

шанного и дистанционного форматов обучения, формирует у студентов навыки самостоятельного решения задач с использованием современных вычислительных инструментов. Электронный ресурс расположен на сайте системы управления обучением ВГУ имени П.М. Машерова по адресу <https://newsdo.vsu.by/course/view.php?id=10489>.

1. Официальная документация Wolfram Mathematica [Электронный ресурс]. – URL: <https://reference.wolfram.com/language/ru/> (дата обращения: 14.09.2025).
2. Трошин, В.И. Математический анализ в Wolfram Mathematica / В.И. Трошин. – М. : ДМК Пресс, 2015. – 480 с.

## СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ ГИСТЕРЕЗИСА В СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКАХ

**Хотьков В.Е.<sup>1</sup>, Сипаков И.Е.<sup>2</sup>,**

<sup>1</sup>студент 2 курса, <sup>2</sup>выпускник ВГУ имени П.М. Машерова, г. Витебск, Республика Беларусь  
Научный руководитель – Кашевич И.Ф., канд. физ.-мат. наук, доцент

**Ключевые слова.** Сегнетоэлектрик, поляризация, гистерезис, Ландау – Халатников, Монте-Карло, Джилс – Атертон.

**Keywords.** Ferroelectric, polarization, hysteresis, Landau – Khalatnikov, Monte-Carlo, Jiles – Atherton.

Изучение сегнетоэлектрических материалов имеет критическое значение для разработки современных электронных компонентов, включая энергонезависимую память, сенсоры и актиоаторы. Ключевой характеристикой этих материалов является гистерезисная зависимость поляризации от внешнего электрического поля, которая отражает сложные процессы доменной динамики и фазовых переходов [1]. Адекватное описание и прогнозирование этого поведения требует применения численного моделирования.

В современной физике конденсированного состояния существует несколько подходов к моделированию сегнетоэлектриков, от макроскопических феноменологических теорий до микроскопических статистических моделей. Каждый метод обладает уникальными преимуществами и недостатками, определяющими его применимость для решения конкретных научных или инженерных задач. Отсутствие единого универсального подхода обуславливает актуальность их сравнительного анализа для выбора оптимального инструмента исследования.

Цель работы – проведение сравнительного анализа ключевых численных методов моделирования гистерезиса в сегнетоэлектриках для определения их преимуществ, недостатков и областей оптимального применения.

**Материал и методы.** Для анализа были выбраны три фундаментально различных метода, реализованных в рамках программной платформы FerroSim: метод Ландау – Халатникова, Монте-Карло и Джилса – Атертона. В качестве объекта исследования рассматривался титанат бария ( $\text{BaTiO}_3$ ) как модельный сегнетоэлектрик.

**Результаты и их обсуждение.** Выбор метода моделирования является критическим шагом, который зависит от поставленной задачи, требуемой точности и доступных вычислительных ресурсов. Для систематизации и наглядного представления сильных и слабых сторон каждого подхода был проведен их сравнительный анализ (см. таблицу), а также сравнение результатов моделирования с экспериментальными данными [2, 3].

Таблица – Сравнительный анализ методов моделирования

Критерий	Ландау–Халатникова	Монте-Карло	Джилса–Атертона
Физическая основа	Термодинамический потенциал Ландау	Микроскопическая модель Изинга	Феноменологическое разделение $P$

Быстрота расчёта	Быстрая (5.9 с)	Медленная (35.6 с)	Очень быстрая (0.02 с)
Поляризация насыщения ( $P_s$ ) Экспериментальные данные (тонкие пленки): 0,26 (Кл/м <sup>2</sup> )	0,28 (Кл/м <sup>2</sup> )	≈0,3 (Кл/м <sup>2</sup> )	0,3 (Кл/м <sup>2</sup> )
Коэрцитивная сила ( $E_c$ ) Экспериментальные данные (тонкие пленки): 1,0–3,0 × 10 <sup>6</sup> (В/м)	1,2 × 10 <sup>6</sup> (В/м)	≈1,5 × 10 <sup>6</sup> (В/м)	0,2 × 10 <sup>6</sup> (В/м)
Уровень детализации	Макроскопический ( $P$ )	Атомарный (спины, домены)	Макроскопический ( $P$ )
Температурные эффекты	Линейная $T$ -зависимость $P_s$	Прямое моделирование через $kT$	Эмпирическое масштабирование $P_s$
Учёт доменов/дефектов	Нет	Явный учёт	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 $c, k$
Инструменты	COMSOL, Python	LAMMPS, Python	Python (NumPy), Excel
Задачи	Фазовые переходы, $P(T)$ -анализ	Домены, дефекты, микроструктура	Инженерный расчёт
Достоинства	Скорость, термодинамическая интерпретация	Детализация микроструктуры	Практичность, скорость
Недостатки	Игнорирование доменов	Высокие вычислительные затраты	Упрощение нелинейных эффектов

Как следует из анализа, не существует единственного «лучшего» метода. Выбор представляет собой компромисс между физической точностью и вычислительной эффективностью. Метод Ландау – Халатникова является оптимальным для изучения термодинамических аспектов и фазовых переходов, обеспечивая хороший баланс между простотой и качественным описанием.

Метод Монте-Карло незаменим для фундаментальных исследований микроскопических явлений, однако его ресурсоёмкость ограничивает применение в масштабных инженерных задачах [4]. Наконец, модель Джилса – Атертона выступает как прагматичный инструмент для быстрых прикладных расчётов, где важна скорость и макроскопическое поведение, а не глубинная физика процесса. Очевидна ценность комплексного подхода, реализованного в платформе FerroSim, который позволяет использовать сильные стороны каждого метода для всестороннего исследования сегнетоэлектриков.

**Заключение.** В результате проведённого исследования выполнен сравнительный анализ трёх ключевых методов моделирования гистерезиса в сегнетоэлектриках. Установлено, что выбор оптимального метода определяется спецификой научной или инженерной задачи и представляет собой компромисс между точностью, вычислительными затратами и уровнем детализации (микро- или макроскопический). Показано, что для всестороннего понимания свойств сегнетоэлектрических материалов необходим много-методный подход. Интеграция различных моделей в единую программную платформу, такую как FerroSim, является эффективным решением, позволяющим гибко выбирать инструмент в зависимости от цели исследования.

1. Доменные границы и топологические дефекты в слоистых сегнетоэлектрических кристаллах / А. Л. Толстихина, Р. В. Гайнутдинов, А. К. Лашкова [и др.] // Наука – образование, производству, экономике [Электронный ресурс] : материалы 76-й Регион. науч.-практ. конф. преподавателей, научных сотрудников и аспирантов, Витебск, 1 марта 2024 г. – Витебск : ВГУ имени П. М. Машерова, 2024. – С. 47–50. – URL: <https://rep.vsu.by/handle/123456789/42168> (дата обращения: 15.08.2025).
2. Ramesh, R. Enabling ultra-low-voltage switching in BaTiO<sub>3</sub> / R. Ramesh, L. W. Martin // Nature Materials. – 2022. – Vol. 21, № 7. – P. 779–785.
3. Ferroelectric properties of BaTiO<sub>3</sub> thin films co-doped with Mn and Nb [Электронный ресурс] / D. Phuyal, S. Mukherjee, S. Jana, F. Denoel, M. Venkata Kamalakar, S. M. Butorin, A. Kalaboukhov, H. Rensmo, O. Karis // Digitala Vetenskapliga Arkivet. – 2019. – URL: <http://www.diva-portal.org/smash/record.jsf?pid=diva2:1351267> (дата обращения: 15.08.2025).
4. Kinetic Monte Carlo simulations of organic ferroelectrics. – URL: [https://www.researchgate.net/publication/329768494\\_Kinetic\\_Monte\\_Carlo\\_simulations\\_of\\_organic\\_ferroelectrics](https://www.researchgate.net/publication/329768494_Kinetic_Monte_Carlo_simulations_of_organic_ferroelectrics) (дата обращения: 15.08.2025).

## ОЦЕНКА МЕТОДА ЛАНДАУ–ХАЛАТНИКОВА ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ ГИСТЕРЕЗИСНОЙ ПЕТЛИ ТИТАНАТА БАРИЯ

**Хотьков В.Е.<sup>1</sup>, Сипаков И.Е.<sup>2</sup>,**

<sup>1</sup>студент 2 курса, <sup>2</sup>выпускник 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, метод Ландау–Халатникова.

**Keywords.** Ferroelectric, polarization, hysteresis, coercive field, Landau – Khalatnikov method.

Титанат бария (BaTiO<sub>3</sub>) является одним из наиболее изученных сегнетоэлектриков, чьи уникальные поляризационные свойства находят широкое применение в современной электронике. Ключевой характеристикой таких материалов является гистерезисная зависимость поляризации от внешнего электрического поля. Для точного понимания и прогнозирования этого поведения необходимо применение численных методов. Феноменологический подход, основанный на теории Ландау, позволяет эффективно анализировать термодинамические свойства и фазовые переходы в однородных системах [1].

Адаптация этого подхода через уравнение Ландау–Халатникова предоставляет мощный инструмент для динамического моделирования поляризации. Однако точность и адекватность модели напрямую зависят от корректного выбора феноменологических коэффициентов и учёта влияния внешних факторов, таких как температура и структурные дефекты материала [2].

Цель работы – программная реализация и оценка эффективности метода Ландау – Халатникова для численного моделирования и анализа гистерезисных петель в титанате бария при различных физических условиях.

**Материал и методы.** В качестве объекта исследования выбран титанат бария (BaTiO<sub>3</sub>). В основе модели лежит численное решение уравнения динамики поляризации Ландау – Халатникова. Для интегрирования этого нелинейного дифференциального уравнения был применён численный метод Рунге – Кутты четвёртого порядка, который обеспечивает высокую точность расчёта [3].