УДК 517.988.67

Методы теории бифуркаций в задаче о кристаллизации жидкого фазового состояния в статистической теории кристалла

© **Б. В. Логинов[1], О. В. Макеев[2]**

Аннотация. Основная часть работы опубликована под тем же названием в т. 11, №1. Кратко изложено (п. 2) приложение результатов [16—21] к задаче о кристаллизации жидкого фазового состояния в статистической теории кристалла, описываемой нелинейным интегральным уравнением типа Гаммерштейна с интегралами по всему пространству $\mathbb{R}^3$ с ядрами, зависящими от модуля разности аргументов. Все решения имеют простой тип и, соответственно, допускают симметрию только симморфных пространственных кристаллографических групп. Основное внимание уделено задаче кристаллизации со сложными решетками (п. 3), описываемой системами интегральных уравнений типа Гаммершейна. Возникает векторное подпространство нулей и, соответственно, векторный случай ветвления с высокими порядками вырождения. Тем самым указан подход к бифуркационным задачам, допускающим симметрию несимморфных кристаллографических групп. В качестве конкретного примера рассмотрено построение уравнения разветвления для задачи кристаллизации с симметрией группы C_{2h}^5 моноклинной сингонии, описываемой системой четырех нелинейных интегральных уравнений. Построенное уравнение разветвления наследует указанную симметрию. Выписана асимптотика разветвляющихся решений. Рассмотрен случай сложной решетки, состоящей из одинаковых подрешеток, что соответствует одному бифуркационному параметру. Здесь представлен пункт 5 статьи ТСВМО т. 11, №1, в котором кратко рассмотрен более сложный случай различных подрешеток. Наиболее общая ситуация будет предметом дальнейших исследований.

Ключевые слова: задачи о нарушении симметрии; статистическая теория кристалла; нелинейные интегральные уравнения типа Гаммерштейна; бифуркация и симметрия

1. Введение

Ниже намечен план исследования кристаллизации со сложными решетками общего типа. Полученные в обеих частях работы результаты поддержаны грантами РФФИ-Румынская Академия, проект №07-01-91680а, и проектом No 2.1.1/6194 программы РНПВШ Минобрнауки РФ.

5. Сложные решетки общего типа

Оставляя общий случай кристаллизации с несколькими подрещетками, составленными из одинаковых частиц в каждом классе, но ориентированных по-разному и отличающимися частицами в разных классах, выпишем систему интегральных уравнений задачи о кристаллизации с симметрией сложной гранецентрированной и объемноцентрированной кубической решетки. Соответственно в вершинах и центрах граней (вершинах и центре) элементарного куба расположены разные частицы и система нелинейных интегральных уравнений типа Гаммерштейна состоит из двух уравнений и содержит два параметра λ_1 и λ_2.

[1]Ульяновский государственный технический университет, Ульяновск; loginov@ulstu.ru.
[2]Ульяновский государственный технический университет, Ульяновск; o.makeev@ulstu.ru.

Начало кристаллизации рассматривается как потеря устойчивости однородного распределения плотностей u_{10} и u_{20}, $M=2$: $u_{i0}+\frac{1}{\theta}\sum_{j=1}^{3}\frac{1}{\lambda_{j0}}e^{u_{j0}}K_{ij0}=0$, $K_{ij0}=\int_0^\infty K_{ij}(|q-q'|)dq' = 4\pi\int_0^\infty \rho^2 K(\rho)d\rho$ с условием нормировки $\frac{1}{|\Pi_0|}(\frac{1}{\lambda_{10}}e^{u_{10}}+\frac{1}{\lambda_{20}}e^{u_{20}})=1$, где Π_0 – объем элементарной ячейки, или двумя условиями нормировки в каждой из подрешеток. Решения соответствующей системы (3.2), ответвляющиеся от однородного распределения плотностей, ищутся в виде $u_s(q)=u_{s0}+w_s(q)$.

$$B_s w_s \equiv w_s(q)+\sum_{j=1}^{2}\mu_{j0}\int K_{sj}(|q-q'|w_j(q'))dq' = \sum_{j=1}^{2}\varepsilon_j\int K_{sj}(|q-q'|)e^{w_j q'}dq' -$$

$$-\sum_{j=1}^{2}\mu_{j0}\int K_{sj}(|q-q'|)[e^{w_j(q')}-w_j(q')-1]dq' \equiv R_s(w,\varepsilon), \quad s=1,2 \quad (5.1)$$

где $\frac{1}{\theta\lambda_j}=\frac{1}{\theta\lambda_{j0}}+\varepsilon_j=\mu_{j0}+\varepsilon_j$. Элементарная ячейка периодичности образована двумя тройками базисных векторов $\mathbf{a}_{kj}=a_j\mathbf{e}_k$, $k=1,2,3$, $j=1,2$, $a_1=2$, $a_2=1$ с соответствующими векторами $\mathbf{l}_j^{(k)}=\frac{1}{a_j}\mathbf{e}_k$ в обратной решетке $\langle\mathbf{a}_{\sigma j},\mathbf{l}_j^{(s)}\rangle=\delta_{s\sigma}$. Общий вектор обратной решетки записывается в виде $\mathbf{l}_{kj}=(\mathbf{m}_{kj}^{(s)},\mathbf{l}_j^{(s)})=\sum_{s=1}^{3}m_{kj}^{(s)}\mathbf{l}_j^{(s)}$. Для описания подпространства нулей линеаризованной системы (5.1) разложим функции w_s в ряды Фурье по обратной решетке $w_j(q)=\sum_k w_{kj}e^{2\pi i\langle\mathbf{l}_{kj},q\rangle}$. После подстановки разложений в (5.1) и перехода к полярным координатам приходим к системе

$$\begin{aligned}
\sum_k\left\{w_{\mathbf{m}_{k1}}[1+\mu_{10}K_{11}(\frac{\mathbf{m}_{k1}}{a_1})]e^{\frac{2\pi i}{a_1}\langle\mathbf{m}_{k1},q\rangle}+\mu_{20}w_{\mathbf{m}_{k2}}K_{12}(\frac{\mathbf{m}_{k2}}{a_2})e^{\frac{2\pi i}{a_2}\langle\mathbf{m}_{k2},q\rangle}\right\} &= 0 \qquad (5.2)\\
\sum_k\left\{\mu_{10}w_{\mathbf{m}_{k1}}K_{21}(\frac{\mathbf{m}_{k1}}{a_1})e^{\frac{2\pi i}{a_1}\langle\mathbf{m}_{k1},q\rangle}+w_{\mathbf{m}_{k2}}[1+\mu_{20}K_{22}(\frac{\mathbf{m}_{k2}}{a_2})]e^{\frac{2\pi i}{a_2}\langle\mathbf{m}_{k2},q\rangle}\right\} &= 0
\end{aligned}$$

где $I_{s\sigma(j)}^k=K_{s\sigma}(\frac{\mathbf{m}_{kj}}{a_j})=\frac{2a_j}{R_{kj}(\mathbf{m}_{kj})}\int_0^\infty \rho K_{s\sigma}(\rho)\sin\frac{2\pi\rho}{a_j}R_{kj}(\mathbf{m}_{kj})d\rho$

Выбирая в (5.2) сначала при $a_1=2$, $a_2=1$ $m_{ks}^{(1)}=\pm1$, $m_{ks}^{(2)}=\pm1$, $m_{ks}^{(3)}=\pm1$, $s=1,2$, а затем при $a_1=2$, $a_2=1$ $m_{k1}^{(s)}=\pm1$, $m_{k1}^{(r\neq s)}=\pm1$; $m_{k2}^{(s)}=\pm1$, $m_{k2}^{(r\neq s)}=\pm1$, $s=1,2,3$ приходим к условиям кристаллизации соответственно с гранецентрированной (объемноцентрированной) ячейкой периодичности в виде соответствующих определителей системы (5.2).

Замечание 5.1. *Для получения критерия кристаллизации к системе интегральных уравнений* (5.1) *следует добавить условия нормировки п. 3, где V кратно ячейке периодичности Π_0 [3, 4]* $\frac{1}{|\Pi_0|}\int_{\Pi_0}[\frac{1}{\lambda_1}e^{u_{10}+w_1(q)}+\frac{1}{\lambda_2}e^{u_{20}+w_2(q)}]dq=1$ *или условием нормировки в каждой из подрешеток* $\frac{e^{u_{j0}}}{|\Pi_j|\lambda_j}\int e^{w_j(q)}dq=1$. *Эти условия позволят определить не только критическое значение температуры кристаллизации, но и закритическое поведение кристалла, разыскивая решение в виде рядов по общему малому параметру* $\varepsilon=\frac{\theta-\theta_0}{\theta_0}$, $\lambda_j=\lambda_{j0}+\nu_j(\varepsilon)$.

Дата поступления 20.08.2009

Bifurcation theory methods in problem about crystallization of liquid phase state in statistical crystal theory

© B. V. Loginov[3], O. V. Makeev[4]

Abstract. Applications of the results [16—21] are briefly presented (p. 2) to the problem on crystallization of liquid phase state in statistical crystal theory governed by nonlinear integral equation of Hammerstein type with integrals on the whole space $\mathbb{R}^3$ and kernels depending on modulus of arguments difference. All solutions have primary type and respectively allow only symmetry of symmorphic spatial crystallographic groups. Basic attention is paid (p. 3) to crystallization problem with composite lattices governed by systems of nonlinear Hammerstein type integral equations. Here vectorial zero-subspace arise and respectively vectorial bifurcation with higher orders of degeneracy. By this an approach is indicated to bifurcation problems allowing non-symorphic crystallographic group symmetries. As concrete example it is considered the construction of the bifurcation equation for crystallization problem with the group C_{2h}^5 symmetry of monoclinic syngony governed by the system of four nonlinear integral equations. The constructed branching equation inherits the indicated symmetry. Bifurcating solutions are written out. It is considered only case of composite lattice consisting of the identical sublattices that corresponds to one bifurcation parameter. Here n.5 of the article Proc. MVMS v. 11, No. 1 is presented in which more complicated case of different sublattices is briefly considered. The most general situation will be subject of future investigations.

Key Words: symmetry breaking problems; statistical theory of crystal; nonlinear integral equations of Hammerstein type; bifurcation and symmetry

[3]Ulyanovsk state technical University, Ulyanovsk; loginov@ulstu.ru.
[4]Ulyanovsk state technical University, Ulyanovsk; o.makeev@ulstu.ru.