

## ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ | NUMERICAL METHODS

Научная статья | Original paper

УДК 537.226:519.6:004.942

### Математическая модель переключения поляризации, основанная на обобщенном уравнении Ландау — Халатникова — Тани: численная реализация

Л.И. Мороз✉, О.С. Дорошков

Амурский государственный университет, Благовещенск, Российская Федерация

✉ lubover@mail.ru

#### Резюме

**Контекст и актуальность.** Сегнетоэлектрические материалы активно применяются в современных устройствах. Функциональность сегнетоэлектриков обусловлена наличием спонтанной поляризации и способностью к её переключению под действием внешнего воздействия. Для математического описания фазовых переходов и динамики спонтанной поляризации в сегнетоэлектриках широко применяется термодинамическая теория Ландау. Однако классическая модель Ландау — Халатникова, основанная на дифференциальном уравнении первого порядка, не учитывает инерционные эффекты, что ограничивает её применение. Это обуславливает необходимость использования обобщённой модели Ландау — Халатникова — Тани, включающей инерционное слагаемое, флуктуации параметра порядка, и описывающей динамику поляризации через нелинейное уравнение гиперболического типа, аналитическое решение которых, во многих случаях вызывает затруднения, поэтому поставленную задачу приходится решать численно, например, с помощью метода конечных разностей. **Цель.** Проведение численной реализации математической модели переключения поляризации в сегнетоэлектриках, основанной на обобщенном уравнении Ландау — Халатникова — Тани. **Гипотеза.** Предполагается, что учёт инерционных эффектов позволяет точнее описывать переключение поляризации в сегнетоэлектриках и воспроизвести эффекты, которые не отображает классическая модель Ландау — Халатникова. **Методы и материалы.** Для решения начально-краевой задачи



для нелинейного уравнения в частных производных гиперболического типа разработана неявная конечно-разностная схема. Проведена программная реализация в ППП Matlab. **Результаты.** Получены временные зависимости поляризации и ее скорости переключения, гистерезисные петли, демонстрирующие влияние частоты, амплитуды поля и толщины пленки. Модель корректно воспроизводит инерционные эффекты и устойчивое гистерезисное поведение. **Заключение.** Показано, что обобщенная модель Ландау — Халатникова — Тани воспроизводит характерные особенности гистерезиса, а также наличие инерционных эффектов при переключении поляризации. Полученные результаты согласуются с физическими представлениями о переключении поляризации в сегнетоэлектриках и подтверждают возможность использования модели Ландау — Халатникова — Тани для описания нестационарных процессов.

**Ключевые слова:** уравнение Ландау — Халатникова — Тани, неявная конечно-разностная схема, сегнетоэлектрик, поляризационный гистерезис, вычислительный эксперимент

**Для цитирования:** Мороз, Л.И., Дорошков, О.С. (2025). Математическая модель переключения поляризации, основанная на обобщенном уравнении Ландау — Халатникова — Тани: численная реализация. *Моделирование и анализ данных*, 15(3), 131—147. <https://doi.org/10.17759/mda.2025150308>

## Mathematical model of polarization switching based on the generalised Landau–Khalatnikov–Tani equation: numerical implementation

L.I. Moroz✉, O.S. Doroshkov

Amur State University, Blagoveshchensk, Russian Federation

✉ lubovep@mail.ru

### Abstract

**Context and relevance.** Ferroelectric materials are widely used in modern electronic devices. Their functionality arises from the presence of spontaneous polarization and the ability to switch it under external stimuli. The Landau thermodynamic theory is commonly employed to describe phase transitions and the dynamics of spontaneous polarization in ferroelectrics. However, the classical Landau — Khalatnikov model, based on a first-order differential equation, does not account for inertial effects, which limits its applicability in high-frequency or fast-switching regimes. This necessitates the use of the generalised Landau — Khalatnikov — Tani model, which includes an inertial term and fluctuations of the order parameter, describing polarization



dynamics through a nonlinear hyperbolic partial differential equation. Analytical solutions to such equations are often unattainable, making numerical methods — such as the finite-difference method — essential for solving the problem. **Objective.** To perform a numerical implementation of a mathematical model for polarization switching in ferroelectrics based on the generalised Landau — Khalatnikov — Tani equation. **Hypothesis.** It is hypothesised that incorporating inertial effects enables a more accurate description of polarization switching in ferroelectrics and allows the reproduction of phenomena not captured by the classical Landau — Khalatnikov model. **Methods and materials.** An implicit finite-difference scheme was developed to solve the initial-boundary value problem for the nonlinear hyperbolic partial differential equation. The numerical algorithm was implemented using MATLAB. **Results.** Time-dependent polarization profiles, switching kinetics, and hysteresis loops were obtained, demonstrating the influence of electric field frequency, amplitude, and film thickness. The model successfully reproduces inertial effects and stable hysteretic behaviour. **Conclusions.** The generalised Landau — Khalatnikov — Tani model accurately captures key features of ferroelectric hysteresis and inertial switching dynamics. The results align with physical understanding of polarization reversal and confirm the model's suitability for describing non-stationary processes in ferroelectric materials.

**Keywords:** Landau — Khalatnikov — Tani equation, implicit finite-difference scheme, ferroelectric, polarization hysteresis, computational experiment

**For citation:** Moroz, L.I., Doroshkov, O.S. (2025). Mathematical model of polarization switching based on the generalized Landau — Khalatnikov — Tani equation: numerical implementation. *Modeling and Data Analysis*, 15 (3), 131—147. <https://doi.org/10.17759/mda.2025150308>

## Введение

Математическое моделирование играет важную роль в исследованиях физики твердого тела, в частности, при изучении сложных динамических процессов в сегнетоэлектрических материалах. Например, можно описывать и предсказывать поведение доменных структур, переключение поляризации и отклики материалов на внешние электрические, магнитные или механические воздействия (Пабе, 2015; Мороз, Масловская, 2018; Ducharme, Newell, Sebald, 2020; Li, Zhang, Wen, Dong, 2024). Модели, основанные на термодинамической теории переходов или методах молекулярной динамики, позволяют глубже понять микроскопические механизмы, лежащие в основе макроскопических свойств сегнетоэлектриков, а также способствуют разработке новых функциональных материалов. В общем случае под сегнетоэлектриками понимают вещества, обладающие спонтанной электрической поляризацией, которая может быть изменена под действием внешнего электрического поля (Scott, 2000; Wang et al., 2003; Mazur, Stefanovich, Yurchenko, 2016; Zhang et al., 2025). Отличительными свойствами сегнетоэлектрических материалов являются диэлектрический гистерезис, высокая нелинейность отклика и устойчивость к разрушению при многократном переключении. Эти особенности делают сегнетоэлектрики незаменимыми в различных устройствах микроэлектроники,



таких как оперативная память (FeRAM), датчики, конденсаторы, энергосберегающие устройства (Landau, Ginzburg, 1965; Ducharne, Newell, Sebald, 2020; Akshayveer et al., 2025). К наиболее известным сегнетоэлектрикам относятся триглицинсульфат), титанат бария ( $\text{BaTiO}_3$ ), сегнетова соль (титанат свинца ( $\text{PbTiO}_3$ ), цирконат-титанат свинца (PZT) и полимерные материалы, например, поливинилиденфторид-трифторэтилен (P(VDF-TrFE)) (Рабе, 2015; Akshayveer et al., 2025).

Для моделирования поведения сегнетоэлектриков применяются различные подходы: стохастические, феноменологические и детерминированные (Рабе, 2015; Bain, Chand, 2017). Стохастические методы учитывают случайные флуктуации и дефекты материала, что особенно важно при описании неоднородных образцов или систем с высоким уровнем шума (Alessandri et al., 2019). Феноменологические подходы, напротив, опираются на эмпирические зависимости, полученные из экспериментальных данных, и позволяют строить упрощённые модели, удобные для практического применения (Cao, 2004; Ducharne, Newell, Sebald, 2020). В свою очередь детерминированные модели, основаны на строгих физических законах и уравнениях, описывающих поведение системы без учёта случайных факторов. Они предполагают, что состояние системы однозначно определяется начальными условиями и внешними воздействиями. Детерминированный подход особенно эффективен при исследовании систем, где случайные шумы и дефекты играют второстепенную роль, и требуется высокая точность прогнозирования поведения материала (Uchino, 1997; Song et al., 2003). Кроме того, существуют модели, в которых данные подходы объединяются для более полного описания сложных процессов в сегнетоэлектриках.

Особое место среди перечисленных подходов занимает теория фазовых переходов, разработанная Львом Ландау в 1930-х годах. Эта теория стала одной из ключевых концепций в физике твёрдого тела и нашла широкое применение при исследовании сегнетоэлектриков (Cao, 2004; Рабе, 2015; Roy, Swayambhoo, 2020). Основной идеей стало описание состояния вещества через параметр порядка — величину, которая отлична от нуля только в упорядоченной фазе. Для сегнетоэлектриков таким параметром служит спонтанная поляризация. В рамках модели энергия системы представляется в виде разложения по степеням поляризации, что позволяет определять условия термодинамической устойчивости различных фаз и предсказывать тип фазового перехода (Cao, 2004; Рабе, 2015). Развитие теории Ландау привело к созданию феноменологической модели Ландау — Гинзбурга — Девоншира — Халатникова, расширяющей её возможности за счёт учёта пространственной неоднородности поляризации и временной динамики (Chen, 2002; Tang et al., 2022; He et al., 2023). Она позволяет моделировать такие явления, как образование доменов, переключение поляризации под действием внешнего электрического поля и гистерезисный отклик (Tang et al., 2022; He et al., 2023; Maslovskaya et al., 2021; Roy, Paul, Dattagupta, 2010; Richman, Rulis, Caruso, 2017). Эта модель активно используется для анализа тонкоплёночных структур и многослойных устройств, где необходимо учитывать влияние напряжений, граничных условий и взаимодействия между слоями.



Тем не менее, модель Ландау — Гинзбурга — Девоншира — Халатникова имеет некоторые ограничения. Она базируется на феноменологическом подходе и не учитывает микроскопические механизмы поведения материала. Кроме того, классическая модель не всегда адекватно описывает сильно нелинейные и динамические процессы, происходящие в современных наноразмерных и композитных системах. Поэтому в последние десятилетия предпринимались шаги по её модификации и обобщению. Одним из важных направлений развития является модель Ландау — Халатникова — Тани, позволяющая учитывать инерционные эффекты и диссипацию в динамике параметра порядка. Эта модель описывает временную эволюцию спонтанной поляризации с помощью дифференциального уравнения второго порядка по времени, которое включает члены, отвечающие за инерцию, вязкость и нелинейность отклика на внешнее воздействие. Такой подход особенно важен при моделировании высокочастотных процессов, быстрого переключения поляризации и нестационарных режимов работы сегнетоэлектрических устройств (Maslovskaya et al., 2021; Roy, Paul, Dattagupta, 2010; Richman, Rulis, Caruso, 2017).

Целью данной работы является численная реализация математической модели переключения поляризации в сегнетоэлектриках, основанная на обобщенном уравнении Ландау — Халатникова — Тани.

## Математическая постановка задачи

Основной принцип термодинамической теории заключается в том, что состояние полярных диэлектриков определяется набором термодинамических параметров: температурой, поляризацией, электрическим полем, напряжением и деформацией. Феноменологическое описание основывается на задании свободной энергии — термодинамической функции, зависящей от параметра порядка (плотности свободной энергии) —  $F$ , Дж·м<sup>-3</sup> (Рабе, 2015).

Для одноосных сегнетоэлектриков свободную энергию можно представить в виде разложения по степеням единственной компоненты поляризации, при этом, для упрощения модели, полем деформаций можно пренебречь.

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

где  $P$  — спонтанная поляризация, Кл·м<sup>-2</sup>;  $A=A_0(T-T_{cw})$ , м·Ф<sup>-1</sup>;  $B$ , м<sup>5</sup>·(Кл<sup>2</sup>×Ф<sup>-1</sup>);  $C$ , м<sup>9</sup>·(Кл<sup>4</sup>×Ф<sup>-1</sup>) — термодинамические постоянные.

Характер сегнетоэлектрического фазового перехода и тип поведения поляризации при  $T < T_{cw}$  зависят от знака константы  $B$  (1). При  $B < 0$  поляризация изменяется скачкообразно с температурой, что соответствует фазовому переходу I рода, тогда как при  $B > 0$  поляризация изменяется непрерывно, указывая на фазовый переход II рода. Для фазового перехода II рода вклад пятой степени в выражении плотности свободной энергии (1) можно не учитывать. Термодинамические параметры  $A_0$  и  $C$  положительны



для известных сегнетоэлектриков. Далее будем рассматривать сегнетоэлектрики с фазовыми переходами I рода.

Простейшая математическая модель гистерезисной зависимости поляризации от внешнего поля основана на представлении равновесной конфигурации как минимума свободной энергии  $\frac{\partial F}{\partial P} = 0$ , т.е.  $A_0(T - T_{cw})P + BP^3 + CP^5 - E = 0$  или  $AP + BP^3 + CP^5 - E = 0$ .

Поле  $E$  можно представить как периодическую функцию  $E(t) = E_0 \sin(\omega t)$ . Здесь  $E_0$  — амплитуда поля, В·м<sup>-1</sup>;  $\omega = 2\pi f$  — угловая частота, рад·с<sup>-1</sup>;  $f$  — частота колебаний электрического поля, Гц.

Нестационарное уравнение Ландау — Халатникова описывает динамику изменения полярного состояния сегнетоэлектрика в рамках теории Ландау (Рабе, 2015; Maslovskaya et al., 2021; Roy, Paul, Dattagupta, 2010):

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

где  $\delta$  — кинетический коэффициент, В·м·с·Кл<sup>-1</sup>.

Подставляя выражение для плотности свободной энергии в уравнение (1), можно вывести следующее дифференциальное уравнение:

$$\delta \frac{dP}{dt} = -AP - BP^3 - CP^5 + E. \quad (2)$$

Подход Ландау опирается на теорию самосогласованного поля, поэтому уравнение не учитывает флуктуации параметра порядка — поляризации. В соответствии с концепцией Гинзбурга, для учета флуктуаций в сегнетоэлектриках уравнение можно дополнить, включив градиентный член или корреляционную энергию  $\psi(\nabla P)^2$ , где  $\psi$  — положительная термодинамическая константа, м<sup>3</sup>·Ф<sup>-1</sup> (Рабе, 2015). Если предположить, что поляризация зависит только от одной пространственной координаты, то для одной из компонент поляризации уравнение Ландау — Халатникова принимает следующий вид:

$$\delta \frac{\partial P}{\partial t} = \psi \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} - AP - BP^3 - CP^5 + vE, \quad 0 < x < L, \quad 0 < t \leq \theta, \quad (3)$$

где  $L$  — толщина образца, м;  $v$  — масштабирующий коэффициент.

Масштабирующий коэффициент  $v$  вводят, чтобы обеспечить согласованность размерностей и избежать численных проблем при решении уравнения, т.е. приводят внешнее поле  $E$  к тому же масштабу, что и поляризация  $P$  (Song et al., 2003).

Для завершения математической постановки задачи необходимо указать начальное

$$P|_{t=0} = P_0, \quad 0 \leq x \leq L,$$



и граничные условия

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

где  $\lambda$  – длина экстраполяции, характеризующая скорость уменьшения поляризации на границе образца, м (Мороз, Масловская, 2018; Maslovskaya et al., 2021; Roy, Paul, Dattagupta 2010).

Классическое уравнение (3) является уравнением первого порядка по времени, что не учитывает инерционные эффекты. Поэтому при моделировании системы под действием переменного электрического поля с высокой частотой точность предсказаний этого уравнения может значительно снижаться с ростом частоты (Wang et al., 2003; Richman, Rulis, Caruso, 2017). Обобщённая модель Ландау — Халатникова — Тани, 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.

Учитывая инерцию зарядов и пространственные флуктуации системы, получаем:

$$\delta \frac{dP}{dt} = -\rho \frac{d^2 P}{dt^2} + \psi \frac{d^2 P}{dx^2} - AP - BP^3 - CP^5 + \nu E, \quad 0 < x < L, \quad 0 < t \leq \theta, \quad (4)$$

где  $\rho$  представляет собой инерцию поляризации, м·В·с<sup>2</sup>·Кл<sup>-1</sup> (Wang et al., 2003; Tang et al., 2022; Richman, Rulis, Caruso, 2017). Более подробный вывод уравнения (4) представлен в работах (Wang et al., 2003; Richman, Rulis, Caruso, 2017).

В этом случае задача дополняется начальными и граничными условиями:

$$P|_{t=0} = P_0, \quad \left. \frac{\partial P}{\partial t} \right|_{t=0} = \tilde{P}_0, \quad \left. \frac{\partial P}{\partial x} \right|_{x=0} = \frac{P}{\lambda}, \quad \left. \frac{\partial P}{\partial x} \right|_{x=L} = -\frac{P}{\lambda}. \quad (5)$$

Отметим, что уравнение вида (4) без градиентного слагаемого в (Tang et al., 2022) использовалось для описания динамики доменных стенок и спин-поляризационных взаимодействий.

Базовая термодинамическая модель, описывающая поляризационное состояние сегнетоэлектриков, формулируется как начально-граничная задача для полулинейного гиперболического уравнения с нелинейными слагаемыми третьей и пятой степеней.

Поднимая вопрос о существовании и единственности решения представленных задач, можно рассмотреть работу (Maslovskaya et al., 2021), в которой приведено доказательство существования и единственности слабого решения для начально-краевой задачи для обобщённого уравнения Ландау — Халатникова. В (Aliev, Isayeva, 2018)



рассмотрена смешанная краевая задача для нелинейных гиперболических уравнений с нелинейной диссипацией. Доказаны существование, единственность и экспоненциальное затухание глобальных решений этой задачи с фокусирующими нелинейными источниками. Кроме того, работа (Barbu, Lasiecka, Rammaha, 2005) посвящена доказательству существования и единственности слабых решений для нелинейного волнового уравнения с вырождающимся демпфированием и нелинейным источником.

В литературе уравнение (4) известно как телеграфное уравнение или волновое уравнение с затуханием в зависимости от области применения. Получение аналитического решения подобных уравнений во многих случаях вызывает существенные сложности. Поэтому оправданным является применение численных методов. Среди численных методов, используемых для решения рассматриваемого класса уравнений, можно выделить: метод конечных разностей (Li, Hu, Zhang, 2023), метод конечных элементов (Sap, 2025), спектральные методы (Abdelwahed, Chorfi, 2022). Однако наибольшее распространение получил метод сеток, реализуемый в рамках конечно-разностных схем. Особенно актуальными при решении нелинейных гиперболических уравнений такого рода являются неявные конечно-разностные схемы, обладающие лучшими свойствами устойчивости по сравнению с явными схемами. В литературе известны случаи применения неявных схем для уравнений данного типа. Например, в работе (Gao, Xie, 2012) представлены двух- и трёхслойные компактные неявные схемы для численного решения одномерных и двумерных линейных телеграфных уравнений. Приведены оценки устойчивости и погрешности. Скорости сходимости представленных схем имеют второй порядок по времени и четвертый по координате. В (Chew, Sulaiman, 2018) получено численное решение с помощью неявной конечно-разностной схемы с использованием итерационной процедуры для одномерных уравнений гиперболического типа. В рамках данной работы остановимся на классической неявной конечно-разностной схеме для волнового уравнения.

### Вычислительная схема

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

Для удобства вычислений предварительно преобразуем уравнение (4) к виду:

$$\frac{\rho}{\delta} \frac{\partial^2 P}{\partial t^2} + \frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\psi}{\delta} \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} - \frac{1}{\delta} P(A + BP^2 + CP^4) + \frac{\nu}{\delta} E, \quad (6)$$

где  $D = \frac{\psi}{\delta}$ .

При построении вычислительной схемы необходимо заменить производные функции на их конечно-разностные аналоги (Формалев, Ревизников, 2006).

Производные по времени и координате аппроксимируем соответствующими формулами центральных разностей





$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \approx \frac{u_i^{j+1} - 2u_i^j + u_i^{j-1}}{\Delta t^2} + O((\Delta t)^2) \text{ и } \frac{\partial u}{\partial t} \approx \frac{u_i^{j+1} - u_i^{j-1}}{2\Delta t} + O((\Delta t)^2), \quad (7)$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \frac{u_{i+1}^{j+1} - 2u_i^{j+1} + u_{i-1}^{j+1}}{\Delta x^2} + O((\Delta x)^2). \quad (8)$$

Более того, из-за наличия в уравнении (4) слагаемых третьей и пятой степеней проведем линеаризацию нелинейной части уравнения с последующим введением итерационной процедуры: для каждого временного слоя  $j$  заменяем  $(P_i^{(s)})^3 \approx (P_i^{(s-1)})^2 P_i^{(s)}$ ,  $(P_i^{(s)})^5 \approx (P_i^{(s-1)})^4 P_i^{(s)}$ , где  $s=1,2,\dots$  — номер итерации, начиная с некоторого  $P_i^{(s)} = P_i^j$ .

Подставляя формулы (7) и (8) в уравнение (4), получим

$$\begin{aligned} & \left( \frac{-D(\Delta t)^2}{(\Delta x)^2} \right) P_{i-1}^{j+1} + \left( \rho \cdot \frac{1}{\delta} + \Delta t + \frac{2D(\Delta t)^2}{(\Delta x)^2} + (\Delta t)^2 \frac{1}{\delta} (A + BP_i^j + CP_i^{j^4}) \right) P_i^{j+1} + \left( \frac{-D(\Delta t)^2}{(\Delta x)^2} \right) P_{i+1}^{j+1} = \\ & = -\rho \cdot \frac{1}{\delta} P_i^{j-1} + (\Delta t) P_i^j + (\Delta t)^2 \frac{1}{\delta} \cdot \nu E^j + 2\rho \frac{1}{\delta} P_i^j, \quad i = \overline{1, M-1}, \quad j = \overline{1, N-1}. \end{aligned} \quad (9)$$

Дополним (9) начальными условиями  $P_i^0 = P_0$ ,  $\frac{P_i^1 - P_i^0}{\Delta t} = \tilde{P}_0$ ,  $i = \overline{0, M}$  и несимметричными конечно-разностными аппроксимациями для производных из граничных условий

$$\frac{-3P_0^{j+1} + 4P_1^{j+1} - P_2^{j+1}}{2(\Delta x)} = \frac{P_0^{j+1}}{\lambda}, \quad \frac{3P_M^{j+1} - 4P_{M-1}^{j+1} + P_{M-2}^{j+1}}{2(\Delta x)} = -\frac{P_M^{j+1}}{\lambda}, \quad j = \overline{1, N-1}. \quad (10)$$

Комбинирование метода конечных разностей с итерационной процедурой позволяет решать прикладные задачи без утраты точности всей вычислительной схемы. В результате построенная схема приводит к системе линейных алгебраических уравнений. При этом первое и последнее уравнения для каждого временного слоя необходимо скорректировать с учётом граничных условий. Общая система алгебраических уравнений решается методом Гаусса, что гарантирует решение с погрешностью, определяемой точностью вычислений. Неявная схема для линейного волнового уравнения обладает абсолютной устойчивостью и обеспечивает первый порядок точности по времени и второй по координате.

## Результаты вычислительных экспериментов

В одноосных сегнетоэлектриках, к которым относятся такие материалы, как ниобат лития, ниобат бария стронция и другие, существует лишь два возможных направления вектора спонтанной поляризации, которые расположены вдоль единственной



полярной оси. В результате их доменная структура состоит из доменов с противоположно направленными векторами поляризации, разделённых  $180^\circ$  доменными стенками. Напротив, в многоосных сегнетоэлектриках, например, в титанате бария или титанате свинца, доменная структура значительно сложнее. Это связано с тем, что вектор спонтанной поляризации может быть ориентирован вдоль одной из нескольких доступных кристаллографических полярных осей.

Чтобы поляризацию можно было считать однокомпонентной для титаната свинца, необходимо, чтобы вся пленка оказалась в одном доменном состоянии, то есть все диполи в материале были ориентированы в одну сторону.

Будем считать, что в выращенной пленке  $\text{PbTiO}_3$  кристаллическая ось  $c$  направлена перпендикулярно подложке. Тогда спонтанная поляризация может быть направлена либо вверх, либо вниз относительно подложки. Поле приложено перпендикулярно плоскости пленки, то есть вдоль оси  $c$  (между верхним и нижним электродами). Переключение доменов происходит в два этапа: начальное зарождение и рост сегнетоэлектрического домена, за которым следует расширение домена посредством бокового движения доменных стенок, пока направление поляризации во всей области не изменится на противоположное (Wang et al., 2003).

В качестве объекта исследования рассмотрим тонкие пленки титаната свинца  $\text{PbTiO}_3$ . Входные параметры, которые использовались при моделировании (Рабе, 2015; Tang et al., 2022; Maslovskaya et al., 2021), представлены в таблице.

Таблица / Table

### Параметры материала $\text{PbTiO}_3$

### Material Parameters of $\text{PbTiO}_3$

Параметры / Parameters	Значение / Numerical value	Единицы измерения / Unit
Толщина пленки / Film Thickness, $L$	1—30	нм/nm
Амплитуда поля / Field Amplitude, $E_0$	$2 \times 10^5$ — $5 \times 10^5$	$\text{В} \cdot \text{м}^{-1} / \text{V} \cdot \text{м}^{-1}$
Начальное значение поляризации / Initial Polarization Value, $P_0$ , $\bar{P}_0$	0	$\text{Кл} \cdot \text{м}^{-2} / \text{C} \cdot \text{м}^{-2}$
Кинетический коэффициент / Kinetic Coefficient, $K$	$1 \times 10^{-7}$	$\text{м} \times \text{с} \cdot \Phi^{-1} / \text{м} \times \text{с} \cdot \text{F}^{-1}$
Инерция поляризации / Polarization Inertia, $\rho$	$10^9$	$\text{м} \cdot \text{В} \cdot \text{с}^2 \cdot \text{Кл}^{-1} / \text{м} \cdot \text{В} \cdot \text{с}^2 \cdot \text{C}^{-1}$
Градиентный коэффициент / Gradient Coefficient, $\psi$	$0.5 \times 10^{-9}$	$\text{м}^3 \cdot \Phi^{-1} / \text{м}^3 \cdot \text{F}^{-1}$
Частота поля / Field Frequency, $f$	50—200	Гц / Hz
Время эксперимента / Time, $\theta$	0.03	с / s
Термодинамические параметры (при $20^\circ \text{C}$ ) / Thermodynamic Parameters (at $20^\circ \text{C}$ )		
$A$	$-1.74 \times 10^8$	$\text{м} \cdot \Phi^{-1} / \text{м} \cdot \text{F}^{-1}$
$B$	$-0.73 \times 10^8$	$\text{м}^5 \cdot \text{Кл}^{-2} \times \Phi^{-1} / \text{м}^5 \cdot \text{C}^{-2} \times \text{F}^{-1}$
$C$	$2.6 \times 10^8$	$\text{м}^9 \cdot \text{Кл}^{-4} \times \Phi^{-1} / \text{м}^9 \cdot \text{C}^{-4} \times \text{F}^{-1}$

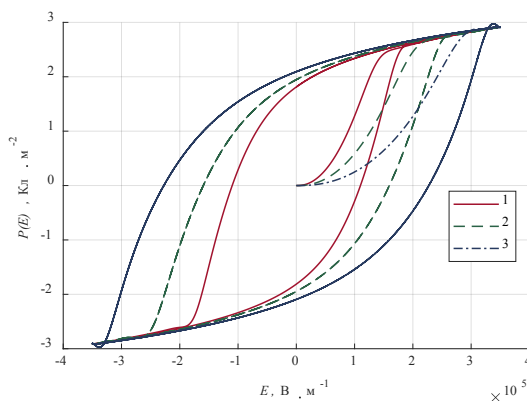


Проведенный вычислительный эксперимент позволяет исследовать динамику гистерезисных свойств сегнетоэлектрика при различных условиях. Также показаны временная эволюция системы, скорость переключения поляризации и влияние частоты и амплитуды приложенного поля на форму гистерезисной петли.

Далее представлены результаты моделирования, демонстрирующие основные закономерности и особенности поведения системы. В ходе исследования проведен анализ зависимости площади петли гистерезиса от ключевых параметров системы — толщины пленки, амплитуды и частоты внешнего электрического поля. Для этого использовалась обобщенная модель Ландау — Халатникова — Тани (4)–(5). Результаты моделирования представлены на рисунках 1–3. Следует отметить, что в работах (Wang et al., 2003; Richman, Rulis, Caruso, 2017) рассматриваемая модель уже применялась для описания поведения материала как функции, зависящей от частоты и амплитуды приложенного поля. Изменение частоты и амплитуды приводит к изменению формы петли. С увеличением этих параметров петля становится более широкой, что указывает на увеличение потерь энергии и более медленное переключение поляризации.

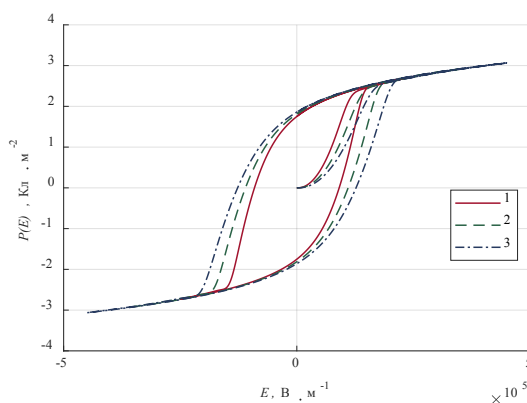
Кроме того, наблюдается зависимость угла наклона петли гистерезиса от амплитуды  $E_0$  и частоты  $f$  внешнего электрического поля. При уменьшении значений данных параметров петля гистерезиса приобретает более вертикальную ориентацию и характеризуется менее плавной формой.

Некоторые исследования (Hong, Fang, 2008) также подчеркивают важность влияния толщины пленки на проявление сегнетоэлектрических свойств: при уменьшении толщины до определённого предела характерные особенности сегнетоэлектриков, такие как гистерезис, исчезают, и их поведение становится похожим на поведение обычных диэлектриков. Зависимость поляризационного гистерезиса от толщины пленки, представленная на рисунке 3. Такое изменение электрофизических характеристик может существенно влиять на эффективность функционирования электронных устройств, основанных на использовании полярных диэлектриков.



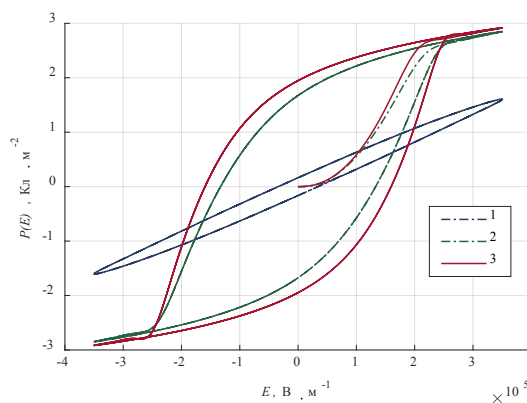
**Рис. 1.** Гистерезисная зависимость  $P(E)$  для пленки  $\text{PbTiO}_3$  при варьировании частоты внешнего поля  $f = 50$  Гц (1),  $f = 100$  Гц (2),  $f = 200$  Гц (3)

**Fig. 1.** Hysteresis dependence  $P(E)$  for  $\text{PbTiO}_3$  film for the variation of the external field frequency  $f = 50$  Hz (1),  $f = 100$  Hz (2),  $f = 200$  Hz (3)



**Рис. 2.** Гистерезисная зависимость  $P(E)$  для пленки  $\text{PbTiO}_3$  при варьировании амплитуды внешнего поля  $E_0 = 2 \cdot 10^{-5} \text{ В} \cdot \text{м}^{-1}$  — (1);  $E_0 = 3 \cdot 10^{-5} \text{ В} \cdot \text{м}^{-1}$  — (2);  $E_0 = 5 \cdot 10^{-5} \text{ В} \cdot \text{м}^{-1}$  — (3)

**Fig. 2.** Hysteresis dependence  $P(E)$  for  $\text{PbTiO}_3$  film for the variation of the amplitude of the external field  $E_0 = 2 \cdot 10^{-5} \text{ В} \cdot \text{м}^{-1}$  — (1);  $E_0 = 3 \cdot 10^{-5} \text{ В} \cdot \text{м}^{-1}$  — (2);  $E_0 = 5 \cdot 10^{-5} \text{ В} \cdot \text{м}^{-1}$  — (3)



**Рис. 3.** Гистерезисная зависимость  $P(E)$  при заданной толщине пленки  $\text{PbTiO}_3$   $L = 2 \text{ нм}$  — (1);  $L = 10 \text{ нм}$  — (2);  $L = 30 \text{ нм}$  — (3)

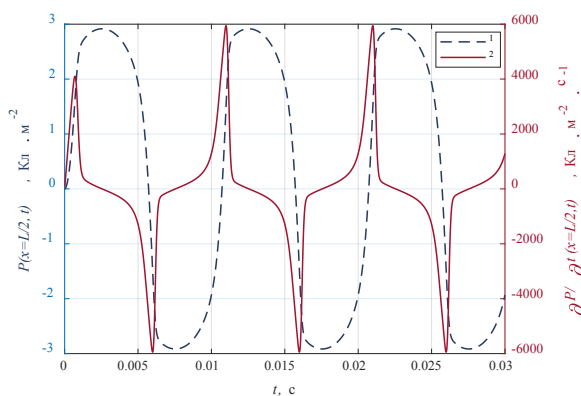
**Fig. 3.** Hysteresis dependence  $P(E)$  for a given thickness of the  $\text{PbTiO}_3$  film  $L = 2 \text{ нм}$  — (1);  $L = 10 \text{ нм}$  — (2);  $L = 30 \text{ нм}$  — (3)



Также в рамках исследования выполнено сравнение графиков переключения поляризации  $P$  и ее скорости  $\frac{\partial P}{\partial t}$  при  $x=L/2$  ( $L=30\text{нм}$ ), рассчитанных с использованием классической модели Ландау — Халатникова и обобщённой модели Ландау — Халатникова — Тани. В целом форма кривых остаётся схожей, что указывает на сохранение основного механизма переключения поляризации в обеих моделях. Однако кривая скорости переключения поляризации на рисунке 4 демонстрирует плавные и гладкие переходы кривой по сравнению с кривой  $\frac{\partial P}{\partial t}$  на рисунке 5, что приводит к меньшей амплитуде колебаний и более низкой скорости переключения. Вместе с тем, классическая модель Ландау — Халатникова не позволяет воспроизвести резонансный пик, связанный с диэлектрическим откликом сегнетоэлектрика при воздействии внешнего поля.

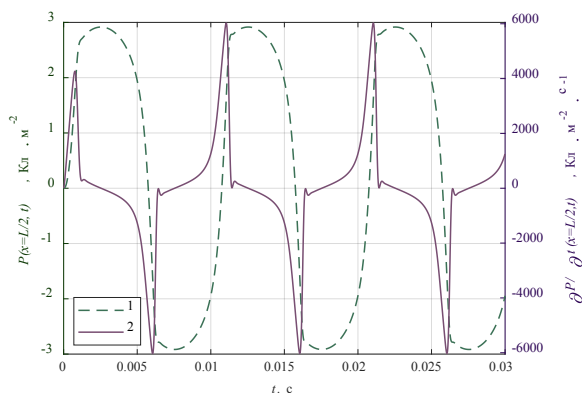
Как отмечают авторы (Wang et al., 2003; Richman, Rulis, Caruso, 2017) указанное ограничение становится особенно значимым при моделировании поведения материалов в условиях высокочастотного возбуждения  $f > 100$  Гц.

Полученные результаты моделирования динамики поляризации и скорости её переключения в тонкой пленке титаната бария демонстрируют, что использование расширенных физических моделей, таких как модель Ландау — Халатникова — Тани, позволяет более точно описывать сложные фазовые переходы и гистерезисные процессы в сегнетоэлектрических материалах по сравнению с классическими подходами. В отличие от классической модели Ландау–Халатникова, в которой переходы поляризации имеют более резкий и дискретный характер, расширенная модель учитывает дополнительные факторы, такие как пространственно-временная неоднородность, релаксационные процессы и взаимодействие доменов, что приводит к более реалистичной динамике переключения поляризации.



**Рис. 4.** Эволюция поляризации  $P$  и ее скорости  $\partial P/\partial t$  при фиксированном  $x=L/2$ , полученная с помощью классической модели Ландау–Халатникова

**Fig. 4.** Evolution of polarization  $P$  and its velocity  $\partial P/\partial t$  at fixed  $x=L/2$ , obtained using the classical Landau–Khalatnikov model



**Рис. 5.** Эволюция поляризации  $P$  и ее скорости  $\partial P/\partial t$  при фиксированном  $x=L/2$ , полученная с помощью модели Ландау — Халатникова — Тани

**Fig. 5.** Evolution of polarization  $P$  and its velocity  $\partial P/\partial t$  at fixed  $x=L/2$ , obtained using the classical Landau — Khalatnikov — Tani model

Эти особенности важны при исследовании наноразмерных и тонкопленочных структур, где проявляются масштабно-зависимые эффекты, влияющие на фазовые переходы и устойчивость поляризованного состояния. Более плавные и сглаженные изменения поляризации, наблюдаемые в модели Ландау — Халатникова — Тани, указывают на её способность учитывать не только термодинамические, но и кинетические эффекты, связанные с динамикой доменных стенок и локальными флуктуациями.

## Заключение

В данной работе представлены результаты численного моделирования динамики переключения поляризации в сегнетоэлектриках на основе обобщённой модели Ландау — Халатникова — Тани, учитывающей инерционные эффекты и пространственные флуктуации. Разработанная модель применена для анализа поведения сегнетоэлектрических материалов с фазовым переходом первого рода под воздействием синусоидального электрического поля, что позволило детально изучить гистерезисные характеристики материала, включая форму петли гистерезиса, скорость переключения поляризации и влияние внешних параметров, таких как частота и амплитуда поля.

Полученные результаты продемонстрировали, что увеличение частоты внешнего электрического поля приводит к расширению гистерезисной петли, увеличению коэрцитивного поля и изменению её формы, что указывает на фазовый сдвиг между полем и поляризацией. С ростом амплитуды поля наблюдается увеличение ширины петли и более раннее достижение насыщения поляризации, что согласуется с физическими ожиданиями и экспериментальными данными. Анализ скорости переключения



поляризации выявил резкие пики, связанные с инерцией параметра порядка, что подчеркивает важность учёта второго порядка производных по времени в модели.

Таким образом, обобщённая модель Ландау — Халатникова — Тани позволяет эффективно описывать сложные динамические процессы в сегнетоэлектриках, включая нелинейные эффекты и влияние внешнего электрического поля.

### Список источников / References

1. Рабе, К.М. (Ред.). (2015). *Физика сегнетоэлектриков: современный взгляд*. Москва: Лаборатория знаний, 443 с.  
Rabe, K.M. (Ed.). (2015). *Physics of Ferroelectrics: A Modern Perspective*. Moscow: Laboratory of Knowledge, 443 p. (In Russ.)
2. Мороз, Л.И., Масловская, А.Г. (2018). Метод прогноза и коррекции в задаче численного моделирования фрактальной динамики доменных границ сегнетоэлектриков. *Вестник Амурского государственного университета. Серия: Естественные и экономические науки*, (83), 3—8.  
Moroz, L.I., Maslovskaya, A.G. (2018). Method of prediction and correction in the problem of numerical modeling of fractal dynamics of ferroelectric domain boundaries. *Vestnik Amurskogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya: Estestvennye i ekonomicheskie nauki*, (83), 3—8. (In Russ.)
3. Ducharme, B., Newell, B., Sebald, G. (2020). Unique fractional derivative operator to simulate all dynamic piezoceramic dielectric manifestations: from aging to frequency-dependent hysteresis. *IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control*, 67(1), 197—206. <https://doi.org/10.1109/TUFFC.2019.2938891>
4. Li, Z., Zhang, Y., Wen, H., Dong, C. (2024). Strain and ferroelectric polarization influence on perpendicular magnetic anisotropy of CoFe<sub>3</sub>N/BaTiO<sub>3</sub> heterostructure. *Results in Physics* 57, 107388. <https://doi.org/10.1016/j.rinp.2024.107388>
5. Scott, J.F. (2000). *Ferroelectric Memories*. Heidelberg: Springer Science & Business Media, 248 p.
6. Wang, B., Xia, R., Fan, H., Woo, C.H. (2003). Dynamic process of domain switching in ferroelectric films. *J. Appl. Phys.*, 94, 3384. <https://doi.org/10.1063/1.1599958>
7. Mazur, O.Y., Stefanovich, L.I., Yurchenko, V.M. (2016). Effect of a weak external electric field on the kinetics of the ordering of ferroelectrics upon first-order phase transitions. *Phys. Solid State* 58, 1596—1604. <https://doi.org/10.1134/S1063783416080205>
8. Zhang, R., Lin, C., Dong, H. *et al.* (2025). Compositionally-graded ferroelectric thin films by solution epitaxy produce excellent dielectric stability. *Nature Communications*, 16(98), 1—10. <https://doi.org/10.1038/s41467-024-55411-7>
9. Landau, L.D., Ginzburg, V.L. (1965). On the theory of superconductivity. *Collected Papers of L.D. Landau*, 546—568. <https://doi.org/10.1016/B978-0-08-010586-4.50078-X>
10. Akshayveer, A., Buroni, F.C., Melnik, R., Rodriguez Tembleque, L., Saez, A. (2025). Environment friendly technologies with lead free piezoelectric materials: A review of recent developments, applications, and modelling approaches. *arXiv preprint*, arXiv:2502.13929. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2502.20250>
11. Bain, A.K., Chand, B. (2017). *Ferroelectrics: Principles and Applications*. Chennai: SPi Global Private Limited, 317 p.
12. Alessandri, C., Pandey, P., Abusleme, A., Seabaugh, A. (2019). Monte Carlo Simulation of Switching Dynamics in Polycrystalline Ferroelectric Capacitors. *Transactions on Electron Devices*, 66(8), 3527—3534. <https://doi.org/10.1109/TED.2019.2922268>



13. Cao, W. (2004). Phenomenological theories of ferroelectric phase transitions. *British Ceramic Transactions*, 103(2), 71—75. <https://doi.org/10.1179/096797804225012774>
14. Uchino, K. (1997). *Ferroelectric Devices*. New York: Marcel Dekker. 312 p.
15. Song, T.K., Kim, J.S., Kim, M.H., Lim, W., Kim, Y.S., Lee, J.C. (2003). Landau–Khalatnikov simulations for the effects of external stress on the ferroelectric properties of Pb(Zr, Ti)O<sub>3</sub> thin films. *Thin Solid Films*, 424(1), 84—87. [https://doi.org/10.1016/S0040-6090\(02\)00920-3](https://doi.org/10.1016/S0040-6090(02)00920-3)
16. Roy, M.K., Swayambhoo M. (2020). Stochastic Dynamics of 180° domains. *Journal of Mathematical Control Science and Applications*, 6(1), 93—105.
17. Chen, L.Q. (2002). Phase-field models for microstructure evolution in ferroelectric materials. *Annual Review of Materials Research*, 32, 113—140. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2023.112510>
18. Tang, P., Iguchi, R., Uchida, K., Bauer, G.E.W. (2022). Excitations of the ferroelectric order. *Physical Review B*, 106, L081105. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.106.L081105>
19. He, R., Wang, H., Liu, F., Liu, S., Liu, H., Zhong, Z. (2023). Unconventional ferroelectric domain switching dynamics in CuInP<sub>2</sub>S<sub>6</sub> from first principles. *Physical Review B*, 108, 024305. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.108.024305>
20. Maslovskaya, A.G., Moroz, L.I., Chebotarev, A.Y., Kovtanyuk, A.E. (2021). Theoretical and numerical analysis of the Landau–Khalatnikov model of ferroelectric hysteresis. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, 93, 105524. <https://doi.org/10.1016/j.cnsns.2020.105524>
21. Roy, M.K., Paul, J., Dattagupta, S. (2010). Domain dynamics and fractal growth analysis in thin ferroelectric films. *IEEE Xplore*, 108, 014108(4). <https://doi.org/10.1063/1.3456505>
22. Richman, M.S., Rulis P., Caruso A.N. (2017). Ferroelectric system dynamics simulated by a second-order Landau model. *Journal of Applied Physics*, 122, 094101. <https://doi.org/10.1063/1.5000139>
23. Aliev, A.B., Isayeva, S.E. (2018). The Existence and Behavior of Global Solutions to a Mixed Problem with Acoustic Transmission Conditions for Nonlinear Hyperbolic Equations with Nonlinear Dissipation. *Dokl. Math.*, 98, 555—558. <https://doi.org/10.1134/S1064562418070062>
24. Barbu, V., Lasiecka, I., Rammaha, M.A. (2005). Existence and uniqueness of solutions to wave equations with nonlinear degenerate damping and source terms. *Control and Cybernetics*, 34(3).
25. Li, P.-W., Hu, S., Zhang, M. (2023). Numerical Solutions of the Nonlinear Dispersive Shallow Water Wave Equations Based on the Space–Time Coupled Generalized Finite Difference Scheme. *Applied Sciences*, 13(14), 8504. <https://doi.org/10.3390/app13148504>
26. Sap, D. (2025). A hybrid isogeometric and finite element method: NURBS-enhanced finite element method for hexahedral meshes. *arXiv preprint*, arXiv:2506.13694. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2506.13694>
27. Abdelwahed, M., Chorfi, N. (2022). Numerical resolution of the wave equation using the spectral method. *Boundary Value Problems*, 2022, 15. <https://doi.org/10.1186/s13661-022-01601-5>
28. Gao, Z., Xie, S. (2012). Fourth-order compact difference and alternating direction implicit schemes for telegraph equations. *Computer Physics Communications*, 183(3), 552—569. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2011.11.023>
29. Chew, J.V.L., Sulaiman, J. (2018). Implicit finite difference solution of one-dimensional porous medium equations using Half-Sweep Newton-Explicit Group iterative method. *Journal of Engineering and Applied Sciences*, 13(5), 1286—1290.
30. Формалев, В.Ф., Ревизников, Д.Л. (2006). Численные методы. Москва: ФИЗМАТЛИТ, 400 с. Formalev, V.F., Reyznikov, D.L. (2006). *Numerical Methods*. Moscow: FIZMATLIT, 400 p. (In Russ.)





31. Hong, J., Fang, D. (2008). Size-dependent ferroelectric behaviors of BaTiO<sub>3</sub> nanowires. *Applied Physics Letters*, 92, 012906. <https://doi.org/10.1063/1.2830662>

### **Информация об авторах**

*Мороз Любовь Игоревна*, кандидат физ.-мат. наук, доцент кафедры математического анализа и моделирования, Институт компьютерных и инженерных наук, Амурский государственный университет, г. Благовещенск, Российская Федерация, ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-4450-3200>, e-mail: [lubovep@mail.ru](mailto:lubovep@mail.ru)

*Дорошков Олег Сергеевич*, бакалавр по направлению подготовки 01.03.02 — «Прикладная математика и информатика», Институт компьютерных и инженерных наук, Амурский государственный университет, г. Благовещенск, Российская Федерация, e-mail: [oleg2003dos@gmail.com](mailto:oleg2003dos@gmail.com)

### **Information about the authors**

*Moroz Lyubov Igorevna*, Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor of the Department of Mathematical Analysis and Modeling, Institute of Computer and Engineering Sciences, Amur State University, Blagoveshchensk, Russian Federation, ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-4450-3200>, e-mail: [lubovep@mail.ru](mailto:lubovep@mail.ru)

*Doroshkov Oleg Sergeevich*, Bachelor's degree in Applied Mathematics and Computer Science (01.03.02), Institute of Computer and Engineering Sciences, Amur State University, Blagoveshchensk, Russian Federation, e-mail: [oleg2003dos@gmail.com](mailto:oleg2003dos@gmail.com)

### **Вклад авторов**

Мороз Л.И. — идеи исследования, аннотирование и написание рукописи, контроль за проведением исследования.

Дорошков О.С. — применение численных методов, проведение экспериментов, написание программы, сбор и анализ данных, визуализация полученных результатов.

Все авторы приняли участие в обсуждении результатов и согласовали окончательный текст рукописи.

### **Contribution of the authors**

Moroz L.I. — research concept, annotation, manuscript writing, supervision of the study.

Doroshkov O.S. — application of numerical methods, conducting experiments, programming, data collection and analysis, visualization of results.

All authors participated in the discussion of results and approved the final manuscript text.

### **Конфликт интересов**

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

### **Conflict of interest**

The authors declare no conflict of interest.

Поступила в редакцию 03.08.2025

Поступила после рецензирования 13.08.2025

Принята к публикации 15.08.2025

Опубликована 30.09.2025

Received 2025.08.03

Revised 2025.08.13

Accepted 2025.08.15

Published 2025.09.30