E. M. Terentjev, Phys. Rev. Lett. **81**, 128 (1998).
 [11] M. Skarabot *et al.*, Phys. Rev. E **59**, R1323 (1999).
 [12] S. Shibahara *et al.*, Phys. Rev. E **62**, R7599 (2000).
 [13] P. K. Mukherjee, Liquid Crystals **22**, 239 (1997).
 [14] M. S. Turner, P. Sens, Phys. Rev. E **55**, R1275 (1997).
 [15] А. Н. Васильев, Теор. мат. физ. **135**, 315 (2003).

ORDER PARAMETER DISTRIBUTION IN LOW-ORDERED LIQUID SYSTEM WITH INCLUSIONS

A. N. Vasil'ev, N. O. Goloborod'ko
*Taras Shevchenko National University of Kyiv,
 Physics Faculty, Department of Theoretical Physics,
 6 Glushkov Prosp., Kyiv, UA-03022, Ukraine*

In this paper we consider a model system that consists of liquid layers. Each layer is characterized by a scalar order parameter. There are spherical impurity particles of low concentration in the upper layer. This causes non-homogeneous distribution of order parameter in the upper layer and due to the interlayer interaction affects the distribution of order parameter over the whole system. We study peculiarities of this distribution depending on the number of layers in the system.