

Etude numérique de transitions d'états de certains matériaux 3D ferroélectriques

Pierre-William MARTELLI, Université de Lorraine, IECL, CNRS UMR 7502.

Séraphin MEFIRE, Université de Lorraine, IECL, CNRS UMR 7502.

Mots-clés : Milieux électroactifs 3D, Ferroélectricité, Eléments finis, Simulations numériques.

Cette présentation sera concernée par des dispositifs tridimensionnels où un matériau ferroélectrique, représenté par l'ouvert V_f , est entouré par un milieu paraélectrique, désigné par l'ouvert borné V_p . Le matériau étant uniaxial, seule la troisième composante, P , du champ de polarisation et celle du champ électrique sont reliées non-linéairement dans V_f . Une modélisation du comportement d'un tel dispositif consiste en un couplage des équations de l'Electrostatique et de Ginzburg-Landau. Les inconnues du système qui en découle sont P et un potentiel de courant, φ , dont le champ électrique dérive. Elles satisfont les équations suivantes,

$$\left\{ \begin{array}{ll} tP - \nabla \cdot \xi \nabla P + \frac{1}{P_0^2} P^3 = -\frac{\kappa_{\parallel}}{4\pi} \partial_z \varphi & \text{dans } V_f, \\ -\nabla \cdot \varepsilon_f \nabla \varphi = -4\pi \partial_z P & \text{dans } V_f, \\ -\nabla \cdot \varepsilon_p \nabla \varphi = 0 & \text{dans } V_p, \end{array} \right. \quad (1)$$

ainsi que des conditions de sauts à l'interface paraélectrique-ferroélectrique. Dans ce système, $t \leq 0$ correspond à la température relative du dispositif ferroélectrique, κ_{\parallel} représente un paramètre positif et P_0 désigne la polarisation saturée du matériau à basse température. Le tenseur ξ contient des longueurs de corrélations, tandis que le tenseur ε_f permet de décrire la permittivité électrique du matériau V_f et ε_p celle du milieu V_p . Une condition aux limites de type Neumann est considérée pour P et par ailleurs, le potentiel φ vérifie une condition de type Dirichlet qui relève de l'application d'une tension au bord du dispositif.

Nous commencerons par présenter l'existence de solutions faibles dans le cas où les tenseurs ξ , ε_f et ε_p sont bornés et coercifs. Nous décrirons ensuite l'approximation par éléments finis du système, et la méthode de résolution du problème discret non-linéaire associé.

Nous nous intéresserons ensuite au cas des nanodots de nitrite de sodium. Ainsi, nous décrirons d'abord des transitions, en tension, de profils de polarisation sous l'influence de la taille du matériau ferroélectrique. Cette étude sera ensuite reprise sous l'action de la permittivité ε_p du milieu environnant, de même que dans le contexte du réchauffement du dispositif. Des cycles similaires d'hystérésis de polarisation seront retrouvés pour ces 3 expérimentations numériques. Enfin, nous mettrons numériquement en exergue l'existence d'une classe de paramètres pour laquelle les transitions d'états, habituellement abruptes et irréversibles, sont au contraire lisses.

Références

- [1] L.D. LANDAU AND E.M. LIFSHITZ, *Course of theoretical physics*, V. 8, Elsevier, New York, 1985.
- [2] P.-W. MARTELLI, S.M. MEFIRE AND I.A. LUK'YANCHUK, *Multidomain switching in the ferroelectric nanodots*, Europhys. Lett. EPL, 111, 2015.

Pierre-William MARTELLI, Université de Lorraine, Institut Elie Cartan de Lorraine (IECL), CNRS UMR 7502, Vandœuvre-lès-Nancy, F-54506, France.

pierre-william.martelli@univ-lorraine.fr

Séraphin MEFIRE, Université de Lorraine, Institut Elie Cartan de Lorraine (IECL), CNRS UMR 7502, Vandœuvre-lès-Nancy, F-54506, France.

seraphin.mefire@univ-lorraine.fr