

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГИСТЕРЕЗИСНЫХ ЯВЛЕНИЙ В СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛАХ: ПРОГРАММНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ И СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ МЕТОДОВ

В.Н. Шут*, И.Ф. Кашевич**, И.Е. Сипаков**

*Учреждение образования «Витебский государственный технологический университет»

**Учреждение образования «Витебский государственный
университет имени П.М. Машерова»

Актуальность исследования обусловлена тем, что сегнетоэлектрики являются ключевыми материалами для энергоэффективных преобразователей, элементов электроники, устройств хранения данных. Разработанная платформа обеспечивает анализ гистерезиса на атомарном, термодинамическом и инженерном уровнях, ускоряя создание материалов нового поколения.

Цель статьи — разработка открытой платформы для многометодного моделирования и анализа гистерезисных явлений в сегнетоэлектриках, позволяющей количественно оценивать влияние дефектов кристаллической решетки и температур на динамику поляризации, а также визуализировать микроструктурные изменения и макропараметры.

Материал и методы. В качестве объекта исследования выбран титанат бария (BaTiO_3) — модельный сегнетоэлектрик с выраженными нелинейными свойствами и классической гистерезисной петлей. Для численного моделирования использован многометодный подход, объединяющий модифицированное уравнение Ландау — Халатникова, метод Монте-Карло и упрощенную модель Джилса — Атертона. Параметры методов подобраны на основе экспериментальных данных для BaTiO_3 .

Результаты и их обсуждение. Описаны ключевые подходы для разработки программной платформы, которая помогает моделировать гистерезисные явления в сегнетоэлектриках методами Ландау — Халатникова, Монте-Карло и Джилса — Атертона. Платформа обеспечивает анализ влияния дефектов, температуры и визуализацию данных в форматах, пригодных для дальнейших расчетов в сторонних пакетах. Сравнительный анализ методов выявил, что модель Ландау — Халатникова наиболее точна для однородных систем, Монте-Карло — для микроструктурного анализа, а упрощенная модель Джилса — Атертона — для быстрых инженерных расчетов.

Заключение. Создана программная платформа для многометодного моделирования и сравнительного анализа гистерезисных явлений в сегнетоэлектриках. Работоспособность представленной платформы подтверждена путем сравнения расчетных и экспериментальных данных. Интеграция методов в единую среду позволила анализировать гистерезис на всех уровнях — от атомарного (Монте-Карло) до макроскопического (Ландау — Халатникова). Приложение подходит для быстрых сравнительных исследований и обучения.

Ключевые слова: сегнетоэлектрики, гистерезисные явления, программная платформа, модель Ландау — Халатникова, метод Монте-Карло, модель Джилса — Атертона.

NUMERICAL MODELING OF HYSTERESIS PROPERTIES IN FERROELECTRIC MATERIALS: PROGRAM IMPLEMENTATION AND COMPARATIVE ANALYSIS OF METHODS

V.N. Shut*, I.F. Kashevich**, I.E. Sipakov***

*Education Establishment "Vitebsk State Technological University"

**Education Establishment "Vitebsk State P.M. Masherov University"

The relevance of the work is due to the fact that ferroelectrics are key materials for energy-efficient converters, electronic elements, and data storage devices. The developed platform provides hysteresis analysis at the atomic, thermodynamic, and engineering levels, accelerating the creation of new-generation materials.

The aim of the article is to develop an open platform for multi-method modeling and analysis of hysteresis phenomena in ferroelectrics, allowing quantitative assessment of the influence of crystal lattice defects and temperatures on the dynamics of polarization, as well as to visualize microstructural changes and macroparameters.

Material and methods. Barium titanate (BaTiO_3) was chosen as the object of study. It is a model ferroelectric with pronounced nonlinear properties and a classical hysteresis loop. For numerical modeling, a multi-method approach was used, combining the modified Landau — Khalatnikov equation; the Monte Carlo method and the simplified Jiles — Atherton model. The parameters of the methods were selected based on experimental data for BaTiO_3 .

Findings and their discussion. The main approaches for developing a software platform that allows to simulate hysteresis phenomena in ferroelectrics by the Landau — Khalatnikov, Monte Carlo and Jiles — Atherton methods are described. The platform provides analysis of the influence of defects, temperature and visualization of data in formats suitable for further calculations in third-party packages. A comparative analysis of the methods revealed that the Landau — Khalatnikov model is the most accurate for homogeneous systems, Monte Carlo is the most accurate for microstructural analysis, and the simplified Jiles — Atherton model is the most accurate for fast engineering calculations.

Conclusion. A software platform has been created for multi-method modeling and comparative analysis of hysteresis phenomena in ferroelectrics. The effectiveness of the developed platform has been confirmed by comparing calculated and experimental data. The integration of methods into a single environment has made it possible to analyze hysteresis at all levels, from the atomic (Monte Carlo) to the macroscopic (Landau — Khalatnikov). The application is well-suited for quick comparative research and training.

Key words: ferroelectrics, hysteresis phenomena, software platform, Landau — Khalatnikov model, Monte Carlo method, Jiles — Atherton model.

Сегнетоэлектрики — кристаллические диэлектрики, обладающие в определенном интервале температур спонтанной (самопроизвольной) поляризацией, которая существенно изменяется под влиянием внешних воздействий. Электрические свойства во многом подобны магнитным свойствам ферромагнетиков (отсюда название ферроэлектрики, принятое в зарубежной литературе). К числу наиболее исследованных и используемых на практике относятся титанат бария, сегнетова соль, триглицинсульфат и др. [1; 2].

Изучение сегнетоэлектрических материалов, таких как титанат бария (BaTiO_3), критически важно для разработки функциональных элементов микроэлектроники, энергонезависимой памяти и датчиков нового поколения. Высокая диэлектрическая проницаемость, температурная стабильность и нелинейные свойства BaTiO_3 делают его ключевым объектом для современных исследований. Однако сложность прогнозирования поведения этих материалов, включая динамику гистерезиса, влияние пьезоэлектрических эффектов и последствия термической обработки, требует углубленного моделирования. Отсутствие точных вычислительных инструментов, учитывающих взаимодействие дефектов структуры, доменной динамики и внешних полей, ограничивает возможность создания материалов с заданными характеристиками для работы в экстремальных условиях.

Цель статьи — разработка открытой платформы для многометодного моделирования и анализа гистерезисных явлений в сегнетоэлектриках, позволяющей количественно оценивать влияние дефектов кристаллической решетки и температур на динамику поляризации, а также визуализировать микроструктурные изменения и макропараметры.

Материал и методы. В качестве объекта исследования выбран титанат бария (BaTiO_3) — модельный сегнетоэлектрик с выраженными нелинейными свойствами и классической гистерезисной петлей. Для численного моделирования использован многометодный подход, объединяющий модифицированное уравнение Ландау — Халатникова, метод Монте-Карло и упрощенную модель Джилса — Атертона. Параметры методов подобраны на основе экспериментальных данных для BaTiO_3 .

Результаты и их обсуждение. В рамках настоящего исследования разработана открытая программная платформа, предназначенная для многометодного моделирования и анализа гистерезисных явлений в сегнетоэлектрических материалах. Интерфейс программы включает специализированные вкладки для каждого алгоритма, прогресс-бар для отслеживания вычислений и иллюстрирование на базе Matplotlib, поддерживающей настройку стилей графиков в реальном времени. Благодаря реализации многопоточности (QThread) ресурсоемкие расчеты, такие как моделирование крупных «спиновых решеток», выполняются в фоновом режиме, не блокируя взаимодействие с программой [3]. Для обеспечения воспроизводимости результатов предусмотрены функции их экспорта: петли гистерезиса сохраняются в векторных и растровом форматах (PDF, SVG, PNG) для публикаций, а расчетные данные — в CSV для дальнейшего анализа в сторонних пакетах.

Моделирование гистерезисных петель сегнетоэлектриков требует учета нелинейной динамики поляризации, связанной с переключением доменов под действием внешнего электрического поля. В нашем коде метод Ландау — Халатникова взят из теории фазовых переходов Ландау, к которой добавлены диссипативные члены для релаксации системы. Эта модель не только воспроизводит ключевые экспериментально наблюдаемые явления, такие как коэрцитивное поле и остаточная поляризация, но и позволяет исследовать влияние дефектов, температуры и пространственных неоднородностей [4].

В приближении Ландау мы описываем свободную энергию через поляризацию P как порядок параметра. В отсутствие внешнего поля ($E = 0$) потенциал имеет симметричную форму с минимумами, соответствующими спонтанной поляризации. При включении поля $E(t)$ симметрия нарушается, что приводит к смещению равновесных состояний. Динамика системы формируется уравнением релаксации:

$$\frac{dP}{dt} = -\frac{1}{\Gamma} \left(\frac{\partial F}{\partial P} \right) = -\frac{1}{\Gamma} (\alpha P + \beta P^3 + \gamma P^5 - E(t)), \quad (1)$$

где Γ — кинетический коэффициент, характеризующий вязкость или демпфирование в системе. Члены $-\alpha P$, $-\beta P^3$, $-\gamma P^5$ соответствуют производным от термодинамического потенциала, а $+E(t)$ — воздействию внешнего поля. Минус в уравнении показывает, что процесс диссипативен: система стремится снизить свою свободную энергию. Для решения дифференциального уравнения используется метод Рунге — Кутты 4-го порядка (RK4), что обусловлено его устойчивостью и точностью при моделировании нелинейных систем.

Алгоритм RK4, реализованный в цикле по полю E , аппроксимирует решение на каждом шаге, вычисляя четыре промежуточные поправки ($k1-k4$). Это позволяет учесть не только текущее значение поля $E(t)$, но и его изменение в пределах временного шага Δt . В коде временной шаг $dt = 0.01$ эмпирически выбран для баланса между точностью и вычислительной эффективностью.

Ключевой особенностью программы является способ задания внешнего поля $E(t)$. Массив E формируется как последовательность линейно возрастающих и убывающих значений от -10 до 10 В/м (в 1 000 шагов в каждом направлении). Такой подход имитирует циклическое изменение поля в эксперименте, создавая замкнутую траекторию в координатах $P-E$. Начальное условие $P[0] = 0$ соответствует деполяризованному состоянию, а итеративное вычисление $P[i]$ через RK4 гарантирует плавное отслеживание равновесной поляризации при квазистатическом изменении E .

Реальные сегнетоэлектрики содержат дефекты кристаллической решетки, которые локально искажают потенциал. В модели это учитывается через модификацию коэффициента γ :

$$\text{gamma_eff} = \text{gamma} \times (1 + \text{defect_density}).$$

Увеличение γ_{eff} усиливает вклад пятой степени P^5 , что физически соответствует росту энергии, необходимой для переполяризации материала из-за пиннинга доменных стенок на дефектах. Температурные эффекты вводятся через множитель $\text{temp_factor} = 1 + 0.001 \times (T - 300)$, линейно масштабирующий γ_{eff} . Это приближение отражает термическое расширение решетки и изменение доменной структуры: при нагреве выше комнатной температуры ($T > 300$ K) эффективное поле дефектов снижается, уменьшая площадь петли.

Значения параметров выбраны так, чтобы отражать реальные свойства титаната бария, и опираются на данные экспериментов. Например, коэффициент Ландау $\alpha = 1 \times 10^6$ характеризует влияние температуры на поведение материала (т.е. он определяет условия фазового перехода).

Кубический коэффициент $\beta = 1.5 \times 10^8$ играет роль стабилизатора, не позволяя поляризации расти бесконтрольно, что соответствует нелинейным характеристикам титаната бария.

Коэффициент $\gamma = 1 \times 10^9$ учитывает вклад высших степеней поляризации в энергию системы, что необходимо для точного описания формы гистерезисной петли.

Плотность дефектов ρ принята равной нулю, это предполагает идеальную структуру материала. Указанное упрощение помогает сосредоточиться на базовых свойствах без учета случайных неоднородностей.

Температура Кюри $T_c = 345$ K представляет собой точку перехода титаната бария, установленную на основе измерений, из параэлектрической фазы в сегнетоэлектрическую.

Рабочая температура $T = 335$ K, ниже T_c , создает условия для возникновения спонтанной поляризации, а это важнейшая особенность сегнетоэлектриков. Когда температура опускается ниже критической,

коэффициент α становится отрицательным, что приводит к появлению устойчивых состояний поляризации, определяемых минимумом свободной энергии.

Анализ гистерезисной петли для BaTiO_3 , смоделированной методом Ландау — Халатникова, показывает основные черты ферроэлектрического поведения. При нулевом внешнем поле материал обладает спонтанной поляризацией около 0.28 Кл/м^2 . Это связано с отрицательным значением коэффициента α , который формирует два устойчивых состояния в двойной потенциальной яме энергии Ландау (рис. 1).

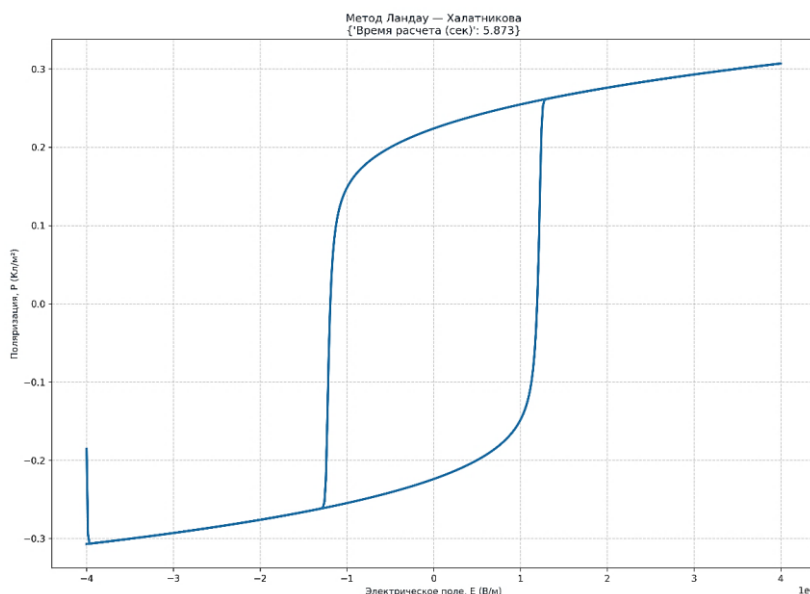


Рис. 1. Результат моделирования петли гистерезиса методом Ландау — Халатникова

Переключение поляризации происходит резко при коэрцитивном поле примерно $1.2 \times 10^6 \text{ В/м}$. Такой переход типичен для фазовых изменений первого рода и определяется балансом линейного и кубического членов энергии. Кубический коэффициент $\beta = 1.5 \times 10^8 \text{ Дж} \cdot \text{м}^5 / \text{Кл}^4$ задает высоту барьера между состояниями, что объясняет резкость переключения.

Симметрия петли обусловлена отсутствием дефектов (плотность дефектов $\rho = 0$). В реальных материалах дефекты могут фиксировать доменные стенки, нарушая симметрию. Максимальная поляризация ($\pm 0.3 \text{ Кл/м}^2$ при поле $\pm 4 \times 10^6 \text{ В/м}$) немного выше насыщения для BaTiO_3 , это может быть связано с ограниченным диапазоном поля.

В отличие от моделей Монте-Карло, где явно учитываются «спиновые конфигурации», или подхода Джилса — Атертона с разделением обратимой и необратимой намагниченности, метод Ландау — Халатникова фокусируется на макроскопической динамике параметра порядка. Это делает его менее требовательным к вычислительным ресурсам, но ограничивает применимость для систем с сильными пространственными неоднородностями.

Метод Ландау — Халатникова, несмотря на феноменологическую природу, остается краеугольным камнем в моделировании сегнетоэлектриков. Его реализация в коде демонстрирует, как сочетание термодинамических принципов и численных методов позволяет воспроизводить сложные нелинейные явления. Анализ параметров a , β , γ через интерактивный интерфейс программы открывает возможности для виртуальных экспериментов, предсказывая поведение материалов при вариации состава, температуры и плотности дефектов.

Метод Монте-Карло (МК), в отличие от феноменологического подхода Ландау — Халатникова, опирается на микроскопическое описание сегнетоэлектрика как системы взаимодействующих дипольных моментов. Если модель Ландау работает с усредненной поляризацией P , то метод МК явно учитывает дискретную структуру материала, моделируя переключение отдельных «спинов» (условных элементарных диполей) под действием поля. Это позволяет изучать эффекты, связанные с доменной структурой, термодинамическими флуктуациями и кинетикой процессов перемагничивания [5; 6].

Чтобы понять, как метод Монте-Карло моделирует гистерезис, необходимо начать с микроскопического описания сегнетоэлектрика. Материал представляется как решетка взаимодействующих диполей, где каждый элемент («спин») s_{ij} может находиться в одном из двух состояний: $+1$ (поляризация «вверх») или -1 (поляризация «вниз»).

Полная энергия системы определяется взаимодействием «спинов» между собой и с внешним полем E :

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - E \sum_i s_i. \quad (2)$$

В формуле (2) первое слагаемое ($-J \sum s_i s_j$) описывает ферроэлектрическое взаимодействие. При $J > 0$ соседние «спины» стремятся выровняться (минимизация энергии), что и соответствует сегнетоэлектрическому упорядочению. Второе слагаемое ($-E \sum s_i$) — энергия во внешнем поле. «Спины» же ориентируются вдоль E , снижая энергию системы.

Например, для двух соседних «спинов» $s_1 = +1$, $s_2 = -1$:

$$H = J \cdot (+1)(-1) = -J \text{ (невыгодное состояние),}$$

а уже при $s_1 = s_2 = +1$, что значит:

$$H = J \cdot (+1)(+1) = +J \text{ (выгодное состояние).}$$

По правилу переворота «спинов» при изменении ориентации «спина» $s_{i,j} \rightarrow -s_{i,j}$ энергия системы меняется на:

$$\Delta H = H_{\text{новое}} - H_{\text{старое}}. \quad (3)$$

Подставляя гамильтониан, получаем:

$$\Delta H = -J_{\text{соседи}} \sum (-s_{i,j} - s_{i,j}) \cdot s_{\text{сосед}} - E(-s_{i,j} - s_{i,j}). \quad (4)$$

Когда упростим, то получим:

$$\Delta H = 2s_{i,j}(J \sum_{\text{соседи}} s_{\text{сосед}} + E). \quad (5)$$

Вероятность принятия переворота определяется распределением Больцмана:

$$P_{\text{flip}} = \min(1, e^{-\Delta H/kT}). \quad (6)$$

И система будет понимать, что если $\Delta H < 0$, переворот энергетически выгоден ($P_{\text{flip}} = 1$). А если $\Delta H > 0$, вероятность экспоненциально падает с ростом ΔH и уменьшением kT .

Можем закрепить физический смысл: при $kT \rightarrow 0$ система «замерзает» в локальных минимумах, что соответствует гистерезису. При $kT \gg J$ тепловые флуктуации разрушают порядок (параэлектрическая фаза).

Гистерезисная петля в методе МК формируется следующим образом: внешнее поле E изменяется циклически от $-E_{\text{max}}$ до $+E_{\text{max}}$. На каждом шаге происходит:

- 1) термализация: L^2 попыток переворота «спинов» (один МК-шаг на «спин») обеспечивает релаксацию системы;
- 2) усреднение поляризованности: после установления квазиравновесия вычисляется $M = 1/L^2 \sum s_{i,j}$, что соответствует макроскопической поляризации P .

Гистерезис возникает из-за задержки переключения доменов: при уменьшении E «спины» сохраняют ориентацию до достижения коэрцитивного поля E_c , это отражает необратимые процессы перераспределения доменных стенок.

Следует обратить внимание на остальные параметры метода МК:

- размер решетки L влияет на разрешение доменной структуры, где малые L (< 30) дают артефакты, большие (> 100) требуют значительной вычислительной мощности;
- температура kT контролирует роль флуктуаций, при $kT \ll J$ доминирует гистерезис, при $kT \gg J$ петля сужается (разрушение порядка);

• учет скорости нагрева через $heating_{rate}$ ($J_{eff} = J \times (1 + 0.1 \times (heating_{rate} - 1))$) приближенно моделирует кинетику материалов при нестационарных условиях.

Опишем пример расчета петли гистерезиса методом Монте-Карло при следующих настройках: $L = 50$ (2 500 «спинов»), $J = 1.0$, $E_{max} = 4.0$, $kT = 1.0$. Перед каждым значением поля E выполняется «прогрев» в $2 \times L^2$ флипа, а затем происходит усреднение по $5 \times L^2$ флипам для расчета M .

Переключение поляризации осуществляется резко в узком диапазоне значений электрического поля, что свидетельствует о коллективном, лавинообразном перевороте доменов при достижении коэрцитивного поля $E_c \approx 1.8$ В/м. Система достигает полного насыщения поляризации ($P \approx \pm 1.0$ Кл/м²), а высокая остаточная поляризация при нулевом поле указывает на стабильность упорядоченного сегнетоэлектрического состояния при данной температуре.

Чтобы наглядно продемонстрировать гибкость модели и физическую адекватность программы, мы реализуем еще две серии расчетов, изменив соотношение между упорядочивающим взаимодействием и тепловой энергией. Повысим температуру (разупорядочивание), т.е. увеличим параметр kT с 1.0 до 2.2 (рис. 2(а)), а также понизим температуру (усилим упорядочивание), т.е. уменьшим параметр kT с 1.0 до 0.5 (рис. 2(б)).

Сравнительный анализ результатов моделирования методом Монте-Карло при различных температурах, представленный на рис. 2, наглядно демонстрирует корректность работы программы и ее способность воспроизводить важнейшие физические закономерности сегнетоэлектриков.

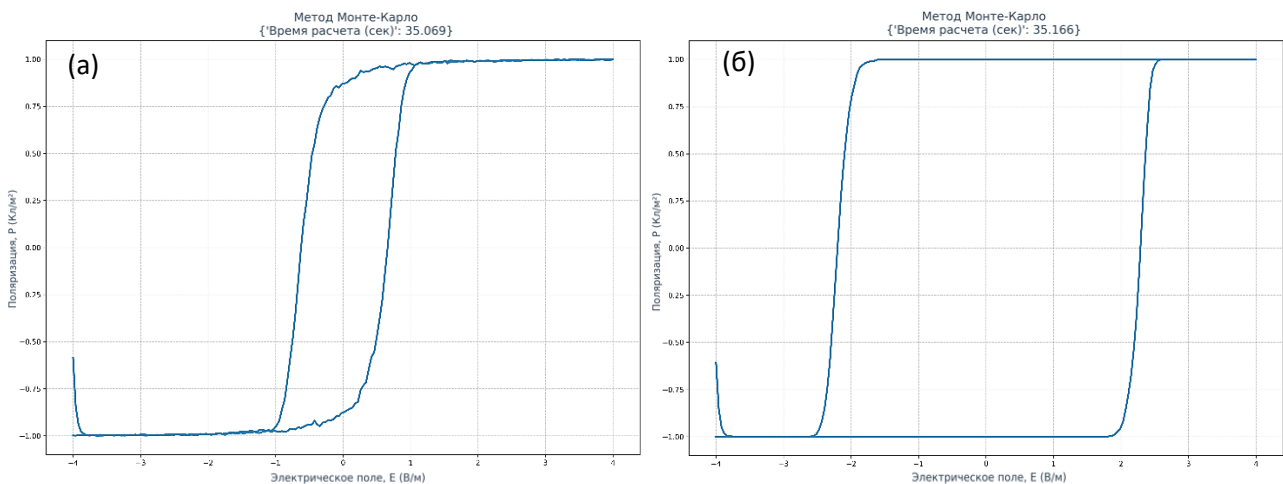


Рис. 2. Моделирование петли гистерезиса методом Монте-Карло при $kT = 2.2$ (а) и при $kT = 0.5$ (б)

При повышении температуры до $kT = 2.2$ (близко к критической точке фазового перехода) замечаем, как петля гистерезиса существенно сужается и скругляется. Коэрцитивное поле и остаточная поляризация уменьшаются, а уровень флуктуаций на графике возрастает. Такое явление отражает физическую картину, в которой тепловая энергия облегчает процесс переполаризации и начинает разрушать дальний порядок в системе.

При понижении температуры до $kT = 0.5$ тепловые флуктуации подавляются, что приводит к формированию почти идеальной прямоугольной петли гистерезиса с резкими вертикальными стенками. Коэрцитивное поле сильно возрастает (до $E_c \approx 2.3$ В/м) по сравнению с исходным расчетом, так как для преодоления усиленного коллективного взаимодействия «спинов» требуется более сильное внешнее поле.

Метод Монте-Карло, в отличие от подхода Ландау — Халатникова, предоставляет «микроскоп» для изучения сегнетоэлектриков, раскрывая роль доменной структуры и термодинамических флуктуаций. Его реализация в программе демонстрирует, как статистическая механика позволяет связать микроскопические взаимодействия (J , kT) с макроскопическими свойствами (коэрцитивное поле, остаточная поляризация). Совместное использование обоих методов в программе создает целостную картину: феноменологическая модель Ландау дает быстрые оценки, а расчеты МК уточняют детали, недоступные в приближении среднего поля. Однако метод требует значительных вычислительных ресурсов ($O(L^2)$) и не подходит для моделирования высокочастотных полей.

Метод Монте-Карло, опирающийся на микроскопические взаимодействия «спинов», эффективно описывает доменную динамику, но требует значительных вычислительных ресурсов. Для задач, где ключевым является макроскопическое поведение поляризации $P(E)$, более удобной представляется феноменологическая модель Джилса — Атертона (JA). Первоначально разработанная для ферромагнетиков, эта модель была адаптирована для сегнетоэлектриков, с учетом их специфики: нелинейной связи P – E , гистерезиса и влияния внутренних полей [7; 8].

В основе модели Джилса — Атертона (JA) находится полная поляризация P как сумма трех компонентов:

$$P = P_{an} + P_{rev} + P_{irr}, \quad (7)$$

где P_{an} — «безгистерезисная» поляризация (анизотермическая),
 P_{rev} — обратимая (реверсивная) часть,
 P_{irr} — необратимая (неревверсивная) часть.

Безгистерезисная поляризация P_{an} определяется равновесным откликом материала на эффективное поле E_e :

$$E_e = E + \alpha P, P_{an} = P_s \cdot \tanh\left(\frac{E_e}{a}\right), \quad (8)$$

где α — коэффициент взаимодействия,
 P_s — поляризация насыщения,
 a — параметр формы кривой $P(E)$.

Обратимая поляризация P_{rev} , которая связана с упругим откликом доменов:

$$P_{rev} = c(P_{an} - P_{irr}), \quad (9)$$

где $c \in [0,1]$ — доля обратимого отклика.

Необратимая поляризация P_{irr} описывает необратимые изменения структуры доменов. Ее динамика задается дифференциальным уравнением:

$$\frac{dP_{irr}}{dE} = \frac{1}{k(1-c)} \left[\frac{dP_{an}}{dE} - k \left| \frac{dP_{irr}}{dE} \right| (P_{an} - P_{irr}) \right], \quad (10)$$

где k — параметр, связанный с коэрцитивным полем,
 $\delta = \pm 1$ — знак изменяющегося поля (учет направления цикла).

Объединяя (8), (9) и (10), получаем систему уравнений, которая должна была гарантировать корректное описание ширины петли за счет параметра k , и ее постепенное смещение при $\alpha \neq 0$.

$$\begin{cases} P_{an} = P_s \cdot \tanh\left(\frac{E + \alpha P}{a}\right), \\ dP_{irr} = \frac{P_{an} - P_{irr}}{k} \delta dE, \\ P = P_{irr} + c(P_{an} - P_{irr}), \end{cases} \quad (11)$$

где $\delta = \pm 1$ — знак изменяющегося поля (учет направления цикла).

При реализации полной модели JA мы столкнулись с двумя ключевыми сложностями:

- 1) уравнение для P_{irr} содержит нелинейные члены (например, $|dP_{irr}/dE|$), что приводит к вычислительной неустойчивости при численном интегрировании методом Рунге — Кутты;
- 2) точность модели критически зависит от подбора α , c , k , a . По причине неверного выбора параметров возникают артефакты: отсутствие гистерезиса или физически некорректные петли.

Например, при $c \rightarrow 1$ обратимая компонента доминирует, и петля гистерезиса исчезает, что противоречит экспериментальным данным для BaTiO₃.

Если бы мы напрямую интегрировали приведенную систему из трех уравнений (11), приходилось бы одновременно отслеживать два неизвестных (P_{irr} и P_{rev}), тщательно контролировать шаги по E и «бороться» с жесткостью уравнений.

Чтобы обойти описанные сложности, предложен упрощенный вариант модели JA, который при этом сохраняет основные физические эффекты.

Исходное выражение:

$$E_e = E + \alpha P_{prev}, P_{an} = P_s \cdot \tanh\left(\frac{E_e}{a}\right), \quad (12)$$

где P_{prev} — поляризация на предыдущем шаге.

Вместо разделения P_{irr} и P_{rev} вводится единое уравнение для приращения поляризации:

$$\frac{dP}{dE} = c \cdot (P_{an} - P_{prev}) + \frac{(P_{an} - P_{prev})}{k}, \quad (13)$$

где первое слагаемое ($c \cdot (P_{an} - P)$) соответствует обратимому отклику, второе слагаемое ($\frac{(P_{an} - P_{prev})}{k}$) описывает необратимые процессы, где k регулирует скорость приближения к P_{an} .

Интегрирование проводили явным методом Эйлера с шагом ΔE , это позволило сделать код проще и быстрее, не потеряв характерную форму петли:

$$P_{new} = P_{prev} + \Delta E \cdot \left[c \cdot (P_{an} - P_{prev}) + \frac{(P_{an} - P_{prev})}{k} \right]. \quad (14)$$

Теперь необходимо выяснить, почему такое упрощение допустимо. Во-первых, параметры P_s , a , α , c , k остаются теми же, что и в полной модели, а их влияние на форму, ширину и асимметрию петли полностью сохраняется. Во-вторых, явная схема Эйлера со встроенным «регулятором» $+1 \times 10^{-6}$ в знаменателе исключает резкий рост при $k \rightarrow 0$ и позволяет не снижать шаг интегрирования. В-третьих, упрощенная однокомпонентная схема демонстрирует практически всю физику гистерезиса: смещение петли с ростом a , изменение площади цикла при варьировании k ($k \rightarrow 0$ — рост коэрцитивного поля (петля расширяется)), а также асимметрию плеч при $c \neq 0.5$ (если же $c \rightarrow 1$, то доминирует обратимый отклик (петля сужается)).

Рассмотрим поведение BaTiO_3 при циклическом изменении внешнего электрического поля E (рис. 3). Параметры модели заданы следующим образом: поляризация насыщения — $P_s = 0.3 \text{ Кл/м}^2$, коэффициент взаимодействия — $\alpha = 0.05$, параметр формы — $a = 0.15$, доля обратимого вклада — $c = 0.2$, $T = 300$ и коэрцитивный параметр — $k = 0.1$.

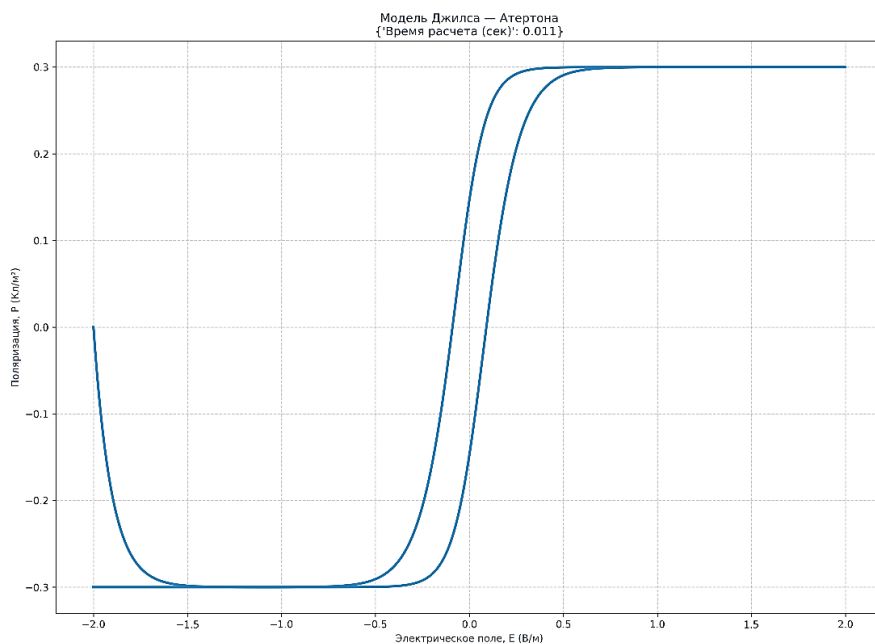


Рис. 3. Результат моделирования петли гистерезиса с помощью модели Джилса — Атертона

График демонстрирует характерное для сегнетоэлектриков поведение при циклическом изменении внешнего электрического поля. Полученная петля симметрична относительно начала координат, что указывает на отсутствие в модели внутреннего поля смещения. Поляризация насыщения достигает значения $\pm 0.3 \text{ Кл/м}^2$, это полностью соответствует заданному параметру модели. Коэрцитивное поле, необходимое для обнуления поляризации, составляет примерно $\pm 0.2 \times 10^6 \text{ В/м}$, а остаточная поляризация при нулевом внешнем поле — около $\pm 0.28 \text{ Кл/м}^2$. Гладкая, скругленная форма петли и плавный характер переключения отражают макроскопическую природу модели, которая эффективно описывает поведение материала для инженерных расчетов.

Несмотря на практическую эффективность упрощенной модели, ее применение допускает ряд компромиссов. Например, исключение нелинейных членов из исходных уравнений (например, $|dP_{irr}/dE|$) лишает модель способности описывать резкие переключения доменов, критичные для материалов с сильной коэрцитивностью. Данное упрощение также игнорирует предысторию цикла, что приводит к одинаковой форме петли при повторных циклах, а это противоречит реальному «старению» сегнетоэлектриков, где гистерезис может сужаться или расширяться со временем. Температурная зависимость, сводящаяся к линейному масштабированию P_s , не учитывает фазовых переходов вблизи точки Кюри, а параметры c и k , будучи константами, не отражают динамической перестройки доменной структуры под нагрузкой. Тем не менее для задач, где критичны скорость и устойчивость расчетов — проектирование конденсаторов или предварительный анализ материалов, эти упрощения оправданы, что позволяет сохранить баланс между физической адекватностью и вычислительной доступностью.

Можем сделать вывод, что, несмотря на некоторую идеализацию, упрощенная схема полностью удовлетворяет целям многометодного сравнения: она демонстрирует корректное смещение петли при изменении α , изменение ширины при варьировании k и изменение насыщения с P_s . Упрощенная модель подходит для инженерных расчетов, где важны скорость и устойчивость, а не точное воспроизведение микроструктуры.

Именно сочетание физической адекватности и программной доступности делает этот вариант JA-реализации оптимальным для интеграции в общий интерфейс программы и виртуальных экспериментов по оптимизации сегнетоэлектриков.

Каждый из рассмотренных методов предоставляет уникальные способы для анализа сегнетоэлектрических свойств. Первый фокусируется на термодинамических закономерностях, описывая систему через уравнения среднего поля, второй акцентируется на микроскопических процессах, моделируя взаимодействия отдельных «спинов», третий предлагает инструменты для быстрого прогнозирования гистерезиса в инженерных приложениях.

В табл. представлен подробный сравнительный анализ рассматриваемых выше методов моделирования сегнетоэлектрических материалов, а также дано сравнение результатов моделирования с экспериментальными данными [9; 10].

Выбор между методами — это не просто вопрос вычислительных ресурсов, но стратегическое решение, определяющее глубину понимания физических процессов. Способен ли макроскопический подход предсказать влияние наноразмерных дефектов? Может ли микроскопическая модель стать инструментом для промышленных расчетов? Ответы на эти вопросы требуют системного сравнения методов, учитывающего их синергию и принципиальные ограничения.

Исходя из анализа табл. можем сделать вывод, что метод Ландау — Халатникова высокоэффективен для анализа термодинамических свойств и фазовых переходов в однородных системах. Но не способен полностью учитывать домены и дефекты, при использовании уравнения без добавочных членов, что ограничивает применение в исследованиях неоднородных материалов.

Монте-Карло же, напротив, предоставляет уникальную возможность изучать микроструктуру на атомарном уровне, однако требует значительных вычислительных ресурсов, что делает его недостаточно пригодным для масштабных инженерных задач.

Упрощенная модель Джилса — Атертона могла бы стать компромиссом для прикладных расчетов, сочетающим скорость и простоту, тем не менее его прогностическая сила снижается в условиях сильных нелинейностей или критических температур.

Сравнительный анализ методов моделирования

Критерий	Ландау — Халатникова	Монте-Карло	Джилса — Атертона
Физическая основа	Термодинамический потенциал Ландау	Микроскопическая модель Изинга	Феноменологическое разделение Р
Поляризация насыщения (P_s) Экспериментальные данные (тонкие пленки): 0,26 (Кл/м ²)	0,28 (Кл/м ²)	≈0,3 (Кл/м ²)	0,3 (Кл/м ²)
Коэрцитивная сила (E_c) Экспериментальные данные (тонкие пленки): 1,0–3,0 × 10 ⁶ (В/м)	1,2 × 10 ⁶ (В/м)	≈1,5 × 10 ⁶ (В/м)	0,2 × 10 ⁶ (В/м)
Быстрота расчета	Быстрая (5.9 с)	Медленная (35.2 с)	Очень быстрая (0.01 с)
Уровень детализации	Макроскопический (Р)	Атомарный («спины», домены)	Макроскопический (Р)
Температурные эффекты	Линейная Т-зависимость P_s	Прямое моделирование через кТ	Эмпирическое масштабирование P_s
Учет доменов/дефектов	Феноменологический учет	Явный учет	Нет
Динамика	Уравнения релаксации (dP/dt)	Шаги Метрополиса	Квазистатика (dP/dE)
Точность	Высокая для однородных систем	Высокая для неоднородных систем	Средняя (калибровка зависимая)
Гибкость	Ограничена потенциалом Ландау	Высокая (дефекты, градиенты)	Ограничена параметрами с, k
Инструменты	COMSOL, Python	LAMMPS, Python	Python (NumPy), Excel
Задачи	Фазовые переходы, Р(Т)-анализ	Домены, дефекты, микроструктура	Инженерный расчет
Достоинства	Скорость, термодинамическая интерпретация	Детализация микроструктуры	Практичность, скорость
Недостатки	Игнорирование доменов	Высокие вычислительные затраты	Упрощение нелинейных эффектов

Если предпринять попытку синтезировать эти методы, например, используя машинное обучение для автоматизации калибровки параметров модели Ландау — Халатникова на основе данных Монте-Карло, то можно устранить их некоторые «индивидуальные» недостатки. Нейросети, обученные на микроструктурных паттернах (например, конфигурациях доменов), могут выявлять скрытые связи между атомарными взаимодействиями и макроскопическими параметрами, такими как коэрцитивное поле или поляризация насыщения. Представленная стратегия открывает путь к созданию гибридных моделей, что критически важно для ускорения перехода от отдельных фундаментальных исследований к полноценным промышленным приложениям.

Заключение. В результате проделанной работы нами было создано полноценное графическое приложение для моделирования сегнетоэлектрических гистерезисных петель с использованием языка программирования Python. Его ключевой особенностью является интеграция трех методов в единый графический интерфейс: метод Ландау — Халатникова, метод Монте-Карло и упрощенная модель Джилса — Атертона. Архитектура платформы модульна, где каждый метод реализован в виде независимого класса, что в будущем обеспечит гибкость при добавлении новых алгоритмов или для модификации уже существующих. Для фиксации результатов все расчеты сопровождаются автоматическим протоколированием параметров моделирования. Данная разработка направлена на преодоление ограничений узкоспециализированных инструментов, предлагает исследователям универсальную среду для комплексного изучения сегнетоэлектриков.

Проведенный же анализ методов моделирования сегнетоэлектриков выявил их комплементарность, а метод Ландау — Халатникова показал наивысшую эффективность для моделирования термодинамики однородных сегнетоэлектриков, обеспечив качественное описание фазовых переходов и гистерезиса через уравнения среднего поля, тогда как Монте-Карло раскрыл микроструктурные механизмы гистерезиса, такие как формирование доменов и влияние дефектов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Лайнс, М. Сегнетоэлектрики и родственные им материалы / М. Лайнс, А. Гласс. — М.: Мир, 1981. — 736 с.
2. Uchino, K. Applied Mathematics in Ferroelectricity and Piezoelectricity / K. Uchino. — [S. l.]: MDPI, 2023. — 632 p.
3. Прохоренко, Н.А. Python 3 и PyQt 5: разработка приложений / Н.А. Прохоренко, В.А. Дронов. — 2-е изд., перераб. и доп. — СПб.: БХВ-Петербург, 2018. — 832 с.: ил. — (Профессиональное программирование). — ISBN 978-5-9775-3978-4.
4. Song, T.K. Landau — Khalatnikov Simulations for Ferroelectric Switching in Ferroelectric Random Access Memory Application / T.K. Song // J. Korean Phys. Soc. — 2005. — Vol. 46, № 1. — P. 5.
5. Юдин, П.Н. Применение метода Монте-Карло для моделирования диэлектрического отклика сегнетоэлектриков / П.Н. Юдин, М.А. Никольский, С.П. Зубко // Журнал технической физики. — 2003. — Т. 73, вып. 8. — С. 56–61.
6. Максимова, О.Г. Изучение температурного поведения сегнетоэлектриков методом компьютерного моделирования / О.Г. Максимова, А.В. Максимов, В.В. Казаков, П.С. Вахрамеев // Вестник Херсонского национального технического университета. — 2015. — № 1. — С. 138–142.
7. Бадяй, Д.В. Использование модели Джилла — Атертона для определения параметров облученного электронами кристалла ТГС / Д.В. Бадяй, И.Б. Копылова // Вестник Амурского государственного университета. Серия: Естественные и экономические науки. — 2018. — № 81. — С. 34–37.
8. Müller, A. A reformulation of the Jiles-Atherton hysteresis model for ferromagnetic/ferroelectric components / A. Müller // PAMM Proc. Appl. Math. Mech. — 2009. — Vol. 9, iss. 1. — P. 401–402.
9. Ramesh, R. Enabling ultra-low-voltage switching in BaTiO₃ / R. Ramesh, L.W. Martin // Nature Materials. — 2022. — Vol. 21, № 7. — P. 779–785.
10. Ferroelectric properties of BaTiO₃ thin films co-doped with Mn and Nb / D. Phuyal, S. Mukherjee, S. Jana [et al.] // Digitala Vetenskapliga Arkivet. — 2019. — URL: <http://www.diva-portal.org/smash/record.jsf?pid=diva2:1351267> (date of access: 05.05.2025).

REFERENCES

1. Lines M., Glass A. *Segnetoelektriki i rodstvenniye im materialy* [Ferroelectrics and Related Materials], M.: Mir, 1981, 736 p.
2. Uchino, K. Applied Mathematics in Ferroelectricity and Piezoelectricity / K. Uchino. — [S. l.]: MDPI, 2023. — 632 p.
3. Prokhorenok N.A., Dronov V.A. *Python 3 i PyQt 5: razrabotka prilozheni* [Python 3 and PyQt 5: Application Development], St. Petersburg: BHV-Peterburg, 2018, 832 p.: ill. — (Professional programming). — ISBN 978-5-9775-3978-4.
4. Song, T.K. Landau — Khalatnikov Simulations for Ferroelectric Switching in Ferroelectric Random Access Memory Application / T.K. Song // J. Korean Phys. Soc. — 2005. — Vol. 46, № 1. — P. 5.
5. Yudin P.N., Nikolski M.A., Zubko S.P. *Zhurnal tekhnicheskoi fiziki* [Journal of Technical Physics], 2003, 73(8), pp. 56–61.
6. Maksimova O.G., Maksimov A.V., Kazakov V.V., Vakhrameev P.S. *Vestnik Khersonskogo natsionalnogo tekhnicheskogo universiteta* [Bulletin of Kherson National Technical University], 2015, 1, pp. 138–142.
7. Badyai D.V., Kopylova I.B. *Vestnik Amurskogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya: Yestestvennye i ekonomicheskiye nauki* [Bulletin of Amur State University. Natural and Economic Sciences], 2018, 81, pp. 34–37.
8. Müller, A. A reformulation of the Jiles-Atherton hysteresis model for ferromagnetic/ferroelectric components / A. Müller // PAMM Proc. Appl. Math. Mech. — 2009. — Vol. 9, iss. 1. — P. 401–402.
9. Ramesh, R. Enabling ultra-low-voltage switching in BaTiO₃ / R. Ramesh, L.W. Martin // Nature Materials. — 2022. — Vol. 21, № 7. — P. 779–785.
10. Ferroelectric properties of BaTiO₃ thin films co-doped with Mn and Nb / D. Phuyal, S. Mukherjee, S. Jana [et al.] // Digitala Vetenskapliga Arkivet. — 2019. — URL: <http://www.diva-portal.org/smash/record.jsf?pid=diva2:1351267> (date of access: 05.05.2025).

Поступила в редакцию 14.07.2025

Адрес для корреспонденции: e-mail: sipakovie@vsu.by — Сипаков И.Е.