

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
АМУРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
(ФГБОУ ВО «АмГУ»)

Институт компьютерных и инженерных наук
Кафедра Математического анализа и моделирования
Направление подготовки 01.03.02 – Прикладная математика и информатика
Направленность (профиль) образовательной программы «Прикладная математика и информатика»

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ
И.о. зав. кафедрой
_____ Н.Н. Максимова
«_____» _____ 2025 г.

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

на тему: Численное моделирование сегнетоэлектрического гистерезиса на основе термодинамического подхода

Исполнитель
студент группы 1101об

(подпись, дата)

О.С. Дорошков

Руководитель
канд. физ.-мат. наук

(подпись, дата)

Л.И. Мороз

Нормоконтроль

(подпись, дата)

В.О. Салмиянов

Благовещенск 2025

Министерство науки высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
АМУРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
(ФГБОУ ВО «АмГУ»)

Институт компьютерных и инженерных наук
Кафедра математического анализа и моделирования

УТВЕРЖДАЮ
И.о. зав. кафедрой
_____ Н.Н. Максимова
« _____ » _____ 2025 г.

З А Д А Н И Е

К выпускной квалификационной работе студента Дорошкова Олега Сергеевича.

1. Тема выпускной квалификационной работы: «Численное моделирование сегнетоэлектрического гистерезиса на основе термодинамического подхода» (утверждена приказом от 03.04.2025 № 879-уч).

2. Срок сдачи студентом законченной работы (проекта) 25.06.2025 г.

3. Исходные данные к выпускной квалификационной работе: отчет по преддипломной практике, отчеты по научно-исследовательской работе, Matlab.

4. Содержание выпускной квалификационной работы (перечень подлежащих разработке вопросов): обзор математических моделей на основе термодинамической теории Ландау для описания динамики распределения поляризации и гистерезиса в сегнетоэлектриках, средства реализации модели, метод конечных разностей, метод Рунге-Кутты, результаты вычислительных экспериментов.

5. Перечень материалов приложения: листинг программы, внешний вид интерфейса.

6. Консультанты по выпускной квалификационной работе (с указанием относящихся к ним разделов): нормоконтроль – Салмиянов В.О., ассистент.

7. Дата выдачи задания: 14.04.2025 г.

Руководитель выпускной квалификационной работы: Мороз Любовь Игоревна
канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры МАиМ.

Задание принял к исполнению (14.04.2025): _____ Дорошков О.С.

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа содержит 70 с., 10 рисунков, 4 таблицы, 35 источника.

УРАВНЕНИЕ В ЧАСТНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ, ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ, ТЕОРИЯ ЛАНДАУ, УРАВНЕНИЕ ЛАНДАУ – ХАЛАТНИКОВА – ТАНИ, ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ, ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

В выпускной квалификационной работе представлена реализация математических моделей сегнетоэлектрического гистерезиса на основе термодинамического подхода. Исследование основано на решении начальных и начально-краевых задач для уравнения Ландау – Халатникова, Ландау – Халатникова – Тани, обобщенного уравнения Ландау – Халатникова – Тани, описывающих динамику поляризации в сегнетоэлектрических материалах под действием внешнего электрического поля.

Разработанные вычислительные алгоритмы позволяют провести комплексное исследование динамических характеристик сегнетоэлектриков. Особое внимание уделено анализу влияния входных параметров на форму и свойства гистерезисных петель. Проведено сравнение результатов, полученных для различных модификаций моделей, включая модели Ландау – Халатникова, Ландау – Халатникова – Тани и обобщенную модель Ландау – Халатникова – Тани.

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	6
1 Основы сегнетоэлектричества: базовые понятия и основные характеристики	9
1.1 Сегнетоэлектричество	9
1.1.1 Виды поляризации.	11
1.1.2 Сегнетоэлектрический гистерезис.	13
1.2 Материалы	15
1.2.1 Оксиды со структурой перовскита	16
1.2.2 Слоистые оксидные сегнетоэлектрики	17
1.2.3 Магнитные сегнетоэлектрические оксиды	18
1.2.4 Электронные сегнетоэлектрики	19
1.2.5 Наноразмерные сегнетоэлектрики	20
1.2.6 Другие семейства сегнетоэлектрических оксидов	20
1.3 Методы исследования сегнетоэлектриков	21
1.4 Приложение сегнетоэлектриков	22
1.4.1 Сегнетоэлектрическая память	24
1.4.2 Пироэлектрические и пьезоэлектрические устройства	26
2 Детерминированные модели сегнетоэлектрического гистерезиса на основе термодинамического подхода	28
2.1 Термодинамические принципы. Теория Ландау	28
2.2 Модель Ландау – Халатникова	31
2.3 Обобщенная модель Ландау – Халатникова	33
2.4 Модель Ландау – Халатникова – Тани	35
2.5 Обобщенная модель Ландау – Халатникова – Тани	36

3 Численные методы реализации детерминированных моделей сегнетоэлектрического гистерезиса	39
3.1 Численные методы решения начальных задач для обыкновенных дифференциальных уравнений	39
3.2 Метод конечных разностей	42
3.3 Линейные многошаговые методы решения задач Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений	43
3.4 Метод сеток решения начально-краевых задач для уравнений в частных производных гиперболического типа	48
3.5 Построение вычислительной схемы для начально-краевой задачи обобщенного уравнения Ландау – Халатникова – Тани	50
4 Программная реализация моделей сегнетоэлектрического гистерезиса на примере титаната свинца	52
Заключение	58
Библиографический список	59
Приложение А Листинг программы расчёта динамических характеристик переключения поляризации в сегнетоэлектриках: термодинамический подход	63
Приложение Б Интерфейс программы	70

ВВЕДЕНИЕ

Исследование сегнетоэлектрических материалов и их динамических характеристик представляет собой одну из ключевых задач современной физики конденсированных сред и материаловедения. Сегнетоэлектрики обладают уникальными свойствами – спонтанная поляризация, гистерезис, пьезо- и электрооптические эффекты – обусловлены их сложной кристаллической структурой и фазовыми переходами. Эти характеристики делают их незаменимыми в современных технологиях, особенно в нанoeлектронике и энергосберегающих устройствах. Однако для эффективного использования сегнетоэлектриков необходимо глубокое понимание механизмов переключения поляризации, особенно в наноразмерных системах, где влияние поверхностных эффектов и дефектов становится доминирующим [7].

Одним из наиболее распространенных подходов к описанию динамики сегнетоэлектриков является феноменологическая модель Ландау – Халатникова, предложенная Л.Д. Ландау и Г.Е. Халатниковым в 1954 году [14]. Эта модель связывает скорость изменения поляризации с термодинамической силой, действующей на систему, и учитывает диссипативные процессы. Модель успешно применяется для анализа петель гистерезиса – зависимости поляризации от внешнего электрического поля, которая характеризует энергетические потери и устойчивость сегнетоэлектрических состояний [12]. Однако классическая модель Ландау – Халатникова имеет ограничения, особенно при описании неоднородных систем и материалов с пространственно-временной дисперсией. Для учета таких факторов были разработаны модификации модели. Например, модель Ландау – Гинзбурга – Девоншира, в которой введены дополнительные члены, связанные с градиентами поляризации, что позволяет исследовать доменную структуру и движение стенок между доменами [21]. Тем не менее модели первого порядка по времени не учитывают инерционные эффекты, которые становятся значимыми при быстрых процессах переключения поляризации (например, при высоких частотах внешнего поля или

в наноразмерных системах). Для компенсации этого ограничения в модели Ландау – Халатникова – Тани введена вторая производная по времени [21,30,31].

Дополнительный член позволяет описывать колебательные режимы в динамике поляризации, которые наблюдаются при резких изменениях внешнего электрического поля, учитывать временные задержки в переключении поляризации, особенно актуальные для высокочастотных приложений (например, в оптических модуляторах), анализировать нестационарные процессы, такие как формирование и движение доменных стенок под действием импульсных полей. Несмотря на то, что модель на основе уравнения Ландау – Халатникова – Тани известна в литературе, решение уравнения Ландау – Халатникова – Тани с учетом слагаемого Гинзбурга не приведено.

Целью работы является разработка алгоритмических и программных средств для численной реализации моделей сегнетоэлектрического гистерезиса на основе термодинамического подхода Ландау.

Задачи исследования включают:

1. Обзор современных подходов к моделированию сегнетоэлектрического гистерезиса.
2. Анализ применимости моделей Ландау – Халатникова и ее модификаций в различных физических условиях.
3. Разработка вычислительных схем. Построение алгоритмов численного решения дифференциальных уравнений, описывающих динамику поляризации.
4. Проведение вычислительных экспериментов. Построение петель гистерезиса для PbTiO_3 при различных параметрах внешнего поля (амплитуде, частоте), толщинах пленок.

Новизна работы заключается в систематическом сравнении различных моделей на основе уравнения Ландау – Халатникова для конкретных материалов (PbTiO_3) и адаптации численных методов для анализа нестационарных режимов. Полученные результаты позволят оценить применимость каждой модели в зависимости от физических условий и внести вклад в понимание механизмов переключения поляризации в наноразмерных системах.

Структура работы. Работа состоит из введения, четырех глав, заключения и библиографического списка. Первая глава посвящена теоретическим основам сегнетоэлектриков. Во второй главе приведено математическое описание моделей Ландау – Халатникова, Ландау – Халатникова – Тани и Ландау – Халатникова – Гинзбурга – Девоншира. В третьей главе описаны вычислительные методы, включая дискретизацию уравнений и выбор алгоритмов численного решения. Четвертая глава представляет результаты вычислительных экспериментов по построению петель гистерезиса для PbTiO_3 и обсуждается сравнение моделей и их применимость в различных условиях.

1 ОСНОВЫ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСТВА: БАЗОВЫЕ ПОНЯТИЯ И ОСНОВНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ

1.1 Сегнетоэлектричество

Термин «сегнетоэлектричество» был введен в научное использование благодаря сегнетовой соли (тартрата натрия-калия, $\text{NaKC}_4\text{H}_4\text{O}_6 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$), в которой чешский ученый Йозеф Валашек в 1920–1921 годах впервые обнаружил нелинейные электрические свойства [8, 21], включая спонтанную поляризацию и гистерезис в зависимости поляризации от электрического поля – ключевые признаки сегнетоэлектриков. В 1930–1950-х годах исследования в этой области получили мощный импульс благодаря открытию других сегнетоэлектриков, таких как титанат бария (BaTiO_3) (1940-е, Б.М. Вул, А. фон Гиппель), ставший первым известным сегнетоэлектриком-керамиком, рошелева соль (другая модификация сегнетовой соли), триглицинсульфат (TGS) и другие органические сегнетоэлектрики. Теоретическая база сегнетоэлектричества была заложена работами выдающихся физиков: В.Л. Гинзбурга (феноменологическая теория, 1940–1950-е), А.Ф. Девоншира (модель термодинамического потенциала), Дж.С. Слейтера (микроскопическая теория для перовскитов) и В. Кокрена [15, 19]. К 1960–1970-м годам были открыты сегнетоэлектрики-полупроводники, сегнетоэластики и материалы с несоизмерными фазами. Позже, в конце XX – начале XXI века, активное изучение тонких пленок, композитов и мультисегнетоиков (сочетающих сегнетоэлектрические и магнитные свойства) расширило область применения сегнетоэлектриков в микроэлектронике, датчиках и энергонезависимой памяти. В русскоязычной литературе иногда используется написание «сегнетоэлектрики» (от Сегнет, французское название города, где добывали соль), но международный вариант – ferroelectrics (по аналогии с сегнетомagnetиками). Современные исследования включают сегнетоэлектрические полимеры (например, PVDF) и гибридные перовскиты для солнечных элементов.

Сегнетоэлектрики представляют собой изоляторы, которые обладают двумя или более стабильными (или метастабильными) состояниями, каждое из

которых характеризуется различной ненулевой электрической поляризацией в условиях отсутствия внешнего электрического поля. Эта поляризация именуется спонтанной. Для того чтобы вещество считалось сегнетоэлектриком, его поляризация должна изменяться между состояниями под влиянием внешнего электрического поля, которое, взаимодействуя с поляризацией, изменяет относительную энергию этих состояний в соответствии с уравнением $-E P$.

Сегнетоэлектрические материалы обладают рядом выдающихся свойств, таких как высокая диэлектрическая проницаемость, а также способность проявлять пьезоэлектрические, пьезоэлектрические и электрокалорические эффекты. Кроме того, они характеризуются нелинейными электрооптическими особенностями и другими примечательными качествами. В настоящее время сегнетоэлектрики находят широкое использование в различных областях современных технологий, включая радиотехнику, акустику, оптоэлектронику и пиротехнику и пьезотехнику. Эти материалы применяются как в динамических, так и в статических запоминающих устройствах в вычислительной технике, а также служат датчиками для акустических и тепловых волн, пьезоэлементами, модуляторами лазерного излучения и активными компонентами в СВЧ-устройствах и других областях [21].

Наличие спонтанной поляризации в сегнетоэлектрических материалах связано с определенными особенностями их кристаллической структуры, в частности с отсутствием центра симметрии в кристаллической решетке. Это отсутствие симметрии приводит к тому, что центры тяжести положительных и отрицательных зарядов в элементарной ячейке не совпадают, что, в свою очередь, вызывает возникновение поляризованного дипольного момента [8, 32]. Это явление способствует упорядочению дипольных моментов, которые ориентируются вдоль определенного направления, называемого полярной осью кристалла. В отсутствие внешнего электрического поля такое упорядочение дипольных моментов приводит к возникновению спонтанной поляризации материала.

В более общем контексте состояние диэлектрика можно описать через его поляризацию P , которая представляет собой суммарный дипольный момент на

единицу объема. Для того чтобы сегнетоэлектрический материал оставался устойчивым и минимизировал свою полную энергию, он должен быть разделен на области, в которых поляризация направлена в разных направлениях. Эти области называются доменами. Доменные стенки образуют границы, которые разделяют эти области с разнонаправленной спонтанной поляризацией. Этот процесс позволяет кристаллу сохранять свою стабильность, снижая внутреннюю энергию. Пример такого разделения на домены можно увидеть на рисунке 1.1, где представлено расположение доменных стенок.

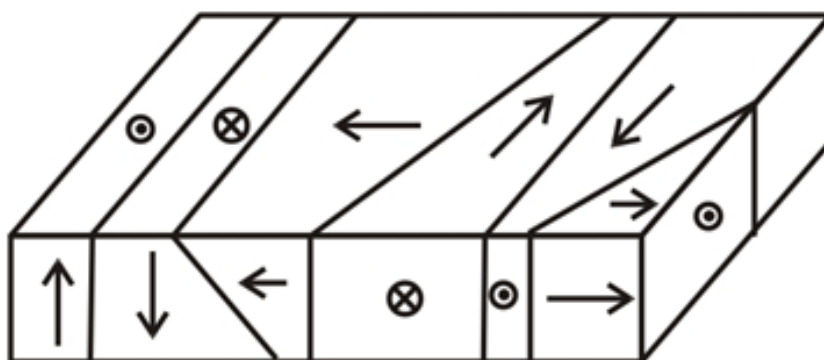


Рисунок 1.1 – Схема разбиения доменов сегнетоэлектрика

1.1.1 Виды поляризации.

Существует несколько типов спонтанной поляризации в сегнетоэлектрических материалах, которые зависят от особенностей их кристаллической структуры и симметрии. Основные виды спонтанной поляризации включают [21]:

1. Линейная поляризация: Линейная спонтанная поляризация возникает, когда дипольные моменты, обусловленные нарушением симметрии в кристалле, ориентированы вдоль одной оси [1,28], и эта ориентация остаётся неизменной при отсутствии внешнего электрического поля. Это типичная поляризация для простых сегнетоэлектрических кристаллов, например, BaTiO_3 (титанат бария), где поляризация ориентирована вдоль определенной оси, обычно вдоль полярной оси кристалла.

2. Ротационная поляризация: В некоторых сегнетоэлектрических материалах спонтанная поляризация может иметь сложную ротационную структуру. В этих материалах диполи расположены не вдоль одной оси, а могут быть направлены под углом друг к другу, создавая более сложную картину поляризации. Это явление наблюдается в материалах с низкой симметрией, например, в PbTiO_3 (свинцовый титанат), где поляризация может изменяться в зависимости от температуры и внешних воздействий.

3. Поляризация, вызванная доменами. В сегнетоэлектрических материалах часто существует разделение на домены – области, внутри которых поляризация направлена в одну сторону. Домены могут быть выровнены параллельно или иметь разные направления поляризации, что влияет на конечный результат. Спонтанная поляризация в такой структуре формируется за счёт упорядоченного расположения дипольных моментов внутри каждого домена. Между доменами расположены доменные стенки, которые отделяют области с различной ориентацией поляризации. Этот тип поляризации характерен для многослойных сегнетоэлектрических материалов, таких как BaTiO_3 или PbTiO_3 .

4. Анизотропная поляризация: В некоторых материалах поляризация может быть анизотропной, то есть зависеть от направления в кристалле. В таких материалах поляризация может изменяться в зависимости от того, вдоль какой оси происходит наблюдение. Это особенно важно в кристаллах с низкой симметрией, например, в сегнетоэлектрических перовскитах, где поляризация может быть сильнее вдоль одной оси и слабее вдоль другой. Анизотропия поляризации сильно влияет на свойства материала, такие как его диэлектрическая проницаемость и пьезоэлектрические характеристики.

5. Температурная зависимость поляризации. Многие сегнетоэлектрические материалы показывают зависимость спонтанной поляризации от температуры. В этих материалах поляризация изменяется при изменении температуры, что приводит к переходу между разными фазами с разной поляризацией. Это явление наблюдается в перовскитах и некоторых других сегнетоэлектрических ма-

териалах, таких как BaTiO_3 . При высоких температурах, как правило, сегнетоэлектрическая поляризация исчезает, переходя в тетрагональную фазу с центром симметрии (параэлектрическая фаза).

6. Поляризация, возникающая при внешнем воздействии. Спонтанная поляризация может возникать или изменяться под воздействием внешних факторов, таких как механическое напряжение, магнитное поле или химическое воздействие. Эти эффекты могут быть использованы в пьезоэлектрических и магнитоэлектрических материалах, где поляризация изменяется в ответ на внешние механические или магнитные воздействия. Например, LiNbO_3 (литийниевый оксид) может изменять свою поляризацию в ответ на внешние напряжения.

7. Электрическая поляризация в наноструктурах: В наноструктурированных сегнетоэлектрических материалах, например, в однослойных или ультратонких пленках, спонтанная поляризация может иметь особое поведение, обусловленное эффектами на уровне нанометров. В таких структурах спонтанная поляризация может изменяться даже при слабых внешних воздействиях, таких как изменение температуры, напряжения или даже при наличии малых дефектов в структуре материала.

1.1.2 Сегнетоэлектрический гистерезис.

Когда к сегнетоэлектрическому кристаллу с симметричной доменной структурой прикладывают постоянное электрическое поле с напряженностью E , вдоль сегнетоэлектрической оси возникает ненулевая поляризация. При небольших значениях напряженности поля зависимость поляризации от E остается линейной, но по мере увеличения поля эта зависимость становится нелинейной. Самый крутой участок кривой поляризации $P(E)$ соответствует интенсивному процессу перестройки доменной структуры, когда дипольные моменты в доменах начинают выстраиваться в одном направлении под воздействием поля. Когда поляризация достигает значения спонтанной поляризации P_s , её дальнейший рост практически прекращается. Это связано с тем, что происходят процессы ионного и электронного смещения в материале, что приводит к стабилизации кристалла в однодоменном состоянии.

Значение спонтанной поляризации P_s можно получить, экстраполируя зависимость $P(E)$ при $E=0$, то есть на основе кривой поляризации можно определить максимальную поляризацию, которую может развить материал. Когда внешнее поле E обращается в ноль, кристалл сохраняет остаточную поляризацию P_r , которая является результатом того, что домены остаются ориентированными в определенном направлении даже при отсутствии внешнего поля. При воздействии внешнего электрического поля, направленного противоположно исходному, равного коэрцитивной силе E_c , поляризация материала становится нулевой, так как домены меняют свою ориентацию.

Стоит отметить, что кривая деполяризации, получаемая при снижении напряженности внешнего электрического поля E , не совпадает с кривой поляризации. Это объясняется тем, что уменьшение поляризации P происходит с задержкой относительно уменьшения напряженности поля E . Таким образом, кривая, которая описывает зависимость поляризации сегнетоэлектрического кристалла от внешнего электрического поля $P(E)$, представляет собой диэлектрический гистерезис, что показано на рисунке 1.2.

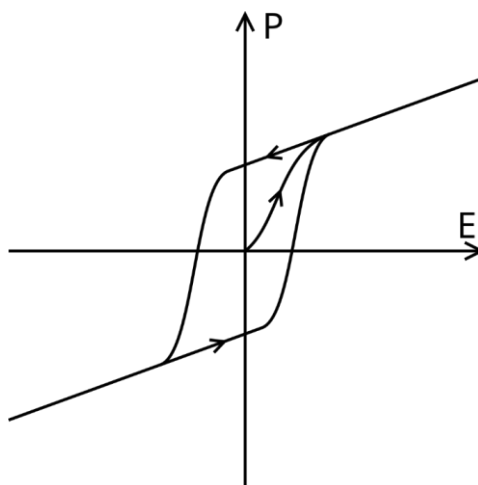


Рисунок 1.2 – Вид петли гистерезиса, зависимости поляризации P от напряженности поля E

При повышении температуры сегнетоэлектриков происходит фазовый переход, сопровождающийся изменением симметрии кристаллической решетки. В результате этих изменений спонтанная поляризация также претерпевает трансформацию и полностью исчезает. Температура, при которой материал теряет

свои сегнетоэлектрические свойства и превращается в обычный диэлектрик, называется температурой Кюри T_c , а сама точка перехода – точкой Кюри. Выше температуры Кюри материал переходит в поляризованную электрическую фазу без доменной структуры. Интересной особенностью сегнетоэлектриков является то, что существует не одна точка Кюри, а две – одна выше, другая ниже. В таких материалах сегнетоэлектрические свойства сохраняются в определенном температурном диапазоне, ограниченном этими двумя значениями. Например, соли сегнетовой кислоты имеют две точки Кюри: 15°C и $+22,5^\circ\text{C}$, что означает, что они сохраняют свои сегнетоэлектрические свойства в этом диапазоне, но за его пределами ведут себя как обычные диэлектрики. Помимо температуры Кюри, на фазовый переход сегнетоэлектрических элементов могут влиять и другие факторы, такие как давление и внешние электрические и магнитные поля, что делает их полезными для применения в различных технических и научных областях, например, в пьезоэлектрических и оптических элементах.

Термодинамическая теория сегнетоэлектриков основывается на ключевом принципе: при фиксированных внешних условиях свободная энергия FF сегнетоэлектрика может быть выражена как функция десяти переменных. К этим переменным относятся шесть компонент тензора деформаций, три компоненты поляризации и одна скалярная величина – температура.

1.2 Материалы

Сегнетоэлектрические материалы составляют обширную и разнообразную группу веществ, которые благодаря своим уникальным физическим свойствам находят применение в самых разных областях науки и техники. Их отличительной чертой является наличие спонтанной электрической поляризации, которая может изменяться под воздействием внешнего электрического поля [20]. Эти материалы классифицируются по химическому составу, кристаллической структуре и специфическим характеристикам, определяющим их функциональные возможности. В данной главе подробно рассматриваются основные семейства сегнетоэлектрических материалов, включая оксиды со структурой перовскита, литий ниобат (LiNbO_3), слоистые оксидные сегнетоэлектрики, а также другие

классы, такие как магнитные сегнетоэлектрические оксиды, электронные сегнетоэлектрики и наноразмерные сегнетоэлектрические структуры.

В таблице 1.1 представлены характеристики для наиболее используемых сегнетоэлектриков. Здесь T_K – точка Кюри; P_c – спонтанная поляризация.

Таблица 1.1 – Характеристики сегнетоэлектриков

Материал	T_K °C	P_c мкКл/см ²
Калий титанил фосфат	900	100
Титанат бария	130	30
Дигидрофосфат калия	-150	4,7
Дитерофосфат калия	-50	4,8
Ниобат лития	1200	15
Ниобат калия	435	30
Танталат лития	655	25
Триглицинсульфат	49	2,8
Титанат свинца	490	60
Молибдат гадолиния	160	0,2

1.2.1 Оксиды со структурой перовскита

Оксиды со структурой перовскита представляют собой один из наиболее изученных и широко применяемых классов сегнетоэлектрических материалов. Их популярность обусловлена универсальностью физических свойств, которые можно модифицировать путем изменения химического состава и условий синтеза [5]. Общая химическая формула перовскитов – ABO_3 , где А и В – катионы, которые могут быть представлены как одиночными элементами (например, Ba^{2+} для А и Ti^{4+} для В в $BaTiO_3$), так и их комбинациями или включать вакансии. Вакансии, или точечные дефекты, возникают при отсутствии атомов в узлах кристаллической решетки и могут существенно влиять на свойства материала [26].

Кристаллическая структура перовскитов в высокотемпературной параэлектрической фазе характеризуется кубической симметрией (пространственная группа $Pm\bar{3}m$) [21]. В этой структуре атомы В располагаются в центрах кислородных октаэдров, образованных шестью атомами кислорода, которые формируют вершины. Октаэдры соединены между собой через общие вершины, образуя трехмерную сеть. Атомы А заполняют пустоты в этой сети, координируясь с 12 атомами кислорода, что обеспечивает высокую симметрию. В сегнетоэлектрической фазе структура искажается, теряя центр симметрии, что приводит к смещению ионов и возникновению спонтанной поляризации. Например, в $BaTiO_3$ при охлаждении ниже температуры Кюри (около $120^\circ C$) кубическая структура переходит в тетрагональную, сопровождаясь смещением иона титана относительно кислородного октаэдра [22].

Разнообразие состава перовскитов позволяет создавать материалы с широким спектром свойств, от диэлектрических до полупроводниковых и магнитных. Например, цирконат-титанат свинца ($Pb(Zr_{1-x}Ti_x)O_3$, PZT) обладает высокой пьезоэлектрической активностью, что делает его незаменимым в датчиках, актуаторах и ультразвуковых устройствах [16]. Другие перовскиты, такие как $SrTiO_3$, проявляют сегнетоэлектрические свойства только в специфических условиях, например, при приложении механического напряжения или в наноструктурах [18]. Основные преимущества перовскитов включают высокую диэлектрическую проницаемость, устойчивость к многократному переключению поляризации и возможность легирования для улучшения характеристик [10].

1.2.2 Слоистые оксидные сегнетоэлектрики

Слоистые оксидные сегнетоэлектрики отличаются от классических перовскитов наличием чередующихся перовскитоподобных слоев и дополнительных структурных единиц, что придает им выраженную анизотропию свойств [20]. Основные группы таких материалов включают фазы Ауривиллиуса, Раддлсдена–Поппера и структуры с перемежающимися несегнетоэлектрическими слоями.

Фазы Ауривиллиуса имеют общую формулу $(\text{Bi}_2 \text{O}_2)^{2+} (\text{A}_{n-1} \text{B}_n \text{O}_{3n+1})^{2-}$, где А – катионы (например, Sr, Ba, Pb), В – переходные металлы (Ti, Nb, Ta), а n определяет количество перовскитовых слоев в структурной единице. Примером является бититанат висмута $(\text{Bi}_4 \text{Ti}_3 \text{O}_{12})$, который обладает высокой устойчивостью к усталости при многократном переключении поляризации [9]. Это свойство делает его перспективным для энергонезависимой сегнетоэлектрической памяти (FeRAM). Структура фаз Ауривиллиуса включает чередование перовскитоподобных слоев и слоев $(\text{Bi}_2 \text{O}_2)^{2+}$, которые стабилизируют кристаллическую решетку и способствуют анизотропии диэлектрических характеристик [5].

Фазы Раддлсдена-Поппера описываются формулой $\text{A}_{n+1} \text{B}_n \text{O}_{3n+1}$, где перовскитовые слои разделены слоями оксидов щелочноземельных металлов. Например, $\text{Sr}_2 \text{TiO}_4$ может демонстрировать сегнетоэлектрическую неустойчивость при определенных условиях, таких как легирование или изменение температуры [18]. Эти материалы характеризуются высокой анизотропией и применяются в оптических и микроэлектронных устройствах, включая конденсаторы и диэлектрические слои [30].

Слоистые сегнетоэлектрики обладают рядом уникальных свойств, включая высокую радиационную устойчивость, что делает их подходящими для применения в аэрокосмических технологиях, а также нелинейную оптическую активность, используемую в устройствах преобразования частоты света [12]. Однако сложность их синтеза, связанная с необходимостью точного контроля состава и структуры, а также ограниченная термическая стабильность некоторых соединений, являются основными препятствиями для массового применения [23]. Исследования направлены на разработку новых методов синтеза, таких как молекулярно-лучевая эпитаксия, для улучшения качества слоистых материалов.

1.2.3 Магнитные сегнетоэлектрические оксиды

Магнитные сегнетоэлектрические оксиды, или мультисегнетоики, представляют собой материалы, сочетающие сегнетоэлектрические и магнитные

свойства. Это позволяет управлять электрической поляризацией с помощью магнитного поля и, наоборот, магнитным упорядочением с помощью электрического поля [5]. Наиболее известный пример – BiFeO_3 , который обладает высокой спонтанной поляризацией (до 100 мКл/см^2) и антисегнетомагнитным упорядочением при комнатной температуре [28].

Мультисегнетоики перспективны для создания энергонезависимой памяти нового поколения, устройств спинтроники и магнитоэлектрических сенсоров [14]. Например, возможность управления магнитным состоянием электрическим полем может существенно снизить энергопотребление в запоминающих устройствах. Однако конкуренция между сегнетоэлектрическим и магнитным упорядочением затрудняет синтез стабильных мультисегнетоиков с высокими рабочими температурами [8].

Современные исследования сосредоточены на разработке гибридных структур, таких как многослойные пленки BiFeO_3 с магнитными материалами, для усиления магнитоэлектрического взаимодействия [19]. Также изучаются новые мультисегнетоики, такие как TbMnO_3 , которые демонстрируют сильную связь между электрическими и магнитными свойствами при низких температурах [28].

1.2.4 Электронные сегнетоэлектрики

Электронные сегнетоэлектрики отличаются от традиционных сегнетоэлектриков тем, что их спонтанная поляризация обусловлена не ионным смещением, а перераспределением электронной плотности [24]. Примером является SrTiO_3 , который в чистом виде не является сегнетоэлектриком, но может проявлять сегнетоэлектрические свойства при легировании (например, Nb) или в наноструктурах, где эффекты поверхности усиливают поляризацию [19].

Электронные сегнетоэлектрики характеризуются высокой подвижностью носителей заряда, что делает их перспективными для полупроводниковых устройств, таких как транзисторы и датчики [24]. Их интеграция в микроэлектронику облегчается совместимостью с кремниевыми технологиями. Однако свойства этих материалов сильно зависят от дефектов, граничных условий и

внешних факторов, таких как температура и электрическое поле [8]. Исследования направлены на оптимизацию методов легирования и создание наноструктур для повышения стабильности сегнетоэлектрических свойств.

1.2.5 Наноразмерные сегнетоэлектрики

Наноразмерные сегнетоэлектрики, включая тонкие пленки, наночастицы и нанотрубки, представляют собой новое направление в исследовании сегнетоэлектрических материалов. Уникальность этих структур заключается в сохранении сегнетоэлектрических свойств при размерах вплоть до нескольких нанометров [25]. Например, тонкие пленки BaTiO_3 демонстрируют спонтанную поляризацию при толщине около 1 нм, что делает их перспективными для создания запоминающих устройств с высокой плотностью хранения данных [19].

Сегнетоэлектрические нанотрубки, изготовленные из поликристаллической керамики, обладают стенками нанометровой толщины и применяются в микросистемах подачи жидкости, струйных принтерах и литографических установках [30]. Их производство осуществляется с использованием пористых матриц или методов фокусированного ионного пучка, обеспечивающих высокую регулярность структур. Наночастицы, такие как PbTiO_3 , сохраняют сегнетоэлектрические свойства при размерах около 20 нм, что открывает возможности для создания наноконденсаторов и сенсоров [11].

Основной вызов в работе с наноразмерными сегнетоэлектриками – это обеспечение экономически выгодного массового производства без потери качества материала [27]. Методы самоорганизации и прямой записи электронным пучком активно развиваются для решения этой проблемы. Кроме того, исследования сосредоточены на изучении влияния граничных эффектов и дефектов на свойства наноструктур, что критически важно для их практического применения [19].

1.2.6 Другие семейства сегнетоэлектрических оксидов

К сегнетоэлектрическим оксидам, помимо перовскитов и слоистых структур, относятся такие классы, как вольфраматы, пирохлоры и титанаты редкоземельных элементов. Эти материалы обладают уникальными свойствами, которые расширяют их потенциальные области применения.

Вольфраматы, такие как Bi_2WO_6 , характеризуются высокой диэлектрической проницаемостью и сегнетоэлектрическими свойствами, обусловленными их слоистой структурой [22]. Они находят применение в высокочастотных конденсаторах и диэлектрических устройствах. Пирохлоры, например $\text{Cd}_2\text{Nb}_2\text{O}_7$, обладают сложной кристаллической структурой, которая способствует появлению спонтанной поляризации [24]. Эти материалы используются в высокочастотной электронике благодаря их низким диэлектрическим потерям.

Титанаты редкоземельных элементов, такие как YMnO_3 , представляют интерес благодаря сочетанию сегнетоэлектрических и магнитных свойств, что делает их потенциальными мультисегнетоиками [28]. Однако их низкая температура Кюри (обычно ниже комнатной) ограничивает практическое использование. Исследования в этой области сосредоточены на повышении температуры фазового перехода путем легирования и создания композитных структур [8].

Эти семейства оксидов дополняют перовскиты и слоистые материалы, расширяя возможности для создания специализированных устройств, таких как высокочастотные фильтры и сенсоры.

1.3 Методы исследования сегнетоэлектриков

Для их исследования применяются различные методы, позволяющие изучить их физические свойства:

1. Диэлектрические измерения: измеряется диэлектрическая проницаемость материала в зависимости от частоты, температуры и электрического поля. Этот метод помогает определить фазовые переходы и диэлектрические аномалии, характерные для сегнетоэлектриков [32].

2. Измерение петель гистерезиса поляризации и электрического поля: применяется для изучения зависимости поляризации от внешнего электрического

поля. Характерная форма петли подтверждает сегнетоэлектрические свойства и позволяет определить остаточную поляризацию и коэрцитивное поле.

3. Рентгеновская дифракция (XRD): анализируется кристаллическая структура материала. Метод выявляет изменения симметрии решетки при фазовых переходах, что важно для понимания природы сегнетоэлектричества

4. Электронная микроскопия (SEM/TEM): сканирующая (SEM) или просвечивающая (TEM) электронная микроскопия позволяет изучить микроструктуру и доменную структуру сегнетоэлектриков на наноуровне [19].

5. Инфракрасная и комбинационно рассеянная спектроскопия: эти методы исследуют колебания атомов в кристаллической решетке. Они помогают выявить мягкие моды – колебания, связанные с сегнетоэлектрическими переходами.

6. Тепловые методы (DSC/DTA): дифференциальная сканирующая калориметрия (DSC) и дифференциальный термический анализ (DTA) измеряют теплоемкость и энтальпию при фазовых переходах, определяя температуру Кюри.

7. Метод второго гармонического поколения (SHG): используется нелинейная оптика для обнаружения отсутствия центра симметрии в структуре, что является ключевым признаком сегнетоэлектричества.

8. Пьезоэлектрические измерения: оценивается способность материала генерировать электрический заряд под механическим напряжением или деформироваться под электрическим полем. Это важно для приложений сегнетоэлектриков.

1.4 Приложение сегнетоэлектриков

Во многих практических приложениях сегнетоэлектриков задействуются не столько их сегнетоэлектрические свойства, сколько связанные с ними эффекты – пьезоэлектричество и пьезоэлектричество. С точки зрения симметрии, эти свойства являются необходимыми условиями для существования сегнетоэлектричества, но не являются достаточными. Это означает, что все сегнетоэлектрики проявляют пьезоэлектрические и пьезоэлектрические свойства, однако не

все пьезоэлектрики являются пирозэлектриками, и не все пирозэлектрики обладают сегнетоэлектрическими характеристиками.

Пирозэлектрические материалы широко применяются в инфракрасных детекторах, сенсорах температуры и тепловизорах, где их способность изменять поляризацию в ответ на изменение температуры используется для регистрации теплового излучения.

Пьезоэлектрики находят обширное применение в электромеханических системах, преобразовывая механические деформации в электрический сигнал и наоборот. Особенно важны пьезоэлектрические материалы в микроэлектромеханических системах (MEMS), где их высокая чувствительность и компактность позволяют создавать точные датчики, ультразвуковые преобразователи, исполнительные механизмы и акустические устройства.

Одним из наиболее эффективных материалов для пьезоэлектрических применений является PZT ($\text{Pb}(\text{Zr}_{1-x}\text{Ti}_x)\text{O}_3$) - твердый раствор цирконата и титаната свинца. Благодаря высокой пьезоэлектрической активности, PZT широко используется в современных ультразвуковых приборах, микронасосах, сенсорах давления, а также в генерации и обработке акустических волн.

В последние годы активно исследуются новые сегнетоэлектрические и пьезоэлектрические материалы, включая безсвинцовые альтернативы (например, KNN – ниобаты калия-натрия), которые демонстрируют схожие характеристики, но при этом являются более экологичными. Такие материалы открывают новые возможности для разработки энергоэффективных и безопасных технологий в микроэлектронике, биомедицинских устройствах и системах управления.

В таблице 1.2 представлены основные направления применения определенных физических свойств сегнетоэлектриков. Здесь ФП – фазовый переход; ГС – гибридные структуры.

Таблица 1.2 – Применение сегнетоэлектриков

Физические особенности	Применение
Высокая диэлектрическая проницаемость	Электрические конденсаторы из сегнетокерамики с размытым ФП
	Сегнетополупроводниковые конденсаторы с барьерным слоем
	СВЧ резонаторы, конденсаторы из высокочастотных диэлектриков
Переключение спонтанно поляризации	Моно- и поликристаллические сегнетоэлектрики с прямоугольной петлей гистерезиса
	ГС сегнетоэлектрик – люминофор
	ГС сегнетоэлектрик – фотопроводник
	ГС сегнетоэлектрик – полупроводник
Температурное изменение E и P в окрестности ФП	Элементы термоизмерения и термоконтроль
	Термокомпенсирующие элемент
	Позистор
Диэлектрическая нелинейность	Вариконды с эффективной нелинейностью
	Вариконды с реверсивной нелинейностью
	Нелинейные СВЧ и ВЧ элемент

1.4.1 Сегнетоэлектрическая память

Сегнетоэлектрическая память (FeRAM, Ferroelectric Random Access Memory) представляет собой один из типов энергонезависимой памяти, использующий сегнетоэлектрические материалы для хранения данных. В отличие от традиционной flash-памяти, FeRAM обеспечивает более высокую скорость записи, низкое энергопотребление и гораздо большее количество циклов перезаписи, что делает ее перспективной технологией для встроенных систем и портативных устройств [30].

В основе работы FeRAM лежит использование сегнетоэлектрического конденсатора, состоящего из двух металлических электродов и слоя сегнетоэлектрического материала, например, $\text{Pb}(\text{Zr}_{1-x}\text{Ti}_x)\text{O}_3$ (PZT) или $\text{SrBi}_2\text{Ta}_2\text{O}_9$ (SBT). Хранение информации осуществляется за счет двух возможных состояний поляризации:

Поляризация вверх (+) - соответствует логической "1".

Поляризация вниз (-) - соответствует логическому "0".

Для записи данных к ячейке памяти прикладывается электрическое поле, которое переключает направление поляризации сегнетоэлектрика. Считывание осуществляется путем измерения изменения заряда при попытке переключения поляризации. Однако такой процесс является разрушающим, так как в случае изменения состояния данные стираются и требуют последующего восстановления.

FeRAM использует матричную архитектуру, аналогичную DRAM, но с сегнетоэлектрическим конденсатором вместо диэлектрического слоя. Основные компоненты ячейки FeRAM включают:

Сегнетоэлектрический конденсатор – отвечает за хранение заряда.

Транзистор доступа – регулирует запись и считывание данных.

Адресные и разрядные шины – обеспечивают выборку нужной ячейки памяти.

Поперечное сечение типичной ячейки FeRAM включает верхний и нижний электроды, между которыми размещается сегнетоэлектрический слой, например, $\text{SrBi}_2\text{Ta}_2\text{O}_9$ (SBT) или PZT.

Благодаря своим уникальным свойствам, FeRAM активно используется в следующих областях:

– Энергонезависимая память в встраиваемых системах – микроконтроллеры, смарт-карты, автомобильные электронные системы.

– Высокоскоростные буферные устройства – регистрационные накопители для процессоров и цифровых устройств.

– Космические и военные технологии – высокая радиационная устойчивость делает FeRAM перспективной для использования в спутниках и системах навигации.

– Биомедицинские приборы – энергоэффективные решения для имплантируемых медицинских устройств.

1.4.2 Пироэлектрические и пьезоэлектрические устройства

Сегнетоэлектрики обладают удивительной способностью преобразовывать тепло и механическую энергию в электричество и наоборот, что делает их идеальными для множества устройств. Эти свойства связаны с их кристаллической структурой, которая не имеет центра симметрии, позволяя материалам реагировать на внешние воздействия [32].

Пироэлектричество – это когда материал меняет свою поляризацию при изменении температуры. Все сегнетоэлектрики обладают этим свойством, и оно активно используется в устройствах, которые улавливают тепловые изменения. Например, такие материалы, как триглицинсульфат и танталат лития, применяются в инфракрасных детекторах и тепловизорах. Они преобразуют тепловое излучение в электрический сигнал, что позволяет видеть в темноте или обнаруживать тепловые утечки. Триглицинсульфат нашел практическое применение, потому что он очень чувствителен к воздействию температуры (переключение поляризации начинается уже при комнатной температуре) [21]. Пироэлектрические материалы также помогают создавать точные датчики температуры для медицинских приборов, систем климат-контроля и промышленного оборудования. Еще одно интересное направление – сбор энергии. Тонкие пленки цирконата-титаната свинца могут генерировать электричество из небольших перепадов температуры, что может питать автономные устройства, например, сенсоры для Интернета вещей [30].

Пьезоэлектричество позволяет сегнетоэлектрикам превращать механическое давление в электрический заряд или, наоборот, деформироваться под действием электрического поля. Это свойство делает их основой для множества

электромеханических устройств. Например, цирконат-титанат свинца, известный своей высокой пьезоэлектрической активностью, используется в ультразвуковых аппаратах для медицинской диагностики и в системах проверки материалов без их разрушения. Он создает ультразвуковые волны и улавливает их отражение, помогая заглянуть внутрь объектов [30]. Пьезоэлектрические материалы, такие как титанат бария, также востребованы в датчиках давления, акселерометрах и микрофонах, а в актуаторах они обеспечивают точное управление движением – например, в камерах смартфонов или медицинских микронасосах [21]. В микроэлектромеханических системах, или MEMS, тонкие пленки этих материалов позволяют создавать компактные датчики и механизмы для носимых гаджетов и биомедицинских имплантатов [20]. Еще одно важное применение – акустические устройства. Литий ниобат, например, создает поверхностные акустические волны, которые используются в фильтрах и резонаторах для телекоммуникаций, включая сети 5G [16].

Однако есть и сложности. При многократном использовании пьезоэлектрические материалы могут уставать, а некоторые, вроде цирконата-титаната свинца, содержат токсичный свинец. Поэтому ученые активно ищут экологичные альтернативы, такие как ниобаты калия-натрия. Они уже показывают хорошие результаты, но пока требуют доработки, чтобы стать такими же эффективными [28].

2 ДЕТЕРМИНИРОВАННЫЕ МОДЕЛИ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ГИСТЕРЕЗИСА НА ОСНОВЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО ПОДХОДА

Моделирование динамических откликов сегнетоэлектриков, таких как поляризация и гистерезисные петли, играет ключевую роль в понимании их поведения под воздействием внешних электрических полей. Эти характеристики отражают способность материала переключать спонтанную поляризацию, что важно для практических приложений, например, в памяти, датчиках и исполнительных устройствах. Моделирование позволяет предсказать, как быстро и эффективно материал реагирует на изменения поля, выявить влияние дефектов, температуры и частоты сигнала на его свойства, а также оптимизировать параметры для конкретных устройств. Без учета динамики поляризации и формы петель невозможно точно описать фазовые переходы и энергопотребление, что делает такие расчеты неотъемлемой частью исследований сегнетоэлектриков.

2.1 Термодинамические принципы. Теория Ландау

Рассмотрим электрическое поле, приложенное параллельно направлению поляризации P . В этом случае поляризация P является параметром порядка, зависящим от одной пространственной переменной x . Поверхности сегнетоэлектрического образца заданы при $x = 0$ и $x = L$. Обратите внимание, что поляризация и приложенное электрическое поле являются векторными величинами. Это означает, что во время полного переключения поляризации моделируются только два возможных состояния поляризации: $\uparrow P$ и $\downarrow P$, которые связаны с ориентацией приложенного поля $\uparrow E$ и $\downarrow E$ соответственно.

Основной теорией, описывающей сегнетоэлектрики, является феноменологическая теория Ландау – Гинзбурга – Девоншира, которая объясняет поведение сегнетоэлектриков на макроскопическом уровне, включая фазовые переходы, спонтанную поляризацию и доменную структуру. Теория Ландау основана на концепции параметра порядка (поляризации P) и разложении свободной энергии в ряд по степеням P , предсказывая фазовые переходы II рода (непрерывные) в сегнетоэлектриках. Модификация Гинзбурга добавляет градиентные члены,

учитывающие неоднородности поляризации, такие как доменные стенки. Вклад Девоншира расширил теорию для описания реальных кристаллов, введя упругие напряжения и электрострикцию, а его уравнение состояния связывает поляризацию с внешним полем и температурой [3,21].

Одно из ключевых положений данной теории гласит, что равновесное состояние системы соответствует минимальному значению свободной энергии F . Это подразумевает, что все зависимые переменные системы принимают такие значения, которые обеспечивают термодинамическую стабильность.

Состояние равновесного сегнетоэлектрика может быть описано набором определенных параметров: поляризацией P , электрическим полем E , температурой T , механическими деформациями η и механическим напряжением σ . При этом поляризация и деформация обычно рассматриваются как внутренние параметры системы, тогда как электрическое поле и механическое напряжение выступают в роли внешних воздействующих факторов.

Для количественного описания поведения сегнетоэлектриков вблизи фазовых переходов первого и второго рода применяется теория структурных фазовых переходов Ландау. На основе этой концепции Гинзбург и Девоншир разработали феноменологическую термодинамическую теорию сегнетоэлектричества. Она описывает механизмы фазовых переходов, сопровождающихся изменением структуры вещества, включая переупорядочение атомов или изменение кристаллографической сингонии.

Дополнительно, термодинамическая теория сегнетоэлектричества позволяет прогнозировать свойства материалов в различных условиях, таких как воздействие высоких давлений или сильных электрических и магнитных полей. Это делает сегнетоэлектрики важными объектами исследований для создания функциональных материалов, используемых в электронике, сенсорных устройствах, энергоэффективных системах хранения данных и пьезоэлектрических технологиях.

Вблизи температуры Кюри свободная энергия F может быть разложена в степенной ряд, параметры которого определяются либо экспериментальными

данными, либо расчетами на основе первопринципного моделирования. При этом условия центросимметричности неполярной фазы позволяют сократить количество членов в разложении, что упрощает аналитическое описание системы.

В частном случае, когда механические напряжения отсутствуют, а поляризация направлена вдоль одной из кристаллографических осей, разложение функции F значительно упрощается. Для одноосных сегнетоэлектриков плотность свободной энергии выражается через степенной ряд единственной компоненты поляризации, что позволяет получить удобную форму зависимости энергии от температуры и внешних воздействий.

Такой подход является основой для описания фазовых переходов и критического поведения сегнетоэлектриков. Он позволяет не только количественно оценивать температурные зависимости поляризации, но и предсказывать влияние различных факторов, таких как внешние электрические поля, механические напряжения и примесные эффекты, на сегнетоэлектрические свойства материала.

$$F = \frac{1}{2}AP^2 + \frac{1}{4}BP^4 + \frac{1}{6}CP^6 - EP, \text{ Дж / м}^3, \quad (2.1)$$

где $P=P(x,t)$ – спонтанная поляризация, Кл/м²; $A=A_0(T-T_{cw})$, м/Ф; B , м⁵/(Кл²·Ф); C , м⁹/(Кл⁴·Ф) – термодинамические постоянные.

Равновесной конфигурации будет соответствовать минимум плотности свободной энергии F : $\frac{\delta F}{\delta P} = 0$. Выражение (2.1) определяет зависимость электрического поля E от поляризации P : $E = AP + BP^3 + CP^5$.

Линейную диэлектрическую восприимчивость в области выше точки фазового перехода можно найти, вычислив производную последнего выражения по P и подставив $P = 0$.

$$\chi = \frac{P}{\varepsilon_0 E} = \frac{1}{\varepsilon_0 A}. \quad (2.2)$$

В соответствии с теорией Ландау Гинзбурга Девоншира предполагается, что вблизи температуры Кюри T_N коэффициент A является функцией температуры.

$$A=A_0(T-T_{cw}), \quad (2.3)$$

Изменение свободной энергии между параэлектрической фазой $T \gg T_{cw}$ и сегнетоэлектрической $T \ll T_{cw}$ будет зависеть от знака коэффициента B . Когда $T = T_{cw}$, если $B > 0$, будет происходить фазовый переход второго рода, а если $B < 0$, то переход первого рода.

В работе рассмотрен одномерный простейший случай, когда поляризация направлена вдоль одной кристаллографической оси, а электрическое поле приложено параллельно этому направлению. Такой подход позволяет упростить математическое описание системы, сосредоточив внимание на ключевых аспектах динамики поляризации, таких как фазовые переходы и гистерезисные явления. В рамках этой модели предполагается, что поляризация $P(x,t)$ изменяется только вдоль одной пространственной координаты x , а временная эволюция описывается уравнением Ландау – Халатникова, которое учитывает релаксационные процессы. Это дает возможность аналитически исследовать поведение сегнетоэлектрика вблизи температуры Кюри, а также предсказать форму гистерезисных петель $P(E)$ при различных значениях внешнего электрического поля E .

2.2 Модель Ландау – Халатникова

Для анализа динамических процессов в сегнетоэлектриках была разработана модель Ландау – Халатникова, которая вводит временную зависимость в уравнениях, описывающих поведение поляризации.

Модель Ландау – Халатникова основана на предположении, что изменение поляризации во времени пропорционально термодинамической силе, стремящейся минимизировать свободную энергию системы. Эта модель особенно полезна для изучения гистерезисных явлений, переключения доменов и релаксационных процессов в сегнетоэлектрических материалах.

Для описания динамики Ландау и Халатников предложили релаксационное уравнение, связывающее скорость изменения поляризации с производной свободной энергии по поляризации:

$$\frac{dP}{dt} = \delta \frac{\partial F}{\partial P},$$

где δ – кинетический коэффициент, характеризующий вязкость или сопротивление системы изменению поляризации. Подставляя выражение для F , получаем:

$$\delta \frac{dP}{dt} = -AP - BP^3 - CP^5 + E. \quad (2.4)$$

Это уравнение лежит в основе модели Ландау – Халатникова и позволяет описывать временную эволюцию поляризации под воздействием внешнего поля или при спонтанных процессах релаксации.

Начальные условия:

$$P(0) = P_0.$$

Модель Ландау – Халатникова применяется для анализа гистерезисных петель, которые являются ключевой характеристикой сегнетоэлектриков.

В случае фазового перехода второго порядка, например, для триглицинсульфата (TGS), уравнение упрощается за счёт исчезновения членов выше P^4 , что отражает более плавное изменение поляризации.

В работе [13] с помощью уравнения Ландау – Халатникова исследуются импульсные реакции переключения поляризации в BaTiO_3 . Установлены максимальные токи и времена переключения поляризации как функции электрического поля, показывающие степенные зависимости с показателем 0,88. Также в работе [11] представлено исследование субнаносекундного переключения поляризации в тонких плёнках $\text{Pb}(\text{Zr}, \text{Ti})\text{O}_3$ с использованием классического уравнения Ландау – Халатникова. Показано, что даже без учёта диссипативных модификаций уравнение предсказывает предельное время переключения ~ 100 пс, что согласуется с экспериментами.

2.3 Обобщенная модель Ландау – Халатникова

Многие явления в сегнетоэлектрических материалах, такие как гистерезисные петли, фазовые переходы и частотно-зависимый отклик, часто моделируются с использованием уравнения Ландау – Халатникова, дополненного начальными условиями $P|_t = P_0$. Однако равновесные состояния поляризации определяются этим уравнением свободной энергии, но динамика развития поляризации в этих состояниях ограничена механизмом релаксации, описываемым уравнением Ландау – Халатникова.

Для учёта пространственных флуктуаций и корреляций в системе используется расширение уравнения Ландау – Халатникова на основе концепции Гинзбурга:

$$\delta \frac{dP}{dt} = \psi \frac{d^2 P}{dt^2} - AP - BP^3 - CP^5 + E, \quad (2.5)$$

где ψ – положительный термодинамический параметр.

Градиентный член подавляет резкие скачки поляризации, стабилизируя плавные переходы между доменами, и позволяет моделировать такие явления, как:

1. Формирование доменных стенок – переходные слои между областями с противоположной ориентацией поляризации. Толщина стенки определяется балансом между градиентной энергией G и объемной свободной энергией F .
2. Движение доменов под внешним полем – градиентный член влияет на скорость распространения фронта переключения поляризации.
3. Влияние дефектов и неоднородностей – локальные изменения G или F могут закреплять доменные стенки, что важно для понимания эффектов усталости в сегнетоэлектрических материалах.

Эта модификация особенно важна для анализа наноразмерных систем, таких как тонкие пленки и нанопроволки, где поверхностные эффекты и ограниченность пространства усиливают роль пространственных флуктуаций. Например, в ультратонких пленках BaTiO_3 градиентный член позволяет описать стабилизацию спонтанной поляризации даже при снижении температуры Кюри из-

за механических напряжений. Модель LKGD также используется для изучения паттернообразования в сложных сегнетоэлектрических структурах, где взаимодействие между доменами приводит к самоорганизации в регулярные решетки или вихревые конфигурации. Таким образом, расширение уравнения Ландау – Халатникова с учётом концепции Гинзбурга открывает возможность исследовать не только временную, но и пространственную динамику сегнетоэлектриков, что критично для проектирования современных устройств на основе наноматериалов.

Для замыкания математического описания задачи обобщённое уравнение Ландау – Халатникова в одномерном случае должно дополняться начальными и граничными условиями, например:

$$P|_{t=0} = P_0, \quad \left. \frac{\partial P}{\partial x} \right|_{x=0} = \frac{P}{\lambda}, \quad \left. \frac{\partial P}{\partial x} \right|_{x=L} = -\frac{P}{\lambda},$$

где λ – длина экстраполяции, м

Модель ЛХД широко используется для анализа сегнетоэлектриков, таких как титанат бария (BaTiO_3) или цирконат-титанат свинца (PZT), где важны электромеханические взаимодействия. Например, она позволяет предсказать поведение гистерезисных петель $P(E)$ при изменении не только электрического поля, но и механического напряжения, что актуально для пьезоэлектрических приложений. Добавление градиентного члена $\kappa \nabla^2 P$ обеспечивает возможность моделирования доменных структур и их эволюции.

Для материалов с фазовым переходом первого порядка модель ЛХД описывает скачкообразное изменение поляризации и влияние внешних условий на температуру перехода. В системах второго порядка, таких как некоторые органические сегнетоэлектрики, она демонстрирует более плавные изменения, что согласуется с экспериментами.

В работе [17] представлено Исследование посвящено влиянию флексоэлектрического эффекта на динамику поляризации в ультратонких сегнетоэлектрических пленках (SrTiO_3 , BaTiO_3) в рамках LGDH-подхода. Также в работе [25]

представлено комплексное численное моделирование динамики доменов в сегнетоэлектрических конденсаторах на основе расширенной модели Ландау – Гинзбурга – Девоншира – Халатникова (LGDH). Исследование фокусируется на анализе переключения поляризации под действием внешнего электрического поля с учетом различных ключевых аспектов

2.4 Модель Ландау – Халатникова – Тани

Исходя из [28] в уравнение ЛХ вводится кинетическая энергия:

$$T = \frac{1}{2} \rho \left(\frac{\partial P}{\partial t} \right)^2,$$

где ρ – эффективная массовая плотность аналог инерции диполей. Это позволяет сформулировать лагранжиан системы:

$$L = \int_V T dV - F,$$

И затем применить принцип наименьшего действия:

$$\delta I = \delta \int_{t_1}^{t_2} L dt = 0,$$

Что приводит уравнение к виду:

$$K \frac{\partial P}{\partial t} = -\rho \frac{\partial^2 P}{\partial t^2}.$$

Именно включение инерции (вторая производная) позволяет этой модели воспроизводить резонансные пики в диэлектрической восприимчивости при высокочастотных полях – эффект, который не может быть описан уравнением первого порядка

Модель Ландау – Халатникова–Тани (далее ЛХТ) представляет собой развитие классической теории Ландау – Халатникова, дополненное учётом инерционных эффектов, предложенных Тани. Эта модель основана на втором порядке по времени в уравнении эволюции поляризации, что позволяет ей учитывать резонансные явления и динамику в широком диапазоне частот, включая высокочастотный режим. Она особенно полезна для анализа гистерезисных свойств и релаксационных процессов в сегнетоэлектрических системах.

$$\delta \frac{dP}{dt} = -\rho \frac{d^2P}{dt^2} - AP - BP^3 - CP^5 + E, \quad (2.6)$$

где ρ – положительная константа, зависящая от материала, $\text{м}^{-1} \cdot \text{Ф}$.

Начальные условия для него задаются в форме:

$$P|_{t=0} = P_0, \left. \frac{dP}{dt} \right|_{t=0} = P_0.$$

Модель ЛХТ, как показано в работе [22], успешно применяется для симуляции поведения сегнетоэлектриков под синусоидальным электрическим полем, предоставляя новые данные о зависимости гистерезисных петель от частоты и амплитуды поля. Её отличительной чертой является способность предсказывать переходы симметрии, что делает её перспективной для изучения современных приложений сегнетоэлектриков

В работе [35, 34] автор представляет комплексное экспериментально-теоретическое изучение инерционных эффектов в рамках модели ЛХТ, объясняющих механизмы субпикосекундного переключения поляризации в PbTiO_3 . Разработано модифицированное динамическое уравнение, включающее инерционный коэффициент γ , и провели серию экспериментов с использованием фемтосекундной рентгеновской дифракции для точного измерения временной зависимости поляризации $P(t)$.

2.5 Обобщенная модель Ландау – Халатникова – Тани

Обобщённая модель Ландау – Халатникова – Тани, представленная в статье [21], является развитием классической феноменологической теории Ландау, дополненной инерционными эффектами, предложенными Тани, и адаптированной для описания динамики сегнетоэлектриков под воздействием синусоидального электрического поля. Эта модель основана на уравнении второго порядка по времени, что позволяет учитывать резонансные явления и высокочастотные режимы, в отличие от стандартного уравнения Гинзбурга – Ландау первого порядка. Она обобщает подход за счёт включения кинетической энергии, градиентных членов и диссипативных эффектов, что делает её применимой к широкому

классу сегнетоэлектрических систем, включая монодоменные и неоднородные структуры.

Учитывая инерцию зарядов и пространственные флуктуации системы, получаем:

$$\delta \frac{dP}{dt} = -\rho \frac{d^2 P}{dt^2} + \psi \frac{d^2 P}{dx^2} - AP - BP^3 - CP^5 + E \quad (2.7)$$

Уравнение эволюции поляризации выводится с использованием принципа наименьшего действия, требующего стационарности I . Применяется уравнение Эйлера – Лагранжа [16].

В этом случае задача дополняется начальными условиями и граничными условиями:

$$P|_{t=0} = P_0, \quad \left. \frac{\partial P}{\partial t} \right|_{t=0} = \tilde{P}_0, \quad \left. \frac{\partial P}{\partial x} \right|_{x=0} = \frac{P}{\lambda}, \quad \left. \frac{\partial P}{\partial x} \right|_{x=L} = \frac{-P}{\lambda}. \quad (2.8)$$

Эта модель позволяет более точно моделировать поведение сегнетоэлектриков в реальных условиях, включая монодоменные и многодоменные системы, а также наноструктуры.

Стоит отметить, что, помимо представленных целочисленных моделей, в современных исследованиях активно развиваются дробно-дифференциальные модификации моделей сегнетоэлектрического гистерезиса, которые позволяют учитывать эффекты нелокальности, долгосрочной памяти и фрактальные свойства среды. Такие подходы основаны на использовании дробных производных (например, производных Римана – Лиувилля, Капуто или Адамара) вместо классических производных по времени или пространству. Например, в работе [17] выведена дробно-дифференциальная модель Ландау – Халатникова. Дробно-дифференциальные модели особенно актуальны для описания сложных систем, где традиционные уравнения с целочисленными производными оказываются недостаточными. Так они учитывают нелокальные эффекты (дробные производные по времени позволяют учитывать историю изменения поляризации, что важно для материалов с релаксационными процессами, зависящими от предыдущих состояний системы), пространственная фрактальность (дробные производные по

координатам описывают неоднородные структуры с масштабно-инвариантными свойствами, например, дефекты, поры или сложные доменные паттерны в сегнетоэлектриках), аномальную дисперсию (в системах с дальнедействующими взаимодействиями дробные модели могут корректно воспроизводить нестандартное распространение возмущений, которое невозможно описать классическими уравнениями). Однако реализация таких моделей сопряжена с рядом сложностей: высокая вычислительная сложность из-за необходимости учитывать историю процесса при численном решении дробных уравнений, отсутствие стандартных численных методов, требующее разработки специализированных алгоритмов, неопределенность в выборе порядка дробной производной, который зависит от конкретных свойств материала и условий эксперимента.

В рамках настоящей работы рассматриваются модификации уравнения Ландау – Халатникова с производными целых порядков. Дробно-дифференциальные подходы, учитывающие эффекты памяти и пространственно-временную нелокальность, представляют собой перспективное направление, однако их анализ выходит за рамки данного исследования.

3 ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ РЕАЛИЗАЦИИ ДЕТЕРМИНИРОВАННЫХ-МОДЕЛЕЙ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ГИСТЕРЕЗИСА

Моделирование гистерезиса, связанного с нелинейным откликом материалов на внешние воздействия, требует численного решения дифференциальных уравнений. Обыкновенные дифференциальные уравнения (ОДУ) описывают временную динамику гистерезисных процессов, а уравнения в частных производных (УЧП) учитывают пространственные эффекты. Далее описаны наиболее известные приближенные методы, которые можно применить для решения поставленных задач.

3.1 Численные методы решения начальных задач для обыкновенных дифференциальных уравнений

Модели на основе уравнений Ландау – Халатникова и Ландау – Халатникова – Тани без чета слагаемого Гинзбурга сводятся к начальным задачам для обыкновенных дифференциальных уравнений.

При моделировании физических процессов, описываемых обыкновенными дифференциальными уравнениями, важно выбрать подходящий численный метод для их решения. Существует множество методов, различающихся точностью, устойчивостью и вычислительной сложностью. Рассмотрим наиболее распространенные из них [6].

Пусть требуется решить задачу Коши для ОДУ: $y'(t) = f(t, y(t))$, $y(t_0) = y_0$.

Метод Эйлера – один из простейших конечно-разностных методов для решения задачи Коши. Он основан на аппроксимации производной правой разностью:

$$y'(x_i) \approx \frac{y_{j+1} - y_j}{\tau}.$$

Подставляя в уравнение $y' = f(t, y)$, получаем итерационную формулу:

$$y_{i+1} = y_j + \tau \cdot f(t_j, y_j), \quad j = 0, 1, \dots, n-1,$$

с начальным условием $y_0 = y(t_0)$.

Геометрически метод Эйлера строит ломаную, где каждый отрезок является касательной к решению в точке (t_j, y_j) . Локальная погрешность метода составляет $O(\tau^2)$, а глобальная – $O(\tau)$, что делает его методом первого порядка [23].

Существуют модификации метода Эйлера, такие как метод Эйлера – Коши, который уточняет направление перехода между точками. Например, в методе Эйлера – Коши вычисляется предварительное значение:

$$y_{j+1}^* = y_j + \tau f(t_j, y_j),$$

а затем уточненное:

$$y_{j+1} = y_j + \frac{\tau}{2} [f(t_j, y_j) + f(t_{j+1}, y_{j+1}^*)].$$

Эти модификации повышают точность, но увеличивают вычислительную сложность.

Преимущества метода:

- Простота реализации;
- Хорошо иллюстрирует основные принципы численного интегрирования.

Недостатки метода:

- Низкая точность;
- Устойчивость требует маленьких шагов;
- Может давать сильно ошибочные результаты при жестких задачах.

Метод Рунге – Кутты – Методы Рунге–Кутты (например, классический метод 4-го порядка) используют взвешенное усреднение значений производной в нескольких точках интервала [23,6].

Сначала вычисляем промежуточные наклоны:

$$k_1 = \tau \cdot f(t_j, y_j),$$

$$k_2 = \tau \cdot f\left(t_j + \frac{\tau}{2}, y_j + \frac{k_1}{2}\right),$$

$$k_3 = \tau \cdot f\left(t_j + \frac{\tau}{2}, y_j + \frac{k_2}{2}\right),$$

$$k_4 = \tau \cdot f\left(t_j + \frac{\tau}{2}, y_j + \frac{k_3}{2}\right).$$

Заменяем значение y для следующего шага:

$$y_{j+1} = y_j + \frac{\tau}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4),$$

Обновляем t : $t_{j+1} = t_j + \tau$.

Далее повторяются предыдущие действия для достижения нужного интервала.

Преимущества метода:

- Высокая точность (погрешность $O(h^4)$ для метода 4-го порядка);
- Устойчивость.

Недостатки метода:

- Высокие вычислительные затраты;
- Многократные вычисление правой части уравнения.

Метод Пикара – Метод Пикара основан на итерационном уточнении решения интегрального уравнения:

Задание начального условия $y(t_0) = y_0$.

При каждом последующем приближении $y_{j+1}(t)$ вычисляется интеграл:

$y_{j+1}(t) = y_0 + \int_{t_0}^t f(s, y_j(s))ds$, повторение данного шага до достижения нужной точности.

$$y_{k+1}(t) = y_0 + \int_{t_0}^t f(\tau, y_k(\tau))d\tau.$$

Преимущества метода:

- Высокая точность при большом количестве итераций;
- Универсальность.

Недостатки метода:

- Требование вычисления интегралов на каждом шаге, что усложняет задачу для некоторых функций;
- Медленная сходимость для ряда случаев.

При моделировании сегнетоэлектрического гистерезиса требуется решать систему нелинейных дифференциальных уравнений, описывающих динамику поляризации в переменном электрическом поле. Для этого наиболее подходят:

1. Многошаговый метод Адамса – Башфорта – Моултона – благодаря высокой точности и устойчивости, что важно для моделирования нелинейных процессов с возможными резкими изменениями решения.

2. Метод конечных разностей – позволяет эффективно аппроксимировать дифференциальные уравнения в частных производных, которые могут возникать при учете пространственного распределения поляризации.

Эти методы обеспечивают баланс между точностью и вычислительной эффективностью, что критично при моделировании гистерезисных явлений, где требуется длительное интегрирование с сохранением устойчивости решения.

3.2 Метод конечных разностей

Конечно-разностные методы (или сеточные методы) для решения обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) основаны на замене производных в уравнении конечно-разностными аппроксимациями. Эти методы позволяют получить приближенное решение в виде набора значений искомой функции на дискретной сетке узлов. Рассмотрим задачу Коши для ОДУ первого порядка [6]:

$$y' = f(t, y), \quad x \in [t_0, b], \quad y(t_0) = y_0,$$

где $f(t, y)$ – заданная функция, $y(t)$ ищется на отрезке $[t_0, b]$.

Сетка определяется как $(t_j = t_0 + j\tau)$, где $\left(\tau = \frac{b-t_0}{n}\right)$ – шаг, $(j = 0, 1, \dots, n)$. Цель вычислить значения $y_j \approx y(t_j)$.

Метод конечных разностей заключается в аппроксимации производных в ОДУ разностными отношениями. Для ОДУ первого порядка производная (y') в точке (t_j) заменяется, например, правой разностью:

$$y'(x_i) \approx \frac{y_{i+1} - y_i}{h}.$$

Подставляя в уравнение $y' = f(t, y)$, получаем разностное уравнение, которое решается итеративно. Точность метода зависит от порядка аппроксимации: правая разность имеет ошибку $O(\tau)$, а центральная разность $\left(\frac{y_{j+1} - y_{j-1}}{2\tau}\right)$ — ошибку $O(\tau^2)$.

Для ОДУ второго порядка, например, $y'' + p(t)y' + q(t)y = f(t)$, вторая производная аппроксимируется как:

$$y''(t_j) \approx \frac{y_{j+1} - 2y_j + y_{j-1}}{\tau^2},$$

а первая — в виде

$$y'(t_j) \approx \frac{y_{j+1} - y_{j-1}}{2\tau}.$$

Преимущества метода:

- Простота реализации;
- Универсальность;
- Прост в использовании и хорош для равномерных сеток.

Недостатки метода:

- Ограниченная точность при больших шагах;
- Чувствительность к выбору шага (малые шаги — высокая точность, но большие вычислительные затраты);
- Не всегда устойчив при решении жестких задач.

3.3 Линейные многошаговые методы решения задач Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений

Начальная задача для уравнения Ландау – Халатникова (2.1)–(2.6) в общем виде представима следующим образом:

$$y' = f(t, y), t > t_0, \tag{3.1}$$

$$y(t=t_0) = y_0, \tag{3.2}$$

где $f(t, y)$ – нелинейные слагаемые.

Методы Адамса относятся к классу многошаговых конечно-разностных методов, которые используют значения функции и производной в нескольких предыдущих точках для вычисления следующего значения. Они основаны на интегрировании уравнения $y' = f(t, y)$ на отрезке $[t_j, t_{j+1}]$:

$$y(t_{j+1}) = y(t_j) + \int_{t_j}^{t_{j+1}} f(t, y(t)) dt$$

Интеграл аппроксимируется с помощью интерполяционного многочлена, построенного по значениям $f(x_j, y_j)$.

Метод Адамса – Башфорта – Моултона

Многошаговый метод Адамса – Башфорта – Моултона является широким инструментом для численного решения обыкновенных дифференциальных уравнений. Он объединяет явную схему Адамса – Башфорта и неявную схему Адамса–Моултона, часто используемые вместе в виде предиктор-корректорного подхода. Этот метод возник благодаря работам нескольких математиков XIX и XX веков, чьи исследования в области численных методов легли в основу его разработки [23,6].

Основы метода были заложены Джоном Каучем Адамсом (1819–1892), английским математиком и астрономом, известным своим вкладом в небесную механику. В 1850-х годах Адамс решал задачи численного интегрирования ОДУ, связанные с вычислением орбит небесных тел. Для таких задач требовались методы, способные эффективно работать на больших временных интервалах с минимальными вычислительными затратами. Адамс предложил многошаговый подход, использующий значения функции на предыдущих шагах для аппроксимации следующего значения решения. Его идеи, опубликованные в 1883 году, стали основой для так называемого метода Адамса.

Комбинация этих схем в виде предиктор-корректорного метода сформировалась в середине XX века с развитием вычислительной техники. Явный метод Адамса–Башфорта используется как предиктор для начального приближения, а

неявный метод Адамса – Моултона – как корректор для уточнения решения. Такой подход, названный методом Адамса – Башфорта – Моултона, сочетает вычислительную эффективность и высокую точность, что сделало его популярным для решения сложных задач, включая моделирование физических процессов, таких как сегнетоэлектрический гистерезис, дальше более подробно разберем данный метод [23].

Метод Адамса – Башфорта использует экстраполяцию значений f в предыдущих точках. Для k -го порядка формула имеет вид:

$$y_{j+1} = y_j + \tau \sum_{l=0}^{k-1} \alpha_l f(t_{j-l}, y_{j-l}),$$

где коэффициенты α_j зависят от порядка метода. Например:

$$\text{Для } (k = 1): y_{\{j+1\}} = y_j + \tau f(t_j, y_j).$$

$$\text{Для } (k = 2): y_{j+1} = y_j + \frac{\tau}{2} [3f(t_j, y_j) - f(t_{j-1}, y_{j-1})].$$

$$\text{Для } (k = 3): y_{i+1} = y_j + \frac{\tau}{12} [23f(t_j, y_j) - 16f(t_{j-1}, y_{j-1}) + 5f(t_{j-2}, y_{j-2})].$$

Локальная погрешность метода k -го порядка составляет $O(h^{k+1})$, глобальная – $O(h^k)$.

Метод Адамса – Моултона

Метод Адамса – Моултона включает в себя значение $f(x_{\{i+1\}}, y_{\{i+1\}})$, что делает его неявным. Формула для k -го порядка:

$$y_{j+1} = y_j + \tau \sum_{l=-1}^{k-1} \beta_l f(t_{j-l}, y_{j-l}).$$

Примеры:

$$\text{Для } (k = 0): y_{\{j+1\}} = y_j + \tau f(t_{\{j+1\}}, y_{\{j+1\}}).$$

$$\text{Для } (k = 1): y_{j+1} = y_j + \frac{\tau}{2} [f(t_{j+1}, y_{j+1}) + f(t_j, y_j)].$$

$$\text{Для } (k = 2): y_{j+1} = y_j + \frac{\tau}{12} [5f(t_{j+1}, y_{j+1}) + 8f(t_j, y_j) - f(t_{j-1}, y_{j-1})].$$

Неявные методы требуют решения уравнения для $y_{\{i+1\}}$, что усложняет вычисления, но повышает устойчивость.

Предикт-корректорная схема

Для практической реализации часто используют комбинацию явного (предиктор) и неявного (корректор) методов Адамса. Например, для метода 1-го порядка:

$$\text{Предиктор: } y_{j+1}^* = y_j + \tau f(t_j, y_j).$$

$$\text{Корректор: } y_{j+1} = y_j + \tau f(t_{j+1}, y_{j+1}^*).$$

Для метода 3-го порядка:

$$\text{Предиктор: } y_{j+1}^* = y_j + \frac{\tau}{12} [23f(t_j, y_j) - 16f(t_{j-1}, y_{j-1}) + 5f(t_{j-2}, y_{j-2})]. \quad (3.3)$$

$$\text{Корректор: } y_{j+1} = y_j + \frac{\tau}{12} [5f(t_{j+1}, y_{j+1}^*) + 8f(t_j, y_j) - f(t_{j-1}, y_{j-1})]. \quad (3.4)$$

Многошаговые методы требуют начальных точек, которые обычно вычисляются одноступенчатыми методами, такими как Рунге – Кутта.

Преимущества метода:

- Эффективен при длительном интегрировании;
- Меньше вычислений на шаг;
- Высокая точность при соответствующей начальной инициализации.

Недостатки метода:

- Требуется предварительного получения стартовых значений другим методом;
- Усложняется при изменении шага интегрирования;
- Меньше устойчивость при неправильной настройке.

Начальную задачу для решения ОДУ второго порядка для использования метода Адамса – Башфорта – Моултона необходимо свести к системе ОДУ второго порядка:

$$dy'' + \beta y' = f(t, y),$$

$$y(t_0) = y_0$$

$$y'(t_0) = y_0'$$

Используя пакет прикладных программ MATLAB, в котором реализована часть численных методов для решения ОДУ, можно получить точное численное решение конкретной задачи. В таблице 3.1 представлены сравнительные характеристики методов, которые предоставляет пакет.

Таблица 3.1 – Сравнительные характеристики

Название	Метод	Тип задачи	Точность
ode45	Рунге – Кутты 4/5 порядок	Нежесткий	Средняя
ode23	Явные формулы Рунге – Кутты		Низкая
ode113	Адамса – Башфорта – Моултона		Низкая/Высокая
ode78	Рунге – Кутты 7/8 порядок		Высокая
ode89	Рунге – Кутты 8/9 порядок		Высокая
ode15s	Метод переменного порядка	Жесткий	Низкая/Средняя
ode23s	Формула Резенброка 2 порядка		Низкая
ode23t	Правило трапеции		Низкая
ode23tb	Неявная формула Рунге – Кутты		Низкая
ode15i	Метод обратных диф. уравнений	Неопределенный	Низкая

Для решения поставленной задачи при моделировании петель сегнетоэлектрического гистерезиса необходимо решить задачу ОДУ первого и второго порядков, для их решения был выбран встроенная функция ППП MATLAB ode113, который реализует метод Адамса – Башфорта – Моултона. Для ОДУ второго порядка решалась система, одно из уравнений также решалось с использованием встроенной функции ode113.

3.4 Метод сеток решения начально-краевых задач для уравнений в частных производных гиперболического типа

Обобщенная модель Ландау – Халатникова – Тани сводится к начально-краевой задаче для уравнения в частных производных гиперболического типа, которая записывается в общем виде $F(x, y, U, U_x, U_y, U_{xx}, U_{yy}, U_{xy}) = 0$.

Решением, которого будет считаться функция $U(x, y)$.

В общем случае уравнения в частных производных второго порядка классифицируются по типу: эллиптические, параболические и гиперболические. Для их численного решения широко применяются метод сеток, в котором производные заменяют конечно-разностными аппроксимациями на дискретной сетке.

Рассмотрим простейший случай уравнения гиперболического типа – уравнение свободных колебаний струны:

$$\frac{\partial^2 U}{\partial t^2} = a^2 \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}, \quad 0 \leq x \leq l, \quad t \geq 0, \quad (3.5)$$

с начальными условиями $U(x, 0) = f(x)$, $\frac{\partial U(x, 0)}{\partial t} = \mu(x)$ и граничными условиями $U(0, t) = \varphi(t)$, $U(l, t) = \psi(t)$.

В системе координат $\{x, t\}$ покроем полуполосу $t \geq 0, 0 \leq x \leq l$ прямоугольной сеткой: $x = ih, t = jk, i = 0, n$, где h, k – шаги вдоль соответствующих осей.

Обозначим $U_{\{i, j\}} = U(x_i, t_j)$.

Заменяем производные следующими аппроксимациями

$$\frac{\partial^2 U}{\partial t^2} \approx \frac{U_{i, j+1} - 2U_{i, j} + U_{i, j-1}}{k^2} \quad \text{и} \quad \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \approx \frac{U_{i+1, j} - 2U_{i, j} + U_{i-1, j}}{h^2}. \quad (3.6)$$

Подставляя, получаем разностное уравнение:

$$\frac{U_{i,j+1} - 2U_{i,j} + U_{i,j-1}}{k^2} = a^2 \frac{U_{i+1,j} - 2U_{i,j} + U_{i-1,j}}{h^2}.$$

При $k = \frac{h}{a}$ (условие устойчивости) схема упрощается:

$$U_{\{i,j+1\}} = U_{\{i+1,j\}} + U_{\{i-1,j\}} - U_{\{i,j-1\}}.$$

Для начала вычислений нужны значения на двух временных слоях ($j = 0$) и ($j = -1$). Из начального условия $P(x, 0) = f(x)$ получаем $P_{\{i,0\}} = f(x_i)$. Для слоя ($j = -1$) аппроксимируем второе начальное условие $\frac{\partial U(x,0)}{\partial t} = \mu(x)$:

$$\frac{U_{i,-1} - U_{i,0}}{-k} \approx \mu(x_i) \Rightarrow U_{i,-1} = U_{i,0} - k\mu(x_i).$$

Граничные условия задают $U_{0,j} = \varphi(t_j)$, $U_{n,j} = \psi(t_j)$ схема устойчива при $\frac{ak}{h} \leq 1$, погрешность составляет $O(h^2 + k^2)$

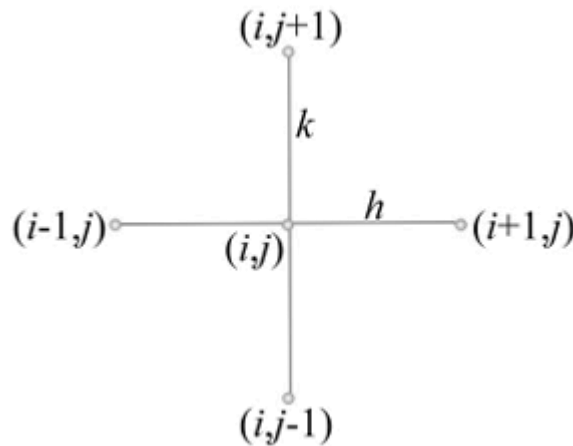


Рисунок 3.1 – Пятиточечная схема

Преимущества метода:

- Подходит для задач с разрывами;
- Сохраняет физические свойства решений;
- Высокая точность при решении задач переноса

Недостатки метода:

- Требуется знания характеристик уравнения;
- Сложен в реализации на сложных сетках;
- Не универсален для всех типов задач.

3.5 Построение вычислительной схемы для начально-краевой задачи обобщенного уравнения Ландау – Халатникова – Тани

Используя преобразования для построения конечно-разностной схемы, описанные выше, для задачи (2.7)-(2.8).

На пространственно-временной сетке $\Omega_{\Delta x}^{\Delta t} = \{x_i = ih, i = \overline{0, M}, t^j = jk, j = \overline{0, N}\}$, покрывающей расчетную область, где h – шаг по координате, k – шаг по времени, построим вычислительную схему.

Как и в пункте 3.4 для начала введем аппроксимацию производных:

$$\frac{\partial^2 P}{\partial x^2} \approx \frac{P_{i+1}^{j+1} - 2P_i^{j+1} + P_{i-1}^{j+1}}{h^2},$$

$$\frac{\partial P}{\partial t} \approx \frac{P_i^{j+1} - P_i^{j-1}}{2k},$$

$$\frac{\partial^2 P}{\partial t^2} \approx \frac{P_i^{j+1} - 2P_i^j + P_i^{j-1}}{k^2}.$$

Кроме того, из-за наличия нелинейных слагаемых проведем линеаризацию нелинейной части уравнения (2.7):

$$(P_i^{j+1})^n \approx P_i^{j+1} (P_i^j)^{n-1}, \quad n = 2, 4.$$

Применяя все преобразования, получаем схему:

$$\rho P_{tt}'' + KP_t' = \psi P_{xx}'' - aP - bP^3 - cP^5 + \nu E;$$

$$\rho \cdot \frac{1}{K} \cdot P_{kk}'' + P_k' = \psi \cdot \frac{1}{K} \cdot P_{xx}'' - \frac{1}{K} P(a + bP^2 + cU^4) + \frac{1}{K} \cdot \nu E;$$

Для удобства обозначим $\psi \cdot \frac{1}{K} = D$, тогда

$$\begin{aligned} & \left(\frac{-Pk^2}{h^2} \right) P_{i-1}^{j+1} + \left(\rho \cdot \frac{1}{K} + k + \frac{2Dk^2}{h^2} + k^2 \frac{1}{K} (a + bP_i^{j+1} + cP_i^{j^4}) \right) P_i^{j+1} + \left(\frac{-Dk^2}{h^2} \right) P_{i+1}^{j+1} = \\ & = -\rho \cdot \frac{1}{K} P_i^{j-1} + kP_i^j + k^2 \frac{1}{K} \cdot \nu E^j + 2\rho \frac{1}{K} P_i^j; \end{aligned} \quad (3.7)$$

Так как даны граничные условия третьего рода, то требуется провести их дискретизацию. В данном случае удобно использовать несимметричные формулы:

$$\frac{-3P_0^{j+1} + 4P_1^{j+1} - P_2^{j+1}}{2h} = \frac{P_0^{j+1}}{\lambda}, \quad (3.8)$$

$$\frac{3P_M^{j+1} - 4P_{M-1}^{j+1} + P_{M-2}^{j+1}}{2h} = -\frac{P_M^{j+1}}{\lambda}, \quad j = \overline{0, N-1}. \quad (3.9)$$

В дальнейшем для получения результатов моделирования сегнетоэлектрического гистерезиса необходимо перенести вычислительную схему в ППП MATLAB реализовав ее там.

4 ПРОГРАММНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ МОДЕЛЕЙ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ГИСТЕРЕЗИСА НА ПРИМЕРЕ ТИТАНАТА СВИНЦА

Для проведения вычислительных экспериментов и реализации выбранной математической модели и разработанной вычислительной схемы..

В качестве среды для разработки, как уже было сказано в прошлой главе, был выбран ППП MATLAB, который предоставляет широкий спектр как готовых решений для решения обширного рода задач, так и дает возможность для написания и проектирование программных решений [33].

Проектируемый в ППП MATLAB программный комплекс имеет модульную структуру и предназначен для программного решения следующих задач: начальная задача для обыкновенного дифференциального, начально-краевая задача для уравнения с частными производными, приложение А.

Входные параметры, которые будут использоваться при моделировании [21], представлены в таблице 4.1.

Таблица 4.1 – Параметры материала PbTiO_3

Параметры модели [21]	Значение
Толщина кристалла; толщина пленки, L	1-30 нм
Термодинамические параметры (при 20°C)	
A	$-1.74 \cdot 10^8 \text{ м/Ф}$
B	$-0.73 \cdot 10^8 \text{ м}^5/(\text{Кл}^2 \cdot \text{Ф})$
C	$2.6 \cdot 10^8 \text{ м}^9/(\text{Кл}^4 \cdot \text{Ф})$
Амплитуда поля, E_0	$2.4 \cdot 10^5 \text{ В/м}$
Начальное значение поляризации, $P_0, \hat{P}_0$	0 Кл/м ²
Кинетический коэффициент, K	$1 \cdot 10^{-7} \text{ м} \cdot \text{с/Ф}$
Кинетический коэффициент, ρ	$10^9 \text{ м} \cdot \text{В} \cdot \text{с}^2/\text{Кл}$
Градиентный коэффициент, ψ	$0.5 \cdot 10^{-9} \text{ м}^3/\text{Ф}$
Частота поля, f	100 - 500 Гц

Используя обобщенную модель Ландау – Халатникова – Тани (2.7)–(2.8) и входные параметры получаем петлю гистерезиса для выбранного материала, представленного на рисунке 4.1.

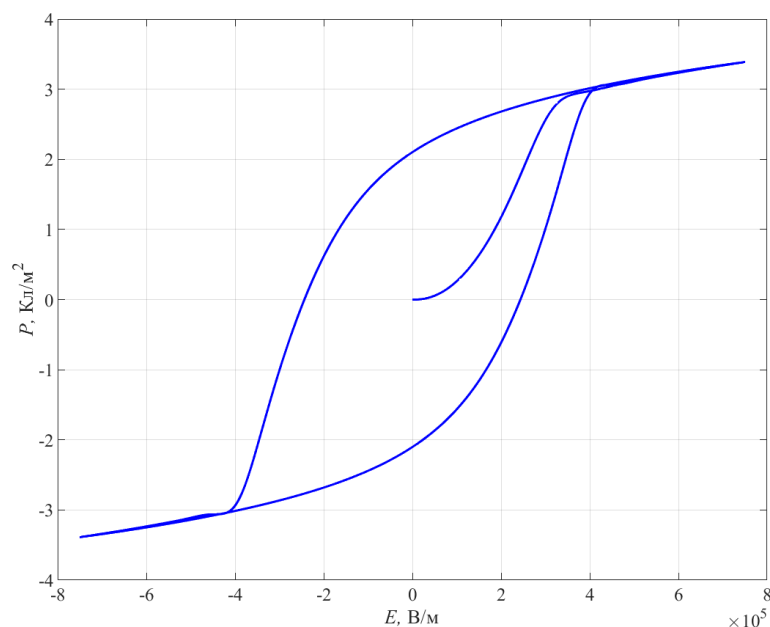


Рисунок 4.1 – Петля сегнетоэлектрического гистерезиса, полученная на основе обобщенной модели Ландау – Халатникова – Тани (2.7)–(2.8)

В рамках исследования проведем анализ зависимости площади петли гистерезиса от входных параметров системы – толщины пленки, амплитуды и частоты внешнего поля – с использованием обобщённой модели Ландау – Халатникова – Тани (2.5). Полученные результаты визуализированы на рисунках 4.2–4.4.

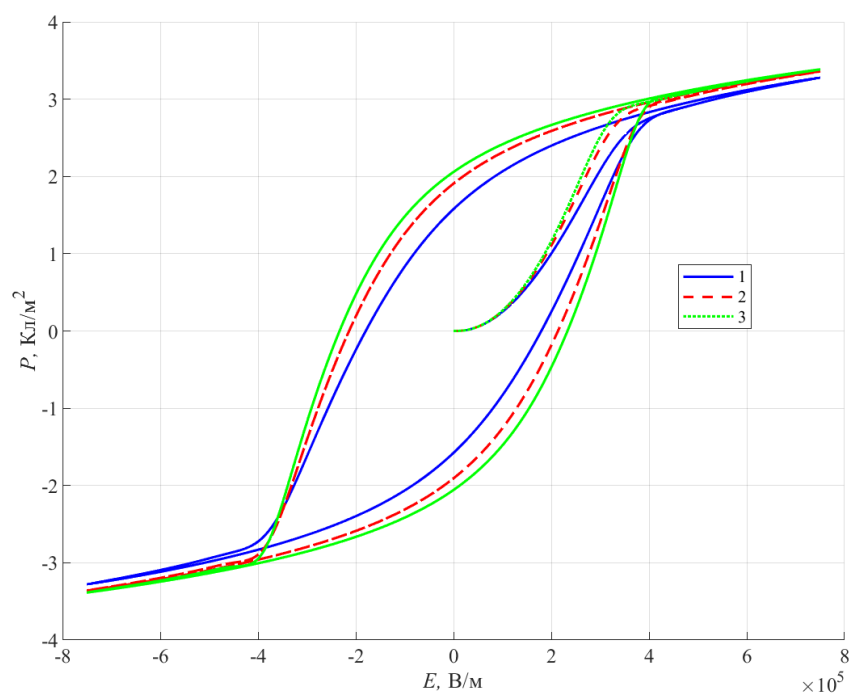


Рисунок 4.2 – Зависимость $P(E)$ при варьировании толщины пленки
для $L=2$ нм – 1; $L=3$ нм – 2; $L=5$ нм – 3

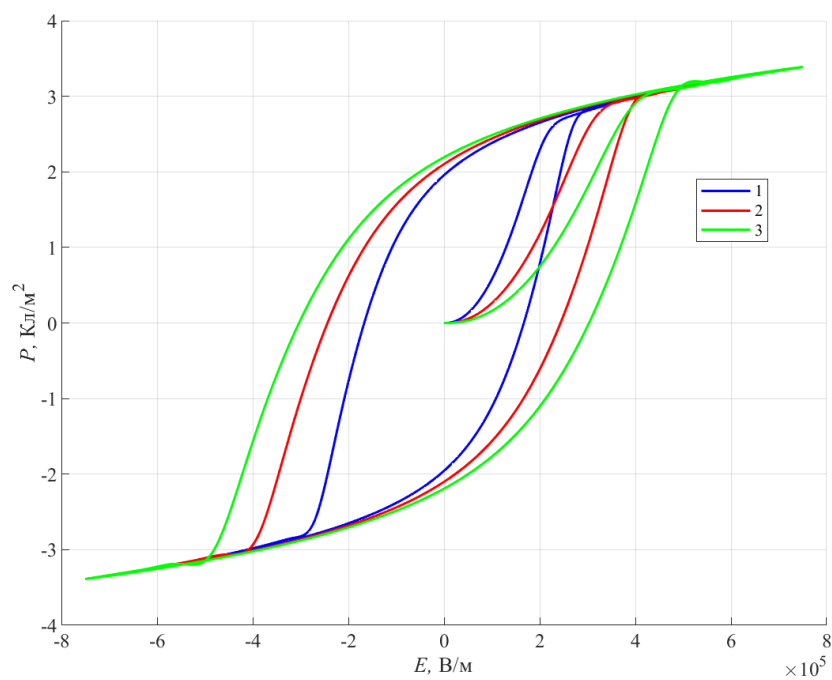


Рисунок 4.3 – Зависимость $P(E)$ при варьировании частоты поля
для $f = 50$ Гц – 1; $f = 100$ Гц – 2; $f = 150$ Гц – 3

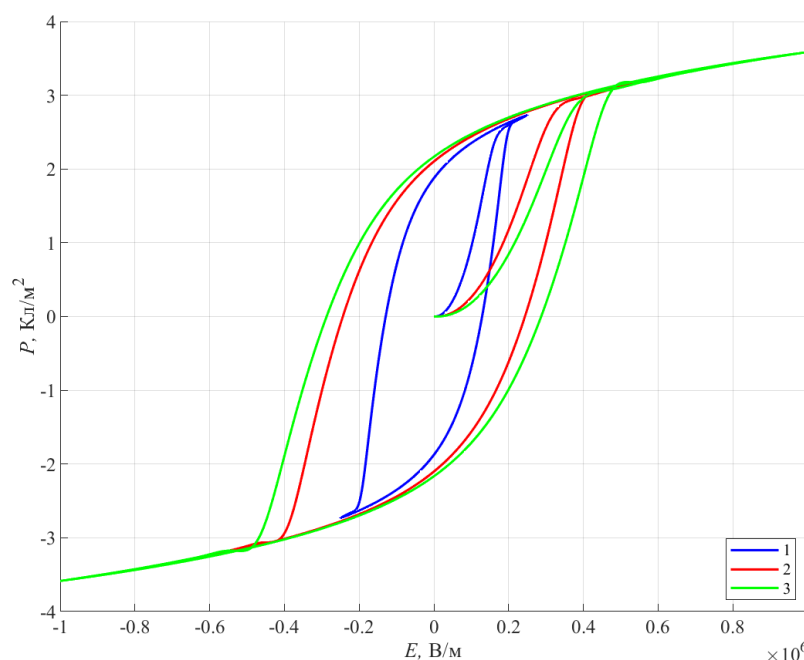


Рисунок 4.4 – Зависимость $P(E)$ при варьировании амплитуды поля
для $E_0 = 250$ кВ/м – 1; $E_0 = 750$ кВ/м – 2; $E_0 = 1000$ кВ/м – 3

Изменение частоты и амплитуды приводит к изменению формы петли. С увеличением параметров петля становится более широкой, что указывает на увеличение потерь энергии и более медленное переключение поляризации. Из результатов видно, что на рисунках 4.3 и 4.4 варьирование параметров влияет не только на площадь самой петли, но и на угол ее поворота, в то время как варьирование параметра толщины пленки на рисунке 4.2 отражается только на площади получаемой петли.

Также проведем сравнение графиков скорости переключения двух моделей Ландау – Халатникова (2.2) и обобщенной модели Ландау – Халатникова – Тани (2.5) представлено на рисунках 4.5 и 4.6.

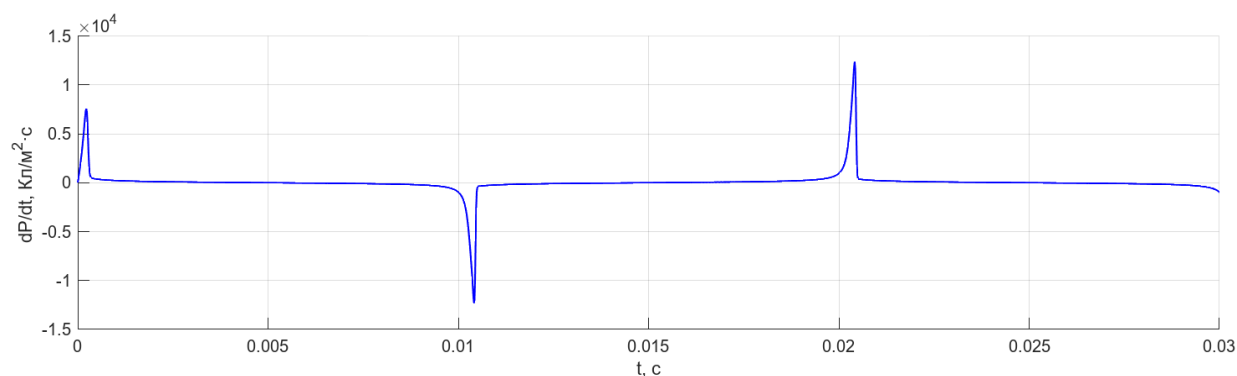


Рисунок 4.5 – Скорость переключения поляризации dP/dt в модели Ландау – Халатникова

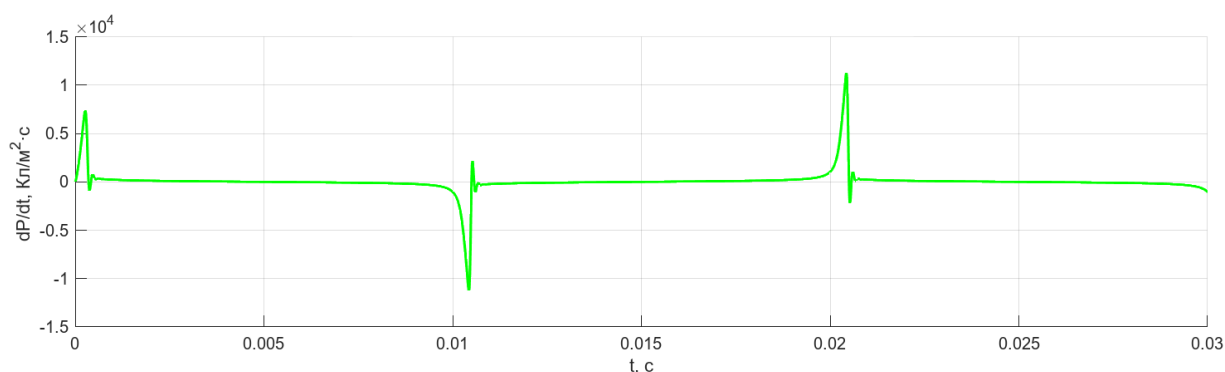


Рисунок 4.6 – Скорость переключения поляризации dP/dt в обобщенной модели Ландау – Халатникова– Тани

На представленных графиках показана динамика скорости переключения поляризации dP/dt во времени для двух моделей: классической модели Ландау – Халатникова и обобщённой модели Ландау – Халатникова–Тани. В обеих моделях наблюдается резкий пик скорости переключения в самом начале временного интервала ($t \approx 0.01$ с), после которого происходит быстрое затухание до нулевого значения. Однако амплитуда пика у классической модели значительно выше – около $1.5 \cdot 10^4 \cdot \text{Кл}^2/\text{с}$, тогда как у обобщённой модели она составляет примерно $0.5 \cdot 10^4 \cdot \text{Кл}^2/\text{с}$. Это указывает на то, что учёт дополнительных факторов в обобщённой модели приводит к снижению интенсивности начального процесса переключения. Форма кривых в целом схожа, что говорит о сохранении основного механизма переключения поляризации в обеих моделях. Тем не менее, уравнение Ландау – Халатникова не способно получить резонансный пик, связанный с диэлектрическим откликом сегнетоэлектрика подвёрнутому высокочастотному полю, особенно это важно при воздействии поля с высокой частотой. Полученные результаты подтверждают важность использования расширенных моделей при исследовании сложных фазовых переходов и гистерезисных явлений в сегнетоэлектриках.

Для лучшей визуализации также был построен график пространственно-временного распределения поляризации, рисунок 4.7.

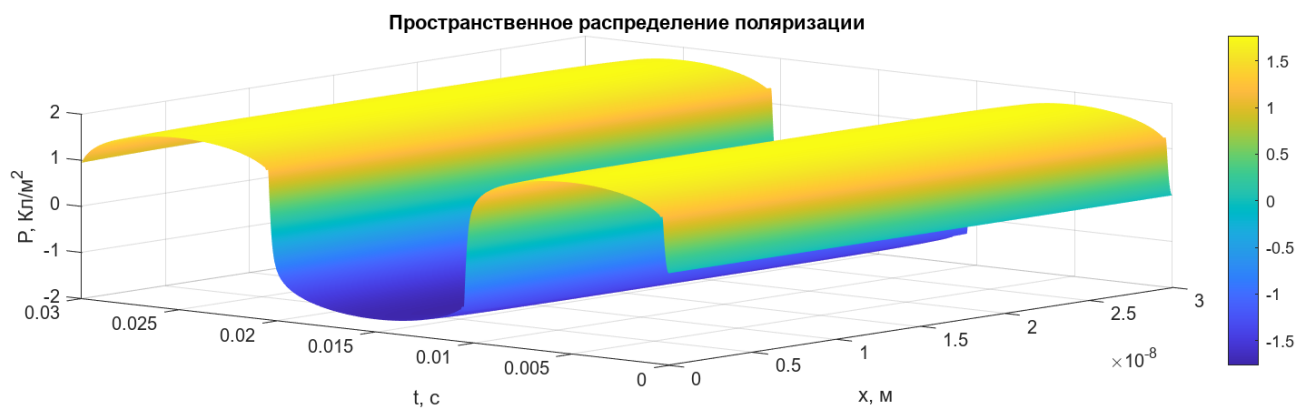


Рисунок 4.7 – Визуализация пространственно-временного распределения поляризации

Итогом работы стала разработка программного интерфейса, выполненная при помощи встроенного функционала ППП MATLAB, а именно App Designer, который позволяет самостоятельно вносить все параметры материала, внешнего поля и параметров модели, интерфейс представлен в приложении Б.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В современной науке и технике сегнетоэлектрические материалы играют ключевую роль благодаря своим уникальным свойствам, таким как спонтанная поляризация, гистерезис и пьезоэлектрические эффекты. Эти свойства делают их незаменимыми в таких областях, как наноэлектроника, энергонезависимая память, датчики и микроэлектромеханические системы. Одним из основных инструментов для изучения этих процессов является моделирование на основе уравнений Ландау и их модификаций, которые позволяют описывать динамику поляризации и гистерезисные явления.

В ходе выполнения данной работы были решены все поставленные задачи и достигнута основная цель исследования. Был проведён обзор современных подходов к моделированию сегнетоэлектрического гистерезиса, включая классические модели Ландау – Халатникова, Ландау – Халатникова – Тани и их обобщённые версии. Особое внимание уделено анализу влияния параметров внешнего поля и геометрических характеристик на форму и свойства гистерезисных петель. Разработаны вычислительные схемы для численного решения дифференциальных уравнений, описывающих динамику поляризации, с использованием методов Адамса – Башфорта – Моултона и конечно-разностных методов. Проведены вычислительные эксперименты, в ходе которых моделировались петли гистерезиса для материала PbTiO_3 при различных параметрах внешнего поля и толщинах плёнок. Разработан программный интерфейс для моделирования поляризационных откликов в ППП MATLAB.

Результаты вычислительных экспериментов подтвердили применимость выбранных моделей для анализа динамических характеристик сегнетоэлектриков. Было установлено, что форма и площадь гистерезисных петель существенно зависят от толщины плёнки, амплитуды и частоты внешнего электрического поля. Полученные данные позволяют оценить эффективность каждой модели в зависимости от физических условий и внести вклад в понимание механизмов переключения поляризации в наноразмерных системах.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Bandyopadhyay, A.K. Dynamical systems analysis for polarization in ferroelectrics / A.K. Bandyopadhyay, P.C. Ray, V. Gopalan // J. Appl. Phys. – 2006. – Vol. 100. – P. 114106.
2. Bertotti, G. Hysteresis in Magnetism for Physicists, Materials Scientists, and Engineers / G. Bertotti. – San Diego: Academic Press, 1998. – 558 p.
3. Burke, K. Time-dependent density functional theory: Past, present, and future / K. Burke, J. Werschnik, E.K.U. Gross // J. Chem. Phys. – 2005. – Vol. 123. – P. 062206.
4. Caputo, J.-G. Nonlinear dynamics in ferroelectric systems with inertial effects / J.-G. Caputo, E.V. Kazantseva, A.I. Maimistov // Phys. Rev. B. – 2007. – Vol. 75. – P. 014113.
5. Dawber, M. Physics of thin-film ferroelectric oxides / M. Dawber, K.M. Rabe, J.F. Scott // Rev. Mod. Phys. – 2005. – Vol. 77. – P. 1083.
6. Formalev, V.F. Численные методы / В.Ф. Формалев. – Москва: Физматлит, 2010. – 320 с.
7. Garcia, J.E. Hysteresis and domain dynamics in ferroelectric thin films / J.E. Garcia, R.G. Polcawich, D. Viehland // J. Appl. Phys. – 2010. – Vol. 107. – P. 054107.
8. Geneste, G. Simulating the Radio-Frequency Dielectric Response of Relaxor Ferroelectrics: Combination of Coarse-Grained Hamiltonians and Kinetic Monte Carlo Simulations / G. Geneste, J.-M. Kiat, H. Yokota, Y. Uesu // Phys. Rev. Lett. – 2016. – Vol. 116. – P. 247601.
9. Gordon, A. Dynamics of polarization reversal in ferroelectric thin films / A. Gordon // Physica B. – 1986. – Vol. 138. – P. 239.
10. Gyarmati, I. Non-Equilibrium Thermodynamics: Field Theory and Variational Principles / I. Gyarmati. – Berlin: Springer-Verlag, 1970. – 184 p.
11. Hoffmann, M. Ultrafast polarization switching in ferroelectric thin films / M. Hoffmann, S. Slesazeck, T. Mikolajick // Nature Communications. – 2019. – Vol. 10. – P. 45.

12. Ishibashi, Y. Theory of polarization reversal in ferroelectrics based on Landau-type free energy / Y. Ishibashi, M. Iwata // Jpn. J. Appl. Phys. – 1999. – Vol. 38, Part 1, No. 3A. – P. 1454–1459.
13. Ivanov, M.S. Inertial effects in ultrafast ferroelectric switching / M.S. Ivanov, T. Shimada // Nature Communications. – 2021. – Vol. 12. – P. 543.
14. Landau, L.D. On the theory of phase transitions / L.D. Landau, I.M. Khalatnikov // Dokl. Akad. Nauk SSSR. – 1954. – Vol. 96. – P. 469–472.
15. Lin, C.K. Theory and Applications of Sum-Frequency Generations / C.K. Lin, L. Yang, M. Hayashi, C.Y. Zhu, Y. Fujimura, Y.R. Shen, S.H. Lin // Journal of the Chinese Chemical Society. – 2014. – Vol. 61, Issue 1. – P. 1–24.
16. Lines, M.E. Principles and Applications of Ferroelectrics and Related Materials / M.E. Lines, A.M. Glass. – Oxford: Oxford University Press, 1977. – 680 p.
17. Luk'yanchuk, I. Domain dynamics in ferroelectric capacitors: LGDH simulations / I. Luk'yanchuk, Y. Tikhonov // Physical Review B. – 2017. – Vol. 95. – P. 014104.
18. Moroz, L.I. Дробно-дифференциальный подход к численному моделированию динамических откликов сегнетоэлектриков как фрактальных физических систем: дис. на соискание ученой степени кан. физико-мат. наук: 05.13.18 / Л.И. Мороз; АмГУ. – Благовещенск, 2021. – 204 с.
19. Nishimatsu, T. Fast molecular-dynamics simulation for ferroelectric thin-film capacitors using a first-principles effective Hamiltonian / T. Nishimatsu, U.V. Waghmare, Y. Kawazoe, D. Vanderbilt // Phys. Rev. B. – 2008. – Vol. 78. – P. 104104.
20. Okatan, M.B. Domain engineering in compositionally graded ferroelectric films for enhanced dielectric response and tunability / M.B. Okatan, A.L. Roytburd, J.V. Mantese, S.P. Alpay // J. Appl. Phys. – 2009. – Vol. 105. – P. 114106.
21. Rabe, K.M. Физика сегнетоэлектриков: современный взгляд: учебное пособие / под ред. К.М. Рабе. – Москва: Лаборатория знаний, 2015. – 443 с. – ISBN 978-5-9963-2535-1. – Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/>.

22. Richman, M.S. Ferroelectric system dynamics simulated by a second-order Landau model / M.S. Richman, P. Rulis, A.N. Caruso // J. Appl. Phys. – 2017. – Vol. 122. – P. 094101.
23. Samarsky, A.A. Введение в численные методы / А.А. Самарский. – Москва: Наука, 1982. – 272 с.
24. Sepliarsky, M. Atomic-level simulation of ferroelectricity in oxide materials / M. Sepliarsky, A. Asthagiri, S.R. Phillpot, M.G. Stachiotti, R.L. Migoni // Current Opinion in Solid State and Materials Science. – 2005. – Vol. 9, Issue 3. – P. 107–113.
25. Song, T.K. Ferroelectric pulse switching simulation with Landau-Khalatnikov equation of BaTiO_3 / T.K. Song // Ferroelectrics. – 2001. – Vol. 260, No. 1. – P. 157–162.
26. Tagantsev, A.K. Domain wall dynamics in ferroelectric thin films / A.K. Tagantsev, L.E. Cross, J. Fousek // J. Appl. Phys. – 2004. – Vol. 96, No. 12. – P. 6616–6623.
27. Völker, B. Multiscale modeling for ferroelectric materials: a transition from the atomic level to phase-field modeling / B. Völker, P. Marton, C. Elsässer // Continuum Mechanics and Thermodynamics. – 2011. – Vol. 23. – P. 435–451.
28. Waghmare, U.V. First-Principles Theory, Coarse-Grained Models, and Simulations of Ferroelectrics / U.V. Waghmare // Acc. Chem. Res. – 2014. – Vol. 47, No. 11. – P. 3242–3249.
29. Wang, B. A second-order time-dependent Ginzburg-Landau model for ferroelectric dynamics / B. Wang, Y.-L. Wang, C. Woo // Phys. Rev. B. – 2005. – Vol. 72. – P. 054107.
30. Wang, W. Dynamic process of domain switching in ferroelectric films / W. Wang, H. Fan, C.H. Woo // J. Appl. Phys. – 2003. – Vol. 94. – P. 3384–3389.
31. Wang, Y.-L. Hysteresis dispersion in ferroelectric systems using a second-order Landau model / Y.-L. Wang, B. Wang, C. Woo // J. Appl. Phys. – 2007. – Vol. 102. – P. 044104.

32. Yang, F. Statistical mechanical origin of hysteresis in ferroelectrics / F. Yang, G. Hu, B. Xu, W. Wu, C. Yang, H. Wu // J. Appl. Phys. – 2012. – Vol. 112. – P. 034113.
33. Yang, W. Y. MATLAB and Simulink for Engineers / W. Y. Yang, T. S. Choi, J. T. Morgan. – Oxford University Press, 2012. – 784 p.
34. Zhang, Y. An electromechanical atomic-scale finite element method for simulating evolutions of ferroelectric nanodomains / Y. Zhang, R. Xu, B. Liu, D. Fang // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. – 2012. – Vol. 60, Issue 8. – P. 1383–1399.
35. Zubko, P. Thermodynamics of flexoelectricity in thin films / P. Zubko, G. Catalan // Nature Materials. – 2018. – Vol. 17. – P. 718–724.

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Листинг программы расчёта динамических характеристик переключения поляризации в сегнетоэлектриках: термодинамический подход

```
clc
clear all
close all
n = 2000;
m = 500;
t0 = 0;
x0 = 0;
te = 0.03;
tau = (te - t0) / n;
t = t0:tau:te;
Gam = 2 * 10^(-7);
Temp = 293;
ro = 150;
a = -1.74*10^8;
b = -0.73*10^8;
c = 2.6*10^8;
ep = 150000;
psi = 0.5 * 10^(-7);
D = psi * Gam;
xe_values = [2, 3, 5] * 10^(-9);
e0_values = [2.5, 7.5, 10] * 10^5;
w_values = [50, 100, 150] * 2 * pi;

colors = {'b', 'r', 'g'};
line_styles = {'-', '--', ':'};

% Figure 1: Влияние толщины пленки на гистерезисные петли
figure(1);
```

```

hold on;
legend_labels = cell(1, length(xe_values));
for l = 1:length(xe_values)
    xe = xe_values(l);
    e0 = e0_values(2);
    w = w_values(2);
    lambda = 88 * 10^(-9) * (xe / (30 * 10^(-9)));
    [U, f] = compute_solution(xe, e0, w, n, m, t, tau, Gam, ro, a, b, c, ep, psi, lambda,
D);
    legend_labels{l} = sprintf('d = %d nm', xe*1e9);
    plot(f, U(round(m/2), :), [colors{l} line_styles{l}], 'LineWidth', 1.5, 'DisplayName',
legend_labels{l});
end
hold off;
grid on;
xlabel('E, В/м', 'FontSize', 12);
ylabel('P, Кл/м^2', 'FontSize', 12);
title('Влияние толщины пленки на гистерезисные петли', 'FontSize', 14);
legend('show', 'Location', 'best', 'FontSize', 10);
set(gca, 'FontSize', 12);
set(gcf, 'Position', [100, 100, 800, 600]);

```

% Figure 2: Влияние частоты на гистерезисные петли

```

figure(2);
hold on;
for l = 1:length(w_values)
    w = w_values(l);
    xe = 30 * 10^(-9);
    e0 = e0_values(2);
    lambda = 88 * 10^(-9);

```

```

[U, f] = compute_solution(xe, e0, w, n, m, t, tau, Gam, ro, a, b, c, ep, psi, lambda,
D);
plot(f, U(round(m/2), :), [colors{1} '-'], 'LineWidth', 1.5, 'DisplayName', sprintf('f =
%d Hz', w/(2*pi)));
end
hold off;
grid on;
xlabel('E, В/м', 'FontSize', 12);
ylabel('P, Кл/м^2', 'FontSize', 12);
title('Влияние частоты на гистерезисные петли', 'FontSize', 14);
legend('show', 'Location', 'best', 'FontSize', 10);
set(gca, 'FontSize', 12);
set(gcf, 'Position', [100, 100, 800, 600]);
% Figure 3: Влияние амплитуды поля на гистерезисные петли
figure(3);
hold on;
for l = 1:length(e0_values)
    e0 = e0_values(l);
    xe = 30 * 10^(-9);
    w = w_values(2);
    lambda = 88 * 10^(-9);
    [U, f] = compute_solution(xe, e0, w, n, m, t, tau, Gam, ro, a, b, c, ep, psi, lambda,
D);
    plot(f, U(round(m/2), :), [colors{1} '-'], 'LineWidth', 1.5, 'DisplayName', sprintf('E_0
= %.1f MV/м', e0/1e6));
end
hold off;
grid on;
xlabel('E, В/м', 'FontSize', 12);
ylabel('P, Кл/м^2', 'FontSize', 12);

```

```

title('Влияние амплитуды поля на гистерезисные петли', 'FontSize', 14);
legend('show', 'Location', 'best', 'FontSize', 10);
set(gca, 'FontSize', 12);
set(gcf, 'Position', [100, 100, 800, 600]);
% Figure 4: Поляризация и её производная во времени
figure(4);
xe = 30 * 10^(-9);
e0 = e0_values(2);
w = w_values(2);
lambda = 88 * 10^(-9);
[U, f] = compute_solution(xe, e0, w, n, m, t, tau, Gam, ro, a, b, c, ep, psi, lambda, D);
P = U(round(m/2), :);
dPdt = diff(P) ./ diff(t);
t_mid = t(1:end-1) + diff(t)/2;
yyaxis left;
plot(t_mid, dPdt, 'b-', 'LineWidth', 1.5);
ylabel('dP/dt, Кл/м^2/с');
yyaxis right;
plot(t, P, 'r-', 'LineWidth', 1.5);
ylabel('Поляризация, Кл/м^2');
xlabel('Время, с');
grid on;
title('Поляризация и её производная во времени');
set(gca, 'FontSize', 12);
set(gcf, 'Position', [900, 100, 800, 600]);
% Figure 5: Петля гистерезиса (один набор параметров)
figure(5);
xe = 30 * 10^(-9);
e0 = e0_values(2);
w = w_values(2);

```

```

lambda = 88 * 10^(-9);
[U, f] = compute_solution(xe, e0, w, n, m, t, tau, Gam, ro, a, b, c, ep, psi, lambda, D);
P = U(round(m/2), :);
E = f;
plot(E, P, 'k-', 'LineWidth', 1.5);
grid on;
xlabel('E, В/м', 'FontSize', 12);
ylabel('P, Кл/м^2', 'FontSize', 12);
title('Петля гистерезиса (один набор параметров)', 'FontSize', 14);
set(gca, 'FontSize', 12);
set(gcf, 'Position', [900, 720, 800, 600]);
% Figure 6: Скорость переключения поляризации
figure(6);
xe = 30 * 10^(-9);
e0 = e0_values(2);
w = w_values(2);
lambda = 88 * 10^(-9);
[U, f] = compute_solution(xe, e0, w, n, m, t, tau, Gam, ro, a, b, c, ep, psi, lambda, D);
P = U(round(m/2), :);
dPdt = zeros(1, n+1);
for j = 2:n
    dPdt(j) = (P(j+1) - P(j-1)) / (2 * tau);
end
dPdt(1) = (P(2) - P(1)) / tau;
dPdt(end) = (P(end) - P(end-1)) / tau;
plot(t, dPdt, 'b-', 'LineWidth', 1.5);
grid on;
xlabel('t, с', 'FontSize', 12);
ylabel('dP/dt, Кл/(м^2·с)', 'FontSize', 12);
title('Скорость переключения поляризации', 'FontSize', 14);

```

```

set(gca, 'FontSize', 12);
set(gcf, 'Position', [100, 720, 800, 600]);
function [U, f] = compute_solution(xe, e0, w, n, m, t, tau, Gam, ro, a, b, c, ep, psi,
lambda, D)
    x0 = 0;
    h = (xe - x0) / m;
    x = x0:h:xe;
    al = -D * tau^2 / (h^2);
    bet = ro * Gam + tau + 2 * D * tau^2 / (h^2);
    ga = -D * tau^2 / (h^2);
    f = zeros(n+1, 1);
    A = zeros(m+1, m+1);
    Ad = zeros(m+1, m+1);
    B = zeros(m+1, 1);
    X = zeros(m+1, 1);
    for j = 1:m+1
        for i = 1:m+1
            A(i,i) = bet;
            if i + 1 == j
                A(i,j) = ga;
            end
            if i - 1 == j
                A(i,j) = al;
            end
        end
    end
    A(1,1) = -1 - h / lambda;
    A(1,2) = 1;
    A(m+1,m) = -1;
    A(m+1,m+1) = 1 + h / lambda;

```

```

U = zeros(m+1, n+1);
U(:,1) = 0;
U(:,2) = 0;
for j = 1:n+1
    f(j) = e0 * sin(w * t(j));
end
for j = 2:n
    B = zeros(m+1, 1);
    for i = 2:m
        Ad(i,i) = Gam * tau^2 * (a + b * U(i,j)^2 + c * U(i,j)^4);
        B(1,1) = 0;
        B(i,1) = -ro * Gam * U(i,j-1) + (2 * ro * Gam + tau) * U(i,j) + tau * tau * Gam
* ep * f(j+1);
        B(m+1,1) = 0;
    end
    X = (A + Ad) \ B;
    for i = 1:m+1
        U(i,j+1) = X(i,1);
    end
end
end
end

```

ПРИЛОЖЕНИЕ Б Интерфейс программы

