

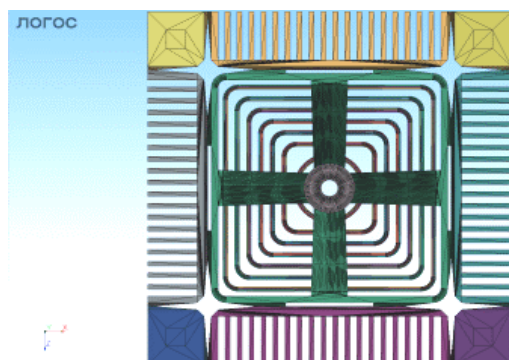


Рисунок 2 – Модель колонки гидравлического стенда в программе Логос

Граничными условиями служат: статическое давление – 1 атмосфера, максимально возможный напор центробежного насоса (расход воды) – 58,2 м³/ч. Сравнение полученных результатов с экспериментальным исследованием [1] представлено в таблице.

Таблица – Сравнение расчетных гидравлических параметров восьмитрубной ТВС ИРТ-3М с экспериментальным исследованием

Критерий	Эксперимент [1]	Расчет
Перепад давления, кПа	$24 \pm 1,44$	$24,18 \pm 0,0039$
Расход через восьмитрубную ТВС, м³/ч	$28,4 \pm 1,704$	$30,02 \pm 0,00223$
Средняя скорость в зазорах, м/с	$2,6 \pm 0,156$	$2,48 \pm 0,00232$

Из таблицы видно, что расчетные значения попадают в доверительный интервал экспериментальных гидравлических параметров, из чего можно сделать вывод о корректности построенной модели.

Заключение. По результатам исследования создана прецизионная математическая модель тепловыделяющей сборки типа ИРТ-3М.

В результате проведенного моделирования в Логос Аэро-Гидро получены следующие гидравлические параметры ТВС: $\Delta P = 24,18$ кПа; $V_{\text{через ТВС}} = 30,02$ м³/ч; $\bar{W} = 2,48$ м/с. Погрешность гидравлических параметров проведенного эксперимента составила ~6%, расчетные значения математической модели попадают в интервал погрешности определения этих величин.

1. Насонов В.А., Рязанцев Е.П., Талиев А.В. Яшин А.Ф. Определение скорости воды в зазорах ТВС ИРТ-3М, – 4М – Атомная энергия. – 2011, Т. 110, Вып.6. – С. 317–321.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГИСТЕРЕЗИСА В СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛАХ МЕТОДОМ ЛАНДАУ – ХАЛАТНИКОВА

Супаков И.Е.,

магистрант ВГУ имени П.М. Машерова, г. Витебск, Республика Беларусь

Научный руководитель – Кашевич И.Ф., канд. физ.-мат. наук, доцент

Ключевые слова. Сегнетоэлектрик, поляризация, гистерезис, ферроэлектрик, свободная энергия, спонтанная поляризация, внешнее электрическое поле.

Keywords. Ferroelectric, polarization, hysteresis, ferroelectric, free energy, spontaneous polarization, external electric field.

Сегнетоэлектрики – это кристаллические диэлектрики, обладающие в определенном диапазоне температур и в отсутствие внешних электрических полей спонтанной электрической поляризацией, т.е. электрическим дипольным моментом. Спонтанная по-

ляризация сегнетоэлектриков может существенным образом изменяться под влиянием внешних воздействий: электрических полей, давления, температуры и других внешних факторов [1; 2].

Актуальность исследования сегнетоэлектрических материалов заключается в их потенциале для практического применения. Сегнетоэлектрики играют ключевую роль в разработке современных технологий, включая устройства памяти, сенсоры и актуаторы. Их уникальные свойства позволяют разрабатывать более эффективные и надежные системы, что особенно важно в условиях быстрого технологического прогресса и растущих требований к функциональности и долговечности материалов.

Цель работы – провести программную реализацию численного моделирования сегнетоэлектрического гистерезиса с использованием метода Ландау – Халатникова.

Материал и методы. Материалом исследования являются сегнетоэлектрические материалы, подвергшиеся воздействию различных внешних условий. Для численного моделирования гистерезиса применялся метод Ландау – Халатникова. Аналитические и сравнительно-сопоставительные методы позволили выявить ключевые параметры, влияющие на электрофизические свойства сегнетоэлектриков.

Результаты и их обсуждение. В настоящее время существует ряд проблем, связанных с моделированием сегнетоэлектриков, включая трудности в описании нелинейных динамических процессов, таких как гистерезис, а также в определении феноменологических параметров, требующих калибровки.

Метод Ландау – Халатникова представляет собой теоретический подход к описанию динамики фазовых переходов и нелинейных явлений в ферроэлектрических материалах. Этот метод основан на феноменологической теории Гинзбурга – Ландау, которая широко используется для описания критических явлений в различных физических системах.

Теория Гинзбурга-Ландау описывает свободную энергию системы как функцию параметра порядка и его градиентов [3]. В контексте ферроэлектриков параметром порядка является поляризация P . Свободная энергия F в теории Гинзбурга – Ландау может быть записана как разложение в степенной ряд от параметра порядка (см. уравнение 1).

$$F(P) = \frac{\alpha}{2}P^2 + \frac{\beta}{4}P^4 + \frac{\gamma}{6}P^6 - EP \quad (1)$$

где α, β, γ – температурно-зависимые коэффициенты, E – внешнее электрическое поле.

Для описания динамики поляризации используется уравнение Ландау – Халатникова, которое является аналогом уравнения движения для ферроэлектрических материалов [4]. Оно включает в себя как потенциальные, так и диссипативные члены (см. уравнение 2).

$$\frac{dP}{dt} = -\frac{dF}{dP} \quad (2)$$

Подставляя выражение для свободной энергии $F(P)$, получаем уравнение 3.

$$\frac{dP}{dt} = -\alpha P - \beta P^3 - \gamma P^5 + E \quad (3)$$

Это уравнение описывает изменение поляризации P во времени под действием внешнего электрического поля E и внутренних нелинейных эффектов, обусловленных параметрами α, β и γ .

Одним из ключевых предсказаний теории Ландау – Халатникова является наличие петли гистерезиса, которая наблюдается при циклическом изменении внешнего электрического поля. Петля гистерезиса – это график зависимости поляризации P от электрического поля E , который показывает, что поляризация зависит не только от текущего значения поля, но и от его предшествующей истории. Петли гистерезиса характерны для материалов с ферроэлектрическими свойствами и являются индикатором нелинейных и необратимых процессов в системе. Они демонстрируют задержку (гистерезис) между приложенным полем и ответной поляризацией, что связано с энергетическими барьерами между различными состояниями поляризации [5].

Основные этапы алгоритма моделирования петли гистерезиса:

- определение параметров системы: феноменологические параметры α , β , γ определяются экспериментально или теоретически;
- формулировка уравнения Ландау – Халатникова: записывается уравнение динамики поляризации (см. уравнение 3);
- выбор начальных условий: устанавливаются начальные значения поляризации $P(0)$ и, при необходимости, её производной dP/dt ;
- численное решение уравнения: для решения уравнения Ландау – Халатникова используется численный метод интеграции, такой как метод Эйлера (на каждом шаге времени dt мы прибавляем к текущему значению поляризации P произведение производной и шага времени), что позволяет получить временную зависимость поляризации $P(t)$ [6];
- анализ результатов: полученные временные зависимости анализируются для выявления характерных динамических свойств системы, таких как петли гистерезиса и критические точки фазовых переходов.

Для моделирования петли гистерезиса мы используем язык программирования *Python*. *Python* является одним из самых популярных языков программирования благодаря своей простоте, читаемости и обширной экосистеме библиотек для научных вычислений и визуализации данных. В данном проекте мы используем библиотеки *NumPy* и *Matplotlib*. *NumPy* предоставляет мощные инструменты для работы с массивами и выполнения численных вычислений, а *Matplotlib* используется для создания высококачественных графиков [7].

При выполнении программы мы получаем график петли гистерезиса. Данный график демонстрирует зависимость поляризации материала от приложенного электрического поля при циклическом изменении поля. На графике видно, что поляризация не возвращается к нулю при снятии внешнего поля, что является свидетельством гистерезиса (см. рисунок).

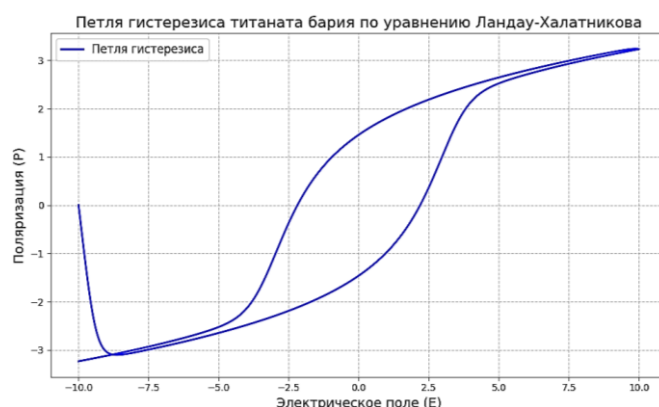


Рисунок – График петли гистерезиса

Метод численного решения уравнения Ландау – Халатникова с использованием метода Эйлера показал свою эффективность и простоту. При компиляции кода и последующем выполнении программы мы получаем: график зависимости поляризации от электрического поля; визуальное подтверждение ферроэлектрических свойств титаната бария и основных характеристик петли гистерезиса, что является важным для дальнейших исследований и практических приложений в электронике и материаловедении.

Закключение. В результате проведенного исследования был подробно исследован, проанализирован и адаптирован метод численного моделирования гистерезиса для сегнетоэлектрических материалов с использованием теории Ландау – Халатникова а также разработана программная модель для численного моделирования гистерезиса методом Ландау – Халатникова. Установлено, что данный метод представляет собой мощный инструмент для описания и понимания сложных нелинейных процессов в ферроэлектрических материалах и показывает эффективность и простоту в реализации, обеспечивая точные результаты при моделировании гистерезиса. Уравнение предсказывает наличие

петли гистерезиса, которая является ключевой характеристикой ферроэлектриков и демонстрирует задержку между приложенным полем и ответной поляризацией.

1. Сегнетоэлектрики. Характеристики сегнетоэлектриков. – URL: <https://www.booksite.ru/fulltext/1/001/008/100/712.htm> – (дата обращения: 20.08.2024).
2. Фазовые переходы в сегнетоэлектриках с распределенной поляризацией, вызванной закономерным изменением состава: Договор с БРФФИ №№ Ф08Р-110 от 1 апр. 2008 г. : отчет о НИР (заключ.) / науч. рук. В.Н. Шут ; [исполн.: В.Н. Шут, И. Ф. Кашевич, С.Е. Мозжаров, Ю.А. Шиенок]; М-во образования Республики Беларусь, УО "ВГУ им. П.М. Машерова". – Витебск, 2010. – 46 л. – URL: <https://rep.vsu.by/handle/123456789/24873> – (дата обращения: 20.08.2024).
3. Термомеханическая модель кристаллических упругопластических сред. – URL: <https://journals.ioffe.ru/articles/viewPDF/36561> (дата обращения: 20.08.2024).
4. Асимптотическое исследование нестационарного уравнения Ландау-Халатникова для определения электрокалорического эффекта в теплоизолированном сегнетоэлектрике. – URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/asimptoticheskoe-issledovanie-nestatsionarnogo-uravneniya-landau-halatnikova-dlya-opredeleniya-elektrokaloricheskogo-effekta-v> (дата обращения: 20.08.2024).
5. Явление гистерезиса в физике. – URL: <https://voltiq.ru/wiki/hysteresis-loop/> (дата обращения: 20.08.2024).
6. Численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений. – URL: <https://rstu.ru/metods/books/DODU.pdf> (дата обращения: 20.08.2024).
7. Python: библиотеки NumPy и Matplotlib. – URL: <https://ya.zerocoder.ru/pgt-python-biblioteki-numpy-i-matplotlib/> (дата обращения: 20.08.2024).

МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ГИСТЕРЕЗИСА В СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛАХ

Супаков И.Е.,

*магистрант ВГУ имени П.М. Машерова, г. Витебск, Республика Беларусь
Научный руководитель – Кашевич И.Ф., канд. физ.-мат. наук, доцент*

Ключевые слова. Сегнетоэлектрик, поляризация, гистерезис, коэрцитивное поле, диполь, внешнее электрическое поле.

Keywords. Ferroelectric, polarization, hysteresis, coercive field, dipole, external electric field.

Сегнетоэлектрические материалы, такие как титанат бария ($BaTiO_3$), обладают уникальными физическими свойствами, включая спонтанную поляризацию и нелинейную зависимость поляризации от внешнего электрического поля. Исследование этих свойств часто требует сложных численных методов, среди которых метод Монте-Карло занимает особое место [1; 2].

Актуальность исследования сегнетоэлектрических материалов заключается в их потенциале для практического применения. Данные материалы обладают спонтанной поляризацией, которая может быть изменена внешним электрическим полем. Это делает их незаменимыми в производстве конденсаторов, датчиков, актуаторов и устройств памяти. В современных условиях, когда вопросы энергоэффективности и миниатюризации устройств становятся все более значимыми, исследование и разработка сегнетоэлектрических материалов продолжают оставаться в центре внимания научного сообщества. Их изучение способствует созданию новых технологий, которые могут значительно улучшить качество жизни и обеспечить устойчивое развитие.

Цель работы – реализовать метод Монте-Карло для численного моделирования гистерезиса в сегнетоэлектриках.

Материал и методы. Материалом исследования являются сегнетоэлектрические материалы, такие как титанат бария, а также программное обеспечение, написанное на языке *Python* с использованием библиотек *NumPy* и *Matplotlib*. Для численного моделирования гистерезиса применялся метод Монте-Карло.

Результаты и их обсуждение. Метод Монте-Карло (ММК) – это класс вычислительных алгоритмов, которые используют случайные числа для решения математических и физических задач.