5. Сахненко В.П., Таланов В.М., Чечин Г.М. // Физика металлов и металловедение. – 1986. – Т. 62, Вып. 5. – С. 847.

6. Ковалев О.В. Неприводимые представления пространственных групп. – Киев: Издательство АН УССР. – 155 с.

7. Stokes H.T., Hatch D.M. Isotropy Subgroup of the 230 Crystallographic Space Groups. – World-Scientific. – Singapore, 1988.

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА FD3M → P4$_1$2$_1$2 В ТИТАНИТЕ МАГНИЯ

[1]Таланов В.М., [2]Широков В.Б., [1]Иванов В.В., [3]М.В. Таланов

[1]Южно-Российский государственный технический университет (Новочеркасский политехнический институт);

[2]Южный научный центр Российской академии наук;

[3]Южный федеральный университет, e-mail: valtalanov@mail.ru

Феноменологическая термодинамическая модель фазовых переходов, описываемых многокомпонентными параметрами порядка, должна быть построена с учетом устойчивости потенциала [1, 2]. Под устойчивостью понимается неизменность ответов модели при появлении малых внешних возмущений. Малые возмущения должны приводить только к небольшим количественным изменениям, не изменяя фазы и топологию фазовой диаграммы. Исследование на устойчивость проводится локально [2-4] вблизи точки потери устойчивости, которая в феноменологической теории определяется, как минимум, равенством нулю коэффициента при квадрате параметра порядка [5]. Для шестикомпонентного ПП, связанного с неприводимым представлением Fd3m(O_h^7) – $k_{10}(\tau_4)$, требование устойчивости приводит к потенциалу шестой степени. Так как фазовый переход из высокосимметричной фазы в низкосимметричную второго рода [6], то коэффициент при квадрате квадрата параметра порядка должен быть положителен. Его можно считать не варьируемым параметром.

Рассмотрим мультикритическую точку, определяемую равенством нулю одновременно двух констант – при квадрате параметра порядка и при одном из анизотропных инвариантов в четвертой степени. Устойчивый потенциал имеет вид

$$F = a_1J_1 + a_2J_1^2 + b_2J_2 + b_3J_3 + b_4J_4 + \\ + a_3J_1^3 + c_{12}J_1J_2 + c_{14}J_1J_4 + d_5J_5 + d_6J_6 + d_7J_7 + d_8J_8. \quad (1)$$

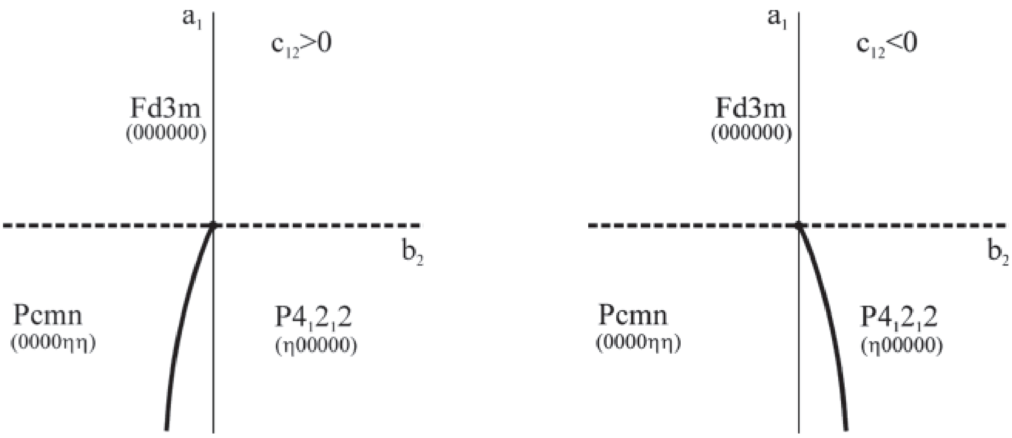
Потенциал (1) устойчив в окрестности b и в самой точке $a_1 = 0$, $b_2 = 0$. В (1) отсутствует слагаемое шестой степени J_1J_3, которое вблизи точки $a_1 = 0$, $b_2 = 0$ можно «устранить» при помощи нелинейной замены [1]. Инварианты в (1) есть

$$\begin{aligned}
J_1 &= \eta_1^2 + \eta_2^2 + \eta_3^2 + \eta_4^2 + \eta_5^2 + \eta_6^2,\\
J_2 &= \eta_1^2\eta_2^2 + \eta_3^2\eta_4^2 + \eta_5^2\eta_6^2,\\
J_3 &= \eta_1^2\eta_3^2 + \eta_1^2\eta_5^2 + \eta_2^2\eta_4^2 + \eta_2^2\eta_6^2 + \eta_3^2\eta_5^2 + \eta_4^2\eta_6^2,\\
J_4 &= \eta_1^2\eta_4^2 + \eta_1^2\eta_6^2 + \eta_2^2\eta_3^2 + \eta_2^2\eta_5^2 + \eta_3^2\eta_6^2 + \eta_4^2\eta_5^2,\\
J_5 &= \eta_1^2\eta_2^2\eta_3^2 + \eta_1^2\eta_2^2\eta_4^2 + \eta_1^2\eta_2^2\eta_5^2 + \eta_1^2\eta_2^2\eta_6^2 + \eta_1^2\eta_3^2\eta_4^2 + \eta_1^2\eta_5^2\eta_6^2 +\\
&\quad + \eta_2^2\eta_3^2\eta_4^2 + \eta_2^2\eta_5^2\eta_6^2 + \eta_3^2\eta_4^2\eta_5^2 + \eta_3^2\eta_4^2\eta_6^2 + \eta_3^2\eta_5^2\eta_6^2 + \eta_4^2\eta_5^2\eta_6^2,\\
J_6 &= \eta_1^2\eta_3^2\eta_5^2 + \eta_2^2\eta_4^2\eta_6^2,\\
J_7 &= \eta_1^2\eta_3^2\eta_6^2 + \eta_1^2\eta_4^2\eta_5^2 + \eta_1^2\eta_4^2\eta_6^2 + \eta_2^2\eta_3^2\eta_5^2 + \eta_2^2\eta_3^2\eta_6^2 + \eta_2^2\eta_4^2\eta_5^2,\\
J_8 &= \eta_1\eta_2\eta_3\eta_4\eta_5\eta_6.
\end{aligned} \quad (2)$$

Эти инварианты составляют целый рациональный базис инвариантов до шестой степени включительно. Полный базис содержит 23 полинома, не превосходящих одиннадцатую степень.

Фазовая диаграмма для потенциала (1) в плоскости (a_1, b_2) приведена на рисунке

Все коэффициенты потенциала (1), не представленные на рисунке, положительны. Высоко-



Фазовые диаграммы, описываемые потенциалом (1). Пунктирная линия – линия переходов второго рода, сплошная – первого. На рисунке показан случай $c_{12} > 0$

симметричная фаза на рисунке граничит с двумя низосимметричными фазами по линиям переходов второго рода, которые обозначены пунктирной линией. Между собой низкосимметричные фазы граничат по линии переходов первого рода (сплошная кривая на рисунке).

Список литературы

1. Прохоров А.М., Гуфан Ю.М., Ларин Е.С., Рудашевский Е.Г., Широков В.Б. // Доклады АН СССР. – 1984. – Т. 227. – С. 1369.

2. Кутьин Е.И., Лорман В.Л., Павлов С.В. // Успехи физических наук. – 1991. – Т. 161, №6. – С. 109.

3. Постон Т., Стюарт И. Теория катастроф и ее приложения. – М.: Мир. 1980. – 608 с.

4. Арнольд В.И., Варченко А.Н., Гусейн-Заде С.М. Особенности дифференцируемых отображений. – М.: Наука. 1982. – Т. 1.

5. Ландау Л.Д. К теории фазовых переходов I // Журнал теоретической и экспериментальной физики. – 1937. – Т.**7**. – С.19.

6. Schmidt M., Ratcliff W., Radaelli P.G., Refson K., Harrison N.M., Cheong S.W. // Phys. Rev. Lett. – 2004. – Vol. 92, №5. – P. 056402.

СТРУКТУРНЫЙ МЕХАНИЗМ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА FD3M → $P4_12_12$ В ТИТАНИТЕ МАГНИЯ

[1]Таланов В.М., [2]Широков В.Б., [1]Иванов В.В., [3]М.В. Таланов

[1]Южно-Российский государственный технический университет (Новочеркасский политехнический институт);

[2]Южный научный центр Российской академии наук;

[3]Южный федеральный университет, e-mail:valtalanov@mail.ru

К настоящему времени проведено детальное экспериментальное исследование структурных, электрических, магнитных, оптических свойств титанита магния [1-6] и предложен ряд микроскопических моделей, объясняющих особенности его атомного и орбитального строения [1, 7-9]. В данной работе, опираясь на теоретико-групповые и термодинамические методы теории