ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ ВЕЩЕСТВА

Классификация феноменологических моделей фазовых переходов методами эквивариантной теории катастроф: модели с $L = C_{nv}$ $(n = 3, 4, 6)$

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 03.05.2016, подписана в печать 29.06.2016.

Предложена классификация феноменологических моделей фазовых переходов для двухкомпонентного параметра порядка методами эквивариантной теории катастроф. Построение моделей проводится не простым разложением термодинамического потенциала в ряд по степеням параметра порядка, а на основе числа термодинамических параметров, варьируемых в эксперименте (температура, давление, химпотенциалы примесей и т. д.). Проведена классификация моделей с группами симметрии параметра порядка $L = C_{nv}$ $(n = 3, 4, 6)$ с числом варьируемых параметров от 1 до 5.

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

УДК: 537.9. PACS: 77.80.Bh.

Введение

Феноменологические модели фазовых переходов должны удовлетворять, по крайней мере, двум условиям: 1) глобальная минимальность; 2) структурная устойчивость.

Первое условие выполняется, если члены высших степеней в разложении термодинамического потенциала имеют четные порядки и коэффициенты при этих членах положительны. Второе условие при простом разложении в ряд по степеням параметра порядка (ПП) до $2n$-й степени $(n > 1)$ всегда выполняется только для одного однокомпонентного ПП [1, 2]. В случае нескольких взаимодействующих ПП или многокомпонентных ПП этот метод далеко не всегда позволяет построить структурно устойчивые феноменологические модели. Только применение теории катастроф (теории особенностей дифференцируемых отображений) [3–7] обеспечивает структурную устойчивость феноменологической модели. Элементарная теория катастроф давно применяется для построения и анализа феноменологиеских моделей [8–12], однако, по меткому выражению Постона и Стюарта, «привлечение теории катастроф в термодинамику... произвело больше тепла, чем света» [8]. И лишь эквивариантная теория катастроф, учитывающая симметрию ПП, [6, 7, 13, 14] позволяет построить структурно устойчивую феноменологиескую модель. В этом случае необходимыми и достаточными исходными данными являются: а) целый рациональный базис инвариантов (ЦРБИ), определяемый на основе группы симметрии ПП (L-группы [1]), и б) число параметров, варьируемых в эксперименте (температура, давление, химпотенциалы примесей и т. д.). При такой постановке задачи можно провести классификацию моделей по числу управляющих (варьируемых) параметров. В работе [15] была предпринята попытка классификации феноменологических моделей фазовых переходов для двух однокомпонентных взаимодействующих параметров порядка.

1. Алгоритм построения феноменологических моделей фазовых переходов методами теории катастроф

Математический метод, представленный ниже, основан на результатах теории особенностей дифференцируемых отображений, разработанных еще в 1970–1980-е гг. Однако он изложен в основном в труднодоступной математической форме [3–5]. В работах [6, 7, 13–15] он успешно применялся для построения структурно устойчивых феноменологических моделей. Для того чтобы слелать 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 дистибутивности. Множество полиномов образуют коммутативное кольцо. Пусть $R[\boldsymbol{x}]$ — кольцо полиномов n переменных $\boldsymbol{x} = \{x_1, x_2, \ldots, x_n\}$. 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 пере-

менной: $R = \{1, x, x^2, x^3, \ldots, x^n, x^{n+1}, \ldots\}$, то идеалом в $R[x]$ является подкольцо $I = \{x^n, x^{n+1}, \ldots\}$. 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 $Q = \{1, x, x^2, x^3, \ldots, x^{n-1}\}$.

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

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

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

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

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

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 [4]. Суть этого метода заключается в следующем.

Предположим, дана гладкая функция n переменных F и зависящая от m параметров α_i. Тогда в окрестности вырожденной критической точки (за которую без ограничения общности можно принять точку ноль) функцию F можно разложить в формальный степенной ряд по степеням x_i

$$F(\boldsymbol{x}) = \sum_{q=1}^{\infty} a_q(\alpha_1, \ldots, \alpha_m)\boldsymbol{x}^q, \tag{3}$$

где $q = (q_1, \ldots q_n)$, $q_i = \deg x_i$.

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 оставшегося «хвоста» ряда (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 в виде суперпозиции однородных или квазиоднородных составляющих

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

степеней N, $N+1$, $N+2$, ... и из оставшегося «хвоста» ряда следует удалить члены, принадлежащие градиентному идеалу, т. е. полиномы

$$u = \sum_i R_i(\boldsymbol{x})\frac{\partial F}{\partial x_i},$$

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

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

Чтобы получить образующие градиентного идеала $I_{\nabla F}$ некоторого полинома $F(\boldsymbol{x})$, достаточно подействовать на квазиоднородные составляющие f_i «хвоста» (4) образующими $\frac{\partial}{\partial x_i}$ алгебры U.

Сначала следует найти градиентный идеал $I_{\nabla f_0}$, действуя на квазиоднородную часть f_0 всеми векторными полями из U:

$$\sum_i R_i \frac{\partial f_0}{\partial x_i} \in I_{\nabla f_0}.$$

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 S_{f_0} квазиоднородной части 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 $S_{f_0+f_1}$, 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

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

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

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

которая и определяет конечный вид отрезка степенного ряда, 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. Эквивариантные векторные поля определяются таким образом, что действие этих полей сохраняет симметрию системы. В этом случае образующие алгебры векторных полей должны иметь вид

$$V_k = \sum_i \nabla_i J_k \frac{\partial}{\partial \eta_i}, \tag{5}$$

где J_k — инварианты из ЦРБИ; η_i — компоненты ПП, играющие здесь роль независимых переменных; $\nabla_i J_k = \frac{\partial J_k}{\partial \eta_i}$.

При построении нормальных форм термодинамических потенциалов 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

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

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, называемые модулями.

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.

2. Построение эквивариантных векторных полей для групп $L = C_{nv}$ в пространстве базисных инвариантов и пример: феноменологическая модель фазовых переходов для параметра порядка с $L = C_{6v}$

Базисные инварианты для групп $L = C_{nv}$ $(n = 3, 4, 6)$ удобно представить в виде

$$J_1 = \eta\eta^*, \quad J_2 = \frac{1}{2}\left(\eta^n + \eta^{*n}\right),$$

где $\eta = \eta_1 + i\eta_2$, звездочка означает комплексное сопряжение; η_1 и η_2 — компоненты ПП. Эквивариантные векторные поля в пространстве ПП определяются по формулам (5):

$$V_1 = 2\eta_1 \frac{\partial}{\partial \eta_1} + 2\eta_2 \frac{\partial}{\partial \eta_2},$$

$$V_2 = \frac{n}{2}\left[\left(\eta^{n-1} + \eta^{*n-1}\right)\frac{\partial}{\partial \eta_1} + i\left(\eta^{n-1} - \eta^{*n-1}\right)\frac{\partial}{\partial \eta_2}\right],$$

а в пространстве базисных инвариантов — по формулам (6):

$$\begin{aligned} U_1 &= 4J_1 \frac{\partial}{\partial J_1} + 2nJ_2 \frac{\partial}{\partial J_2}, \\ U_2 &= 2nJ_2 \frac{\partial}{\partial J_1} + n^2 J_1^{n-1} \frac{\partial}{\partial J_2}. \end{aligned} \tag{7}$$

Для дальнейших расчетов сделаем замену переменных $(\eta_1, \eta_2) \to (r, \varphi)$: $\eta = re^{i\varphi}$. Тогда $J_1 = r^2$, $J_2 = r^n \cos n\varphi$.

Рассмотрим в качестве примера построение феноменологической модели фазовых переходов с группой симметрии параметра порядка $L = C_{6v}$ с тремя варьируемыми параметрами. В этом случае ЦРБИ для двухкомпонентного ПП имеет вид

$$J_1 = r^2, \quad J_2 = r^6 \cos 6\varphi$$

и эквивариантные векторные поля в пространстве базисных инвариантов определяются по формуле (7) с $n = 6$:

$$\begin{aligned} U_1 &= 4J_1 \frac{\partial}{\partial J_1} + 12J_2 \frac{\partial}{\partial J_2}, \\ U_2 &= 12J_2 \frac{\partial}{\partial J_1} + 36J_1^5 \frac{\partial}{\partial J_2}. \end{aligned} \tag{8}$$

Разложим термодинамический потенциал в ряд по степеням базисных инвариантов и выделим слагаемые, однородные по степеням ПП. Тогда

$$F = \underbrace{a_1 J_1}_{2} + \underbrace{a_2 J_1^2}_{4} + \underbrace{a_3 J_1^3 + a_4 J_2}_{6} + \underbrace{a_5 J_1^4 + a_6 J_1 J_2}_{8} + \dots\ . \tag{9}$$

Под фигурными скобками указаны степени слагаемых по компонентам ПП. Подходящим подбором параметров, варьируемых в эксперименте, можно положить $a_1 = a_2 = a_3 = 0$ (такой подбор гарантируется теоремой о неявной функции [3, 4]). Тогда из (9) следует, что однородная часть наименьшей степени

шесть $f_0 = J_2$. Подействуем на нее эквивариантными векторными полями (8):

$$U_1 f_0 = 12 J_2 \in I_{\nabla f_0}, \quad U_2 f_0 = 36 J_1^5 \in I_{\nabla f_0}. \tag{10}$$

Из (10) следует, что все мономы $J_1^{k_1} J_2^{k_2}$ с $k_1 \geqslant 0$, $k_2 > 1$, а также с $k_1 \geqslant 5$, $k_2 \geqslant 0$ принадлежат идеалу, и безразмерный математический термодинамический потенциал с тремя варьируемыми параметрами имеет вид

$$F = a_1 J_1 + a_2 J_1^2 + a_3 J_1^3 + J_2 + b_1 J_1^4. \tag{11}$$

Последнее слагаемое в модели (11) не попало в градиентный идеал $I_{\nabla F}$, и коэффициент b_1 в этом слагаемом не является варьируемым параметром. Как уже отмечалось выше, в теории катастроф и теории особенностей дифференцируемых отображений такие коэффициенты называются модулями [3, 4, 6, 7]. Модули отличаются от варьируемых параметров тем, что не зависят от внешних термодинамических параметров и определяют только тип бифуркуционной фазовой диаграммы. В данном случае $b_1 > 0$, что необходимо для обеспечения глобальной минимальности феноменологической модели (11). Этот результат не может быть получен без применения методов теории катастроф.

Аналогичным образом строятся и другие феноменологические модели. Как видно из данного примера, для построения потребовалось только знание группы симметрии ПП и число управляющих параметров, варьируемых в эксперименте.

3. Феноменологические модели с $L = C_{nv}$ и $c = 1, \ldots, 5$

Построение феноменологических моделей фазовых переходов методами теории катастроф позволяет провести классификацию термодинамических потенциалов по числу управляющих параметров. Подобные классификации проводились для элементарных катастроф [8, 9, 16], для функций общего положения, причем в последнем случае оказалось, что классификация должна проводиться не по числу управляющих параметров, а по количеству модулей в нормальной форме функций [3, 4]. В работе [17] представлена классификация так называемых min-функций, т. е. функций общего положения, имеющих в нуле глобальный минимум. Min-функции могут использоваться в качестве феноменологических моделей фазовых переходов с взаимодействующими параметрами порядка в системах, не обладающих симметрией [18]. Классификация нормальных форм функций с симметрией, которыми являются феноменологические модели фазовых переходов с двухкомпонентными параметрами порядка, представлена в табл. 1–3. Коэффициенты a_i — управляющие параметры, b_i — модули.

Следует отметить, что в теории особенностей дифференцируемых отображений максимальное число невырожденных критических точек, на которые распадается вырожденная критическая точка при изменении параметров, называется кратностью μ вырожденной критической точки. Кратность связана с числом управляющих параметров, варьируемых в эксперименте c и модальностью m (количеством модулей) простым соотношением [3, 4]

$$\mu = m + c + 1.$$

В табл. 1–3 в первом столбце указано число управляющих параметров моделей, во втором — однородная часть функции f_0. В третьем столбце приведены феноменологические модели F, соответствующие данному числу управляющих параметров, в пятом и шестом столбцах указаны модальность и кратность вырожденной критической точки, которой является точка фазового перехода. Следует отметить, что кратность учитывает не только число точек минимума, но и максимумы. Поэтому количество особых точек [19] на фазовых диаграммах моделей определяется как $[\mu/2]$, где квадратные скобки означают целую часть числа.

Некоторые модели, представленные в таблицах, внешне совпадают с моделями, построенными традиционным методом простого разложения в ряд Тейлора [20–22]. Однако есть два существенных отличия. Во-первых, в теории катастроф разложение проводится в формальный, т. е. не обязательно сходящийся ряд Тейлора и не требующий малости ПП. Во-вторых, не все феноменологические коэффициены в термодинамическом потенциале зависят от параметров, варьируемых в эксперименте. Однако в ряде работ последних лет [14, 15, 23–25] методы эквивариантной теории катастроф успешно применяются для построения феноменологиеских моделей фазовых переходов.

4. Анализ фазовых диаграмм

Фазовые диаграммы моделей с одним варьируемым параметром порядка одномерны и содержат одну вырожденную критическую точку фазовых переходов из высокосимметричной фазы (00) в низкосимметричную ($\eta 0$) или ($\eta\eta$). Перенормировкой ПП и феноменологических коэффициентов можно показать [13], что феноменологические модели в этом случае сводятся к потенциалу Ландау для одного однокомпонентного ПП. У моделей с двумя варьируемыми параметрами — двумерные фазовые диаграммы. Примечательно, что эти модели для $L = C_{3v}$ и $L = C_{4v}$ имеют не только одинаковый вид в пространстве базисных инвариантов

$$\Phi = a_1 J_1 + a_2 J_2 + J_1^2 + b_1 J_2^2 \tag{12}$$

(различие только в инвариантах J_2), но и одинаковую топологию фазовых диаграмм. Потенциалы (12) описывают все возможные фазы, присущие моделям с данной симметрией ПП. Для $L = C_{3v}$ это фазы: I. (00), II. ($\eta 0$), III. ($-\eta 0$), IV. ($\eta_1 \eta_2$);

Таблица 1

Феноменологические модели с $L = C_{3v}$

c	f_0	F	m	μ
1	J_2	Нет модели		
2	J_1^2	$a_1J_1 + a_2J_2 + J_1^2 + b_1J_2^2$	1	4
3	J_1J_2	$a_1J_1 + a_2J_2 + a_3J_1^2 + J_1J_2 + b_1J_2^2 + J_1^3$	1	5
4	$J_1^3 + J_2^2$	$a_1J_1 + a_2J_2 + a_3J_1^2 + a_4J_1J_2 + J_1^3 + J_2^2 + J_1J_2^2 + b_1J_1^4$	1	6
5	J_2^2	$a_1J_1 + a_2J_2 + a_3J_1^2 + a_4J_1J_2 + a_5J_1^3 + J_2^2 + b_1J_1^4 + b_2J_1^5$	2	8

Таблица 2

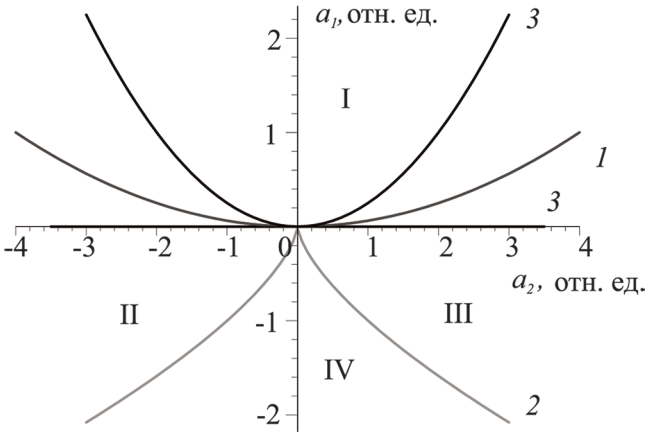
Феноменологические модели с $L = C_{4v}$

c	f_0	F	m	μ
1	$J_1^2 + b_1J_2$	$a_1J_1 + J_1^2 + b_1J_2$	1	3
2	J_1^2	$a_1J_1 + a_2J_2 + J_1^2 + b_1J_2^2$	1	4
3	$J_1^3 + b_1J_1J_2$	$a_1J_1 + a_2J_2 + a_3J_1^2 + b_1J_1J_2 + J_1^3 + b_2J_2^2 + J_1^4$	2	6
4	J_1^3	$a_1J_1 + a_2J_2 + a_3J_1^2 + a_4J_1J_2 + J_1^3 + b_1J_2^2 + b_2J_1J_2^2$	2	7
5	$J_1^4 + b_1J_1^2J_2 + J_2^2$	$a_1J_1 + a_2J_2 + a_3J_1^2 + a_4J_1J_2 + a_5J_1^3 + J_2^2 + J_1^4 + b_1J_1^2J_2 + b_2J_1^5 + b_3J_1^6 + b_4J_2^3$	4	10

Таблица 3

Феноменологические модели с $L = C_{6v}$

c	f_0	F	m	μ
1	J_1^2	$a_1J_1 + J_1^2 + b_1J_2$	1	3
2	$J_1^3 + b_1J_2$	$a_1J_1 + a_2J_1^2 + J_1^3 + J_2 + b_1J_1J_2$	1	4
3	J_2	$a_1J_1 + a_2J_1^2 + a_3J_1^3 + J_2 + b_1J_1^4$	1	5
4	$J_1^4 + J_1J_2$	$a_1J_1 + a_2J_1^2 + a_3J_1^3 + a_4J_2 + J_1^4 + J_1J_2 + b_1J_1^5 + b_2J_1^6$	2	7
5	J_1J_2	$a_1J_1 + a_2J_1^2 + a_3J_1^3 + a_4J_2 + a_5J_1^4 + J_1J_2 + b_1J_1^5 + b_2J_2^2$	2	8



Фазовая диаграмма модели (12): *1* — граница фазовых переходов первого рода, *2* — граница фазовых переходов второго рода, *3* — границы равновесия фаз

модель с $L = C_{4v}$ описывает фазы I. (00), II. ($\eta 0$), III. ($\eta\eta$), IV. ($\eta_1\eta_2$) (рисунок). Парабола *1* является границей фазовых переходов 1-го рода, полукубическая парабола *2* в полуплоскости $a_1 < 0$ — граница фазовых переходов 2-го рода в низкосимметричную фазу ($\eta_1\eta_2$), кривые *3* — границы равновесия фаз. Точка 0 на фазовой диаграмме — тетракритическая точка, в которой сходятся границы всех четырех фаз, т. е. кратность этой точки равна $\mu = 4$ (см. табл. 1 и 2).

Заключение

Применение методов теории катастроф с учетом симметрии ПП (L-группы) позволяет классифицировать феноменологические модели фазовых переходов по числу термодинамичеких параметров, варьируемых в эксперименте. При этом феноменологические коэффициенты в разложении термодинамического потенциала делятся на зависящие от внешних условий (управляющие параметры) и не зависящие от них (модули). Эти результаты нельзя получить, используя традиционный метод построения феноменологических моделей разложением в ряд по степеням малого параметра или малых ПП. Попытка варьирования модуля в широких пределах в отличие от управляющего параметра может привести к потере

структурной устойчивости и глобальной минимальности, а также к появлению на фазовой диаграмме модели безгистерезисных фазовых переходов первого рода, как это сделано в работе [2]. Классификация позволяет использовать готовые структурно устойчивые модели с разной степенью сложности и размерности фазовых диаграмм в зависимости от числа варьируемых параметров (температуры, давления, химпотенциалов примесей и т. д.).

Список литературы

1. *Гуфан Ю.М.* Структурные фазовые переходы. М., Наука, 1982.
2. *Изюмов Ю.А., Сыромятников В.Н.* Фазовые переходы и симметрия кристаллов. М.: Наука, 1984. (*Izyumov Yu.A., Syromyatnikov V.N.* Phase Transitions and Crystal Symmetry. Kluwer Academic Publisher, 1990.)
3. *Арнольд В.И.* // УМН. 1975. **30**, № 5. С. 3. (*Arnold V.I.* // Russian Mathematical Surveys. 1975. **30**, N 5. P. 1.
4. *Арнольд В.И., Варченко А.Н., Гусейн-Заде С.М.* Особенности дифференцируемых отображений. Т. 1. Классификация критических точек, каустик и волновых фронтов. М.: Наука, 1982. (*Arnold V.I., Varchenko A.N., Gusein-Zade S.M.* Singularities of Differentiable Maps. Vol. 1. The Classification of Critical Sets, Caustics and Wave Fronts. Boston; Basel; Stuttgart: Birkhauser, 1985.)
5. *Арнольд В.И.* Теория катастроф. М., Наука, 1990. (*Arnold V.I.* Catastrophe Theory. Springer-Verlag, 2004.)
6. *Кутьин 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.)
7. *Павлов С.В.* Методы теории катастроф в исследованиях фазовых переходов. М., 1993.
8. *Постон Т., Стюарт И.* Теория катастроф и ее применения. М.: Мир. 1980. (*Poston T., Stewart I.* Catastrophe Theory and Its Applications. Pitman, 1978.)
9. *Гилмор Р.* Прикладная теория катастроф. М., Мир. 1984. (*Gilmore R.* Catastrophe Theory for Scientists and Engineers. John Wiley & Sons, 1981.)
10. *Osada K.* // J. Phys. Soc. Jap. 1989. **58**, N 3. P. 905.
11. *Pershin Vl.K., Konoplev V.A.* // Phys. Lett. 1990. **148**, N 5. P. 275.
12. *Bogdan T.V., Wales D.J.* // J. Chem. Phys. 2004. **120**, N 23. P. 11090.
13. *Павлов С.В.* // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2016. № 2. С. 62. (*Pavlov S.V.* // Moscow University Phys. Bull. 2016. N 2. P. 202.)
14. *Шамшин А.П., Изотова Т.М., Матюшкин Э.В., Десятниченко А.В.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2004. **68**, № 7. С. 945. (*Shamshin A.P., Izotova T.M., Matyushkin E.V., Desyatnichenko A.V.* // Bull. of the Russian Academy of Sciences. Physics. 2004. **68**, N 7. P. 1061.)
15. *Изотова Т.М., Шамшин А.П., Матюшкин Э.В.* // Информ.-вычислит. технологии в решении фундамент. и прикл. науч. задач. Сессия ИВТН-2004. Сб. материалов. М., 2004. http://www.ivtn.ru/2004/physmath/enter/r_pdf/dp04_30.pdf.
16. *Thom R.* Stabilite et Morphogeese. N. Y.: Benjamin, 1972.
17. *Васильев В.А.* // Функциональный анализ и его приложения. 1977. **11**, № 3. С. 1.
18. *Павлов С.В.* // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1990. № 1. С. 70. (*Pavlov S.V.* // Moscow University Phys. Bull. 1990. **45**, N 1. P. 73.)
19. *Гуфан Ю.М., Ларин Е.С.* // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1979. **43**, № 8. С. 1567. (*Gufan Yu.M., Larin E.S.* // Bull. of the Acad. of Sci. of the USSR: Physics. 1979. **43**, № 8. P. 1567.)
20. *Гуфан Ю.М., Сахненко В.П.* // ЖЭТФ. 1972. **63**, № 5. С. 1909. (*Gufan Yu.M., Sakhnenko V.P.* // Soviet Physics JETF. 1973. **36**, N 5. P. 1009.)
21. *Муковнин А.А., Таланов В.М.* // Наносистемы: физика, химия, математика. 2012. № 3. С. 122. (*Mukovnin A.A., Talanov V.M.* // Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics. 2012. N 3(4). P. 122.)
22. *Муковнин А.А., Таланов В.М.* // Журн. физ. химии. 2012. **86**, № 12. С. 1920. (*Mukovnin A.A., Talanov V.M.* // Russian J. of Phys. Chem. A. 2012. **86**, N 12. P. 1785.)
23. *Таланов В.М., Широков В.Б., Торгашев В.И.* и др. // Физика и химия стекла. 2007. **34**. С. 822.
24. *Таланов В.М., Широков В.Б.* // Усп. соврем. естествознания. 2012. № 3. С. 98.
25. *Широков В.Б.* // Вестн. Южного научного центра РАН. 2012. **8**, № 2. С. 3.

Classification of phenomenological phase transition models by the methods of equivariant catastrophe theory: models with $L = C_{nv}$ ($n = 3, 4, 6$)

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 classification of phenomenological phase-transition models for the two-component order parameter by the methods of equivariant catastrophe theory is proposed. The models are constructed on the basis of the number of thermodynamic parameters that are varied in an experiment (temperature, pressure, chemical potentials of admixtures, etc.) instead of the simple expansion of the thermodynamic potential in an order parameter power series. The classification of models with the order parameter symmetry groups $L = C_{nv}$ ($n = 3, 4, 6$) with the number of varied parameters from 1 to 5 is performed.

Keywords: phase transition, phenomenological model, catastrophe theory, equivariant vector fields.
PACS: 77.80.Bh.
Received 3 May 2016.
English version: *Moscow University Physics Bulletin*. 2016. **71**, No. 5. Pp. 508–513.

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