

Построение феноменологических моделей фазовых переходов методами эквивариантной теории катастроф

С. В. Павлов

*Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет,
кафедра общей физики и физики конденсированного состояния.
Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2.
E-mail: swcusp@mail.ru*

Статья поступила 14.09.2015, подписана в печать 28.11.2015.

Рассмотрен метод построения феноменологических моделей фазовых переходов с использованием эквивариантной теории особенностей дифференцируемых отображений с учетом симметрии параметров порядка (эквивариантной теории катастроф). Данный метод отличается от традиционного разложения в ряд по степеням малого параметра порядка тем, что, во-первых, отсутствует требование малости параметров порядка, а задается только число термодинамических параметров, варьируемых в эксперименте (температура, давление и т. д.), во-вторых, получаемые модели обладают структурной устойчивостью и адекватно описывают аномалии физических свойств вблизи фазовых переходов. В качестве примера, иллюстрирующего метод, построена модель фазовых переходов для двухкомпонентного параметра порядка.

Ключевые слова: фазовые переходы, феноменологическая модель, теория катастроф, эквивариантные векторные поля.

УДК: 537.9. PACS: 77.80.Bh.

Введение

Общая постановка задачи в феноменологической теории фазовых переходов в кристаллах следующая: дана высокосимметричная пространственная группа G и на основе математических методов нужно установить, в какие подгруппы этой группы могут происходить фазовые переходы, какова возможная физическая реализация параметра (параметров) порядка, какие физические свойства появляются в результате фазового перехода, зависимости этих свойств от внешних воздействий — температуры, давления и т. п. Однако если известно, что кристалл испытывает фазовый переход, и известна группа низкосимметричной фазы, задача несколько сужается. В этом случае нет необходимости перечисления всех подгрупп, в которые возможны фазовые переходы из исходной группы высокотемпературной фазы. (Тем не менее общая задача позволяет провести полный анализ фазовой диаграммы.) Наиболее разработанным математическим методом решения исходной задачи является теоретико-групповой анализ [1–6].

Теория групп позволяет, не конкретизируя вида термодинамического потенциала, перечислить все возможные низкосимметричные фазы кристалла, определить размерность и симметрию параметра или параметров порядка, построить для каждого параметра порядка целый рациональный базис инвариантов (ЦРБИ), а также предсказать возможную физическую реализацию каждого параметра порядка и его сопряжение по симметрии с основными физическими свойствами — диэлектрическими, тепловыми, упругими и т. д. [1, 2].

Конкретный вид термодинамического потенциала и температурные зависимости физических свойств

можно определить, только привлекая модельные представления, т. е. разложение термодинамического потенциала в ряд по степеням параметров порядка, точнее, по степеням инвариантов из ЦРБИ. Как известно, всякая физическая модель лишь приблизительно описывает реальное физическое явление и обладает рядом недостатков, присущих моделям. Однако чтобы улучшить это приближение и минимизировать недостатки, к построению модели надо подойти, используя методы современной математики. В данном случае это методы теории особенностей дифференцируемых отображений (теории катастроф) [7–13].

1. Два подхода к построению феноменологических моделей

Разница в подходах к построению феноменологических моделей при простом разложении в ряд по степеням параметров порядка и применения эквивариантной теории катастроф следующая.

Первый подход предполагает малость параметров порядка и разложение в ряд Тейлора вплоть до какой-либо степени: четвертой, шестой, восьмой по этому малому параметру. При этом нет строгого научного обоснования, почему ряд обрывается на данной конкретной степени, что иногда приводит к построению структурно неустойчивых моделей, в которых возникают ошибочные, нефизичные результаты. Следует отметить, что имеются в виду многокомпонентные и взаимодействующие параметры порядка [14–21].

Второй подход, хотя и требует некоторых знаний в теории дифференциальных операторов и построении эквивариантных векторных полей в кольце

полиномов [7, 9, 10], логически последователен. В этом подходе параметры порядка играют роль независимых переменных, а феноменологические коэффициенты являются управляющими параметрами, т.е. параметрами, зависящими от физических величин, варьируемых в эксперименте (температура, давление, химпотенциалы примесей и концентрации дефектов).

Постановка задачи следующая. Имеется комбинация независимых переменных, фактически ЦРБИ из параметров порядка [1] и число управляющих параметров, варьируемых в эксперименте. Требуется построить структурно устойчивую феноменологическую модель исходя только из данных условий.

2. Алгоритм построения феноменологических моделей фазовых переходов методами теории катастроф

Математический метод, изложенный ниже, основан на результатах теории особенностей дифференцируемых отображений, разработанных еще в 60–80-е гг. прошлого столетия. Однако он изложен в основном в строго математической труднодоступной форме [7, 8]. Для того чтобы сделать более понятным этот метод, следует сформулировать некоторые основные определения и положения.

Коммутативным кольцом называется множество R , на котором определены две бинарные операции сложения и умножения, удовлетворяющие условиям ассоциативности, коммутативности и дистрибутивности. Множество полиномов образуют коммутативное кольцо. Пусть $R[x]$ — кольцо полиномов. Идеалом данного кольца называется такое подкольцо полиномов, что каждый полином кольца, умноженный на полином из идеала, оказывается принадлежащим идеалу. Например, если $R[x]$ — кольцо мономов одной переменной: $R = \{1, x, x^2, x^3, \dots, x^n, x^{n+1}, \dots\}$, то идеалом в $R[x]$ является подкольцо $I = \{x^n, x^{n+1}, \dots\}$. В самом деле, любой элемент кольца, умноженный на элемент из идеала, принадлежит идеалу. В идеале всегда есть конечное число элементов, называемых образующими идеала и порождающих весь идеал. В кольце мономов порождающим элементом идеала является моном x^n . Фактор-алгеброй Q по идеалу I называется множество $Q = R/I$. Для кольца мономов $Q = \{1, x, x^2, x^3, \dots, x^{n-1}\}$.

Градиентным идеалом $I_{\nabla f}$ некоторой функции $f \in R[\mathbf{x}]$ называется множество полиномов, у которых образующими являются компоненты градиента функции f , т.е. все полиномы вида

$$R_1(\mathbf{x}) \frac{\partial f}{\partial x_1} + R_2(\mathbf{x}) \frac{\partial f}{\partial x_2} + \dots + R_n(\mathbf{x}) \frac{\partial f}{\partial x_n},$$

где $R_i(\mathbf{x})$ — произвольные полиномы, в том числе можно принять $R_i(\mathbf{x}) = 1$.

Критической точкой гладкой функции F называется точка $\mathbf{x}_0 = \{x_{01}, x_{02}, \dots, x_{0n}\}$ такая, что

$$dF(\mathbf{x}_0) = 0. \tag{1}$$

Критическая точка называется невырожденной, если в этой точке

$$\det \left\| \frac{\partial^2 F}{\partial x_i \partial x_j} \right\| \neq 0,$$

и вырожденной, если

$$\det \left\| \frac{\partial^2 F}{\partial x_i \partial x_j} \right\| = 0. \tag{2}$$

Ясно, что точка фазового перехода является вырожденной критической точкой функции F , в качестве которой выступает термодинамический потенциал, а совместное решение уравнений (1) и (2) определяет границы устойчивости фаз на фазовой диаграмме этого потенциала.

Для определения конкретного вида гладкой функции в виде конечного отрезка ряда Тейлора, которая адекватно описывает свойства системы вблизи вырожденной критической точки, наиболее универсальным и последовательным является метод, основанный на спектральной последовательности фильтрации комплекса Кошуля, подробное и строгое изложение которого можно найти, например, в [7]. Суть этого метода заключается в следующем.

Предположим, дана гладкая функция n переменных F . Тогда в окрестности вырожденной критической точки (за которую без ограничения общности можно принять точку ноль) функцию F можно разложить в формальный, т.е. не обязательно сходящийся, ряд Тейлора по степеням

$$F = \sum_q a_q(\alpha_1, \dots, \alpha_m) x_1^{q_1} x_2^{q_2} \dots x_n^{q_n}, \tag{3}$$

где $q = (q_1, \dots, q_n)$.

Подбором параметров α_i , зависящих от внешних условий (называемых управляющими параметрами), на основании теоремы о неявной функции можно обратить в нуль m первых коэффициентов ряда (3). Из оставшейся части ряда Тейлора (3) подходящей гладкой заменой переменных следует удалить члены, не влияющие на топологию фазовой диаграммы в окрестности вырожденной критической точки, которой является точка фазового перехода, для заданного числа m управляющих параметров. Для этого необходимо представить оставшиеся члены ряда Тейлора в виде суперпозиции однородных или квазиоднородных составляющих

$$F = f_0 + f_1 + f_2 + \dots \tag{4}$$

степеней $N, N+1, N+2$ и из оставшейся части ряда Тейлора следует удалить члены, принадлежащие градиентному идеалу, т.е. полиномы

$$\sum_i R_i(\mathbf{x}) \frac{\partial F}{\partial x_i},$$

где $R_i(\mathbf{x})$ — произвольные полиномы. Для этого вводится алгебра U векторных полей вида

$$u = \sum_i R_i(\mathbf{x}) \frac{\partial}{\partial x_i}, \quad u \in U.$$

Чтобы получить образующие градиентного идеала некоторого полинома $f(\mathbf{x})$, достаточно подействовать на квазиоднородные составляющие f_i оставшейся части (4) образующими $\frac{\partial}{\partial x_i}$ алгебры U .

Сначала следует найти градиентный идеал, действуя на квазиоднородную часть f_0 всеми векторными полями из U :

$$I_{\nabla f_0} = R_i(\mathbf{x}) \frac{\partial f_0}{\partial x_i}.$$

Это первое приближение $I_{\nabla F}$. Далее находится градиентный идеал $I_{\nabla f_1}$, для чего на часть f_1 , которая не вошла в $I_{\nabla f_0}$, подействуем всеми полями из U , сохраняющими f_0 , т. е. из стационарной алгебры f_0

$$s_0 f_0 = 0, \quad s_0 \in S_{f_0}.$$

Объединение $I_{\nabla f_1}$ с $I_{\nabla f_0}$ дает следующее приближение градиентного идеала $I_{\nabla F}$. Следующий шаг — нахождение градиентного идеала $I_{\nabla f_2}$. На часть f_2 , не вошедшую в предыдущее приближение, надо подействовать полями из стационарной алгебры s_1 , т. е. такими, что

$$s_0 f_1 + s_1 f_0 = 0.$$

На r -м шаге векторные поля s_{r-1} , которые действуют на квазиоднородную часть f_r , должны определяться из условия

$$s_0 f_{r-1} + s_1 f_{r-2} + \dots + s_{r-1} f_0 = 0.$$

В окрестности конечнократной критической точки такой процесс через несколько шагов сходится к фактор-алгебре особенности функции F

$$Q = R[\mathbf{x}]/I_{\nabla F},$$

которая и определяет конечный вид отрезка ряда Тейлора, адекватно описывающего свойства функции F вблизи вырожденной критической точки для заданного числа управляющих параметров.

Однако для термодинамических систем с симметрией термодинамический потенциал является целой рациональной функцией инвариантов из ЦРБИ. Следовательно, разложение термодинамического потенциала необходимо проводить по степеням этих инвариантов и процедуру спектральной последовательности приведения потенциала к нормальной форме осуществить с учетом симметрии системы. Такой учет производится при помощи эквивариантных векторных полей. Если для функций без симметрии (общего положения) векторные поля записывались следующим образом:

$$u = \sum_i R_i \frac{\partial}{\partial x_i},$$

где R_i — произвольные полиномы, то для систем с симметрией эквивариантные векторные поля строятся по формулам

$$V_k = \sum_i \nabla_i J_k \frac{\partial}{\partial x_i}, \quad (5)$$

где J_k — инварианты из ЦРБИ,

$$\nabla_i J_k = \frac{\partial J_k}{\partial x_i}.$$

Эквивариантные векторные поля построены таким образом, что действие этих полей сохраняет симметрию системы. При построении нормальных форм функций с симметрией можно работать как в пространстве параметров порядка, так и в пространстве инвариантов из ЦРБИ. В последнем случае выражение для эквивариантных векторных полей имеет вид

$$V_k = \sum_{m,i} (\nabla_i J_k \nabla_i J_m) \frac{\partial}{\partial J_m}. \quad (6)$$

Следует отметить, что коммутаторы эквивариантных векторных полей также входят в алгебру этих полей, т. е. алгебра эквивариантных векторных полей должна быть замкнута относительно операции коммутирования. В остальном спектральная последовательность приведения к нормальной форме функций с симметрией вполне аналогична схеме для функций общего положения.

Универсальный характер алгоритма дает возможность получить феноменологическую модель любой степени сложности с любым числом варьируемых параметров. Кроме того, таким образом можно разделить коэффициенты потенциала Ландау на две группы: на зависящие от внешних условий (варьируемые или управляющие) параметры и не зависящие от них (модули).

Эти группы параметров играют разную роль. Бифуркационная диаграмма в пространстве управляющих параметров определяет фазовую диаграмму и остальные характеристики термодинамической системы. А модули определяют тип бифуркационной диаграммы. При выделенных значениях модулей термодинамический потенциал вырождается. Эти значения делят пространство модулей на части. Разным частям этого пространства соответствуют потенциалы одного типа, но с качественно различными бифуркационными диаграммами. Варьирование модулей в феноменологической теории фазовых переходов недопустимо, так как приводит к возможности принятия ими выделенных значений. Соответствующие им термодинамические потенциалы относятся уже к другому типу.

3. Феноменологическая модель фазовых переходов для двухкомпонентного параметра порядка

Для сравнения обоих подходов рассмотрим конкретный простой пример. Пусть проведен теоретико-групповой анализ и построен ЦРБИ для двухкомпонентного параметра порядка с инвариантами

$$J_1 = \frac{1}{2} (\eta_1^2 + \eta_2^2), \quad J_2 = \frac{1}{2} \eta_1^2 \eta_2^2.$$

В [2] исследуется трехмерная фазовая диаграмма модели четвертой степени, построенной традиционным методом:

$$\Phi = r(\eta_1^2 + \eta_2^2) + u_1(\eta_1^4 + \eta_2^4) + u_2\eta_1^2\eta_2^2, \quad (7)$$

где показано, что эта модель допускает существование двух низкосимметричных фаз ($\eta 0$) и ($\eta \eta$), причем фазовый переход между этими фазами в рамках данной модели не описывается.

Упомянутые фазы имеют общую плоскость $2u_1 = u_2$, на которой нарушаются их условия устойчивости и можно ожидать, что линия фазовых переходов лежит в этой плоскости. Вопрос о возможности фазового перехода в работе [2] решается, как обычно, добавлением членов порядка η^6 . А какой результат получается, если использовать методы теории особенностей?

Эквивариантные векторные поля в пространстве параметров порядка строятся по формулам (5)

$$V_1 = \eta_1 \frac{\partial}{\partial \eta_1} + \eta_2 \frac{\partial}{\partial \eta_2}, \quad V_2 = \eta_1 \eta_2^2 \frac{\partial}{\partial \eta_1} + \eta_1^2 \eta_2 \frac{\partial}{\partial \eta_2}.$$

В пространстве инвариантов из ЦРБИ выражение для эквивариантных векторных полей записывается по формулам (6):

$$U_k = \sum_{i,m} (\nabla_i J_k \nabla_i J_m) \frac{\partial}{\partial J_m},$$

или

$$U_k = \sum_m a_{km} \frac{\partial}{\partial J_m},$$

где $a_{km} = V_k J_m$. Для рассматриваемой системы

$$V_1 J_1 = \eta_1^2 + \eta_2^2 = 2J_1,$$

$$V_1 J_2 = V_2 J_1 = 2\eta_1^2 \eta_2^2 = 4J_2,$$

$$V_2 J_2 = \eta_1^2 \eta_2^2 (\eta_1^2 + \eta_2^2) = 4 \frac{1}{2} \eta_1^2 \eta_2^2 \frac{1}{2} (\eta_1^2 + \eta_2^2) = 4J_1 J_2.$$

Следовательно, эквивариантные векторные поля в пространстве инвариантов из ЦРБИ удобно записать в матричной форме:

$$\begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2J_1 & 4J_2 \\ 4J_2 & 4J_1 J_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial J_1} \\ \frac{\partial}{\partial J_2} \end{pmatrix}.$$

Термодинамический потенциал в окрестности нуля можно разложить в формальный ряд Тейлора:

$$\Phi = a_1 J_1 + a_2 J_1^2 + a_3 J_1^3 + b_1 J_2 + a_4 J_1^4 + c_{12} J_1 J_2 + \dots$$

Сначала рассмотрим модель с одним варьируемым параметром, т. е. примем $a_1 = 0$. Тогда однородная часть f_0 имеет вид [9, 10]

$$f_0 = b_1 J_2 + a_2 J_1^2.$$

Для обеспечения глобальной минимальности термодинамического потенциала необходимо условие $a_2 > 0$. Поэтому без ограничения общности можно положить $a_2 = 1$ (речь здесь идет, безусловно, о математическом безразмерном потенциале).

Следовательно,

$$U_1 f_0 \sim b_1 J_2 + J_1^2, \quad U_2 f_0 \sim J_1 J_2,$$

и феноменологическая модель с одним варьируемым параметром имеет вид

$$\Phi = a_1 (\eta_1^2 + \eta_2^2) + b_1 \eta_1^2 \eta_2^2 + (\eta_1^2 + \eta_2^2)^2. \quad (8)$$

Здесь коэффициент b_1 , как сказано выше, является модулем [7, 9, 10]. Потенциал (8) структурно устойчив только при $b_1 > -4$, поэтому его нельзя варьировать в широких пределах. Фазовый переход из высокосимметричной фазы в низкосимметричную происходит в точке $a_1 = 0$.

Легко видеть, что модель (8) с точностью до переобозначения коэффициентов совпадает с моделью (7), но фазовая диаграмма модели (8) одномерна, а не трехмерна, как утверждается в [2]. Варьирование коэффициентов u_1 и u_2 в модели (7) приводит к тому, что на плоскости $2u_1 - u_2 = 0$ потенциал (7) вырождается и принимает вид $\Phi = r(\eta_1^2 + \eta_2^2) + u_1(\eta_1^2 + \eta_2^2)^2$. Перенормировкой параметра порядка $\xi^2 = \eta_1^2 + \eta_2^2$ он сводится к потенциалу Ландау с одним однокомпонентным параметром порядка $\Phi = r\xi^2 + u_1\xi^4$. Это вырождение как раз связано с попыткой варьирования модуля. Поэтому модель (7) и не описывает перехода между фазами ($\eta 0$) и ($\eta \eta$).

Теперь рассмотрим модель с двумя варьируемыми параметрами.

Обратим в нуль коэффициенты a_1 и b_1 при элементах J_1 и J_2 соответственно, запишем инвариант J_2 в виде

$$J_2 = \frac{1}{4} (\eta_1^4 + \eta_2^4 - 6\eta_1^2 \eta_2^2).$$

Такое изменение J_2 удобно для проведения замены переменных $(\eta_1, \eta_2) \rightarrow (r, \varphi)$:

$$\eta_1 = r \cos \varphi, \quad \eta_2 = r \sin \varphi.$$

Тогда

$$J_1 = r^2, \quad J_2 = r^4 \cos 4\varphi.$$

Соответственно изменяются эквивариантные векторные поля:

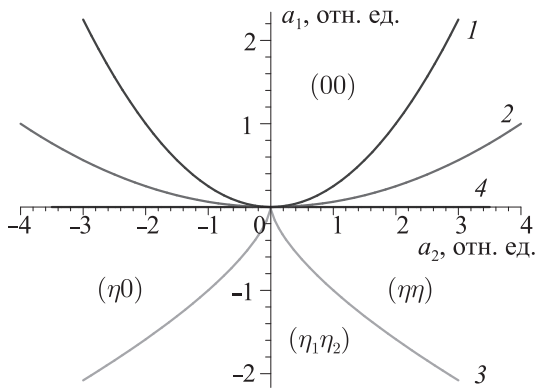
$$\begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} J_1 & 2J_2 \\ 2J_2 & 4J_1^3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial J_1} \\ \frac{\partial}{\partial J_2} \end{pmatrix}.$$

Главная однородная часть термодинамического потенциала $f_0 = J_1^2$ и

$$U_1 f_0 \sim J_1^2 \in I_{\nabla f_0}, \quad U_2 f_0 \sim J_1 J_2 \in I_{\nabla f_0},$$

где $I_{\nabla f_0}$ — идеал однородной части f_0 [9, 10]. Значит, мономы J_1^2 и $J_1 J_2$ лежат в идеале. Но идеал не закрылся по переменной J_2 , поэтому необходимо рассмотреть однородную часть $f_1 = J_2^2$ и построить оператор $U = \alpha U_1 + \beta U_2$, в котором коэффициенты α и β определяются из условия

$$U f_0 = 0, \quad U f_1 = \alpha J_1^2 + \beta J_1 J_2 = 0,$$



Фазовая диаграмма модели (9): 1 — граница фазовых переходов первого рода, 2, 4 — границы равновесия фаз, 3 — граница фазовых переходов второго рода

откуда $\alpha = aJ_2$, $\beta = J_1$. Тогда

$$U = c_1 J_1 J_2 \frac{\partial}{\partial J_1} + (c_2 J_2^2 + c_3 J_1^4) \frac{\partial}{\partial J_2},$$

где $c_1 - c_3$ — некоторые численные коэффициенты. Очевидно, что из мономов в выражении

$$U \hat{f}_1 = (c_2 J_2^2 + c_3 J_1^4) 2J_2$$

только J_2^3 не принадлежит идеалу $I_{\nabla \hat{f}_0}$ и порождает идеал $I_{\nabla \hat{f}_1}$. На этом шаге получаем конечную локальную алгебру, а модель имеет вид

$$\Phi = a_1 J_1 + J_1^2 + b_1 J_2 + \mu J_2^2.$$

Здесь a_1 , b_1 — варьируемые параметры, μ — модуль. В переменных (r, φ)

$$\phi = \frac{1}{2} a_1 r^2 + \frac{1}{4} r^4 + \frac{1}{4} b_1 r^4 \cos 4\varphi + \frac{1}{8} \mu r^8 \cos^2 4\varphi. \quad (9)$$

Модель, описываемая потенциалом (9), допускает существование четырех устойчивых фаз — высокосимметричной фазы $r = 0$, $\varphi = 0$ ($\eta_1 = \eta_2 = 0$) и трех низкосимметричных фаз:

- 1) $r \neq 0$, $\sin 4\varphi = 0$, $\cos 4\varphi = 1$ ($\eta_1 \neq 0$, $\eta_2 = 0$);
- 2) $r \neq 0$, $\sin 4\varphi = 0$, $\cos 4\varphi = -1$ ($\eta_1 = \eta_2 = \eta \neq 0$);
- 3) $r \neq 0$, $\sin 4\varphi \neq 0$ ($\eta_1 \neq \eta_2 \neq 0$).

Фазовая диаграмма данной модели изображена на рисунке.

Заключение

Таким образом, применение методов теории особенностей (теории катастроф) при построении феноменологических моделей позволяет избежать ошибок, связанных со структурной неустойчивостью термодинамического потенциала, и появления нефизических результатов на фазовой диаграмме модели.

Список литературы

1. Гуфан Ю.М. Структурные фазовые переходы. М., 1982.
2. Изюмов Ю.А., Сыромятников В.Н. Фазовые переходы и симметрия кристаллов. М., 1984.
3. Гуфан Ю.М. // ФТТ. 1971. **13**. С. 225.
4. Sakhenko V.P., Chechin G.M. // Computers & Mathematics with Applications. 1988. **16**. P. 453.
5. Howard C.J., Stoks H.T. // Acta Crystallographica B. 1998. **54**. P. 782.
6. Гуфан Ю.М., Дмитриев В.П., Рошаль В.П. Фазы Ландау в плотноупакованных структурах. Ростов-на-Дону, 1990.
7. Арнольд В.И., Варченко А.Н., Гусейн-Заде С.М. Особенности дифференцируемых отображений. Т. 1. Классификация критических точек, каустик и волновых фронтов. М., 1982. (Arnold V.I., Gusein-Zade S.M., Varchenko A.N. Singularities of Differentiable Maps. Vol. 1. The Classification of Critical Sets, Caustics, and Wave Fronts. Birkhauser; Boston; Basel; Stuttgart, 1985.)
8. Арнольд В.И. Теория катастроф. М., 1990. (Arnold V.I. Catastrophe Theory. Springer-Verlag, 2004.)
9. Кутыин Е.И., Лорман В.Л., Павлов С.В. // УФН. 1991. **161**, № 6. С. 109. (Kut'in E.I., Lorman V.L., Pavlov S.V. // Soviet Physics — Uspekhi. 1991. **34**, N 10. P. 497.)
10. Павлов С.В. Методы теории катастроф в исследованиях фазовых переходов. М., 1993.
11. Постон Т., Стюарт И. Теория катастроф и ее применения. М., 1980. (Poston T., Stewart I. Catastrophe Theory and Its Applications. Pitman, 1978.)
12. Гилмор Р. Прикладная теория катастроф. М., 1984. (Giltmore R. Catastrophe Theory for Scientists and Engineers. John Wiley & Sons, 1981.)
13. Томпсон Дж.М.Т. Неустойчивости и катастрофы в науке и технике. М., 1985. (Thompson J.M.T. Instabilities and Catastrophes in Science and Engineering. John Wiley & Sons, 1982.)
14. Гуфан Ю.М., Сахненко В.П. // ЖЭТФ. 1972. **63**. 1909. (Sov. Phys. JETP. 1973. **36**. P. 1009.)
15. Griffiths R.B. // Phys. Rev. B. 1975. **12**. P. 345.
16. Павлов С.В. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1988. **29**. С. 67. (Pavlov S.V. // Moscow University Phys. Bull. 1988. **43**, N 4. P. 73.)
17. Гуфан Ю.М., Ларин Е.С. // ФТТ. 1980. **22**. С. 1629.
18. Galam S., Hatch D.M. // Phys. Rev. B, 1986. **34**. P. 7813.
19. Гуфан Ю.М., Сахненко В.П. // ЖЭТФ. 1975. **69**. С. 1428.
20. Таланов В.М., Широков В.Б., Торгашев В.И. и др. // Физика и химия стекла. 2007. **34**. С. 822.
21. Shirokov V.B., Yuzyuk, Dkhil B. et al. // Phys. Rev. B. 2007. **75**. P. 224116.

The construction of phenomenological models of phase transitions using equivariant catastrophe theory methods**S. V. Pavlov***Department of General Physics and Condensed Matter Physics, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University, Moscow 119991, Russia.**E-mail: swcusp@mail.ru.*

A method for the construction of phenomenological models of phase transitions using the equivariant theory of singularities of differentiable maps with the symmetry of the order parameter (the equivariant catastrophe theory) is considered. This method differs from the traditional series expansion in powers of the order parameter in that, firstly, there is no requirement that the order parameters be small, and only the number of thermodynamic parameters that are varied in the experiment (temperature, pressure, etc.) is given; secondly, derived models have structural stability for an adequate description of the anomalies of the physical properties near the phase transitions. As an example to illustrate the method, a model of phase transitions with a two-component order parameter is constructed.

Keywords: phase transitions, phenomenological model, catastrophe theory, equivariant vector fields.

PACS: 77.80.Bh.

Received 14 September 2015.

English version: *Moscow University Physics Bulletin*. 2016. **71**, No. 2. Pp. 202–207.

Сведения об авторе

Павлов Сергей Васильевич — канд. физ.-мат. наук, доцент; тел.: (495) 939-11-28, e-mail: swcusp@mail.ru.