ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ ВЕЩЕСТВА

Классификация феноменологических моделей фазовых переходов с трехкомпонентным параметром порядка методами теории катастроф: $L = T_d(\bar{4}3m)$

С. В. Павлов[a]

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.

Поступила в редакцию 18.10.2017, после доработки 06.12.17, принята к публикации 11.12.2018.

Методами эквивариантной теории катастроф проведена классификация феноменологических моделей фазовых переходов с трехкомпонентным параметром порядка и с числом управляющих параметров от 1 до 4. Анализ фазовых диаграмм полученных моделей показал, что для описания всех низкосимметричных фаз требуется меньшее число членов разложения в степенной ряд, чем в модели, построенной традиционным методом с учетом всех слагаемых до $2n$-й степени ($n > 1$). Проведено сопоставление теоретической температурной зависимости теплоемкости с экспериментальными данными в соединении GaV_4S_8.

Ключевые слова: фазовые переходы, феноменологическая модель, теория катастроф, эквивариантные векторные поля, фазовая диаграмма.
УДК: 537.9. PACS: 77.80.Bh.

ВВЕДЕНИЕ

В работах [1–3] исследованы термодинамические потенциалы с трехкомпонентным параметром порядка (ПП), преобразующимся по неприводимому представлению с группой симметрии $L = T_d(\bar{4}3m)$. Феноменологические модели с такой симметрией ПП описывают последовательности фазовых переходов (ФП) в суперионных проводниках [4], фазах Лавеса [5], борацитах [6], нитритах щелочных металлов [7] и ряде других соединений.

Метод построения феноменологических моделей, основанный на разложении термодинамического потенциала в степенной ряд и учете всех слагаемых, вплоть до $2n$-й степени ($n > 1$), приводит к большому числу феноменологических коэффициентов, особенно для трехкомпонентного ПП. Так, в модели 8-й степени, которая описывает фазовые переходы во все возможные низкосимметричные фазы, 14 слагаемых. Исследование фазовой диаграммы такой модели сопряжено с определенными техническими трудностями. Кроме того, на фазовой диаграмме модели могут появляться структурно неустойчивые области, существование которых заранее трудно предугадать.

Метод, основанный на применении теории катастроф (теории особенностей дифференцируемых отображений) [8, 9] с применением эквивариантных векторных полей [10–12], при котором учитывается симметрия ПП, обеспечивает построение структурно устойчивых моделей, которые описывают низкосимметричные фазы с меньшим числом слагаемых. При этом исходными данными являются только целый рациональный базис инвариантов (ЦРБИ), однозначно определяемый группой симметрии ПП (L-группой [13]) и число управляющих параметров, варьируемых в эксперименте. И самое главное, такой подход позволяет проводить классификацию феноменологических моделей по числу управляющих параметров. В [14, 15] положено начало такой классификации для взаимодействующих однокомпонентных и двухкомпонентных ПП. Цель данной работы — классификация феноменологических моделей для трехкомпонентного ПП с группой $L = T_d$, сопоставление полученных моделей с термодинамическими потенциалами, построенными традиционным методом, исследование сечений фазовых диаграмм, теоретические зависимости тепловых свойств и сопоставление с экспериментальными результатами в соединении GaV_4S_8.

1. МЕТОД ПОСТРОЕНИЯ ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ И КЛАССИФИКАЦИОННАЯ ТАБЛИЦА

Метод построения феноменологических моделей с помощью эквивариантных векторных полей изложен в работах [10–12, 15], поэтому остановимся на нем вкратце.

Как отмечено выше, исходными данными являются ЦРБИ и c — число управляющих параметров, зависящих от внешних условий (температуры, давления, химпотенциалов примесей и т. д.). Предполагая, что термодинамический потенциал Ф является гладкой функцией в окрестности точки ФП, которая является вырожденной критической точкой [8, 9], его можно разложить в ряд по степеням инвариантов из ЦРБИ и подбором варьируемых параметров обратить в нуль первые c членов разложения. Из оставшегося «хвоста» ряда подходящей гладкой заменой переменных можно удалить члены, не влияющие на топологию фазовой диаграммы. Конструктивно метод состоит в том, что «хвост» степенного ряда разбивается на однородные (или квазиоднородные) части по степеням ПП

$$F = f_0 + f_1 + f_2 + \dots \quad (1)$$

степеней N, $N+1$, $N+2$, ... и на каждую однородную часть действуют эквивариантные векторные поля вида [10–12]

$$U_k = \sum_{m,i} (\nabla_i J_k \nabla_i J_m) \frac{\partial}{\partial J_m} \quad (2)$$

[a] E-mail: swcusp@mail.ru

Таблица. Феноменологические модели с $L = T_d(\bar{4}3m)$

c	f_0	F	m	μ
1	J_2	$a_1J_1 + J_2 + b_1J_1^2$	1	3
2	$J_3 + J_1^2$	$a_1J_1 + a_2J_2 + J_3 + b_1J_1^2 + b_2J_1^3 + b_3J_2^2$	3	6
3	J_1^2	$a_1J_1 + a_2J_2 + a_3J_3 + J_1^2 + b_1J_2^2 + b_2J_3^2 + b_3J_2J_3$	3	7
4	J_1J_2	$a_1J_1 + a_2J_2 + a_3J_1^2 + a_4J_3 + J_1J_2 + b_1J_1^3 + b_2J_1^4 + b_3J_1^5 + b_4J_2^2 + b_5J_3^2$	5	10

где J_k — инварианты из ЦРБИ, $\nabla_i J_k = \frac{\partial J_k}{\partial \eta_i}$, η_i — компоненты ПП. Получившиеся в результате полиномы $U_k f_0$, $U_k f_1$, … являются образующими градиентного идеала $I_{\nabla F}$, и фактор-алгебра $Q = F/I_{\nabla F}$ определяет искомую феноменологическую модель.

Поясним вышеизложенную схему примером построения феноменологической модели с трехкомпонентным ПП (η_1, η_2, η_3), симметрией ПП $L = T_d$ и с числом управляющих параметров $c = 2$. Представим ЦРБИ в виде

$$J_1 = \eta_1^2 + \eta_2^2 + \eta_3^2, \quad J_2 = \eta_1\eta_2\eta_3, \quad J_3 = \eta_1^2\eta_2^2 + \eta_2^2\eta_3^2 + \eta_1^2\eta_3^2. \tag{3}$$

Здесь J_1, J_2, J_3 — базисные инварианты, η_1, η_2, η_3 — компоненты ПП.

Разложим термодинамический потенциал в ряд по степеням базисных инвариантов и выделим слагаемые, однородные по степеням ПП. Тогда (1) запишется в виде

$$F = \underbrace{a_1J_1}_{2} + \underbrace{a_2J_2}_{3} + \underbrace{a_3J_3 + a_4J_1^2}_{4} + \underbrace{a_5J_1J_2}_{5} + \underbrace{a_6J_1^3 + a_7J_2^2 + a_8J_1J_3}_{6} + \ldots \tag{4}$$

Под фигурными скобками указаны степени слагаемых по компонентам ПП.

Поскольку $c = 2$, то подбором параметров, варьируемых в эксперименте, можно положить $a_1 = a_2 = 0$ (такой подбор гарантируется теоремой о неявной функции [8–10]). Тогда из (4) следует, что однородная часть f_0 четвертой степени, то есть $f_0 = a_4J_1^2 + a_3J_3$. Так как потенциал задается в безразмерной математической форме, можно положить $a_3 = 1$.

Эквивариантные векторные поля в пространстве базисных инвариантов определяются подстановкой инвариантов (3) в формулу (2)

$$\begin{aligned} U_1 &= 2J_1\frac{\partial}{\partial J_1} + 3J_2\frac{\partial}{\partial J_2} + 4J_3\frac{\partial}{\partial J_3}, \\ U_2 &= 3J_2\frac{\partial}{\partial J_1} + 2J_3\frac{\partial}{\partial J_2} + 2J_1J_2\frac{\partial}{\partial J_3}, \\ U_3 &= 4J_3\frac{\partial}{\partial J_1} + 2J_1J_2\frac{\partial}{\partial J_2} + \left(3J_2^2 + 4J_1J_3\right)\frac{\partial}{\partial J_3}. \end{aligned} \tag{5}$$

Подействуем на f_0 эквивариантными векторными полями (5):

$$\begin{aligned} U_1 f_0 &= 4a_4J_1^2 + 4J_3 \in I_{\nabla f_0}, \\ U_2 f_0 &= 2\,(3a_4 + 1)\,J_1J_2 \in I_{\nabla f_0}, \\ U_3 f_0 &= 4J_1J_3\,(2a_4 + 1) + 3J_2^2 \in I_{\nabla f_0}. \end{aligned} \tag{6}$$

Из (6) следует, что моном J_1J_2 лежит в идеале $I_{\nabla f_0}$, а мономы J_1^2 и J_3, а также J_1J_3 и J_2^2 сравнимы по идеалу. Используя то обстоятельство, что если $U_k f_0$ лежит в идеале, то и $J_p^n U_k f_0$ также принадлежит идеалу, умножим $U_3 f_0$ на J_2 и убедимся, что J_2^3 также лежит в идеале, поскольку моном J_1J_2 — один из образующих идеала:

$$J_2U_3f_0 = 4J_1J_2J_3\,(2a_4 + 1) + 3J_2^3 \in I_{\nabla f_0} \Rightarrow J_2^3 \in I_{\nabla f_0}.$$

Аналогично находятся остальные мономы, являющиеся образующими идеала. В итоге получаем конечную фактор-алгебру из мономов, составляющих слагаемые модели с двумя управляющими параметрами:

$$a_1J_1 + a_2J_2 + J_3 + b_1J_1^2 + b_2J_1^3 + b_3J_2^2. \tag{7}$$

(Существует и другой способ определения мономов идеала, основанный на алгоритме Бухбергера с использованием базисов Грёбнера [16, 17]. Этот алгоритм реализован в математических редакторах, в частности в Maple.)

В модели (7) появились слагаемые степени выше четвертой. Коэффициенты при этих слагаемых b_i не являются управляющими параметрами и не зависят от внешних условий. Эти коэффициенты в теории особенностей называются модулями [8–12] и определяют бифуркационный тип фазовой диаграммы, а вместе с управляющими параметрами и кратность вырожденной критической точки, то есть максимальное число невырожденных критических точек, на которые распадается вырожденная критическая точка при изменении значений феноменологических коэффициентов. Кратность μ связана с числом управляющих параметров, варьируемых в эксперименте c и модальностью m (количеством модулей) простым соотношением [8, 9] $\mu = m + c + 1$.

Подобным образом строятся модели с другим числом управляющих параметров. Эти модели для $L = T_d(\bar{4}3m)$ представлены в классификационной таблице. В первом столбце таблицы 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 — число модулей и кратность вырожденной критической точки, которой является точка фазового перехода. Коэффициенты a_i в таблице — управляющие параметры, b_i — модули. Следует отметить, что кратность учитывает не только число точек минимума, но и максимумы. Поэтому количество особых точек на фазовых диаграммах моделей определяется как $[\mu/2]$, где квадратные скобки обозначают целую часть числа.

2. ФАЗОВЫЕ ДИАГРАММЫ МОДЕЛЕЙ

Все возможные симметрийно неэквивалентные фазы, описываемые термодинамическими потенциалами с группой симметрии ПП $L = T_d(\bar{4}3m)$, следующие [1–3]:

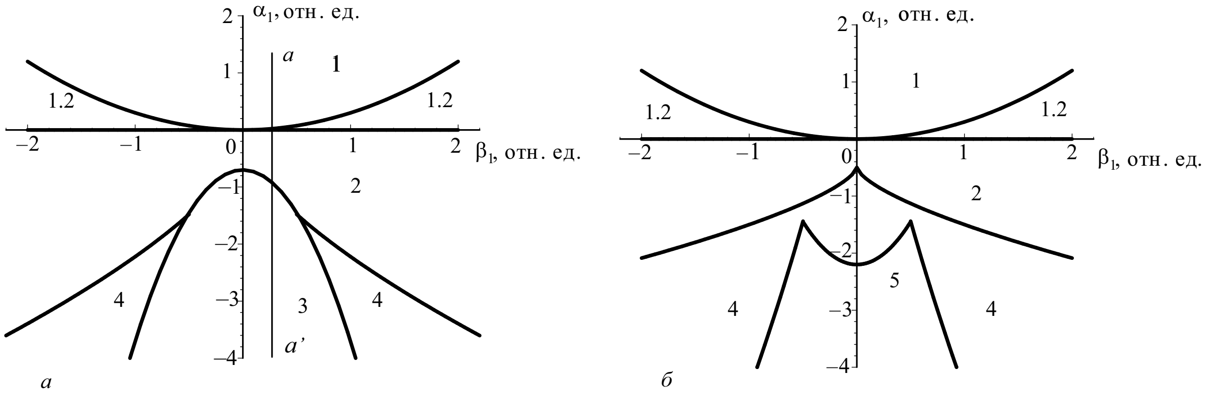

Рис. 1. Типичные сечения фазовой диаграммы модели (9) в координатах $\beta_1 - \alpha_1$ при различных значениях феноменологических коэффициентов: *а* — $\alpha_2 = \beta_2 = \gamma_1 = \gamma_2 = \delta_{23} = 1$, *б* — $\alpha_2 = \beta_2 = \gamma_2 = 1$, $\gamma_1 = \delta_{23} = -1$

Фаза 1 высокосимметричная. $\eta_1 = \eta_2 = \eta_3 = 0$.

Фаза 2. $\eta_1 = \eta_2 = \eta_3 \neq 0$. В ней сосуществуют две антиизоструктурные фазы: 2A (η, η, η); $\eta > 0$ и 2B $(-\eta, \eta, \eta)$; $\eta > 0$.

Фаза 3. $\eta_1 \neq 0$, $\eta_2 = \eta_3 = 0$.

Фаза 4. $\eta_1 = \eta_2 \neq \eta_3$, в которой сосуществуют также две антиизоструктурные фазы: 4A (η_1, η_1, η_3); $\eta_1 > 0$, $\eta_3 > 0$ и 4B $(-\eta_1, \eta_1, \eta_3)$; $\eta_1 > 0$, $\eta_3 > 0$.

Фаза 5. $\eta_1 \neq \eta_2 \neq \eta_3 \neq 0$. Наиболее низкосимметричная (трехпараметрическая) фаза.

Анализ фазовых диаграмм моделей, приведенных в классификационной таблице показал, что модель с одним управляющим параметром описывает один фазовый переход из фазы 1 в фазу 2. Заменой ПП и перенормировкой феноменологических коэффициентов эта модель сводится к катастрофе сборки [18–20]. В модели с двумя управляющими параметрами ($c = 2$) реализуются, кроме высокосимметричной фазы 1 также фазы 2, 3 и 4. Модель с тремя управляющими параметрами описывает все низкосимметричные фазы. При построении традиционным методом только модель 8-й степени также описывает все фазы. Термодинамический потенциал при этом имеет вид [1–3]

$$\Phi = \alpha_1 J_1 + \alpha_2 J_1^2 + \alpha_3 J_1^3 + \alpha_4 J_1^4 + \beta_1 J_2 + \beta_2 J_2^2 + \gamma_1 J_3 + \gamma_2 J_3^2 + \delta_{12} J_1 J_2 + \delta_{13} J_1 J_3 + \delta_{23} J_2 J_3 + \delta_{112} J_1^2 J_2 + \delta_{113} J_1^2 J_3 + \delta_{122} J_1 J_2^2, \quad (8)$$

где $J_1 = \eta_1^2 + \eta_2^2 + \eta_3^2$, $J_2 = \eta_1\eta_2\eta_3$, $J_3 = \eta_1^4 + \eta_2^4 + \eta_3^4$ — базисные инварианты. Эта модель содержит 14 слагаемых, тогда как модель, построенная методами теории катастроф с тремя управляющими параметрами в обозначениях [1],

$$\Phi = \alpha_1 J_1 + \alpha_2 J_1^2 + \beta_1 J_2 + \beta_2 J_2^2 + \gamma_1 J_3 + \gamma_2 J_3^2 + \delta_{23} J_2 J_3, \quad (9)$$

где $J_1 = \eta_1^2 + \eta_2^2 + \eta_3^2$, $J_2 = \eta_1\eta_2\eta_3$, $J_3 = \eta_1^2\eta_2^2 + \eta_2^2\eta_3^2 + \eta_1^2\eta_3^2$ — базисные инварианты. В этой модели 7 слагаемых, и она также описывает все низкосимметричные фазы.

Аналитическое построение фазовой диаграммы (9) связано с техническими трудностями ввиду высокой степенью нелинейности этого потенциала. Однако его можно проанализировать численно, задаваясь различными сочетаниями коэффициентов. В модели (9) для обеспечения структурной устойчивости и глобальной минимальности термодинамического потенциала необходимо, чтобы $\alpha_2 > 0$ и $\gamma_2 > 0$. Коэффициент α_1 считаем зависящим от температуры, двумерные сечения фазовой диаграммы будут построены в координатах $\beta_1 - \alpha_1$, следовательно, набор феноменологических коэффициентов для исследования фазовой диаграммы сокращается до трех: β_2, γ_1 и δ_{23}. Типичные двумерные сечения фазовой диаграммы модели (9) в координатах $\beta_1 - \alpha_1$ для различных значений этих коэффициентов представлены на рис. 1. Как видно из рис. 1, *а*, при положительных значениях феноменологических коэффициентов β_2, γ_1 и δ_{23} на фазовой диаграмме присутствуют области всех фаз, кроме фазы 5. При $\beta_2 > 0$ и отрицательных значениях коэффициентов γ_1 и δ_{23} появляется самая низкосимметричная фаза 5 (рис. 1, *б*). Высокосимметричная фаза 1 стабильна только в случае $\alpha_1 > 0$ и сосуществует с антиизоструктурными фазами 2A и 2B, причем фазовые переходы из фазы 1 в фазу 2A или 2B являются переходами первого рода.

3. ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ЗАВИСИМОСТИ АНОМАЛЬНОЙ СОСТАВЛЯЮЩЕЙ ТЕПЛОЕМКОСТИ

Для модели восьмой степени (8), полученной в рамках традиционного подхода, и модели с тремя управляющими параметрами, построенной с помощью эквивариантных векторных полей (9), рассчитаны теоретические зависимости аномальной части теплоемкости и проведено их сопоставление с экспериментальными данными теплоемкости в GaV_4S_8 [21–23]. Это соединение имеет кубическую структуру с пространственной группой симметрии $F\bar{4}3m$ (T_d^2) и при низких температурах испытывает два последовательных ФП — в ромбоэдрическую фазу с симметрией $R3m$ (фаза 2) при $T_{C1} = 44$ К, затем в орторомбическую фазу 3 с симметрией $Imm2$ $(T_{C2} = 13$ К). Между группами $R3m$ и $Imm2$ нет соотношения группа—подгруппа, однако они обе являются подгруппами исходной высокотемпературной фазы и именно в таком порядке располагаются на двумерных сечениях фазовых диаграмм моделей, в частности в модели (9) для термодинамического пути aa' (рис. 1, *а*).

Аномальная часть теплоемкости рассчитывается по формуле

$$C = -2\alpha_1' T \left(\eta_1 \frac{\partial \eta_1}{\partial T} + \eta_2 \frac{\partial \eta_2}{\partial T} + \eta_3 \frac{\partial \eta_3}{\partial T} \right)$$

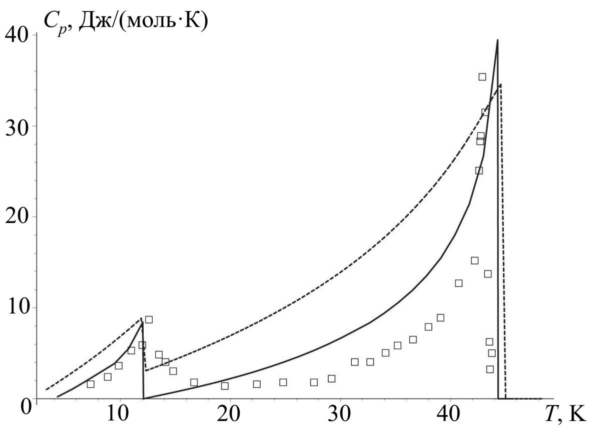

Рис. 2. Температурные зависимости аномальной части теплоемкости в GaV_4S_8. Квадраты — экспериментальные данные работы [21], сплошная кривая — теоретическая зависимость, рассчитанная по модели (9), пунктирная кривая — теоретическая зависимость, рассчитанная по модели (8)

в предположении, что в коэффициент α_1 термодинамическом потенциале зависит от температуры $\alpha_1 = \alpha_1'(T - T_1)$.

Частные производные компонент ПП определяются посредством дифференцирования уравнений состояния $\frac{\partial\Phi}{\partial\eta_i} = 0$ по температуре и последующего решения линейной системы из трех уравнений, неизвестными в которой являются производные ПП. Аналитический анализ крайне затруднителен из-за сильной нелинейности потенциалов (8) и (9), поэтому теоретические зависимости теплоемкости от температуры определялись численными методами с помощью компьютерной программы. Эти зависимости приведены на рис. 2. Квадратами на рисунке обозначены экспериментальные результаты аномальной части теплоемкости в GaV_4S_8, вычисленные по данным работы [21]. Как видно из рис. 2, теоретические кривые теплоемкости качественно удовлетворительно описывают данные эксперимента. Некоторое несоответствие графика, построенного по модели (8) с экспериментальными результатами объясняется тем, что расчет проводился по 13 подгоночным параметрам, в то время как в модели (9) их только 6. В этом одно из преимуществ модели, построенной методами теории катастроф.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Теория катастроф с применением эквивариантных векторных полей позволяет строить феноменологические модели ФП для многокомпонентных ПП, эти модели структурно устойчивы и имеют более компактный вид по сравнению с моделями, построенными традиционным методом. Классификация моделей по числу управляющих параметров выявляет все возможные виды термодинамических потенциалов для данной симметрии ПП. Исследование фазовых диаграмм моделей позволяет проследить эволюцию появления и топологию низкосимметричных фаз в зависимости от числа управляющих параметров, варьируемых в эксперименте, а также провести сопоставление с имеющимися экспериментальными данными.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Mukovnin A. A., Talanov V. M.* // Solid State Communications. 2014. **182**, N 1. P. 1.
2. *Mukovnin A. A., Talanov V. M.* // European Physical Journal B. 2014. **87**, N 2. P. 34.
3. *Муковнин, А. А., Таланов В. М.* // Журнал физической химии. 2014. **88**, № 9. С. 1315.
4. *Geller S.* // Phys. Rev. B. 1976. **14**, N 10. P. 4345.
5. *Lawson A. C., Larson A. C., Dreele R. B. V.* et al. // Journal of the Less Common Metals. 1987. **132**, N. 2. P. 229.
6. *Kubel F.* // Ferroelectrics. 1994. **160.** N 1. P. 61.
7. *Richter P. W., Pistorius C. W. F. T.* // Journal of Solid State Chemistry. 1972. **5**. N 2. P. 276.
8. *Арнольд В. И.* // УМН. 1975. **30**. № 5. С. 3.
9. *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., 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 and Stuttgart, 1985.)
10. *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.)
11. *Павлов С. В.* Методы теории катастроф в исследованиях фазовых переходов. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1993.
12. *Павлов С. В.* // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2016. № 2. С. 62. (*Pavlov S. V.* // Moscow Univ. Phys. Bull. 2016. **71**. N 2. P. 202.)
13. *Гуфан Ю. М.* Структурные фазовые переходы. М.: Наука, 1982.
14. *Изотова Т. М., Шамшин А. П., Матюшкин Э. В.* // Информационно-вычислительные технологии в решении фундаментальных и прикладных научных задач. Сессия ИВТН-2004. Сборник материалов. М., 2004.
15. *Павлов С. В.* // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2016. № 5. С. 37. (*Pavlov S. V.* // Moscow Univ. Phys. Bull. 2016. **71**. N 5. P. 508.)
16. *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.* // Bulletin of the Russian Academy of Sciences. Physics. 2004. **68**. N 7. P. 1061.)
17. *Кокс Д., Литтл Дж., О'Ши Д.* Идеалы, многообразия и алгоритмы. М.: Мир, 2000.
18. *Постон Т., Стюарт И.* Теория катастроф и ее применения. М.: Мир. 1980. (*Poston T., Stewart I.* Catastrophe theory and its applications. Pitman. 1978).
19. *Гилмор Р.* Прикладная теория катастроф. М.: Мир. 1984. (*Gilmore R.* Catastrophe theory for scientists and engineers. A Wiley-interscience publication John Wiley & Sons, 1981).
20. *Арнольд В. И.* Теория катастроф. М.: Наука, 1990. (*Arnol'd V. I.* Catastrophe theory. Springer-Verlag, 2004).
21. *Ruff E., Widmann S., Lunkenheimer P.* et al. // arXiv: 1504.00309v2 [cond-mat.str-el].
22. *Bichler, D. Slavik H., Johrendt D.* // Zeitschrift fur Naturforschung B. 2009. **64**, N 8. P. 915.
23. *Bichler, D. Slavik H., Johrendt D.* et al. // Phys. Rev. B. 2008. **77.** 212102

Classification of Phenomenological Models of Phase Transitions with Three-Component Order Parameters by Methods of Catastrophe Theory: $L = T_d(\bar{4}3m)$

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.

Using the equivariant catastrophe theory, we classify phenomenological models of phase transitions with a three-component order parameter and with a number of control parameters from one to four. The analysis of phase diagrams of the obtained models shows that the description of all low-symmetry phases requires fewer terms of the power-series expansion than that required by the model constructed using the traditional method taking all terms up to the $2n$th power into account ($n > 1$). The theoretical temperature dependence of the heat capacity is compared with the experimental data in the GaV_4S_8 compound.

Keywords: phase transitions, phenomenological model, catastrophe theory, equivariant vector fields, phase diagram.
PACS: 77.80.Bh.
Received 18 October 2017.

English version: *Moscow University Physics Bulletin*. 2019. **74**, No. 2. Pp. 186–190.

Сведения об авторе

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