кинетика фазовых переходов в конденсированных средах. модель генератора ван-ДЕР-Поля [[1]](#footnote-1)\*)

Змиевская Г.И.

Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, zmig@mail.ru

Многие физические процессы, такие как турбулентность, фазовые переходы, инициируемые шумом 1-го и 2-го рода, в том числе типа «порядок - беспорядок», поляризации сегнетоэлектриков, химические превращения и др. можно моделировать как случайные процессы. Неравновесные процессы в твердом теле, возникающие при имплантации ионов инертного газа в тонкослойное покрытие ***(SiC/Mo)*** поверхности [1, 2] были представлены моделью броуновского движения вакансионно-газовых дефектов под действием коллективных сил косвенного упругого взаимодействия сферических неточечных дефектов между собой и с границами тонких слоев, получены результаты распределения пористости, структур предтрещин и напряжений в модели на временах действия радиационного потока, совпадающей с длительностью начальной стадии фазового перехода.

Броуновское движение при действии на систему внешней периодической силы рассмотрено как численная стохастическая кинетическая модель изменения поляризации в одноосном сегнетоэлектрике (пропорциональная одномерному смещению ионов в кристаллической решетке при воздействии поля, ***E cos Ωt***), этот тип фазового перехода аналогичен фазовым переходам "порядок - беспорядок" (и обратно).в твердом теле. Сформулированы стохастические уравнения Ланжевена (СДЛ) для двух ***(+/-)*** направлений поляризации ***P(x,V)*** и соответствующие уравнения Колмогорова (Фоккера-Планка) с нелинейными коэффициентами. Рассмотрена модификация алгоритмов решения СДЛ численного метода для моделирования свойств сегнетоэлектрика. Предложена модель свободной энергии Гиббса образования доменов поляризации как кластеров зародышей фазового перехода. Решение СДЛ позволяет найти распределение спонтанной поляризации ***P(x,V, t)*** по траекториям стохастических динамических переменных координат и скоростей диполей, ***X(t)*** и ***V(t)***, рассчитать величину электрического поля ***Е(t)***, при котором происходит переключение спонтанной поляризации при заданной температуре образца; время переключения поляризации на неравновесной стадии фазового перехода.

Рассмотрено поведение стохастической системы генератора Ван-дер-Поля (***ВдП***) при наличии шумов в уравнениях для ***X(t)*** и ***V(t),*** симметризованных по нелинейности. Анализ проводился двумя различными подходами: с помощью кинетического уравнения Фоккера-Планка-Колмогорова для плотности переходной вероятности (кинетической функции распределения ***f (x,V, t),*** где ***х*** -координата, **V**- скорость, **t**-время) и систем стохастических дифференциальных уравнений Ланжевена. Модель позволяет рассмотреть процесс фазового перехода в конденсированной среде с точки зрения анализа поведения стохастических динамических переменных ***(х, V)*** при изменении соотношения физических величин, которыми характеризуется фазовый переход: ***α, β, γ***, коэффициента обратной связи, линейного и нелинейного трения, соответственно. Рассмотрена зависимость ***f (x,V, t)*** системы ***ВдП*** от коэффициента диффузии (зависящего от интенсивности шума) при фиксированных значениях α, β, γ и ***f (x,V, t)*** в фазовом пространстве энергии системы ***{E}*** .

Работа выполнена при частичной поддержке грантом РФФИ 18-01-00436.

Литература

1. G.I. Zmievskaya, A.L. Bondareva // [Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques](https://link.springer.com/journal/11700), Volume 10, [Issue 4](https://link.springer.com/journal/11700/10/4/page/1), 802–808. –2016.
2. G.I. Zmievskaya// Physics of the Solid State, Vol,62, No.1, 40-45. -2020.
1. \*) [DOI – тезисы на английском](http://www.fpl.gpi.ru/Zvenigorod/XLVII/Pt/en/GA-Zmievskaya_e.docx) [↑](#footnote-ref-1)