

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://volti.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.

Данный метод нашел широкое применение в физике, особенно в задачах, связанных с статистической механикой, квантовой механикой и физикой конденсированного состояния. Одним из ключевых применений является моделирование систем со многими частицами, где детерминированные методы становятся непрактичными [3].

Сегнетоэлектрики, такие как $BaTiO_3$, проявляют спонтанную поляризацию, которую можно изменить внешним электрическим полем. Одним из ключевых явлений в таких материалах является гистерезис, характеризующийся зависимостью поляризации от истории приложенного электрического поля. Моделирование петли гистерезиса сегнетоэлектриков с помощью метода Монте-Карло позволяет изучить микроскопические механизмы, лежащие в основе этого явления [4].

Гистерезис в сегнетоэлектриках проявляется в виде петли на графике зависимости средней поляризации P от внешнего электрического поля E . Эта петля отражает задержку отклика поляризации на изменение внешнего поля и зависит от истории изменения поля. Основные характеристики гистерезисной петли включают коэрцитивное поле и остаточную поляризацию.

Для моделирования гистерезиса в сегнетоэлектриках часто используется упрощенная модель и в этой модели:

- решетка $L \times L$ представляет собой массив диполей (или спинов), каждый из которых может иметь поляризацию $+1$ или -1 ;
- взаимодействие между соседними диполями определяется коэффициентом J ;
- внешнее электрическое поле E взаимодействует с каждым диполем, создавая дополнительный вклад в энергию системы.

Основные этапы метода Монте-Карло включают генерацию случайных состояний, вычисление энергетических изменений и принятие решений на основе вероятностных критериев.

Основные этапы алгоритма:

1. инициализация: задается начальная конфигурация решетки P со случайной поляризацией каждого диполя;
2. изменение внешнего поля: внешнее поле E изменяется от $-E_{\max}$ до E_{\max} и обратно;
3. шаги Монте-Карло: для каждого значения E выполняется множество шагов Монте-Карло:

- случайным образом выбирается диполь (i, j) ;
- вычисляется изменение энергии ΔE при изменении поляризации диполя (см. уравнение 1)

$$\Delta E = 2P_{i,j}(J \sum_{\text{соседи}} P_{\text{сосед}} + E); \quad (1)$$

- используется следующий критерий для принятия решения об изменении поляризации (см. уравнение 2)

$$P_{i,j} = -P_{i,j} \text{ если } \Delta E < 0 \text{ или } rand < \exp\left(\frac{-\Delta E}{kT}\right); \quad (2)$$

4. сбор данных: после выполнения шагов Монте-Карло для каждого значения E вычисляется средняя поляризация решетки $\langle P \rangle$.

Преимущества метода Монте-Карло:

- подходит для решения широкого спектра задач, включая те, где нет аналитических решений;
- алгоритмы ММК достаточно просты в реализации и не требуют сложной математической подготовки, что делает метод доступным для многих исследователей;
- хорошо масштабируется на многопроцессорные и распределенные вычислительные системы, что позволяет эффективно моделировать большие системы;
- позволяет получать статистически достоверные результаты при достаточном количестве проб.

Недостатки метода Монте-Карло:

- высокие вычислительные затраты;
- медленная сходимость, особенно в системах с высокими корреляциями, поэтому необходимо выполнение большого числа шагов для точных результатов.

– сложность верификации и анализа результатов.

Для моделирования петли гистерезиса мы используем язык программирования *Python* и библиотеки *Numpy* и *Matplotlib* для реализации и визуализации модели [5].

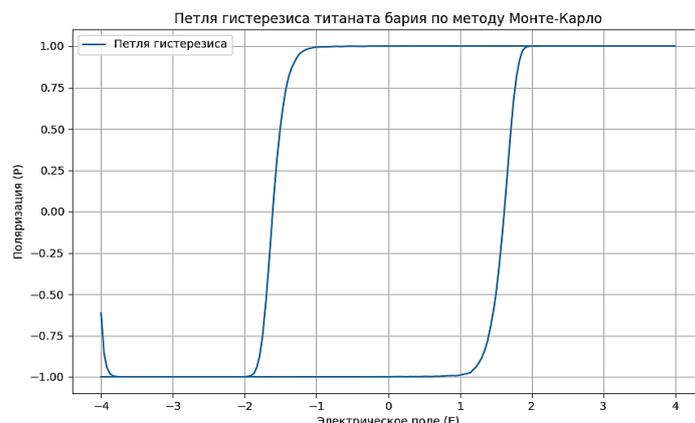


Рисунок – График петли гистерезиса

При выполнении программы мы получаем график, показывающий петлю гистерезиса (см. рисунок). Такой график позволяет наблюдать изменения поляризации в материале при изменении внешнего поля, что является характерным для сегнетоэлектриков.

Результаты моделирования могут отличаться в зависимости от выбранных начальных условий, размера решетки, числа шагов Монте-Карло и других параметров, что обусловлено стохастической природой метода и сложностью моделируемых систем.

Поэтому для получения надежных результатов необходимо проводить множество повторных симуляций и учитывать статистическую обработку данных.

Заключение. Программная реализация метода Монте-Карло для моделирования петли гистерезиса показала свою эффективность в изучении сложных физических систем. Выбор параметров модели играет ключевую роль в корректности и точности результатов. Проведенное моделирование позволяет понять поведение поляризации в зависимости от внешнего электрического поля, что является важным для применения сегнетоэлектриков в различных технологических устройствах.

Однако стоит отметить, что метод Монте-Карло является сложным и вычислительно затратным, в том числе, как показала практика, для электронно-вычислительных устройств. Данный метод требует тщательной настройки параметров и значительного количества вычислительных ресурсов для получения точных и достоверных результатов. Важным аспектом является также наличие экспериментальных данных, которые могут служить ориентиром и точкой сравнения для симуляций. Тем не менее, несмотря на эти сложности, метод Монте-Карло остается мощным инструментом для изучения фазовых переходов и других сложных явлений в конденсированных средах.

1. Клименков, Б.Д. Развитие и области применения сегнетоэлектрических материалов. От прошлого к будущему / Б.Д. Клименков. – Текст: непосредственный // Молодой ученый. – 2015. – № 8(88). – С. 256–260. – URL: <https://moluch.ru/archive/88/17428/> (дата обращения: 30.08.2024).

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: 30.08.2024).

3. Метод Монте-Карло – один из самых полезных алгоритмов в ИТ. – URL: <https://thecode.media/monte-carlo/> (дата обращения: 30.08.2024).

4. Kinetic Monte Carlo simulations of organic ferroelectrics. – URL: https://translated.turbopages.org/proxy_u/en-ru.ru.a2f77f16-6672ea8e-79de9f90-74722d776562/https://pubs.rsc.org/en/content/articlehtml/2019/cp/c8cp06716c (дата обращения: 30.08.2024).

5. Modeling of hysteresis loops by Monte Carlo simulation. – URL: <https://pubs.aip.org/aip/adv/article/5/12/127124/661186/Modeling-of-hysteresis-loops-by-Monte-Carlo> (дата обращения: 30.08.2024).