УДК 515.164:517.925:536.42

ОПИСАНИЕ ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ МЕТОДАМИ ТЕОРИИ КАТАСТРОФ

С. В. Павлов

(кафедра физики кристаллов)

На основе теорем теории катастроф показано, что феноменологически все фазовые переходы в системах с числом параметров порядка не больше трех описываются посредством одного из 15 классов функций, называемых min-функциями.

Для феноменологического описания фазовых переходов (ФП) термодинамический потенциал раскладывается в ряд по степеням параметров порядка вблизи точки ФП и в разложении удерживаются члены, инвариантные относительно группы симметрии исходной фазы. Однако вопрос о том, сколько членов разложения необходимо и достаточно для адекватного описания ФП, как правило, остается неисследованным.

Теория катастроф (или теория особенностей) позволяет строго математически на основании ряда теорем определить число членов в разложении термодинамического потенциала, необходимых для точного описания ФП. В настоящей статье при помощи теории катастроф будет показано, что все феноменологические модели ФП в системах с числом параметров порядка не больше трех в окрестности точек ФП можно описать посредством одного из 15 классов функций, называемых min-функциями.

Приведем краткие формулировки основных теорем теории катастроф и дадим сведения о терминологии, необходимые для дальнейшего изложения. Следует отметить, что иногда определения будут даваться в форме, понятной нематематикам, в ущерб математической строгости.

Пусть имеется физическая система, поведение которой описывается потенциальной функцией $U(x_i, \alpha_j)$, зависящей от n переменных x_i ($i=1,\dots,n$) и m параметров α_j ($j=1,\dots,m$), называемых управляющими параметрами. (Здесь и ниже под потенциалом и потенциальной функцией будет пониматься математический, т. е. безразмерный, потенциал.) Тогда если в некоторой точке $\{x_{i0}\}$ $\nabla U\neq 0$, то в некоторой окрестности этой точки возможна такая замена переменных:

$$y_i=y_i(x_1,\dots,x_n),\quad i=1,\dots,n, \tag{1}$$

в результате которой функция U может быть приведена к виду $U=y_1+\mathrm{const}$ (теорема о неявной функции). Точка $\{x_{i0}\}$ называется некритической точкой функции U.

Если $\nabla U(x_{i0})=0$ и $\det\left\|\dfrac{\partial^2 U}{\partial x_i\partial x_j}\right\|\neq 0$, то в некоторой окрестности точки $\{x_{i0}\}$ заменой переменных (1) можно привести функцию U к виду $U=\sum\limits_{i=1}^{k} y_i^2-\sum\limits_{j=k+1}^{n} y_j^2$ $(1\leqslant k\leqslant n)$ (лемма Морса). Точка $\{x_{i0}\}$ называется в этом случае невырожденной, изолированной или морсовской точкой функции U.

Если в точке $\{x_{i0}\}$ $\nabla U=0$, $\det\left\|\dfrac{\partial^2 U}{\partial x_i\partial x_j}\right\|=0$ и ранг матрицы устойчивости $\left\|\dfrac{\partial^2 U}{\partial x_i\partial x_j}\right\|$ равен r, то в окрестности этой точки функция U эквивалентна функции вида $\sum_{i=1}^{r} \lambda_i(\alpha_1, \ldots \alpha_m) y_i^2 + f(y_{r+1}, \ldots, y_n, \alpha_1, \ldots, \alpha_m)$, где $f(y_{r+1}, \ldots, y_n, \alpha)$ — некоторая гладкая функция (лемма расщепления). Точка $\{x_{i0}\}$ в этом случае называется неизолированной, вырожденной или неморсовской критической точкой функции U. Число $k=(n-r)$ называется корангом функции f, а число управляющих параметров m называется ее коразмерностью.

Центральной теоремой теории катастроф является теорема Тома. Она опирается на сформулированные выше леммы и гласит следующее:

Функция $f(y_{r+1}, \ldots, y_n, \alpha)$ коразмерности $m \leqslant 5$ и коранга $k \leqslant 2$, когда на f не наложены ограничения симметрии и другие, эквивалентна в окрестности вырожденной критической точки одной из функций, называемых элементарными катастрофами (табл. 1).

Таблица 1

Элементарные катастрофы Тома

Тип	k	m	Катастрофы
A_2	1	1	$x_1^3 + \alpha_1 x_1$
$A_{\pm 3}$	1	2	$\pm x_1^4 + \alpha_1 x_1^2 + \alpha_2 x_1$
A_4	1	3	$x_1^5 + \alpha_1 x_1^3 + \alpha_2 x_1^2 + \alpha_3 x_1$
$A_{\pm 5}$	1	4	$\pm x_1^6 + \alpha_1 x_1^4 + \alpha_2 x_1^3 + \alpha_3 x_1^2 + \alpha_4 x_1$
A_6	1	5	$x_1^7 + \alpha_1 x_1^5 + \alpha_2 x_1^4 + \alpha_3 x_1^3 + \alpha_4 x_1^2 + \alpha_5 x_1$
$D_{\pm 4}$	2	3	$x_1^2 x_2 \pm x_2^3 + \alpha_1 x_2^2 + \alpha_2 x_1 + \alpha_3 x_2$
D_5	2	4	$x_1^2 x_2 + x_2^4 + \alpha_1 x_1^2 + \alpha_2 x_2^2 + \alpha_3 x_1 + \alpha_4 x_2$
$D_{\pm 6}$	2	5	$x_1^2 x_2 \pm x_2^5 + \alpha_1 x_2^3 + \alpha_2 x_2^2 + \alpha_3 x_1^2 + \alpha_4 x_1 + \alpha_5 x_2$
$E_{\pm 6}$	2	5	$x_1^3 \pm x_2^4 + \alpha_1 x_1 x_2^2 + \alpha_2 x_2^2 + \alpha_3 x_1 x_2 + \alpha_4 x_1 + \alpha_5 x_2$

Классификация функций табл. 1 впервые дана Арнольдом [1]. Члены, не зависящие от управляющих параметров (они имеют самые высокие порядки в полиномах), называются ростками катастрофы, остальные члены, зависящие от управляющих параметров, называются деформацией катастрофы. Еще раз подчеркнем, что приведенные выше теоремы строго математически доказаны и справедливы для любой гладкой функции. В доступной форме они изложены в монографиях Постона и Стюарта [2] и Гилмора [3].

Легко видеть, что для термодинамической потенциальной функции вырожденная неморсовская точка минимума является точкой ФП, а невырожденная — точкой равновесия. Следовательно, в случае ФП зада-

Таблица 2

Классификация min-функций [4]. Здесь всюду $B_k = b_0 + \ldots + b_k x_2^k$, $C_k = c_0 + \ldots + c_k x_2^k$, $r, p, q \in N$

Тип	μ	Росток	Ограничения	m
A_{2s-1}	0	x_1^{2s}	$s \geqslant 2$	$2s-2$
$X_{1,0}$	1	$x_1^4 + B_0 x_1^2 x_2^2 + x_2^4$	$b_0 > -2,\ b_0 \neq 2$	7
$X_{1,2r}$	1	$x_1^4 + x_1^2 x_2^2 + B_0 x_2^{4+2r}$	$b_0 > 0$	$7+2r$
$Y_{2r,2q}$	1	$x_1^{4+2r} + B_0 x_1^2 x_2^2 + x_2^{4+2q}$	$b_0 > 0$	$7+2r+2q$
$Y_{r,r}^{1+}$	1	$(x_1^2 + x_2^2)^2 + B_0 x_2^{4+r}$	$b_0 \neq 0$	$7+2r$
$W_{1,0}$	2	$x_1^4 + B_1 x_1^2 x_2^3 + x_2^6$	$b_0^2 < 4$	12
$W_{1,2q}^{\#}$	2	$(x_1^2 + x_2^3)^2 + B_1 x_1^2 x_2^{3+q}$	$b_0(-1)^q < 0$	$12+2q$
$W_{p,0}$	$3p-1$	$x_1^4 + B_{2p-1} x_1^2 x_2^{2p+1} + C_{p-2} x_1 x_2^{3p+2} + x_2^{4p+2}$	$b_0^2 < 4,\ p \geqslant 2$	$9p+3$
$W_{p,2q}^{\#}$	$3p-1$	$(x_1^2 + x_2^{2p+1})^2 + B_{2p-1} x_1^2 x_2^{2p+q+1} + C_{p-2} x_1 x_2^{3p+q+2}$	$b_0(-1)^q < 0,\ p \geqslant 2$	$9p+3+2q$
$X_{p,2r}$	$3p-2$	$x_1^4 + B_{p-2} x_1^3 x_2^p + x_1^2 x_2^{2p} + C_{2p-2} x_2^{4p+2r}$	$b_0^2 < 4,\ c_0 > 0$	$9p-2+2r$

Продолжение табл. 2

Тип	μ	Росток	Ограничения	m
$X_{p,0}$	$3p-2$	$x_1^4+B_{2p-2}x_1^2x_2^{2p}+C_{p-2}x_1x_2^{3p}+x_2^{4p}$	$x_1^4+b_0x_1^2+c_0x_1+1$ не имеет действительных корней $p\geqslant 2$, $\lvert b_0^2-4\rvert+\lvert c_0\rvert\neq 0$	$9p-2$
$Y^p_{2r,2r}$	$3p-2$	$x_1^2(x_1+x_2^p)+B_{2p-2}x_1^2x_2^{2(p+r)}+C_{p-2}x_2^{4p+2r}$	$c_0>0,\ p\geqslant 2$	$9p-2+4r$
$Y^p_{2r,q}$	$3p-2$	$x_1^2(x_1+x_2^p)^2+B_{p-2}x_1^2x_2^{2p+q}+C_{2p-2}x_2^{4p+2r}$	$c_0>0,\ r>q,\ p\geqslant 2$	$9p-2+2r+q$
$Y^{p+}_{r,r}$	$3p-2$	$(x_1^2+x_2^{2p})^2+P(x_1,x_2)\,x_2^{3p+r}$ P — либо $B_{p-2}x_1+C_{2p-2}x_2^p$, либо $B_{2p-2}x_1+C_{p-2}x_2^p$	$b_0^2+c_0^2\neq 0,\ p\geqslant 0$	$9p-2+2r$
V_0''	10	$x_1^4+x_2^4+x_3^4+\Sigma a_{\overline{m}}x^{\overline{m}}$ $\overline{m}=m_1,\ m_2,\ m_3,\ \Sigma m_i\geqslant 4,\ 0\leqslant m_i\leqslant 2$		16

ча сводится к следующему. Известно число управляющих параметров термодинамической системы m и число параметров порядка k. Зная m и k, выбираем из табл. 1 соответствующую катастрофу, которая, как гарантирует теорема Тома, адекватно описывает поведение системы в окрестности точки ФП, т. е. в окрестности вырожденной точки минимума.

На самом деле из всех перечисленных в табл. 1 катастроф только A_{+3} и A_{+5} имеют вырожденные критические точки минимума. Остальные элементарные катастрофы содержат только максимумы и седловые точки. Кроме того, на систему, как правило, наложены ограничения симметрии, которые не позволяют использовать теорему Тома. Следовательно, для описания ФП, в частности для систем с двумя параметрами порядка, необходимо использовать катастрофы коразмерности больше пяти.

Классификация катастроф высшей коразмерности, называемых также особенностями, проведена Арнольдом [1]. Но эта классификация в комплексной области в общем случае не совпадает с классификацией в вещественной области. С другой стороны, многие функции катастроф в классификации Арнольда описывают точки максимума и седла и поэтому для исследования ФП не подходят. Для моделей ФП необходимы вещественные функции катастрофы, имеющие вырожденные точки минимума. Классификация ростков таких функций для одной, двух и трех переменных проведена Васильевым в работе [4]. Это так называемые min-функции.

Таким образом, мы подошли к основному положению данной работы: на основании общих теорем теории катастроф и теорем работы [4] можно утверждать, что все феноменологические модели ФП, содержащие не более трех параметров порядка, описываются одной из min-функций, приведенных в табл. 2.

Ростки min-функций корангов 2 и 3 содержат параметры, неустранимые гладкой заменой переменных. Эти параметры называются модулями. Модальность min-функций представлена в табл. 2 числом μ. Ростки элементарных катастроф модулей не содержат (см. табл. 1) и называются простыми ростками. Ростки с одним модулем называются унимодальными, с двумя — бимодальными.

В табл. 3 представлены универсальные деформации некоторых min-функций. Они рассчитаны стандартными методами теории катастроф [2, 3].

Теория катастроф неосознанно давно применялась в различных областях физики. Много примеров такого применения приведено Арнольдом в работе [5]. Катастрофу A_{+3}, называемую катастрофой сборки [2, 3], для анализа ФП 2-го рода использовал Ландау [6], min-функцию $X_{1,0}$, которая называется катастрофой двойной сборки [3], в 1954 году предложил Девоншир [7] в качестве модели ФП в сегнетовой соли. Эта же min-функция успешно использовалась для описания антисегнетоэлектрических ФП [8]. Гуфан и др. в ряде работ по исследованию структурных ФП использовали min-функции $X_{1,0}$ [9, 10], $X_{1,2}$ [10, 11], $Y^1_{2,4}$ [11]. Те же функции встречаются в качестве феноменологических моделей ФП и в монографии Изюмова и Сыромятникова [12].

В заключение приведем пример выбора min-функции для феноменологической модели пропионатов. Как известно [13], эти кристаллы испытывают последовательно при понижении температуры ФП 2-го и 1-го рода, причем последний переход в дикальцийсвинецпропионате происходит со сменой знака спонтанной поляризации. По-видимому, такое необычное явление можно описать в рамках модели двух полярных подре-

Таблица 3

Универсальные деформации унимодальных и бимодальных min-функций

Тип	Универсальная деформация
$X_{1,0}$	$\alpha_1 x_1+\alpha_2 x_2+x_3 x_1^2+\alpha_4 x_1 x_2+\alpha_5 x_2^2+\alpha_6 x_1^2 x_2+\alpha_7 x_1 x_2^2$
$X_{1,2r}$	$\alpha_1 x_1+\alpha_2 x_2+\alpha_3 x_1^2+\alpha_4 x_1 x_2+\alpha_5 x_2^2+\alpha_6 x_2^3+\ldots+\alpha_{7+2r} x_2^{2(r+1)}$
$Y^{1+}_{r,r}$	$\alpha_1 x_1+\alpha_2 x_2+\alpha_3 x_1^2+\alpha_4 x_1 x_2+\alpha_5 x_2^2+\alpha_6 x_1^2 x_2+\alpha_7 x_1 x_2^2+\alpha_8 x_2^3+\alpha_9 x_1 x_2^3+$ $+\alpha_{10} x_2^4+\alpha_{11} x_1 x_2^4+\ldots+\alpha_{7+2r-1} x_1 x_2^{2+r}+\alpha_{7+2r} x_2^{2+r}$
$W_{1,0}$	$\alpha_1 x_1+\alpha_2 x_2+\alpha_3 x_1^2+\alpha_4 x_1 x_2+\alpha_5 x_2^2+\alpha_6 x_1^2 x_2+\alpha_7 x_1 x_2^2+\alpha_8 x_2^3+\alpha_9 x_1^2 x_2^2+$ $+\alpha_{10} x_2^4+\alpha_{11} x_1 x_2^3+\alpha_{12} x_1 x_2^4$

шеток. В работе [14] для описания ФП в пропионатах используется модель с двумя параметрами порядка, которыми являются поляризации подрешеток, их взаимодействие описывает член $x_1 x_2^3$. Действительно, для описания смены знака поляризации необходимо, чтобы потенциал имел члены, нечетные по каждому параметру порядка в отдельности, но инвариантные относительно замены $x_1 \to -x_1$ и $x_2 \to -x_2$.

Однако модель, приведенная в [14], описывает лишь ФП 1-го рода. Неполное описание ФП в пропионатах обусловлено произволом в обрыве ряда разложения по степеням параметров порядка. На самом деле, как следует из табл. 2 и 3, простой min-функцией, которая может наиболее полно описать ФП в пропионатах, является функция $Y^{1+}_{2,2}$. К сожалению, критерия выбора модели для какого-либо конкретного случая пока нет, и для модели можно также выбрать $W_{1,0}$ и $W^{\#}_{1,2q}$, но остановимся на $Y^{1+}_{2,2}$ как наиболее простой. Тогда, учитывая инвариантность относительно замены $x_1 \to -x_1$ и $x_2 \to -x_2$, имеем

$$V=(x_1^2+x_2^2)^2+b_0 x_2^6+a_1 x_1^2+a_2 x_2^2+a_3 x_1 x_2^3+a_4 x_2^4. \qquad (2)$$

Модель (2) имеет три устойчивые фазы: 1) $x_1=0$, $x_2=0$; 2) $x_1 \neq 0$, $x_2=0$; 3) $x_1 \neq 0$, $x_2 \neq 0$, причем переход $1 \to 2$ является ФП 2-го рода, а $2 \to 3$ — 1-го рода. Равновесное значение параметров порядка в фазе 3 описывается алгебраическим уравнением 12-й степени, но качественный анализ этого уравнения показывает, что переход $2 \to 3$ может происходить как со сменой, так и без смены знака параметров порядка, т. е. при различных значениях управляющих параметров модель (2) должна адекватно описывать оба ФП в семействе пропионатов.

Автор выражает глубокую благодарность К. Н. Баранскому, Н. Д. Гавриловой и В. А. Копцику за ценные советы и замечания, сделанные в ходе написания статьи.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Арнольд В. И.//Успехи матем. наук. 1975. **30**, № 5. С. 3. [2] Постон Т., Стюарт И. Теория катастроф и ее приложения. М., 1980. [3] Гилмор Р. Прикладная теория катастроф: В 2 кн. М., 1984. [4] Васильев В. А.//Функциональный анализ и его приложения. 1977. **11**, № 3. С. 1. [5] Арнольд В. И.//Итоги науки и техники. Сер. Современные проблемы математики. Фундаментальные направления. М.,

1985. Т. 5. С. 219. [6] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. М., 1976. [7] Devonshire A. F.//Adv. in Phys. 1954. 3, N 10. P. 86. [8] Блинц Р., Жекш Б. Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики. Динамика решетки. М., 1975. [9] Гуфан Ю. М., Торгашев В. И.//ФТТ. 1980. 22, № 6. С. 1629. [10] Гуфан Ю. М., Кутьин Е. И., Лорман В. Л., Сидоренко Е. М.//ФТТ. 1987. 29, № 3. С. 756. [11] Гуфан Ю. М., Ларин Е. С.//ФТТ. 1987. 29, № 1. С. 8. [12] Изюмов Ю. А., Сыромятников В. Н. Фазовые переходы и симметрия кристаллов. М., 1984. [13] Чобот Г. М., Варикаш В. М.//ДАН БССР. 1988. 32, № 3. С. 223. [14] Dvořak V., Ishibashi Y.//J. Phys. Soc. Jap. 1976. 41, N 2. P. 548.

Поступила в редакцию
28.11.88

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1990. Т. 31, № 1

УДК 538.566.5

КОЭФФИЦИЕНТ ПРОПУСКАНИЯ РАВНОМЕРНО ИЗОГНУТЫХ РЕНТГЕНОВСКИХ ВОЛНОВОДОВ В РЕЖИМЕ ШЕПЧУЩИХ МОД

В. А. Бушуев, М. Н. Оруджалиев, Р. Н. Кузьмин

(кафедра физики твердого тела)

На основе явления полного внешнего отражения проведен теоретический анализ коэффициента пропускания рентгеновских волноводов в зависимости от их длины, радиуса изгиба, расстояния между стенками и расходимости пучка. Показана возможность поворота рентгеновских пучков на углы до 10—20° с эффективностью порядка 10%.

В последнее время значительно возрос интерес к исследованиям по транспортировке и изменению направления распространения пучков рентгеновского излучения с помощью явления полного внешнего отражения (ПВО). Явление ПВО заключается в резком возрастании коэффициента отражения $P_1 \approx 1$ при углах скольжения $\vartheta \leqslant \vartheta_c$, где $\vartheta_c = \sqrt{|\chi_r|}$ — критический угол ПВО, и обусловлено тем, что в рентгеновском диапазоне длин волн показатель преломления среды меньше единицы, поскольку действительная часть поляризуемости χ_r отрицательна. Для жесткого рентгеновского излучения с $\lambda \sim 1$ Å типичные значения ϑ_c составляют 5—15 угл. мин.

Рентгеновский волновод с многократным ПВО впервые был реализован в работе [1]. В работах [2—6] показано, что транспортировка рентгеновского излучения вдоль прямых волноводов (полых стеклянных и металлических трубок с внутренним диаметром порядка 0,1—1 см и длиной до нескольких метров) происходит без существенных потерь, что позволяет в десятки раз повысить плотность излучения на мишени, удаленной на некоторое расстояние от источника [5, 6].

Поворот рентгеновского пучка на несколько градусов экспериментально осуществлен при скользящих углах отражения от вогнутых цилиндрических зеркал [7] (см. также теоретические работы [8, 9]) и при транспортировке в тонких (~0,5 мм) изогнутых капиллярах [6, 10]. В работе [11] впервые показана принципиальная возможность концентрации расходящегося характеристического излучения рентгеновской трубки с помощью системы капилляров или коаксиальных сферических зеркал, в результате которой интенсивность излучения обычных рентгеновских трубок на выходе ПВО-системы может стать сравнимой с интенсивностью мощных синхротронных источников.