

УДК 51-7:519.6

Мороз Любовь Игоревна

Амурский государственный университет

г. Благовещенск, Россия

E-mail: lubover@mail.ru**Moroz Lubov Igorevna**

Amur State University

Blagoveshchensk, Russia

E-mail: lubover@mail.ru**Масловская Анна Геннадьевна**

Амурский государственный университет

г. Благовещенск, Россия

E-mail: maslovskayaag@mail.ru**Maslovskaya Anna Gennadievna**

Amur State University

Blagoveshchensk, Russia

E-mail: maslovskayaag@mail.ru

**МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ПОЛЯРИЗАЦИОННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК
СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКОВ В РАМКАХ ТЕОРИИ ЛАНДАУ –
ГИНЗБУРГА – ДЕВОНШИРА**

**MATHEMATICAL MODELS OF FERROELECTRIC POLARIZATION CHARACTERISTICS
DESCRIBED WITHIN THE FRAMEWORK OF THE LANDAU – GINZBURG
– DEVONSHIER THEORY**

Аннотация. В статье представлен обзор и реализация математических моделей поляризационных характеристик сегнетоэлектриков в рамках термодинамической теории Ландау – Гинзбурга. Математические модели переключения поляризации в сегнетоэлектриках формализуются с помощью нескольких классов дифференциальных задач. На основе разностных методов построены вычислительные схемы для различных модификаций модели Ландау – Халатникова. Проведено численное моделирование поляризационного гистерезиса в сегнетоэлектриках с фазовым переходом первого рода. Результаты расчетов, полученных в ППП Matlab, приведены в сравнении с экспериментальными данными.

Abstract. The paper presents the overview and implementation of mathematical models of ferroelectric polarization characteristics within the framework of the Landau – Ginzburg theory. Mathematical models of polarization switching in ferroelectrics are formalized by means of several types of differential problems. Based on difference methods the computational schemes are constructed for various modifications of the Landau – Khalatnikov model. Numerical simulation of the polarization hysteresis in ferroelectrics with the first-order phase transition is performed. The computational results obtained in Matlab are compared with the experimental data.

Ключевые слова: уравнение Ландау – Халатникова, конечно-разностная схема, итерационная процедура, модель сегнетоэлектрического гистерезиса.

Key words: Landau – Khalatnikov equation, finite-difference scheme, iterative procedure, model of ferroelectric hysteresis.

Введение

В настоящее время развитие методов математического моделирования и разработка вычислительных алгоритмов для их реализации предоставляют широкие возможности для изучения и прогнозирования свойств многих сложных физических систем. В физике твердого тела к таким системам относят сегнетоэлектрические материалы. Под сегнетоэлектриками понимают класс полярных диэлектриков, обладающих спонтанной поляризацией, которую можно переориентировать посредством внешнего электрического поля. Возможность переключения поляризации очень важна для различного использования сегнетоэлектриков в качестве функциональных элементов в оперативной памяти, датчиках, конденсаторах, оптических переключателях и т.д. [1]

Термодинамической теорией, позволяющей количественно описать поведение материала в окрестности фазового перехода первого и второго рода, является теория структурных фазовых переходов Ландау. На основе этой теории Гинзбург и Девоншир развили феноменологическую термодинамическую теорию сегнетоэлектричества [1]. Она описывает структурные фазовые переходы, ассоциированные с изменением порядка расположения атомов или с изменением кристаллографической сингонии образца.

Теория Ландау – Гинзбурга – Девоншира применяется для оценки сегнетоэлектрических характеристик с использованием концепции модели типа Изинга в рамках эффективной теории поля [2-4] или с моделированием Монте-Карло с помощью алгоритма Метрополиса [5, 6].

Другое, не менее важное направление – использование теории фазовых переходов Ландау для моделирования переключения поляризации сегнетоэлектриков и петель диэлектрического гистерезиса. Одной из пионерных работ в данном направлении является исследование [7]. Исааком Халатниковым был развит термодинамический подход для описания состояния и динамического поведения поляризации сегнетоэлектриков во внешнем поле [8]. Предложенное уравнение вошло в теорию сегнетоэлектричества как нестационарное уравнение Ландау – Халатникова, обобщенный аналог которого (с введенным градиентным слагаемым) соответствует уравнению Ландау – Гинзбурга.

Классическое уравнение Ландау – Халатникова (в постановке нестационарного обыкновенного дифференциального уравнения) было в центре внимания исследований при изучении характера переключения и явления гистерезиса в тонких сегнетоэлектрических пленках [8-10], частичного переключения под действием внешнего напряжения [10, 11], влияния электрокалорических и пирозлектрических эффектов на сегнетоэлектрический фазовый переход [12] и др. Однако классическое уравнение не учитывает пространственные флуктуации и неоднородность распределения поляризации.

Недостаток квазидинамического дифференциального уравнения в постановке краевой задачи для обыкновенного дифференциального уравнения II порядка [1, 13] заключается в том, что оно лишь косвенно зависит от времени. Обобщенное уравнение Ландау – Халатникова является кубическо-квинтическим уравнением с частными производными параболического типа (уравнение класса «реакция-диффузия»). Редукция уравнения до кубического представления применяется для моделирования переключения поляризации в сегнетоэлектриках с фазовым переходом II рода [14, 15].

При решении начально-краевых задач для уравнений Гинзбурга – Ландау основное внимание исследований сосредоточено на использовании приближенных методов. В [16] спектральный метод, основанный на быстром преобразовании Фурье, был применен для кубического уравнения Гинзбурга – Ландау. Преимущество спектральных методов – высокая точность. В то же время метод конечных разностей пригоден для параллельной реализации, – например, как это было выполнено в [17] для

кубико-квинтического уравнения Гинзбурга – Ландау. Построение конечно-разностных схем для нелинейных уравнений требует баланса между высокой точностью аппроксимации и обеспечением численной устойчивости. Вопрос существования и единственности решения начально-краевых задач для кубико-квинтической модели исследован в работах [18, 19].

Цель нашей работы – систематизация и реализация математических моделей поляризационных характеристик сегнетоэлектриков в рамках термодинамической теории Ландау – Гинзбурга.

Математические постановки задачи

Основной тезис термодинамической теории сегнетоэлектриков состоит в том, что состояние полярных диэлектриков можно определить набором термодинамических характеристик: температурой, поляризацией, электрическим полем, напряжением и деформацией. Феноменологически описания вводят заданием свободной энергии – термодинамической функции, зависящей от параметра порядка (плотности свободной энергии) – F , Дж/м³. В случае одноосных сегнетоэлектриков свободную энергию можно разложить по степеням единственной компоненты поляризации (для упрощения модели полем деформаций можно пренебречь):

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

где $P=P(x,t)$ – спонтанная поляризация, Кл/м²; $A=A_0(T - T_{CW})$, м/Ф; B , м⁵/(Кл²·Ф); C , м⁹/(Кл⁴·Ф) – термодинамические постоянные, $E=E(t)$ – напряженность электрического поля, В/м.

Характер сегнетоэлектрического фазового перехода, а также непрерывное или разрывное поведение поляризации при $T < T_{CW}$ определяются знаком константы B (1). Если $B < 0$, то имеет место скачкообразная зависимость поляризации от температуры, и мы можем наблюдать фазовый переход I рода, тогда как $B > 0$ соответствует непрерывной зависимости поляризации от температуры и фазовому переходу II рода. В случае фазового перехода II рода слагаемым, содержащим пятую степень в выражении для плотности свободной энергии (1), можно пренебречь. Значения термодинамических параметров A_0 и C положительны для всех известных сегнетоэлектриков [1]. Далее для определенности будем рассматривать сегнетоэлектрики с фазовыми переходами I рода.

Простейшей математической моделью гистерезисной зависимости поляризации от внешнего поля можно считать прямое следствие из общего представления равновесной конфигурации как минимума свободной энергии: $\frac{\partial F}{\partial P} = 0$, которое задается нелинейным алгебраическим уравнением

$$A_0(T - T_{CW})P + BP^3 + CP^5 - E = 0, \quad (2)$$

где поле E может быть записано в виде периодической зависимости $E(t) = E_0 \sin(\omega t)$.

Здесь E_0 – амплитуда поля, В/м; $\omega = 2\pi f$ – радиальная частота, рад/с; f – частота колебаний электрического поля, Гц.

Нестационарное уравнение Ландау – Халатникова описывает динамику изменения полярного состояния сегнетоэлектрика в рамках теории Ландау – Гинзбурга – Девоншира [8]:

$$\delta \frac{dP}{dt} = -\frac{\partial F}{\partial P}, \text{ В/м}, \quad (3)$$

где δ – кинетический коэффициент, В·с/Кл (или м·с/Ф).

Заменяя плотность свободной энергии в (3) соответствующим выражением (1), можно получить следующее дифференциальное уравнение – уравнение Ландау – Халатникова:

$$\delta \frac{dP}{dt} = -A_0(T - T_{CW})P - BP^3 - CP^5 + E. \quad (4)$$

Сегнетоэлектрические материалы состоят из доменов, которые на практике часто переключаются в значительно меньшем электрическом поле, чем это описано в (4), т.е. экспериментальное ко-

эрцитивное поле может быть меньше теоретического. Для соответствия равенства (4) экспериментальным данным, член электрического поля, следуя [10, 11, 20], умножается на безразмерный коэффициент масштабирования ν , так что (4) можно записать в виде

$$\delta \frac{dP}{dt} = -A_0(T - T_{CW})P - BP^3 - CP^5 + \nu E. \quad (5)$$

Динамическое уравнение (5), дополненное начальным условием $P(t_0) = P_0$, позволяет описать гистерезисную зависимость P от внешнего поля E .

Общий подход Ландау основан на теории самосогласованного поля, и, как следствие, уравнение (5) не учитывает флуктуации параметра порядка – поляризации. Следуя концепции Гинзбурга [1], для описания флуктуации в сегнетоэлектриках можно расширить формулу (5), добавив градиентное слагаемое или корреляционную энергию $\psi(\nabla P)^2$, где ψ – положительная термодинамическая постоянная, $\text{м}^3/\Phi$. Предполагая пространственную зависимость поляризации только от переменной x , для случая одной из составляющих поляризации обобщенное уравнение Ландау – Халатникова можно представить в следующем виде:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + aP + bP^3 - cP^5 + \sigma E(t), \quad 0 < x < L, \quad 0 < t \leq \theta, \quad (6)$$

где L – толщина образца, м; $a = -A/\delta$, $b = -B/\delta$, $c = C/\delta$ – положительные константы; рассматривая сегнетоэлектрики с фазовым переходом I рода ($b < 0$) и полагая, что некоторая текущая температура T , – например, комнатная температура $T < T_{CW}$; $\sigma = \nu/\delta$; $D = \psi/\delta$ – термодинамический параметр, представляющий собой комбинацию ранее введенных параметров, имеющий смысл и размерность коэффициента диффузии, $\text{м}^2/\text{с}$.

Для замыкания математической постановки задачи обобщенное уравнение Ландау – Халатникова (6) необходимо дополнить начальными

$$P(x, t_0) = P_0(x), \quad 0 \leq x \leq L, \quad (7)$$

граничными условиями:

для объемного образца

$$P(0, t) = P(L, t) = P_b \sin(\omega t), \quad 0 \leq t \leq \theta \quad (8)$$

и пленки

$$\left. \frac{\partial P}{\partial x} \right|_{x=0} = \frac{P}{\lambda}, \quad \left. \frac{\partial P}{\partial x} \right|_{x=L} = -\frac{P}{\lambda}, \quad 0 \leq t \leq \theta, \quad (8')$$

где λ – характерный параметр (длина экстраполяций), м.

Альтернативным вариантом, представленным в литературе [13], является квазидинамический аналог уравнения (6):

$$D \frac{d^2 P}{dx^2} + aP + bP^3 - cP^5 + \sigma E(t) = 0, \quad 0 < x < L, \quad 0 < t \leq \theta \quad (9)$$

– обыкновенное дифференциальное уравнение второго порядка, которое требует задания только граничных условий.

Таким образом, фундаментальная термодинамическая модель, описывающая поляризационное состояние сегнетоэлектрических материалов, задается начально-граничной задачей для полулинейного параболического уравнения («cubic-quintic») типа «реакция – диффузия».

Поскольку построение точного решения уравнения Ландау – Гинзбурга – Девоншира – Халатникова вызывает затруднения у исследователей, предпочтителен является поиск приближенного решения.

Вычислительные схемы

Для поиска численного решения уравнения параболического типа (6) воспользуемся неявной пятиточечной трехслойной схемой [19].

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 Δx – шаг по координате, Δt – шаг по времени, построим вычислительную схему, которая после ряда преобразований может быть выражена следующим образом:

$$\frac{P_i^{j+1} - P_i^j}{\Delta t} = D \left(\frac{P_{i+1}^{j+1} - 2P_i^{j+1} + P_{i-1}^{j+1}}{2(\Delta x)^2} + \frac{P_{i+1}^j - 2P_i^j + P_{i-1}^j}{2(\Delta x)^2} \right) + \varphi(P_i^{j+1}) + \sigma E^{j+1}, \quad (10)$$

$$i = \overline{1, M-1}, \quad j = 0;$$

$$\frac{3P_i^{j+1} - 4P_i^j + P_i^{j-1}}{2\Delta t} = D \left(\frac{P_{i+1}^{j+1} - 2P_i^{j+1} + P_{i-1}^{j+1}}{(\Delta x)^2} \right) + \varphi(P_i^{j+1}) + \sigma E^{j+1}, \quad (11)$$

$$i = \overline{1, M-1}, \quad j = \overline{1, N-1},$$

где $\varphi(P_i^{j+1}) = aP_i^{j+1} + b(P_i^{j+1})^3 - c(P_i^{j+1})^5$.

В данном случае применим итерационную схему, что связано с наличием нелинейных членов в уравнении «реакция – диффузия». Формируем последовательность приближений $P_i^{(s)}$, сходящуюся к P_i^{j+1} для каждого момента времени t^{j+1} , $j = \overline{0, N-1}$. В качестве первоначального приближения используем формулы $(P_i^{(s)})^3 \approx (P_i^{(s-1)})^2 P_i^{(s)}$, $(P_i^{(s)})^5 \approx (P_i^{(s-1)})^4 P_i^{(s)}$, где номер итерации $s = 1, 2, \dots$, начиная с $(P_i^{(0)}) \approx P_i^j$. Комбинация схем конечных разностей с итерационной процедурой позволяет решать прикладные задачи без потери точности общей вычислительной схемы. Полученная схема сводится к системе линейных алгебраических уравнений. Первое и последнее уравнение системы для каждого временного слоя следует модифицировать с учетом граничных условий. Неявная пятиточечная трехслойная схема абсолютно устойчива и обеспечивает второй порядок точности по временной и пространственной переменным $O((\Delta t)^2 + (\Delta x)^2)$. Система линейных алгебраических уравнений эффективно решается методом прогонки.

Для построения численного решения задачи Коши для нелинейного дробно-дифференциального уравнения (5) применяем метод Рунге – Кутты IV порядка. Алгоритм реализации квазидинамического аналога модели (9) строится на основе метода конечных разностей.

Решение прикладных задач

Проведем серию вычислительных экспериментов для случая компьютерного моделирования сегнетоэлектрического гистерезиса на базе подходов классической термодинамической теории. Представим численное исследование и сравнительный анализ базовых моделей (Ландау – Халатникова (5), обобщенной модели Ландау – Халатникова (6) и квазидинамического аналога (9)) на примере расчета гистерезисной зависимости поляризации от поля для сегнетоэлектрика с фазовым переходом I рода – титаната бария BaTiO_3 (для объемного кристалла и тонкой пленки).

Наиболее изученным случаем переключения поляризации является 180-градусная инверсия поляризации, при которой внешнее поле прикладывается вдоль оси спонтанной поляризации и его ориентация изменяется непосредственно на 180° . Например, 180-градусное переключение поляризации наблюдается практически для всех одноосных сегнетоэлектрических кристаллов – таких как триглицинсульфат $(\text{NH}_2\text{CH}_2\text{COOH})_3 \cdot \text{H}_2\text{SO}_4$, дигидрофосфат калия KH_2PO_4 , ниобат лития LiNbO_3 и др.

Хотя обобщенная модель Ландау – Халатникова (6) наиболее подходит для одноосных кристаллов, ее также можно применять для описания переключения поляризации в многоосных кристаллах. Примером может служить титанат бария (BaTiO_3), обладающий как 90-градусной, так и 180-градусной типами доменных структур в тетрагональной фазе при комнатной температуре. Используя соответствующее внешнее поле, приложенное вдоль c -ориентированных доменов BaTiO_3 , можно наблюдать 180-градусное переключение поляризации [1, 21, 22].

На примере объемного кристалла и тонкой пленки титаната бария рассмотрим и сравним результаты реализации трех математических моделей на базе: классического уравнения Ландау – Халатникова (5) – задача Коши для обыкновенного дифференциального уравнения, обобщенного уравнения Ландау – Халатникова (6) – начально-граничная задача для уравнения с частными производными параболического типа и квазидинамического аналога (7) – краевая задача для обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка.

В таблице приведены значения термодинамических параметров для титаната бария при температуре T (в К) [1, 23].

Коэффициенты разложения термодинамического потенциала для титаната бария

Параметр модели	Значение, ед. измерения
$A/2$	$-3.34 \cdot (T-381) \cdot 10^5 \text{ м/Ф}$
$B/4$	$-(3.6 \cdot (T-448) - 202) \cdot 10^6 \text{ м}^5 / (\text{Кл}^2 \cdot \text{Ф})$
$C/6$	$(5.52 \cdot (T-120) + 276) \cdot 10^7 \text{ м}^9 / (\text{Кл}^4 \cdot \text{Ф})$

В случае использования уравнений (6), (9) применены граничные условия III рода (8'), длина экстраполяция принята равной $\lambda = 88 \text{ нм}$ согласно [10].

Рассмотрим переключение в периодическом поле $E(t) = E_0 \sin(\omega t)$. Параметры вычислительного эксперимента: амплитуда поля $E_0 = 2.5 \cdot 10^5 \text{ В/м}$, частота поля $f = 50 \text{ Гц}$ ($\omega = 2\pi f$), время наблюдения процесса $\theta = 0.03 \text{ с}$, градиентный коэффициент $\psi = 5 \cdot 10^{-8} \text{ м}^3/\text{Ф}$ [24], кинетический коэффициент (определяет скорость движения доменных стенок) $\delta = 2 \cdot 10^5 \text{ м} \cdot \text{с}/\text{Ф}$ [24]. Масштабирующий параметр для нестационарных моделей $v = 400$, для квазистационарной модели – $v = 100$. Термодинамические параметры соответствуют комнатной температуре 293 К. При построении зависимостей $P(t)$ от $E(t)$ для каждого момента времени было вычислено усредненное значение поляризации по толщине кристалла $P(t) = \frac{1}{L} \int_0^L P(x, t) dx$. Альтернативный подход состоит в вычислении значений поляризации для центральной точки кристалла: $x = L/2$.

На рис. 1 представлены результаты вычислительных экспериментов (на основе трех рассмотренных математических моделей) по оценке гистерезисной зависимости поляризации P от приложенного поля E в титанате бария для различных значений толщины образца – 2 мкм и 10 нм (рис. 1 а и 1 б соответственно). Гистерезисная зависимость поляризация от приложенного электрического поля дает возможность оценить: коэрцитивное поле E_c , при котором поляризация обращается в ноль; значение спонтанной поляризации P_s , при котором может происходить перестройка домена; остаточную поляризацию P_r , соответствующую нулевому электрическому полю. Результаты, полученные на основе всех трех моделей для объемного кристалла, качественно согласуются с данными экспериментальных наблюдений, представленными в литературных источниках [1, 25, 26], и модельных расчетов [10, 13, 23, 24], в том числе на основе решеточных моделей [27]: остаточная поляризация $P_r = 0.22 \div 0.35 \text{ Кл/м}^2$ и коэрцитивное поле $E_c = 0.75 \div 1.45 \cdot 10^5 \text{ В/м}$. Квазистационарная модель дает более «насыщенный» вид петель сегнетоэлектрического гистерезиса по сравнению с нестационарными подходами, результаты моделирования на основе которых в большей степени (по форме петли) соответствуют экспериментальным данным.

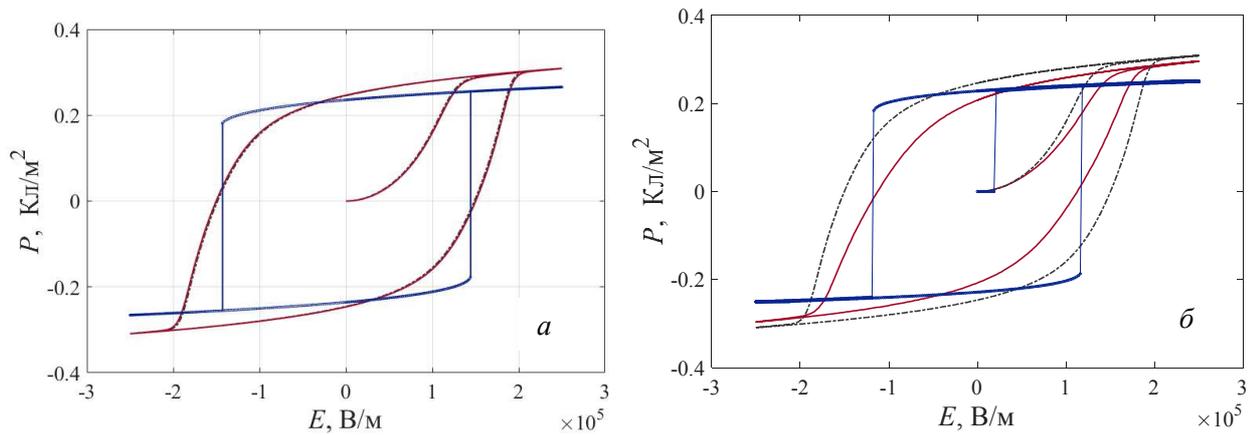


Рис. 1. Модельные зависимости поляризации от поля ВаТiО₃, вычисленные на основе: обобщенной модели Ландау – Гинзбурга – Девоншира – Халатникова (сплошная кривая); модели Ландау – Халатникова (штрих-пунктирная кривая); квазидинамической модели (точечный массив) для $L = 2$ мкм (а) и $L = 10$ нм (б).

В общем случае наличие диффузионного члена в обобщенном уравнении Ландау – Халатникова (6) позволяет учесть пространственные флуктуации поляризации. Однако для образца толщиной 2 мкм, как показано на рис. 1а, значение коэффициента диффузии титаната бария довольно мало по отношению к масштабу расстояний. Как следствие, численное моделирование с использованием классического уравнения Ландау – Халатникова (5) приводит в этом случае к схожему результату, полученному с помощью обобщенной модели Ландау – Халатникова (6).

Неоднородное распределение поляризации может быть весьма существенным фактором для низкоразмерных сегнетоэлектриков – таких как тонкие пленки, нанотрубки, нанопроволоки и т. п. Более того, для низкоразмерных структур эта теория часто дает лучшие результаты, чем для объемных материалов [1]. Рис. 1б демонстрирует результат моделирования сегнетоэлектрического гистерезиса для тонкой пленки титаната бария с толщиной $L = 10$ нм и наблюдаемый размерный эффект – уменьшение толщины пленки приводит к изменению (в данном случае – к сужению) петли гистерезиса. Данный эффект неоднократно был диагностирован независимыми авторами [13, 26].

Анализируя рассмотренные подходы с математической точки зрения, можно отметить, что все модели позволяют приемлемо описать сегнетоэлектрический гистерезис. Все модели включают аппроксимационный параметр – масштабирующий коэффициент для приложенного поля v . Нестационарные модели (в постановке задачи Коши для обыкновенного дифференциального уравнения и начально-граничной задачи уравнения с частными производными) дают более адекватное представление о геометрии петли гистерезиса.

Для объемных объектов (кристаллов) введение градиентного слагаемого не играет существенной роли – классическая модель Ландау – Халатникова (5) дает такой же результат, как и обобщенная модель (6); результат реализации квазистатической модели (9) совпадает с результатом реализации простейшей алгебраической модели (2.). Присутствие диффузионного слагаемого в обобщенной модели Ландау – Халатникова оказывается принципиально важным для адекватного описания процесса переключения поляризации низкоразмерных сегнетоэлектрических структур.

Заключение

Таким образом, в работе проведена систематизация математических моделей поляризационных характеристик сегнетоэлектриков в рамках термодинамической теории Ландау – Гинзбурга. Построена вычислительная схема, основанная на монотонном и абсолютно устойчивом неявном методе конечных разностей в сочетании с итерационной процедурой. Численные эксперименты показали

возможность применения рассмотренной модели для математического моделирования и исследования характеристик сегнетоэлектриков с фазовым переходом первого рода. Сопоставлены обобщенное уравнение Ландау – Халатникова с некоторыми известными его модификациями. Проведено сравнение результатов численного моделирования петель гистерезиса поляризации электрического поля титаната бария с экспериментальными данными. Показана важная роль диффузионного члена и его масштабного эффекта для адекватного описания переключения поляризации в сегнетоэлектриках. Масштабируемость диффузионного члена можно рассматривать как главное преимущество обобщенной модели Ландау – Халатникова.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20–31–90075.

1. Физика сегнетоэлектриков: современный взгляд / под ред. К.М. Рабе, Ч.Г. Анна, Ж.-М. Трискона; пер. с англ. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2011. – 440 с.
2. Gonzalo, J.A. Effective field approach to phase transitions and some applications to ferroelectrics. – Singapore: World Scientific Press, 2006. – 236 p.
3. Cui, L. The hysteresis loops of a ferroelectric bi layer film with surface transition layers / L. Cui, T.Q. Lü, P.-N. Sun, H.J. Xue // Chin. Phys. B. – 2010. – V. 19, № 7. – P. 077701.
4. Diouf, A.A. How to model an Ising ferroelectric system: case of the investigation of the dielectrics properties of a nano-octahedral ferroelectric system / A.A. Diouf, B. Lo, A.N. Dione, C.B. Ndao, A. Chedikh // Communications. – 2017. – V. 5 (5). – P. 51-57.
5. Wang, C. Monte-Carlo simulation of first order phase transitions / C. Wang, J. Li, M. Zhao, M. Marqués, C. Aragón, J. Gonzalo // Ferroelectrics. – 2010. – V. 401. – P. 3-8.
6. Srinoi, S. Investigation of temperature-driven ferroelectric phase-transition via modified Heisenberg model: the Monte-Carlo simulation / S. Srinoi, Y. Laosiritaworn // Adv. Mater. Res. – 2013. – V. 813. – P. 315-318.
7. Omura, M. Simulations of ferroelectric characteristics using a onedimensional lattice model / M. Omura, H. Adachi, Y. Ishibashi // Jpn. J. Appl. Phys. – 1991. – V. 30. – P. 2384-2387.
8. Blinc, R. Soft modes in ferroelectrics and antiferroelectrics / R. Blinc, B. Zeks. – Amsterdam: North-Holland Publ. Co., 1974. – 317 p.
9. Ouyang, K. Simulation on the hysteresis of ferroelectric thin films / K. Ouyang, T.-L. Ren, L.-T. Liu, D. Wei // Integrated Ferroelectrics. – 2004. – V. 64, № 1. – P. 69-75.
10. Song, T.K. Landau – Khalatnikov simulations for ferroelectric switching in ferroelectric random access memory application // J. Korean Phys. Soc. – 2005. – V. 46, № 1. – P. 5-9.
11. Song, T.K. Landau – Khalatnikov simulations for the effects of external stress on the ferroelectric properties of Pb(Zr,Ti)O₃ thin films / T.K. Song, J.S. Kim, M.H. Kim, W. Lim, Y.S. Kim, J.C. Lee // Thin Solid Films. – 2003. – V. 424. – P. 84-87.
12. Starkov, A.S. Effect of thermal phenomena on a second-order phase transition in the Landau – Ginzburg model / A.S. Starkov, O.V. Pakhomov, I.A. Starkov // J. Exper. Theor. Phys. Lett. – 2010. – V. 91, № 10. – P. 507-511.
13. Hong, J. Size-dependent ferroelectric behaviors of BaTiO₃ nanowires / J. Hong, D. Fanga // Appl Phys Lett. – 2008. – V. 92. – P. 012906.
14. Roy, M.K. Dynamics of ferroelectric domains: PhD thesis. – India: West Bengal University of Tehcnology, 2013. – 80 p.
15. Dattagupta, S. Pattern formation in non-linear reaction-diffusion systems / S. Dattagupta, M. Roy // Indian Academy of Sciences Conference Series. – 2019. – № 2. – P.55-58.
16. Lu, S. Fourier spectral approximation to long-time behavior of the derivative three-dimensional Ginzburg – Landau equation / S. Lu, Q. Lu, E.H. Twizell // J. Comp. Appl. Math. – 2007. – V. 198, № 1. – P. 167-186.
17. Paasonen, V.I. Three-level non-iterative high accuracy scheme for Ginzburg – Landau equation / V.I. Paasonen, M.P. Fedoruk // Comp. Techn. – 2015. – V. 20, № 3. – P. 46-57.
18. Wei, J. On a cubic-quintic Ginzburg–Landau equation with global coupling / J. Wei, M. Winter // Proc AMS. – 2005. – V. 133. – P. 1787-1796.
19. Maslovskaya, A.G. Theoretical and numerical analysis of the Landau – Khalatnikov model of ferroelectric hysteresis / A.G. Maslovskaya, L.I. Moroz, A.Yu. Chebotarev, A.E. Kovtanyuk // Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation. – 2021. – V. 93. – P. 105524 (13).
20. Ducharme, S. Intrinsic ferroelectric coercive field / S. Ducharme, V.M. Fridkin, A.V. Bune, S.P. Palto, L.M. Blinov, N.N. Petukhova, S.G. Yudin // Phys. Rev. Lett. – 2000. – V. 84, № 1. – P. 175-178.
21. Лайнс, М. Сегнетоэлектрики и родственные им материалы / М. Лайнс, А. Гласс. – М.: Мир, 1981. – 736 с.
22. Смоленский, Г.А. Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики / Г.А. Смоленский, В.А. Боков, В.А. Исупов, Н.Н. Крайник, Р.Е. Пасынков, М.С. Шур. – М.: Наука, 1971. – 465 с.

23. Hlinka, J. Phenomenological model of 90° domain wall in BaTiO₃-type ferroelectrics / J. Hlinka, P. Marton // Phys. Rev. B. – 2006. – V. 74. – P. 104104.
24. Narita, F. Evaluation of dielectric and piezoelectric behavior of un poled and poled barium titanate polycrystals with oxygen vacancies using phase field method / F. Narita, T. Kobayashi, Y. Shindo // Int. J. Smart. Nano. Mat. – 2016. – V. 7, № 4. – P. 265-275.
25. Nakamura, K. Ultrasonic transducers: Materials and design for sensors, actuators and medical applications // Woodhead Publ. Ltd. – 2012. – 722 p.
26. Moulson, A. Electroceramics. Materials, properties, applications / A. Moulson, J.M. Herbert. – London: Chapman & Hall, 1990. – 464 p.
27. Glazkova, E. Tailoring properties of ferroelectric ultrathin films by partial charge compensation / E. Glazkova, K. Mc Cash, C.-M. Chang, B. Mani, I. Ponomareva // Appl. Phys. Lett. – 2014. – V. 104. – P. 012909.

УДК 519.876.5

Максимова Надежда Николаевна

Амурский государственный университет

г. Благовещенск, Россия

E-mail: knnamursu@mail.ru

Maksimova Nadezhda Nikolaevna

Amur State University,

Blagoveshchensk, Russia

E-mail: knnamursu@mail.ru

ОПТИМИЗАЦИЯ РАБОТЫ ОТДЕЛЕНИЯ БАНКА С ПРИМЕНЕНИЕМ ИМИТАЦИОННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

OPTIMIZATION OF THE BANK'S DIVISION WORK USING SIMULATION MODELING

Аннотация. В работе представлены построение в среде AnyLogic и исследование имитационной модели системы массового обслуживания – отделение банка; вычислены основные характеристики системы, осуществлен анализ результатов работы имитационной модели и даны рекомендации по оптимизации работы отделения.

Abstract. The paper presents the construction in the AnyLogic program and the study of the queuing system simulation model, which is a division of the bank; the main characteristics of the system are calculated, the results of the simulation model are analyzed and recommendations for optimizing the work of the department are given.

Ключевые слова: имитационное моделирование, системы массового обслуживания, среда AnyLogic.

Key words: simulation modeling, queuing systems, AnyLogic program.

DOI: 10.22250/jasu.95.3

Введение

Исследование реальных систем массового обслуживания с привлечением математических инструментов (методами математического моделирования) является весьма трудной задачей. Между тем оно необходимо для оптимизации работы таких систем (например, определение оптимального количества кассиров, уменьшение длины очереди, увеличение доли обслуженных клиентов и др.) [1].

На помощь в данном случае приходит имитационное моделирование [2], которое позволяет описать все процессы, происходящие в системе, задать законы их работы и взаимодействие отдель-