

УДК 004.94 + 519.63

Веселова Елена Михайловна

Амурский государственный университет

г. Благовещенск, Россия

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

Амурский государственный университет

г. Благовещенск, Россия

E-mail: maslovskayaag@mail.ru**Veselova Elena Michailovna**

Amur State University

Blagoveshensk, Russia

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

Amur State University

Blagoveshensk, Russia

E-mail: maslovskayaag@mail.ru

**СПЕЦИАЛИЗИРОВАННОЕ ПРИЛОЖЕНИЕ
ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКОВ:
РЕАЛИЗАЦИЯ НА БАЗЕ COMSOL MULTIPHYSICS**

**SPECIALIZED APPLICATION SOFTWARE FOR SIMULATION
OF POLARIZATION SWITCHING IN FERROELECTRICS:
IMPLEMENTATION IN THE COMSOL MULTIPHYSICS**

Аннотация. С использованием инструментов системы конечно-элементного моделирования COMSOL Multiphysics разработано специализированное приложение, позволяющее проводить расчет характеристик процесса переключения поляризации в сегнетоэлектриках при изменении управляющих параметров модели. В основе компьютерной реализации лежит термодинамическая модель Ландау – Гинзбурга – Девоншира – Халатникова. Рассмотрен пример решения прикладной задачи об исследовании процесса переключения поляризации в тонких сегнетоэлектрических пленках титаната бария.

Abstract. Using tools of the COMSOL Multiphysics finite element modeling system, specialized application software is developed to calculate characteristics of polarization switching in ferroelectrics under the variation of control model parameters. The computer implementation is based on the Landau-Ginzburg-Devonshire-Khalatnikov thermodynamic model. Solving an applied problem is considered to examine the process of polarization switching in thin ferroelectric films of barium titanate.

Ключевые слова: система «реакция-диффузия», модель Ландау – Гинзбурга – Девоншира – Халатникова, сегнетоэлектрический гистерезис, COMSOL Multiphysics, пользовательский интерфейс, вычислительный эксперимент.

Key words: reaction-diffusion system, Landau-Ginsburg-Devonshire-Khalatnikov model, ferroelectric hysteresis, COMSOL Multiphysics, user interface, computational experiment.

DOI: 10.22250/20730268_2022_97_13

Введение

Компьютерное моделирование различных процессов ускоряет получение ряда существенных результатов и часто используется для прогнозирования поведения динамических систем. С помощью современных вычислительных мощностей и комплексов программ исследователи получили арсенал средств, позволяющих моделировать работу отдельных компонентов сложных систем, значительно сократив количество физических экспериментов и оптимизировав затраты на использование экспериментальных образцов. Появление современных вычислительных систем, способных моделировать динамические свойства объектов при различных внешних воздействиях, позволило в ряде важнейших случаев заменить натурные эксперименты их вычислительными аналогами.

Одной из эффективных платформ для компьютерного моделирования различного класса задач является система конечно-элементного моделирования COMSOL Multiphysics. С использованием инструментария COMSOL можно выполнять математическое и компьютерное моделирование трудно-формализуемых систем и прогнозировать характеристики анализируемых процессов.

В настоящее время в теории и практике математического и компьютерного моделирования для формализации пространственно-временных структур в нелинейных средах различной природы используют уравнения типа «реакция-диффузия». Примеры таких приложений можно привести в самых разнообразных предметных областях: химии, биологии, экономике, экологии, физике, теории тепло- и массопереноса, гидродинамики и др. [1–7]. Детерминированный подход приводит к фундаментальному описанию моделей реакционно-диффузионных процессов в постановке краевых и начально-граничных задач для уравнений с частными производными параболического типа.

К подобным математическим моделям можно отнести модель Ландау – Гинзбурга, которую используют для описания большого класса нелинейных задач в многокомпонентных реакционно-диффузионных системах. В серии работ [8–12] рассмотрено приложение модели Ландау – Гинзбурга для исследования свойств сегнетоэлектриков, моделирования сегнетоэлектрического переключения поляризации и петель гистерезиса. Математически пространственно-временное распределение поляризации может быть описано на основе термодинамической модели Ландау – Гинзбурга – Девоншира – Халатникова [8] в постановке начально-граничной задачи для уравнения с частными производными типа «реакция-диффузия». В авторских работах [11–14] рассмотрены численные аспекты реализации одномерной модели процесса переключения поляризации, выполнено компьютерное моделирование сегнетоэлектрического гистерезиса на основе подходов классической термодинамической теории. Теоретический анализ модели представлен в работе [14], в которой исследованы вопросы существования и единственности слабого решения начально-краевой задачи для уравнения реакции-диффузии Ландау – Халатникова.

В общем случае построение аналитических решений для решения реакционно-диффузионных физических задач сопряжено с рядом серьезных трудностей и на практике широко используются численные методы и средства компьютерной имитации.

В последнее время среди численных методов решения задач математической физики все большую популярность приобретает метод конечных элементов. Существует широкий спектр программного обеспечения для анализа процессов и явлений методом конечных элементов. Функционал специализированных программных продуктов позволяет решать прикладные задачи, формализованные уравнениями типа «реакция-диффузия». Эффективной средой для численной реализации данного класса задач является платформа конечно-элементного моделирования COMSOL Multiphysics. Однако использование инструментария COMSOL предполагает владение навыками математического моделирования и знание этапов компьютерного моделирования в пакете. Использование технологии COMSOL Application Builder позволяет работать в COMSOL пользователям с минимальным опытом численного моделирования. На основе разработанной расчетной модели создается приложение со

специализированным интерфейсом, которое применяется для вычислительных экспериментов и анализа результатов, а также может быть использовано для решения типовых задач широким кругом пользователей.

Цель настоящей работы – разработка пользовательского приложения на платформе COMSOL Multiphysics для реализации 2D физико-математической модели нелинейной реакционно-диффузионной системы. Проведение вычислительных экспериментов продемонстрировано на примере моделирования петель гистерезиса в тонких сегнетоэлектрических пленках титаната бария.

Постановка задачи математического моделирования

Введем в рассмотрение постановку задачи моделирования поляризационных характеристик сегнетоэлектрика, используя термодинамический подход Ландау – Гинзбурга – Девоншира – Халатникова. В случае переключения поляризации вдоль одной из ее компонент под действием внешнего поля, математическая модель может быть формализована в виде двумерной (по отношению к пространственным координатам) начально-граничной задачи для полулинейного уравнения типа «реакция-диффузия»:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D \cdot \Delta P + aP + bP^3 - cP^5 + E, \quad (1)$$

где $0 < x < L$, $0 < y < L$, $t_0 < t \leq t_{ob}$,

$$P|_{t=t_0} = 0, \quad 0 \leq x \leq L, \quad 0 \leq y \leq L, \quad (2)$$

$$\left. \frac{\partial P}{\partial \mathbf{n}} \right|_{\Gamma} = -\frac{P}{\lambda}, \quad t_0 < t \leq t_{ob}, \quad (3)$$

где $P(x, y, t)$ – поляризация, Кл/м²; \mathbf{n} – вектор внешней нормали к границе пленки; Γ – граница области (область – квадрат с линейным размером L); L – линейный размер образца, м; λ – длина экстраполяации (положительный параметр), м; D – коэффициент диффузии, м²/с; $a = 2A/\delta$, $b = 4B/\delta$, $c = 6C/\delta$ – положительные постоянные (для сегнетоэлектриков с фазовыми переходами I рода); A , B , C – термодинамические постоянные, зависящие от температуры; δ – кинетический коэффициент, (м·с)/Ф; t_{ob} – время наблюдения, с.

Для наблюдения петель диэлектрического гистерезиса поле выбирают периодическим, в нашем случае – синусоидальным:

$$E = \frac{E_{0x} \nu}{\delta} \sin(\omega t), \quad (4)$$

где E_{0x} – амплитуда напряженности электрического поля, В/м; ν – масштабирующий коэффициент; $\omega = 2\pi f$ – радиальная частота приложенного поля, рад/с; f – частота колебаний поля, Гц.

Реализация модели на платформе COMSOL Multiphysics

Для реализации математической модели в постановке (1) – (4) использованы функциональные возможности платформы COMSOL Multiphysics v5.2. Программное обеспечение пакета COMSOL предназначено для моделирования практически любой задачи из прикладной области, формализованной в виде дифференциальных уравнений или систем уравнений. Пакет включает в себя графический пользовательский интерфейс COMSOL Desktop и набор готовых интерфейсов и инструментов, которые предназначены для решения стандартных задач моделирования [15]. Дополнительные модули расширяют возможности платформы, обеспечивая моделирование в специфических областях и интеграцию с программными пакетами сторонних разработчиков.

Существенным преимуществом среды COMSOL относительно других пакетов конечно-

элементного моделирования является то, что все этапы компьютерной реализации модели выполняются в едином окне (рис. 1).

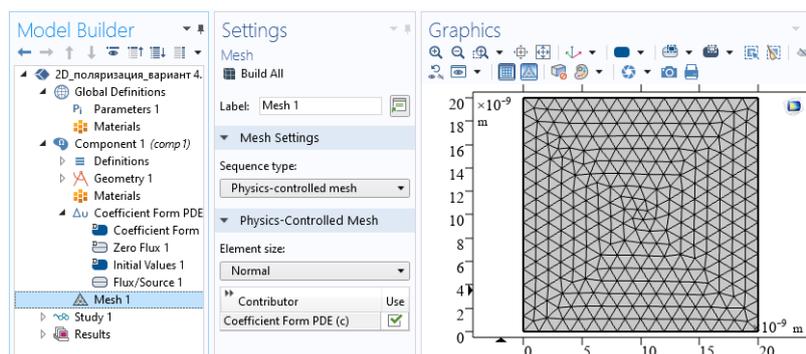


Рис. 1. Рабочая среда базовой платформы COMSOL Multiphysics.

В дереве модели Model Builder открывается доступ ко всем настройкам: определения, геометрии, материалы, физические интерфейсы, сетки, исследования, результаты. В COMSOL реализовано быстрое графическое отображение и визуализация на любом этапе моделирования.

Таким образом, платформа COMSOL достаточно эффективна при компьютерном моделировании за счет единого интерфейса и интеграции всех процессов построения модели в удобной и наглядной среде. Независимо от постановки и сложности задачи используются одни и те же функции и настройки для инициализации параметров модели. Также инструментарий платформы используется для задания и расчета пользовательских систем уравнений при решении нестандартных задач, не имеющих готового физического интерфейса.

Разработка приложения пользовательского интерфейса для моделирования с помощью COMSOL Multiphysics

Для реализации физико-математической модели в постановке (1) – (4) в системе COMSOL разработана расчетная модель по исследованию переключения поляризации в тонких сегнетоэлектрических пленках. Для решения задачи (1) – (4) использован универсальный математический PDE-интерфейс базовой платформы COMSOL Multiphysics, непривязанный к конкретной физике, а именно Coefficient Form PDE (коэффициентная форма математической записи краевой задачи).

Алгоритм компьютерного решения задачи (1) – (4) в PDE-интерфейсе состоит из следующих этапов:

1. Настройка параметров модели – определение размерности модели и режима исследования.
2. Определение и построение геометрии модели.
3. Математическая постановка задачи – задание параметров модели и переменных, задание начальных и граничных условий, определение функции источника.
4. Генерация конечно-элементной сетки и разбиение модели на простейшие элементы.
5. Установка настроек решателей, решение и модификация задачи.
6. Визуализация и постобработка результатов.

В качестве объекта выбраны тонкие пленки типичного сегнетоэлектрика титаната бария (BaTiO_3). Титанат бария является двуосным сегнетоэлектриком, тем не менее введенный подход и геометрия модели позволяют проводить оценку основных характеристик переключения поляризации c -доменов в данном объекте. Для работы модели инициализированы константы и физические параметры [11], полный перечень которых представлен в таблице.

Параметры для реализации модели в размерных величинах

Обозначение	Значение	Единица измерения
L	$50 \cdot 10^{-9}$	м
λ	$88 \cdot 10^{-9}$	м
D	$0.5 \cdot 10^{-7}$	$\text{м}^2/\text{с}$
A	$3.34 \cdot (T-381) \cdot 10^5$	м/Ф
B	$(3.6 \cdot (T-448) - 202) \cdot 10^6$	$\text{м}^5/(\text{Кл}^2 \cdot \text{Ф})$
C	$(-5.52 \cdot (T-393) + 276) \cdot 10^7$	$\text{м}^9/(\text{Кл}^4 \cdot \text{Ф})$
T	293	К
δ	$0.5 \cdot 10^4$	(м·с)/Ф
ν	10	
E_{0x}	$3 \cdot 10^6 - 6 \cdot 10^6$	В/м

Приложение синусоидального поля E вдоль одной из компонент поляризации приведет к периодическому изменению поляризации. Функциональная зависимость $P(E)$, вычисленная как зависимость по времени среднего значения поляризации по площади образца от приложенного поля, представляет собой петлю гистерезиса. Как правило, именно петля гистерезиса (при данных термодинамических условиях) позволяет оценить такие важные характеристики как коэрцитивное поле, остаточная поляризация и спонтанная поляризация.

С использованием инструментальных возможностей COMSOL Multiphysics можно провести исследование гистерезисной зависимости «поляризация – электрическое поле». Результаты вычисления зависимости поляризации от приложенного поля при варьировании линейного размера пленки приведены в работе [12].

На основе компьютерной модели математической задачи в постановке (1) – (4) в среде COMSOL Multiphysics разработано приложение пользовательского интерфейса. Интерфейс приложения разработан таким образом, чтобы пользователь мог анализировать модель, не тратя много времени на изучение программы. Приложения COMSOL – это специализированные инструменты моделирования, которые содержат все функции модели, построенной в режиме построителя моделей, но скрывают ненужную для пользователя информацию.

Среда разработки приложений включена в базовую платформу COMSOL Multiphysics и доступна из графического пользовательского интерфейса COMSOL Desktop в режиме Среды разработки приложений (рис. 2).

Среда Application Builder позволяет исследователям создавать интуитивно понятные пользовательские интерфейсы для своих расчетных моделей, готовые к использованию. Пользователь такого приложения оперирует только входными данными и значимыми результатами моделирования, что не требует от него априорного знания базовой модели. Среда разработки приложений позволяет расширять приложения пользовательскими интерфейсами на основе ваших моделей. Такой пользовательский интерфейс может быть упрощенной версией модели или содержать часть полей ввода и вывода, которые необходимо сделать доступными для пользователя.

Приложение предоставляет возможность не привязываться к определенному компьютеру пользователя. Открывая доступ к приложению, обеспечиваем пользователей мощным инструментом моделирования.

Приложение с пользовательским интерфейсом, показанным на рис. 3, было создано с помощью редактора форм, не требующего программирования.

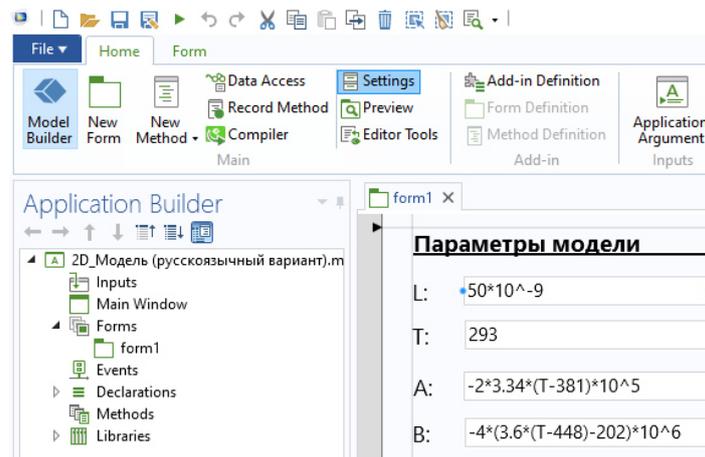


Рис. 2. Рабочая среда COMSOL Application Builder.

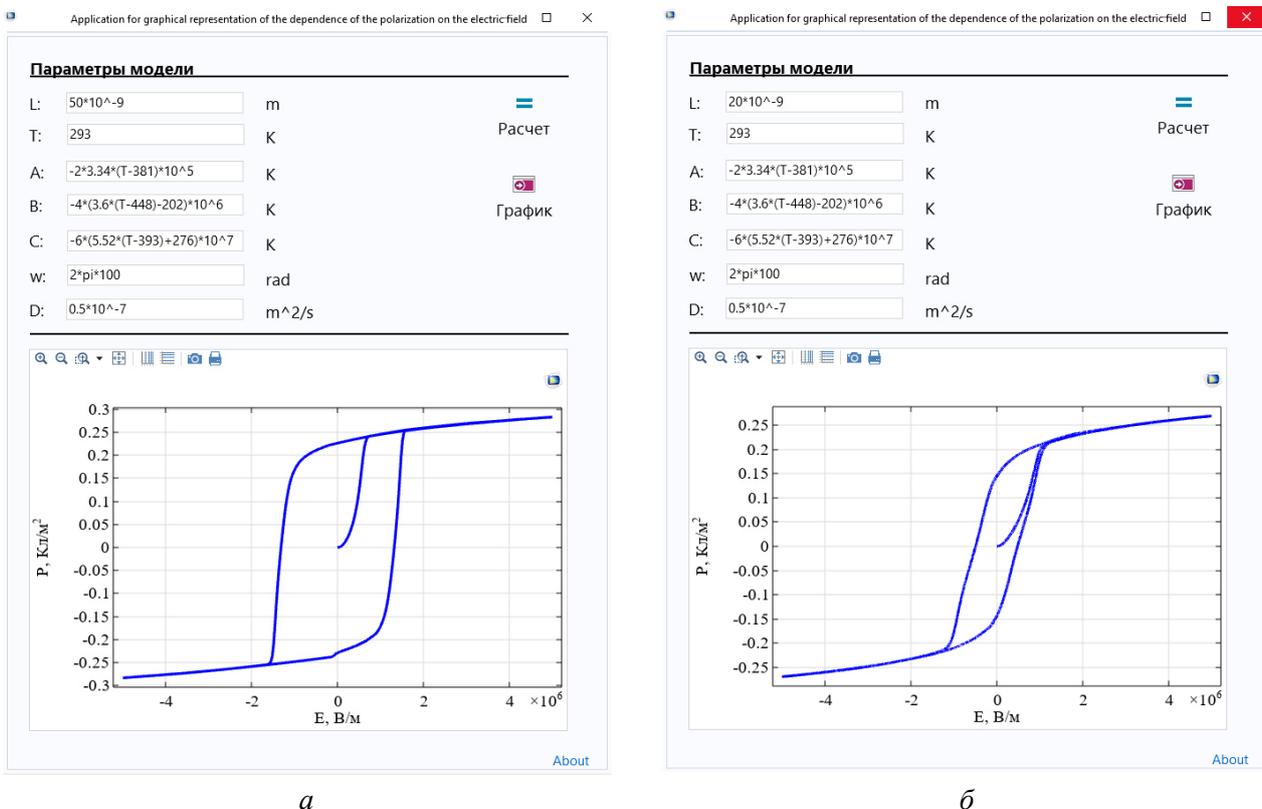


Рис. 3. Общий вид пользовательского интерфейса приложения

для графического представления зависимостей поляризации от электрического поля при варьировании значений линейного размера пленки: $L=50$ нм – а, $L=20$ нм – б.

На главной форме приложения размещены основные управляющие параметры модели: толщина образца, температура, термодинамические константы и коэффициент диффузии. В режиме работы приложения пользователь может изменять значения параметров, определяющих модель, и видеть вывод графических результатов зависимости поляризации от электрического поля, варьируя значения параметров. На основном рабочем экране приложения есть две функциональные кнопки: «Расчет» и «График». Кнопка «Расчет» запускает процесс расчета базовой модели после изменения исходных данных. Команда «График» позволяет отобразить графический результат после ввода новых значений параметров модели.

Результаты вычислительных экспериментов (рис. 3) указывают на существенную зависимость формы петли гистерезиса тонкой пленки от линейного размера образца. В пленках BaTiO_3 размером

менее 50 нм можно диагностировать размерные эффекты явления гистерезиса – уменьшение размера пленки приводит к деформации петли гистерезиса с последующим ее исчезновением. Критическое значение размера пленки, менее которого петля не наблюдается, составляет 3–4 нм. Результаты вычислительного эксперимента согласуются с данными, полученными автором работы [9], для нанопроволоки титаната бария на основе реализации стационарного аналога модели Ландау – Гинзбурга в постановке краевой задачи для обыкновенного дифференциального уравнения.

Заключение

Сложность математических постановок реакционно-диффузионных систем обуславливает востребованность использования программ конечно-элементного моделирования для решения данного класса задач. Так, платформа COMSOL Multiphysics предоставляет эффективные инструменты реализации математических моделей нелинейных и полулинейных реакционно-диффузионных процессов, избегая рутинных процедур программирования численных алгоритмов.

В настоящей работе в качестве прикладной задачи рассмотрена реализация в среде COMSOL термодинамической модели Ландау – Гинзбурга – Девоншира – Халатникова, описывающей процесс переключения поляризации в сегнетоэлектриках. Полулинейная начально-граничная 2D задача решена с использованием коэффицентной формы пакета. В COMSOL Multiphysics было разработано приложение для проектирования пользовательского интерфейса, позволяющее проводить компьютерное моделирование петель гистерезиса сегнетоэлектриков при изменении управляющих параметров моделирования.

1. Otten, D. *Mathematical Models of Reaction Diffusion Systems, their Numerical Solutions and the Freezing Method with Comsol Multiphysics* / – Bielefeld: Bielefeld University (Germany), 2000. – 77 p.
2. Patankar, S. V. *Numerical heat transfer and fluid flow* / S.V. Patankar. – Washington: Hemisphere Publ. Corp., 1980. – 195 p.
3. Drake, J.B. *Climate modeling for scientists and engineers* / J. B. Drake // Knoxville, Tennessee: University of Tennessee, 2014. – 47 p.
4. Montecinos, G. I. *Numerical methods for advection-diffusion-reaction equations and medical applications: PhD thesis* / G. I. Montecinos // University of Trento, 2014. – 161 p.
5. Tan, X. *A splitting method for fully nonlinear degenerate parabolic PDEs* / X. Tan // *Electron J. Probab.*, 2013. – No 145. – P. 1–24.
6. Kadanoff, L. P. *Statistical physics: statics, dynamics and renormalization* / L. P. Kadanoff – London: World Scientific Publ., 2000. – 484 p.
7. Масловская, А.Г. *Моделирование теплового воздействия электронного зонда в растровой электронной микроскопии* // *Информатик и системы управления*, – 2007. – № 2(14). – С. 40–51.
8. Song, T. *Landau – Khalatnikov simulations for the effects of external stress on the ferroelectric properties of Pb(Zr,Ti)O₃ thin films* / T. Song, J. Kim, M. Kim, W. Lim, Y. Kim, J. Lee // *Thin Solid Films*, 2003. – Vol. 424. – P. 84–87.
9. Hong, J. *Size-dependent ferroelectric behaviors of BaTiO₃ nanowires* / J. Hong, D. Fanga // *Appl Phys Lett*, 2008. – Vol. 92. – P. 012906.
10. Morozovska, A. *Modelling of pyroelectric response in inhomogeneous ferroelectric-semiconductor films* / A. Morozovska, E. Eliseev, D. Remiens, C. Soyer // *Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics*, 2006. – Vol. 9. – No. 1. – P. 14–21.
11. Moroz, L. *Computer Simulation of Hysteresis Phenomena for Ferroelectric Switching Devices* / L. Moroz, A. Maslovskaya // *Proc of International Multi-Conference on Industrial Engineering and Modern Technologies (FarEastCon)*, 2020. – P. 1–6.
12. Веселова, Е. М. *Моделирование гистерезиса в тонких сегнетоэлектрических пленках: реализация в COMSOL Multiphysics* // *Сборник материалов IX Международной научной конференции, посвященной 85-летию профессора В.И. Потапова*, 2021. – С. 95–97.
13. Moroz, L. I. *Simulation of thickness-dependent polarization switching in ferroelectric thin films using COMSOL Multiphysics Platform* / L. I. Moroz, E. M. Veselova, A. G. Maslovskaya // *SMART Automatics and Energy*, 2022. – Vol. 272. – P. 49–57.
14. 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. – Vol. 93. – P. 105524 (13).
15. *Введение в COMSOL Multiphysics* – Режим доступа www.comsol.ru.