

УДК 537.9

ИССЛЕДОВАНИЕ УСТОЙЧИВОСТИ ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ $Ba_{1-x}Sr_xTiO_3$

© 2012 г. В.Б. Широков¹

Проведено исследование на устойчивость методами теории катастроф феноменологического потенциала Ландау твердого раствора $Ba_{1-x}Sr_xTiO_3$. Устойчивый потенциал, зависящий от шестикомпонентного параметра порядка (ротационного и поляризации), должен включать в шестой степени тринадцать слагаемых. Дополнительный учет упругого потенциала позволяет исключить из потенциала феноменологической теории все перекрестные слагаемые в шестой степени.

Ключевые слова: теория Ландау, фазовые переходы, твердые растворы, теория катастроф, структурная устойчивость, титанат бария-стронция.

В физической теории всегда имеются параметры, которые “управляют” поведением системы. Таковыми являются температура, давление, концентрация (если нет распада в системе), внешние силы, константы взаимодействия и т.п. Физический смысл и количество параметров определяются выбранной моделью. Так, в задаче феноменологического описания твердых растворов $Ba_{1-x}Sr_xTiO_3$ (BST) для объемных образцов [1] таких параметров два: температура и концентрация. При описании тонких пленок BST появляется еще один параметр – деформация пленки (misfit strain) в плоскости подложки [2]. Этот параметр, определяемый экспериментально по рентгеноструктурным данным, эффективно описывает уникальную зависимость свойств тонких пленок от толщины [3]. В пространстве изменения параметров модели появляются критические (мультифазные) точки, в окрестности которых находится большое число низкосимметричных фаз [4]. Небольшое изменение условий модели, например, изменение констант модели, не относящихся к варьируемым параметрам, либо дописывание других членов потенциала с малыми константами, может приводить к существенному изменению ответов модели. Кроме того, может оказаться, что построенная модель дает нефизические результаты, например отсутствие гистерезиса при переходе в фазу, не являющуюся подгруппой исходной.

Для того чтобы избежать подобных явлений, модель должна быть устойчивой. Причем устойчивость понимается в традиционном физическом

смысле: любые малые внешние воздействия не должны приводить к качественным изменениям теории, а всего лишь немного изменять количественные ответы. Обычный для физиков путь исследования – это последовательно учитывать новые (малые) допустимые взаимодействия до тех пор, пока они не перестанут менять качественные результаты. Такая процедура очень трудоемкая, требует каждый раз решать задачу заново. В математике существует направление, в рамках которого разработаны эффективные методы исследования потенциалов на устойчивость. В физической литературе это направление известно как теория катастроф [5–8]. Более подробную литературу по этому вопросу можно найти в обзоре [9].

1. ПРИВЕДЕНИЕ ПОТЕНЦИАЛА В КРИТИЧЕСКОЙ ТОЧКЕ

Опишем кратко алгоритм приведения в критической точке потенциала феноменологической теории фазовых переходов. Представим потенциал в виде ряда по параметру порядка (ПП)

$$\Phi(\lambda, \vec{\eta}) = \sum_{\{i_1, i_2, \dots, i_k\}} \alpha_{i_1, i_2, \dots, i_k}(\lambda) \eta_1^{i_1} \eta_2^{i_2} \dots \eta_k^{i_k}, \quad (1)$$

где λ – набор внешних управляющих термодинамических параметров. В наиболее распространенном случае параметр λ один, $\lambda = T - T_c$, и от него в выражении (1) зависит только одна константа при квадрате ПП. Если рассматриваемая точка не особая, то

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \eta} = 0, \quad \left\| \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \eta_i \partial \eta_k} \right\| > 0,$$

¹ Южный научный центр Российской академии наук, 344006 Ростов-на-Дону, пр. Чехова, 41, тел.: (863) 219-87-74, e-mail: shirokov-vb@rambler.ru

откуда для малых η следует хорошо известный результат $\Phi = \sum a_i \eta_i^2$.

В критической точке определитель $\det\left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \eta_i \partial \eta_k}\right) = 0$. Для исследования на устойчивость будем считать, что в (1) присутствуют все слагаемые старших степеней, то есть ряд (1) формально бесконечный. Это эквивалентно учету всех возможных внешних возмущений. Далее, следуя методам теории катастроф [5, 10], сделаем замену переменных

$$\vec{\eta} = \vec{\xi} + \vec{V}(\vec{\xi}), \quad (2)$$

где ряд (2) должен быть таков, чтобы обеспечить взаимную однозначность замены переменных, то есть должно выполняться

$$\det\left(\frac{\partial \vec{\eta}}{\partial \vec{\xi}}\right) \neq 0.$$

Это можно выполнить, если считать, что для малых ξ : $\left.\frac{\partial V(\xi)}{\partial \xi}\right|_{\xi=0} = 0$. Функция $V\vec{V}(\vec{\xi})$ является формальным рядом по новому ПП с произвольными пока коэффициентами. Подставим (2) в (1), разложим в ряд по $\vec{V}(\vec{\xi})$ и рассмотрим линейный член

$$\Phi(\vec{\xi} + \vec{V}(\vec{\xi})) = \Phi(\vec{\xi}) + \frac{\partial \Phi}{\partial \vec{\xi}} \vec{V}(\vec{\xi}). \quad (3)$$

Поскольку ряд $\vec{V}(\vec{\xi})$ мы не ограничиваем по степеням, то в (3) будут присутствовать все возможные слагаемые. Рассмотрим в (3) только одну степень $k+1$. Если теперь найти такие константы ряда $\vec{V}(\vec{\xi})$, которые обратят в нуль все слагаемые степени $k+1$ из (3), и подставить найденную замену в исходный потенциал (1), то в полученном потенциале будут отсутствовать все слагаемые в $k+1$ степени. При этом появятся новые слагаемые в старших степенях, которые перенормируют коэффициенты исходного потенциала. Повторяя подобную процедуру последовательно для каждой степени выше $k+1$, получим итерационный процесс “устранения” всех степеней выше $(k+1)$ -й. Если такое возможно, то потенциал k -й степени устойчив. Если какое-либо слагаемое “устранить” нельзя, то оно должно присутствовать в потенциале устойчивой модели. Описанный алгоритм легко реализуется в случае, когда симметрии нет, и достаточно подробно описан в [5]. При этом дополнительно используются преобразования, сдвигающие начало координат, которые позволяют уменьшить число слагаемых в младших степенях.

Требование инвариантности феноменологического потенциала относительно симметрии высокосимметричной фазы приводит к тому, что потенци-

ал можно записать в виде ряда по полиномиальному базису инвариантов

$$\Phi(\lambda, \vec{\eta}) = \sum_{\{i_1, i_2, \dots, i_k\}} a_{i_1, i_2, \dots, i_k}(\lambda) J_1^{i_1} J_2^{i_2} \dots J_k^{i_k}. \quad (4)$$

В (4) записан простой ряд по инвариантам, без учета возможной зависимости между инвариантами, когда число инвариантов больше, чем число компонент параметра порядка. В случае зависимых инвариантов существование “сизигий” – соотношений между степенями инвариантов – будет приводить к тому, что число всевозможных произведений $J_1^{i_1} \dots J_k^{i_k}$ в некоторой фиксированной степени будет больше, чем число инвариантов в этой степени. Для описания алгоритма это не существенно.

Проведем замену переменных (2) при наличии симметрии [11]. Теперь вместо (3) имеем

$$\Phi(\lambda, J_i(\vec{\xi} + \vec{V})) = \Phi(\lambda, J_i) + \sum_k \frac{\partial \Phi}{\partial J_k} (\vec{V}, \vec{\nabla}) J_k, \quad (5)$$

где $\vec{\nabla} = \frac{\partial}{\partial \vec{\eta}}$, $\vec{V} = \vec{V}(\vec{\xi})$, а $(\vec{V}, \vec{\nabla})$ – дифференциальный инвариант, действующий на J_k . Бесконечный векторный ряд \vec{V} можно представить в виде произведения конечного числа векторных инвариантов \vec{v}_m , умноженного на бесконечный ряд, составленный из обычных скалярных инвариантов. Тогда (5) запишется в виде

$$\Phi(\lambda, J_i(\vec{\xi} + \vec{V})) = \Phi(\lambda, J_i) + \sum_{k,m} \frac{\partial \Phi}{\partial J_k} U_{k,m} \sum_{\{i_1, i_2, \dots, i_k\}} b_{i_1, i_2, \dots, i_k} J_1^{i_1} J_2^{i_2} \dots J_k^{i_k}, \quad (6)$$

где $U_{k,m} = (\vec{v}_m, \vec{\nabla}) J_k$. Таким образом, задача исследования на устойчивость сводится к нахождению v_m , построению скалярных произведений $U_{k,m}$ и выяснению возможности “убрать” при помощи (6) все старшие степени.

2. ПОСТРОЕНИЕ БАЗИСА ИНВАРИАНТОВ

Для того чтобы приступить к проверке потенциала феноменологической теории на устойчивость, необходимо построить базис инвариантов J_k и базис вектор-инвариантов \vec{v}_m . Если в каждом вектор-инварианте \vec{v}_m заменить градиент $\vec{\nabla}$ на формальный вектор $\vec{\xi}$, обладающий теми же трансформационными свойствами, что и $\vec{\nabla}$, то получим скалярный инвариант $(\vec{v}_m, \vec{\xi})$. Тем самым задача нахождения базиса вектор-инвариантов сводится к задаче нахождения линейных инвариантов (ковариантов по [11]).

Построение базиса инвариантов производится последовательным нахождением инвариантов в

каждой степени и исключением из их числа тех, которые можно представить через произведения инвариантов уже найденных [12]. Эта процедура должна производиться с одновременным приведением к дробно-рациональному виду функции Молина [13], разложения которой дает ряд Пуанкаре [14] для выбранной группы (представления), определяя число инвариантов в каждой степени. Знаменатель полученной таким образом дроби дает число и степени алгебраически независимого базиса, числитель перечисляет по степеням число инвариантов линейного базиса. Для конечных групп ряд Пуанкаре вычисляется по формуле Молина [15]

$$P(z) = 1 + \sum_{k=1}^{\infty} a_k z^k = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} \frac{1}{\det(I - zT(g))} = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} \frac{1}{\prod_{i=1}^k (1 - z\omega_i(g))}, \quad (7)$$

которая с одновременным вычислением базиса приводится к виду

$$P(z) = \frac{1 + \sum a_m z^m}{(1 - z^{d_1})(1 - z^{d_2}) \dots (1 - z^{d_s})}. \quad (8)$$

В (8) все $a_m > 0$ дают число инвариантов линейного базиса $I_{m,i}$ в степени m ($i = 1, 2, \dots, a_m$), каждый d_i определяет степень инварианта независимого

базиса J_k , $k = d_1, d_2, \dots, d_s$. Формула (8) определяет разложение в ряд любой функции, инвариантной относительно заданной группы в виде

$$f(\eta) = \Phi(J_k) + \sum_{m,i} I_{m,i} \Psi_{m,i}(J_k). \quad (9)$$

Для групп, порожденных отражениями, в числителе (8) стоит единица. В этом случае между инвариантами базиса нет никаких соотношений (сизигий), так что базис является функционально независимым. В этом случае всевозможные произведения инвариантов базиса, которые дают некоторую степень, полностью определяют все инварианты, существующие в этой степени. В общем случае правило образования произведений, полностью определяющих инварианты некоторой степени, дается формулой (9).

3. УСТОЙЧИВОСТЬ ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ BST

Феноменологический потенциал, описывающий свойства твердых растворов BST, содержит два трехкомпонентных параметра порядка $R_{25} \oplus F_{1u}$ [1]. Трансформационные свойства этих параметров порядка в группе $Pm\bar{3}m(O_h^1)$ задаются следующими матрицами (генераторами группы):

$$\begin{matrix} & C_2^x & C_2^y & C_3 & C_2^{xy} & I & a_1, a_2, a_3 \\ p(F_{1u}): & \left| \begin{array}{c} 1 \\ -1 \\ -1 \end{array} \right| \left| \begin{array}{c} -1 \\ 1 \\ -1 \end{array} \right| \left| \begin{array}{c} 1 \\ 1 \\ 1 \end{array} \right| \left| \begin{array}{c} -1 \\ -1 \\ -1 \end{array} \right| \left| \begin{array}{c} -1 \\ -1 \\ -1 \end{array} \right| \left| \begin{array}{c} 1 \\ 1 \\ 1 \end{array} \right| \\ \varphi(R_{25}): & \left| \begin{array}{c} 1 \\ -1 \\ -1 \end{array} \right| \left| \begin{array}{c} -1 \\ 1 \\ -1 \end{array} \right| \left| \begin{array}{c} 1 \\ 1 \\ 1 \end{array} \right| \left| \begin{array}{c} -1 \\ -1 \\ 1 \end{array} \right| \left| \begin{array}{c} 1 \\ 1 \\ 1 \end{array} \right| \left| \begin{array}{c} -1 \\ -1 \\ -1 \end{array} \right| \end{matrix} \quad (10)$$

Точно такие же матрицы генераторов будут и для группы симметрии параметра порядка сегнетомагнетика [16]. В этом случае матрице, соответствующей трансляциям a_1, a_2, a_3 , будет соответствовать матрица инверсии времени того же вида. То есть инварианты сегнетомагнетика, а значит и потенциал, можно получить из инвариантов для $R_{25} \oplus F_{1u}$ заменой ротационного параметра порядка φ на магнитный момент m .

Формула (7) для функции Молина и ряда Пуанкаре для группы, определяемой генераторами (10), дает следующее перечисление для инвариантов:

$$P(z) = \frac{1 + 2z^4 + 4z^6 + 5z^8 + 4z^{10} + 5z^{12} + 2z^{14} + z^{16}}{(1 - z^2)^2 (1 - z^4)^2 (1 - z^6)^2} = 1 + 2z^2 + 7z^4 + 18z^6 + 41z^8 + 84z^{10} + 163z^{12} + 288z^{14} + 488z^{16} + \dots \quad (11)$$

Вычисление по описанной выше схеме дает базис, состоящий из 14 инвариантов. Расчет с учетом функции Молина позволяет произвести следующее разбиение базиса:

$$\begin{aligned}
 J_1 &= \varphi_1^2 + \varphi_2^2 + \varphi_3^2, \\
 J_2 &= p_1^2 + p_2^2 + p_3^2, \\
 J_3 &= \varphi_1^2 \varphi_2^2 + \varphi_1^2 \varphi_3^2 + \varphi_2^2 \varphi_3^2, \\
 J_4 &= p_1^2 p_2^2 + p_1^2 p_3^2 + p_2^2 p_3^2, \\
 J_5 &= p_1^2 \varphi_2^2 + p_2^2 \varphi_1^2 + p_1^2 \varphi_3^2 + p_3^2 \varphi_1^2 + p_2^2 \varphi_3^2 + p_3^2 \varphi_2^2, \\
 I_6 &= p_1 p_2 \varphi_1 \varphi_2 + p_1 p_3 \varphi_1 \varphi_3 + p_2 p_3 \varphi_2 \varphi_3, \\
 J_7 &= \varphi_1^2 \varphi_2^2 \varphi_3^2, \\
 J_8 &= p_1^2 \varphi_2^2 \varphi_3^2 + p_2^2 \varphi_3^2 \varphi_1^2 + p_3^2 \varphi_1^2 \varphi_2^2, \\
 I_9 &= \varphi_1 \varphi_2 \varphi_3 (p_1 p_2 \varphi_3 + p_2 p_1 \varphi_3 + p_3 p_1 \varphi_2), \\
 I_{10} &= p_1^2 p_2^2 \varphi_3^2 + p_2^2 p_3^2 \varphi_1^2 + p_1^2 p_3^2 \varphi_2^2, \\
 I_{11} &= p_1 p_2 p_3 (p_1 \varphi_2 \varphi_3 + p_2 \varphi_1 \varphi_3 + p_3 \varphi_1 \varphi_2), \\
 J_{12} &= p_1^2 p_2^2 p_3^2, \\
 I_{13} &= \varphi_1 \varphi_2 \varphi_3 [(\varphi_1^2 + \varphi_2^2) \varphi_3 p_1 p_2 + \\
 &\quad + (\varphi_2^2 + \varphi_3^2) \varphi_1 p_2 p_3 + (\varphi_1^2 + \varphi_3^2) \varphi_2 p_1 p_3], \\
 I_{14} &= p_1 p_2 p_3 (\varphi_1 \varphi_2 p_3^3 + \varphi_1 \varphi_3 p_2^3 + \varphi_2 \varphi_3 p_1^3),
 \end{aligned} \tag{12}$$

где J_k – инварианты алгебраически независимого базиса, I_m – инварианты зависимого базиса. Вычисления линейного базиса в соответствии с (11) дают следующий список

$$\begin{aligned}
 (4) \quad & 2 \quad \{I_5, I_6\} \\
 (6) \quad & 4 \quad \{I_8, I_9, I_{10}, I_{11}\} \\
 (8) \quad & 5 \quad \{I_5^2, I_5 I_6, I_6^2, I_{13}, I_{14}\} \\
 (10) \quad & 4 \quad \{I_5 I_9, I_5 I_{11}, I_6 I_9, I_6 I_{11}\} \\
 (12) \quad & 5 \quad \{I_8 I_9, I_8 I_{10}, I_8 I_{11}, I_9 I_{11}, I_{10} I_{11}\} \\
 (14) \quad & 2 \quad \{I_6^2 I_9, I_6^2 I_{11}\} \\
 (16) \quad & 1 \quad \{I_6 I_8 I_{10}\}.
 \end{aligned} \tag{13}$$

Здесь произведения инвариантов зависимого базиса выделены в произведения, определяющие линейный базис в соответствии с числителем (11). Цифра в круглых скобках означает степень инвариантов, число перед фигурной скобкой есть число инвариантов линейного базиса в данной степени.

Рассмотрим феноменологические модели с параметрами порядка $R_{25} \oplus F_{1u}$. Прежде всего опреде-

лим пространство фазовой диаграммы. Критическими данные параметры порядка становятся, когда коэффициенты при квадратах этих ПП равны нулю. Поэтому, если говорить о двух параметрах порядка, необходимо считать, как минимум, что в области изменения термодинамических параметров существует точка, в которой одновременно равны нулю коэффициенты при квадратах ПП R_{25} и F_{1u} . Исследование на устойчивость модели, в которой отсутствуют квадратичные члены, дает следующий потенциал шестой степени:

$$\begin{aligned}
 \Phi &= a_1 J_1 + b_1 J_2 + \\
 &\quad + a_{11} J_1^2 + a_{12} J_1 J_2 + b_{11} J_2^2 + d_1 J_3 + d_2 J_4 + d_3 J_5 + \\
 &\quad + d_4 J_6 + a_{111} J_1^3 + a_{13} J_1 J_3 + a_3 J_7 + b_{111} J_2^3 + b_{13} J_2 J_4 + \\
 &\quad + b_3 J_{12} + f_1 J_8 + f_2 J_9 + f_3 J_{10} + f_4 J_{11} + f_{23} J_2 J_3 + \\
 &\quad + f_{25} J_2 J_5 + f_{23} J_2 J_6.
 \end{aligned} \tag{14}$$

В потенциале (14) подчеркнуты слагаемые, равные нулю в мультикритической точке. Из 18 инвариантов шестой степени, согласно (11), в устойчивом потенциале (14) присутствует 13. Пару слагаемых шестой степени $J_2 J_3$, $J_2 J_5$ можно заменить на пару $J_1^2 J_2$, $J_1 J_2^2$.

4. ВЛИЯНИЕ НЕКРИТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ПОРЯДКА НА УСТОЙЧИВОСТЬ КРИТИЧЕСКИХ

Исключение слагаемых старших степеней в потенциале феноменологической теории, согласно (5), основано на действии дифференциальных векторных инвариантов (\vec{v}_m, \vec{V}) на инварианты слагаемых потенциала. При этом производится дифференцирование первого порядка. Поэтому если существуют инварианты, линейные по некритическим параметрам порядка, то учет таких слагаемых может дать дополнительные уравнения для исключения слагаемых старших степеней. Учет таких ПП будет упрощать феноменологический потенциал. Поясним сказанное на простом примере. Пусть имеется инвариант $\eta^3 \xi$ для однокомпонентных ПП η и ξ . Тогда существует дифференциальный инвариант $\left(\eta^3, \frac{\partial}{\partial \xi}\right)$. Действие его на исходный инвариант дает $\left(\eta^3, \frac{\partial}{\partial \xi}\right) \eta^3 \xi = \eta^6$. Это позволяет исключить слагаемое шестой степени η^6 из феноменологического потенциала.

Вернемся к рассмотрению ПП R_{25} и F_{1u} . Наиболее известная величина, имеющая такие линейные

инварианты, – это деформация. Традиционно включаются в термодинамическое рассмотрение следующие инварианты упругой связи:

$$\begin{aligned}
 J_{e_1} &= u_1(\varphi_2^2 + \varphi_3^2) + u_2(\varphi_1^2 + \varphi_3^2) + u_3(\varphi_1^2 + \varphi_2^2), \\
 J_{e_2} &= u_4\varphi_2\varphi_3 + u_5\varphi_1\varphi_3 + u_6\varphi_1\varphi_2, \quad (15) \\
 J_{e_3} &= u_1(p_2^2 + p_3^2) + u_2(p_1^2 + p_3^2) + u_3(p_1^2 + p_2^2), \\
 J_{e_4} &= u_4p_2p_3 + u_5p_1p_3 + u_6p_1p_2; \\
 J_{e_5} &= u_1\varphi_1^2 + u_2\varphi_2^2 + u_3\varphi_3^2, \\
 J_{e_6} &= u_1p_1^2 + u_2p_2^2 + u_3p_3^2. \quad (16)
 \end{aligned}$$

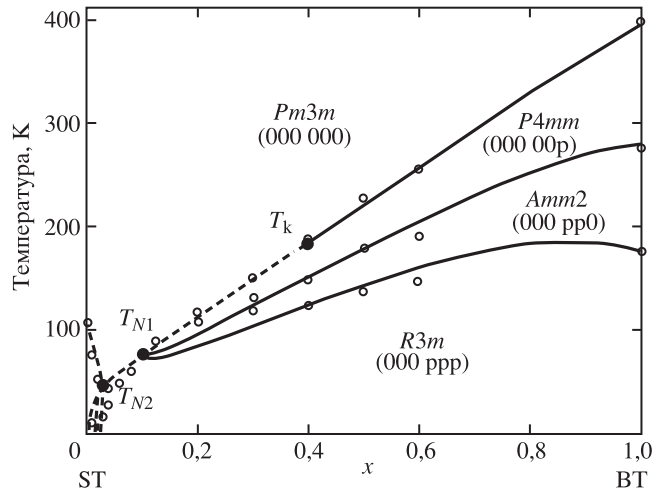
Шесть инвариантов (15) и (16) линейны по деформациям. Деформации u_1, u_2, u_3 под действием элементов симметрии преобразуются друг через друга, но, в отличие от деформаций u_4, u_5, u_6 , включают в себя единичное представление. Чтобы его исключить (с помощью единичного представления можно устранить любое слагаемое), будем использовать только инварианты (15). Это следует из того, что можно образовать два произведения

$$\begin{aligned}
 (u_1 + u_2 + u_3)(\varphi_1^2 + \varphi_2^2 + \varphi_3^2), \\
 (u_1 + u_2 + u_3)(p_1^2 + p_2^2 + p_3^2),
 \end{aligned}$$

при помощи которых можно “убрать” инварианты (16).

Анализ потенциала феноменологической теории для ПП $R_{25} \oplus F_{1u}$ с отсутствующей квадратичной частью приводит к потенциалу шестой степени, в которой можно оставить только одно слагаемое. Из физических соображений этим слагаемым должно быть либо J_1^3 , либо J_2^3 . Вычисления показывают, что это сделать можно.

Рассмотренная модель с варьируемыми параметрами при квадратах ПП недостаточна для описания фазовых переходов в твердых растворах BST. Для выяснения типа мультикритической точки, а значит числа и типа варьируемых параметров, обратимся к фазовой диаграмме твердого раствора BST, приведенной на рисунке [1]. Прежде всего схождение линий фазовых переходов из парафазы в одну точку T_{N2} выделяет два параметра при квадратах ПП: J_1, J_2 (12), равных нулю в этой точке. Для описания фазового перехода первого рода со стороны *Va* необходимо, чтобы была отрицательной константа при J_2^2 . Уменьшение гистерезиса этого перехода при увеличении концентрации Sr заканчивается в трикритической точке T_k , в которой константа при J_2^2 должна быть равна нулю. Это дает второй варьируемый параметр и более сложную мультикритическую точку, в которой одновременно зануляются константы при J_1, J_2 и J_2^2 . Кроме



Фазовая диаграмма Ba_xSr_{1-x}TiO₃ [1]. Сплошные и штриховые линии соответствуют линиям фазовых переходов первого и второго рода. Экспериментальные точки взяты из [17]. Вычисленные координаты трикритической и мультикритических точек $T_{N1} = 79$ К, $x = 0,11$; $T_{N2} = 47$ К, $x = 0,028$; $T_k = 176$ К, $x = 0,38$. Под обозначением симметрии приведен вид параметра порядка, характеризующего данную фазу

того, экспериментальные точки на линиях трех фазовых переходов в низкосимметричные фазы – тетрагональную (*P4mm*), орторомбическую (*Amm2*) и ромбоэдрическую (*R3m*) – при уменьшении концентрации Ва сближаются. Это говорит о точке схождения этих фаз (T_{N1}), существование которой возможно при равенстве нулю константы при J_4 . Таким образом, минимальная модель, которая может описать фазовую диаграмму твердого раствора BST, должна содержать мультикритическую точку, в которой исчезают слагаемые J_1, J_2, J_2^2 и J_4 в феноменологическом потенциале. Следовательно, полная фазовая диаграмма такой модели четырехмерна.

Исследование на устойчивость потенциала BST в вышеописанной мультикритической точке с учетом упругих инвариантов (15) позволяет записать потенциал

$$\begin{aligned}
 \Phi &= a_1 J_1 + b_1 J_2 + b_{11} J_2^2 + d_2 J_4 + \\
 &+ a_{11} J_1^2 + a_{12} J_1 J_2 + d_1 J_3 + d_3 J_5 + d_4 J_6 + \\
 &+ b_{111} J_2^3 + b_3 J_{12} + b_{13} J_2 J_4 + \Phi_u, \quad (17)
 \end{aligned}$$

где Φ_u – обычный упругий потенциал, включающий все слагаемые (15), (16). В (17) подчеркнуты слагаемые, равные нулю в мультикритической точке. Потенциал устойчив относительно малых внешних воздействий во всей области изменений параметров a_1, b_1, b_{11}, d_2 , включая нулевую точку. Таким образом, проведенные исследования показывают, что феноменологический потенциал, в котором по ротационному ПП $R_{25} - \varphi$ учитываются члены

до четвертой степени, а по ПП поляризации – p до шестой, достаточен для описания фазовой диаграммы твердого раствора BST.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Concentration phase diagram of $Ba_xSr_{1-x}TiO_3$ solid solutions / *V.B. Shirokov, V.I. Torgashev, A.A. Bakirov, V.V. Lemanov* // *Physical Review B*. 2006. Vol. 73. P. 104–116 (1–7).
2. *Pertsev N.A., Zembiglotov A.G., Tagantsev A.K.* Effect of Mechanical Boundary Conditions on Phase Diagrams of Epitaxial Ferroelectric Thin Films // *Phys. Rev. Lett.* 1998. Vol. 80. P. 1988–1991.
3. *Головки Ю.И., Мухортов В.М., Маматов А.А.* Фазовые переходы в наноразмерных эпитаксиальных сегнетоэлектрических пленках титаната бария-стронция // *Вестник Южного научного центра*. 2008. Т. 4. № 2. С. 11–17.
4. Phenomenological theory of phase transitions in epitaxial $Ba_xSr_{1-x}TiO_3$ thin films / *V.B. Shirokov, Yu.I. Yuzuyuk, B. Dkhil, V.V. Lemanov* // *Physical Review B*. 2009. Vol. 79. P. 144118 (1–9).
5. *Постон Т., Стюарт И.* Теория катастроф и ее приложения. М.: Мир, 1980. 608 с.
6. *Арнольд В.И.* Теория катастроф // *Итоги науки и техники. Сер. Современные проблемы математики. Фундаментальные направления*. М.: ВИНТИ АН СССР, 1986. С. 219–278.
7. *Гилмор Р.* Прикладная теория катастроф. М.: Мир, 1984. Т. 1, 2. 635 с.
8. *Томпсон Дж. М. Т.* Неустойчивости и катастрофы в науке и технике. М.: Мир, 1985. 254 с.
9. *Кутьин Е.И., Лорман В.Л., Павлов С.В.* Методы теории особенностей в феноменологии фазовых переходов // *Успехи физических наук*. 1991. Т. 161. № 6. С. 109–147.
10. *Арнольд В.И., Варченко А.Н., Гусейн-Заде С.М.* Особенности дифференцируемых отображений. М.: Наука, 1982. Т. 1. 304 с.
11. *Вейль Г.* Классические группы, их инварианты и представления. М.: ИИЛ, 1947. 400 с.
12. *Широков В.Б.* К построению целого рационального базиса инвариантов // *Физика металлов и металлосодержание*. 1982. Т. 54. № 5. С. 880–886.
13. *Спрингер Т.* Теория инвариантов. М.: Мир, 1981. 192 с.
14. *Бурбаки Н.* Группы и алгебры Ли. М.: Мир, 1972. 331 с.
15. *Jaric M.V., Birman J.L.* New algorithms for the Molien function // *J. Math. Phys.* 1977. Vol. 18. № 7. P. 1456–1458.
16. *Широков В.Б.* Базис инвариантов для сегнетомагнетика // *Кристаллография*. 2011. Т. 56. Вып. 3. С. 530–531.
17. Phase transitions and glasslike behavior in $Sr_{1-x}Ba_xTiO_3$ / *V.V. Lemanov, E.P. Smirnova, P.P. Syrnikov and E.A. Tarakanov* // *Phys. Rev. B*. 1996. Vol. 54. P. 3151–3157.

STABILITY ANALYSIS OF A PHENOMENOLOGICAL MODEL OF SOLID SOLUTIONS $Ba_{1-x}Sr_xTiO_3$

V.B. Shirokov

By catastrophe theory was investigated on the stability of the phenomenological Landau potential of a solid solution $Ba_{1-x}Sr_xTiO_3$. Potential, depending on the six-component order parameter (rotation and polarization) is stable if it includes a sixth-degree thirteen terms. Additional consideration of the elastic potential can be excluded from the potential of the phenomenological theory, all the cross terms in the sixth degree.

Key words: Landau theory, phase transitions, solid solutions, catastrophe theory, structurally stable, barium-strontium titanate.

REFERENCES

1. Shirokov V.B., Torgashev V.I., Bakirov A.A., Lemanov V.V. 2006. Concentration phase diagram of $Ba_xSr_{1-x}TiO_3$ solid solutions. *Phys. Rev. B.* 73: 104116(1–7). doi: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.73.104116>. (In English).
2. Pertsev N.A., Zembiglotov A.G., Tagantsev A.K. 1998. Effect of Mechanical Boundary Conditions on Phase Diagrams of Epitaxial Ferroelectric Thin Films. *Phys. Rev. Lett.* 80: 1988–1991. doi: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.80.1988>. (In English).
3. Golovko Yu.I., Mukhortov V.M., Mamatov A.A. 2008. [Phase transitions in nanoscale epitaxial ferroelectric films of barium strontium titanate]. *Vestnik Yuzhnogo Nauchnogo Tsentra.* 4(2): 11–17. (In Russian).
4. Shirokov V.B., Yuzyuk Yu.I., Dkhil B., Lemanov V.V. 2009. Phenomenological theory of phase transitions in epitaxial $Ba_xSr_{1-x}TiO_3$ thin films. *Phys. Rev. B.* 79: 144118(1-9). doi: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.79.144118>. (In English).
5. Poston T., Stewart I. 1978. *Catastrophe theory and its applications*. L., “Pitman”. (In English).
6. Arnold V.I. 1986. Teoriya katastrof. [Catastrophe theory]. In: *Itogi nauki i tehniki. Sovremennye problemy matematiki. Fundamental'nye napravleniya. [Results of science and technology. Current problems in mathematics. Fundamental Directions]*. M., VINITI AN SSSR: 219–277. (In Russian).
7. Gilmore Robert. 1981. *Catastrophe Theory for Scientists and Engineers*. N.-Y., “Wiley & Sons”. (In English).
8. Thompson J.M.T. 1982. *Instabilities and catastrophes in science and engineering*. N.-Y., “Wiley & Sons”. (In English).
9. Kut'in E.I., Lorman V.L., Pavlov S.V. 1991. Methods of the theory of singularities in the phenomenology of phase transitions. *Sov. Phys. Usp.* 34(6): 497–514. doi: 10.1070/PU1991v034n06ABEH002385. (In English).
10. Arnold V.I., Varchenko A.N., Gusein-Zade S.M. 1985. *Singularities of Differentiable Maps. Vol. 1: The Classification of Critical Points Caustics, Wave Fronts*. Boston, “Birkhäuser”: 396 p. (In English).
11. Weyl H. 1939. *The Classical Groups. Their Invariants and Representations*. Princeton, Princeton University Press. (In English).
12. Shirokov V.B. 1982. K postroeniju celogo racional'nogo bazisa invariantov. [On the construction of a rational basis of invariants]. *Fizika metallov i metallovedenie.* 54: 880–886. (In Russian).
13. Springer T.A. 1977. *Invariant theory*. Berlin, “Springer”. (In English).
14. Bourbaki N. 1968. *Groupes et algebres de Lie*. Paris, “Hermann”. (In French).
15. Jaric M.V., Birman J.L. 1977. New algorithms for the Molien function. *J. Math. Phys.* 18: 1456–1458. (In English).
16. Shirokov V.B. 2011. Basis of Invariants for Multiferroic. *Crystallography Reports.* 56(3): 475–476. (In English).
17. Lemanov V.V., Smirnova E.P., Syrnikov P.P. and Tarakanov E.A. 1996. Phase transitions and glasslike behavior in $Sr_{1-x}Ba_xTiO_3$. *Phys. Rev. B.* 54: 3151–3157. (In English).