HAL
open science

Modélisation et simulations numériques de la formation de domaines ferroélectriques dans des nanostructures 3D

Pierre-William Martelli

To cite this version:

Pierre-William Martelli. Modélisation et simulations numériques de la formation de domaines ferroélectriques dans des nanostructures 3D. Analyse numérique [math.NA]. Université de Lorraine, 2016. Français. NNT : 2016LORR0119 . tel-01466747

HAL Id: tel-01466747

https://theses.hal.science/tel-01466747v1

Submitted on 13 Feb 2017

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

UNIVERSITÉ DE LORRAINE

AVERTISSEMENT

Ce document est le fruit d'un long travail approuvé par le jury de soutenance et mis à disposition de l'ensemble de la communauté universitaire élargie.

Il est soumis à la propriété intellectuelle de l'auteur. Ceci implique une obligation de citation et de référencement lors de l'utilisation de ce document.

D'autre part, toute contrefaçon, plagiat, reproduction illicite encourt une poursuite pénale.

Contact : ddoc-theses-contact@univ-lorraine.fr

LIENS

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 122. 4
Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 335.2- L 335.10
http://www.cfcopies.com/V2/leg/leg_droi.php
http://www.culture.gouv.fr/culture/infos-pratiques/droits/protection.htm

École Doctorale IAEM Lorraine

Modélisation et simulations numériques de la formation de domaines ferroélectriques dans des nanostructures 3D

THÈSE

présentée pour l'obtention du grade de

Docteur de l'Université de Lorraine

Spécialité : Mathématiques Appliquées

par

Pierre-William MARTELLI

Soutenue publiquement le 26 Septembre 2016

Composition du jury

Rapporteurs :	Xavier Ferrieres	ONERA, Toulouse
	Rachid Touzani	Université Blaise Pascal
Président du jury :	François Alouges	École Polytechnique
Examinateurs :	Jean-Guy Caputo	INSA de Rouen
	Igor A. Luk'yanchuck	Université de Picardie
	Jean Rodolphe Roche	Université de Lorraine
Directeur de thèse :	Séraphin M. Mefire	Université de Lorraine

Institut Élie Cartan de Lorraine - Site de Nancy (UMR 7502)
BP 70239, 54506 Vandœuvre-lès-Nancy Cedex

Remerciements

J'aimerais en premier lieu exprimer toute ma gratitude à mon directeur de thèse, Séraphin M. Mefire, qui m'a accordé sa confiance en acceptant d'encadrer ce travail doctoral. J'aimerais lui dire à quel point j'ai apprécié sa grande disponibilité, qui m'a permis de réaliser cette Thèse dans des conditions idéales. Je tiens également à le remercier chaleureusement pour le soutien qu'il m'a toujours apporté dans mes choix et décisions. Ce fut un réel plaisir de travailler avec lui.

Je remercie Xavier Ferrières ainsi que Rachid Touzani, qui ont accepté la responsabilité d'être les rapporteurs de cette thèse. Je leur suis reconnaissant pour leur grande disponibilité et les échanges que nous avons pu avoir.

Je suis très honoré de la présence de François Alouges dans ce jury de Thèse. Je remercie également Jean-Guy Caputo d'avoir accepté d'être l'un des examinateurs de ce travail. Je suis très reconnaissant à Igor A. Luk'yanchuck. Les discussions que nous avons pu avoir m'ont fait découvrir de très nombreux aspects de la ferroélectricité et m'ont inspiré. Je suis très heureux qu'il soit membre de ce jury. J'adresse aussi mes remerciements à Jean Rodolphe Roche. J'ai apprécié son enseignement en Master et sa présence à ce jury, quatre ans plus tard, me ravit.

Je suis reconnaissant envers tous les membres de l'Institut Elie Cartan, chercheurs et non chercheurs, pour avoir contribué chaque jour à l'atmosphère conviviale de ces lieux. Je pense à Saikat Mazumdar, avec qui j'ai partagé mon bureau ces quatre années, et qui m'a fait découvrir les spécialités culinaires de tous les endroits où il est passé ! Je remercie également les doctorants ou post-doctorants avec lesquels j'ai pu échanger, ainsi que les collègues avec lesquels j'ai enseigné, qui m'ont appris tellement de "trucs" qui me resserviront pour mes futurs enseignements !

Vient le moment des amis, qui m'ont soutenu, parfois supporté, tout au long de cette Thèse. J'en oublierai certainement, je m'en excuse d'avance. Merci à Nex-Nex, mon ami de plus de 20 ans et qui me surprend encore quand il se met derrière les fourneaux ! Merci à Julie, Caro, Gégé, Marlène, Pauline... mes amies de la fac, Grâce ou non, pour m'avoir appris l'humilité (une qualité qui sert en Thèse !) à travers différentes parties de trouduc. Je remercie Anne pour ses visites surprises qui me font tellement rire (et un peu peur quand même). Merci également à ses parents, M. et Mme. Nicolas, qui ont toujours été d'une incroyable gentillesse. Merci à Pierre, Greg, Pascal... Les barbecues estivaux auraient bien moins de saveurs sans vous, pour différentes raisons ! Merci à Vivinou pour ces débats sur tous les sujets qui passent, de Gainsbourg à la cuisson des steaks ! Merci à Marine pour ces tours de Pep', qui nous ont un (court) instant donné l'impression d'être de grands sportifs. Je remercie également Emilie, Eva et Wang. Tout d'abord parce que je leur ai promis dans

un moment de liesse, mais surtout pour ces soirées au Ch'ti à philosopher sur les grandes vérités de la vie. Je n'oublie évidemment pas JB, qui a été mon colocataire une grande partie de ces années de Thèse. Pour ces bons moments devant le p'tit d'jour, le CFC du dimanche soir, les babys et les goûters pré-travail, merci ! Enfin je remercie Lucille, qui est encore ma presque colocataire et qui ensoleille chaque jour le 8 par son humour et sa bonne humeur (sans oublier sa douce voix acidulée !). Et comme dirait l'autre, après la pluie vient le beau temps...

Enfin, j'apporte mes plus chaleureux remerciements à toute ma famille, plus particulièrement à mes sœurs et frères, et surtout à mes parents, toujours là, dans les instants difficiles et les joyeux. Ce soutien de chaque instant fut extrêmement précieux, et ces quelques lignes ne suffisent pas pour leur communiquer ma reconnaissance. Pour tout, Merci !

Table des matières

Introduction **1**

I Nanostructures avec couche ferroélectrique entièrement enclavée dans un environnement paraélectrique **5**

1 Dérivation du modèle ferroélectrique **7**
1.1 Introduction à la ferroélectricité . . . 7
1.1.1 Origine de la ferroélectricité . . . 7
1.1.2 Formation de domaines ferroélectriques . . . 8
1.1.3 Le cycle d'hystérésis ferroélectrique . . . 10
1.1.4 Comparaison avec les matériaux ferromagnétiques . . . 12
1.1.5 Les ferroélectriques et les nanotechnologies . . . 13
1.2 Modélisation d'une nanostructure ferroélectrique . . . 13
1.2.1 Bilan énergétique . . . 14
1.2.2 Théorie des transitions de phases de Ginzburg-Landau . . . 16
1.2.3 Modèle ferroélectrique . . . 21

2 Etude variationnelle du modèle **25**
2.1 Préliminaires . . . 25
2.2 Formulation variationnelle . . . 27
2.3 Existence de solutions variationnelles . . . 31

3 Méthode numérique et protocoles d'expérimentations **41**
3.1 Approximations par Eléments Finis . . . 41
3.2 Résolution du système non-linéaire . . . 43
3.2.1 L'algorithme de Newton inexact . . . 43
3.2.2 Globalisation par la méthode de recherche linéaire . . . 44
3.3 Protocoles d'expérimentations numériques . . . 51
3.3.1 Présentation du contexte d'expérimentation numérique . . . 51
3.3.2 Protocole de chauffage du dispositif . . . 52
3.3.3 Protocole de simulation de cycles d'hystérésis en tension . . . 54
3.3.4 Stabilité de la méthode numérique par raffinement du pas de maillage 55
3.4 Application des protocoles à d'autres configurations géométriques . . . 57
3.4.1 Etude thermique . . . 58
3.4.2 Cycle d'hystérésis en tension . . . 61
3.4.3 Etude de l'influence de la taille de l'environnement paraélectrique . . . 62

4 Etude numérique d'une classe de nanostructures ferroélectriques sous des considérations concrètes 65
4.1 Configuration cylindrique 65
4.1.1 Présentation de la nanostructure 65
4.1.2 Etats métastables 68
4.1.3 Cycle d'hystérésis en tension 72
4.1.4 Influence de la température sur les transitions d'états 74
4.1.5 Influence d'autres paramètres sur les transitions d'états 76
4.2 Configuration parallélépipédique 79
4.2.1 Description de la nanostructure 79
4.2.2 Comparaison avec la configuration cylindrique 80
4.2.3 Caractérisation de la température critique 85

II Nanostructures avec superposition de couches ferroélectriques / paraélectriques 87

5 Formation de domaines dans un super-réseau ferroélectrique 89
5.1 Présentation du modèle 89
5.2 Détermination analytique d'états de polarisation uniformes 92
5.3 Formulation variationnelle et Approximations par Eléments Finis 95
5.3.1 Formulation variationnelle 95
5.3.2 Approximations par Eléments Finis 98
5.4 Etude numérique 100
5.4.1 Caractérisation de la largeur des nanocouches 100
5.4.2 Caractérisation de la permittivité effective et simulations numériques . 106

6 Etude basée sur un modèle avec conditions périodiques 115
6.1 Présentation du modèle 115
6.2 Méthodes numériques 116
6.2.1 Approximations par Différences Finies 117
6.2.2 Hybridation des approximations Eléments Finis/Différences Finies . . 123
6.2.3 Comparaison des approches numériques 129
6.3 Etude numérique de la permittivité effective 134

Conclusions et Perspectives 143

Bibliographie 147

Introduction

« C'est une puissance divine qui te met en mouvement, comme cela se produit dans la pierre qu'Euripide a nommée Magnétis, et que la plupart des gens appellent Héraclée. Car en réalité, cette pierre n'attire pas seulement les anneaux qui sont eux-mêmes en fer, mais elle fait aussi passer en ces anneaux une force qui leur donne le pouvoir d'exercer à leur tour le même pouvoir que la pierre. »

Cet extrait du dialogue *Ion*, de Platon [6], montre que les matériaux ferromagnétiques étaient connus au IVe siècle avant J.-C. Ces matériaux ont la propriété de posséder une aimantation persistante en l'absence de champ magnétique appliqué, que Platon qualifiait lyriquement de « puissance divine qui te met en mouvement ». Il aura fallu attendre 1921 pour qu'une propriété électrique similaire soit découverte dans le sel de Rochelle par J. Valasek [68], dans lequel l'équivalent de l'aimantation est appelé *polarisation* et persiste en l'absence de champ électrique appliqué en dessous d'une certaine température. Ces nouveaux matériaux, dits *ferroélectriques*, sont encore aujourd'hui bien moins compris que leurs homologues ferromagnétiques, et attireront toute notre attention dans ce manuscrit.

L'étude des matériaux ferroélectriques n'a véritablement commencé que dans les années 1940, avec la découverte d'autres cristaux ferroélectriques ayant une structure moléculaire plus simple, comme le Titanate de Baryum. Puisque la ferroélectricité se manifeste lors d'une transition de phases, d'une phase *paraélectrique* (*i.e.* non ferroélectrique) haute température vers une phase ferroélectrique basse température, V.L. Ginzburg [27] propose en 1945 d'utiliser la théorie des transitions de phases développée par Landau [37], et considère la polarisation comme paramètre d'ordre.

Plus récemment, le cycle d'hystérésis de la polarisation en fonction du champ électrique appliqué, caractéristique des matériaux ferroélectriques, a permis d'envisager ces derniers pour le stockage de mémoire informatique [57]. Cependant, la miniaturisation nécessaire pour ces réalisations, qui demandent l'application de champs électriques trop importants pour des matériaux de grande taille, a conduit à la découverte de propriétés nanoscopiques très différentes des aspects macroscopiques. En effet, à cette échelle, les interactions électriques de longue portée deviennent prépondérantes et la loi de Coulomb ne peut plus être négligée. Une conséquence importante est la formation de régions dans les nanomatériaux ferroélectriques où la polarisation est uniforme, appelées *domaines*. E.V. Chenskii et V.V. Tarasenko [11] ont l'idée en 1985 de compléter le modèle originel de Ginzburg-Laudau afin de prendre en compte ces interactions.

Durant les dernières décennies, plusieurs expérimentations numériques ont été menées sur des nanostructures ferroélectriques de taille finie, avec une attention particulière sur les effets conduisant à la formation de domaines ferroélectriques. Les approches numériques employées peuvent être classées en deux catégories :

- les méthodes basées sur les premiers principes (calculs *ab initio*, voir *e.g.* [59]) ;
- les méthodes basées sur les systèmes d'Équations aux Dérivées Partielles (voir *e.g.* [10],

où les équations de Ginzburg-Landau sont approchées à partir de méthodes spectrales). Dans les calculs *ab initio*, l'interaction de chaque atome avec ses voisins, suivant les lois de la Physique, est considérée. Cette approche, bien que précise, est toutefois inadaptée et limitée pour la simulation directe en temps CPU raisonnable de nombreuses propriétés fondamentales des matériaux ferroélectriques, telles les transitions de phases et le mouvement de parois de domaines. Afin de s'affranchir de ces limites, nous considérons dans ce manuscrit des méthodes basées sur des systèmes d'Équations aux Dérivées Partielles, obtenus à partir de la théorie de Ginzburg-Laudau et prenant en compte les interactions électriques de longue portée. L'objectif de la thèse est d'analyser les mécanismes de formation de domaines ferroélectriques dans des nanostructures tridimensionnelles soumises à l'action de champs électriques stationnaires. Ces champs sont générés par des électrodes qui imposent des potentiels de courant sur une partie du bord de la nanostructure.

Ce manuscrit est subdivisé en deux parties intitulées :

- « Nanostructures avec couche ferroélectrique entièrement enclavée dans un environnement paraélectrique » ;
- « Nanostructures avec superposition de couches ferroélectriques/paraélectriques ».

Dans la première partie, nous étudions à travers quatre chapitres des nanostructures constituées d'une région ferroélectrique entièrement interne et d'un espace environnant complémentaire paraélectrique. Dans la seconde partie, les nanostructures sont composées d'une couche ferroélectrique partiellement enclavée qui s'intercale entre deux couches paraélectriques. Les deux derniers chapitres du manuscrit traiteront de ce contexte.

Le Chapitre 1 présente la notion de ferroélectricité ainsi que le modèle basé sur un couplage d'équations de Ginzburg-Landau et d'Electrostatique (GLE), que nous investiguerons dans la première partie de ce manuscrit. Il s'agit d'un système non-linéaire que nous établissons par calcul des variations, en nous inspirant des travaux d'I. Luk'yanchuck, A. Sené et L. Lahoche, qui décrivent un modèle similaire et obtiennent des propriétés universelles de nanostructures ferroélectriques 2D proches de notre contexte, dans [38]. Ce système est uniaxial puisque nous nous plaçons dans le cadre où une seule composante du champ de polarisation est en interaction non-linéaire avec une seule composante du champ électrique. Cette composante du champ de polarisation et le champ électrique en constituent les inconnues.

Dans le Chapitre 2, nous établissons un résultat d'existence de solutions variationnelles du système (GLE). La preuve fait usage du théorème du point fixe de Schauder, ainsi que du théorème de Vitali.

Nous élaborons dans le Chapitre 3 une méthode numérique pour la résolution du système (GLE). Celle-ci est basée sur une discrétisation par Eléments Finis nodaux de la formulation variationnelle associée au système (GLE), ainsi que sur une approche de quasi-Newton inexacte, globalisée par une technique de *linesearch* (voir *e.g.* [47]). Nous sommes en effet concernés par la résolution du système matriciel non-linéaire qui résulte de la discrétisation effectuée. Les solutions des systèmes linéaires obtenus à chaque étape de cette approche itérative sont déterminées avec l'algorithme GMRES [53], préconditionné par une factorisation LU incomplète (voir *e.g.* [48]).

Nous mettons ensuite en place des protocoles d'expérimentations numériques, afin de simuler le chauffage d'une nanostructure ferroélectrique ou de produire son cycle d'hystérésis

en tension. Le processus de chauffage consiste à augmenter la température du système ; ce dernier paramètre est crucial car c'est lui qui initie la transition de phases ferroélectrique/paraélectrique. Le cycle d'hystérésis s'obtient en faisant varier les potentiels de courant appliqués sur le bord de la nanostructure. Ces protocoles sont ensuite mis en œuvre dans des configurations géométriques classiques, cylindriques ou parallélépipédiques. Nous nous assurons finalement de l'adéquation des résultats obtenus avec certaines propriétés physiques.

Nous sommes concernés dans le Chapitre 4 par des investigations numériques de nanostructures constituées d'une couche ferroélectrique de Nitrite de Sodium.

Dans un premier temps, nous étudions le cas de nanotubes, pour lesquels la couche et la nanostructure sont de configuration géométrique cylindrique. Nous menons des simulations numériques à partir des protocoles établis dans le chapitre précédent. Le premier résultat remarquable est l'obtention d'une hystérésis multibits lorsqu'on fait varier les potentiels appliqués à la nanostructure, ce qui est prometteur quant au « design » de nanotubes de haute capacité de stockage. Ce résultat a fait l'objet d'une publication [42]. Nous nous intéressons également à l'influence de plusieurs paramètres sur les propriétés de la nanostructure, comme la largeur de la couche ferroélectrique, la température ou la permittivité de l'environnement paraélectrique. Nous expliquons en particulier comment *doper* le matériau ferroélectrique ; par exemple, nous pouvons imiter les propriétés d'un matériau de diamètre différent en considérant certaines valeurs de la permittivité du milieu paraélectrique.

Nous nous intéressons dans un second temps au cas où la couche et la nanostructure sont de configuration géométrique parallélépipédique. Tout d'abord, nous retrouvons toutes les propriétés découvertes dans le cas du nanotube, à savoir essentiellement l'existence d'une hystérésis multibits et le dopage possible du matériau grâce au milieu paraélectrique environnant. Nous allons ici plus loin, en assemblant un diagramme de phases faisant intervenir à la fois la permittivité de l'environnement paraélectrique et l'épaisseur de la couche ferroélectrique. Tous ces résultats font l'objet d'un article actuellement en cours de rédaction [40].

En 2006, A.M. Bratkovsky et A.P. Levanyuk ont avancé que la chute de la température de transition de phases d'un matériau ferroélectrique lorsqu'il interagit avec un environnement paraélectrique pouvait conduire à ce que la permittivité dite *effective* devienne négative [4], ce qui a été retrouvé expérimentalement depuis (voir *e.g.* [31], dans lequel une couche ferroélectrique de $Pb(Zr_{0.2}Ti_{0.8})O_3$ intercalée entre deux couches de $SrTiO_3$ est étudiée). Le fait que la permittivité effective puisse être négative a suscité une attention croissante depuis qu'il a été mis en avant que cela pouvait être utilisé afin de surmonter les limites fondamentales dans la consommation des transistors à effets de champ [54], même si les manifestations de ce phénomène ne sont pas encore exploitables [35]. Très récemment, P Zubko, J.C. Wojdel *et al.* ont exhibé, dans un article paru dans *Nature* [72], que la permittivité effective devenait négative dans une nanostructure ferroélectrique, où trois couches sont superposées : une couche ferroélectrique centrale de $PbTiO_3$ s'intercalant entre deux couches paraélectriques de $SrTiO_3$. Des résultats numériques ayant nécessité de très longs temps de calculs y sont notamment présentés, à partir d'une approche basée sur les premiers principes.

L'objectif de cette seconde partie est d'analyser la permittivité effective de nanostructures similaires. Deux modèles sont proposés, à partir d'une variante du couplage d'équations de Ginzburg-Landau et d'Electrostatique présenté dans la première partie et se distinguent dans la prescription des conditions aux limites. Ils font chacun l'objet d'un chapitre.

Dans le Chapitre 5 de ce manuscrit, des conditions de Neumann interviennent dans le modèle, pour lequel une méthode numérique basée sur des approximations par Eléments Finis est introduite. Différentes expérimentations numériques sont conduites et permettent de caractériser les permittivités effectives des nanostructures. Certains des résultats obtenus sont similaires à ceux présentés dans [72], notamment en ce qui concerne le signe négatif que peut prendre la permittivité effective.

Dans le Chapitre 6, le modèle prend plutôt en considération des conditions périodiques. Nous mettons d'abord en place une méthode numérique afin de résoudre le système non-linéaire résultant, à partir de discrétisations par Différences Finies. En vue d'une discrétisation plus précise des conditions de l'interface ferroélectrique/paraélectrique, une autre méthode numérique, faisant intervenir à la fois des approximations par Différences Finies et par Eléments Finis, est introduite. Les simulations numériques viennent confirmer un ordre de discrétisation plus précis de la seconde méthode.

Les résultats numériques prouvent, encore dans ce contexte, que la permittivité effective peut être négative. Nous allons plus loin ici dans les investigations, pour nous rapprocher un peu plus du contexte expérimental, en considérant une variation de la permittivité électrique des couches paraélectriques en fonction de la température.

Dans l'article [41], en cours de rédaction, nous présenterons les résultats obtenus aux Chapitres 5 et 6, en y détaillant par ailleurs l'étude thermique d'états depuis aussi le modèle introduit au Chapitre 6.

Première partie

Nanostructures avec couche ferroélectrique entièrement enclavée dans un environnement paraélectrique

Chapitre 1

Dérivation du modèle ferroélectrique

Le but de ce chapitre est d'introduire un modèle décrivant le comportement de certaines nanostructures 3D ferroélectriques sous l'action de champs électriques, en nous appuyant sur le calcul des variations et sur des travaux présentés dans [38] dans un cadre bidimensionnel. Nous serons concernés par ce modèle tout au long de la première partie de ce manuscrit. Nous commencerons par le rappel des propriétés les plus importantes de la ferroélectricité. Nous illustrerons également un exemple d'utilisation des nanostructures ferroélectriques et comparerons celles-ci à leurs célèbres homologues ferromagnétiques.

1.1 Introduction à la ferroélectricité

1.1.1 Origine de la ferroélectricité

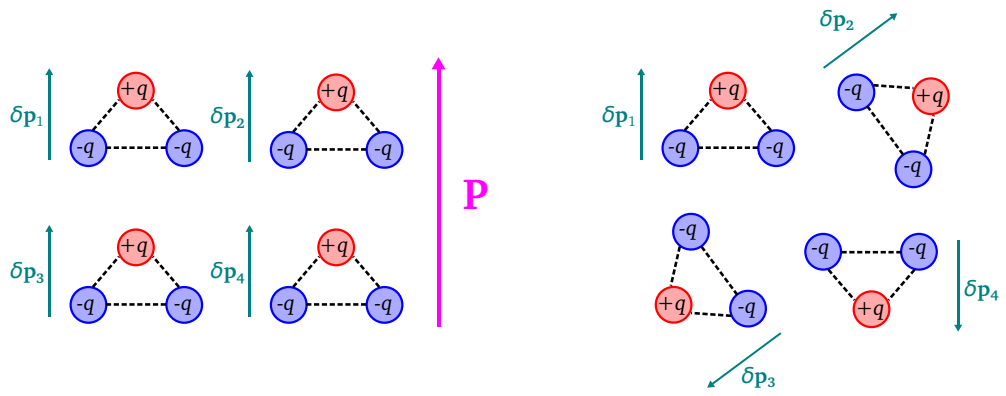
Les matériaux *diélectriques* (ou *isolants*) possèdent, contrairement aux métaux, des charges électriques localisées qui ne peuvent se déplacer que très faiblement par rapport à leur position d'équilibre : sous l'action d'un champ électrique, leurs charges positives se déplacent suivant la direction du champ et leurs charges négatives effectuent un déplacement dans la direction opposée, créant ainsi des dipôles électriques orientés parallèlement au champ. Un *moment dipolaire électrique*, $\delta\mathbf{p}$, qui est une grandeur qui caractérise à la fois la distance entre le barycentre des charges positives et celui des charges négatives, ainsi que les valeurs des charges déplacées, est associé à chaque dipôle :

$$\delta\mathbf{p} = \sum_{i=1}^{n} q_i \mathbf{r}_i,$$

lorsque n charges dans la maille cristalline sont éloignées de leur position d'équilibre, où, pour tout $1 \leq i \leq n$, q_i désigne la valeur de la i^{e} charge et $\mathbf{r}_i$ son vecteur de position dans un repère quelconque. La *polarisation*, $\mathbf{P}$, est une « moyenne » des moments dipolaires d'un volume élémentaire δV,

$$\mathbf{P} = \frac{1}{\delta V} \sum_{i=1}^{N} \delta\mathbf{p}_i,$$

où N désigne le nombre de mailles cristallines dans le volume δV, et $\delta\mathbf{p}_i, ..., \delta\mathbf{p}_N$ leurs moments dipolaires. Dans la plupart des matériaux, dits *paraélectriques*, la polarisation s'annule lorsqu'aucun champ électrique n'est plus appliqué. J. Valasek [68] a découvert en



(a) Phase ferroélectrique ($T < T_c$).

(b) Phase paraélectrique ($T > T_c$).

FIGURE 1.1 – Alignement des dipôles dans une transition ordre-désordre ; T représente la température, $\mathbf{P}$ est la polarisation et $\delta\mathbf{p}_1, ..., \delta\mathbf{p}_4$ sont les moments dipolaires de mailles cristallines composées de trois charges, valant $\pm q$.

1921 l'existence de matériaux, dits *ferroélectriques*, pour lesquels la polarisation subsiste, en l'absence de champ électrique, et en dessous d'une certaine température critique T_c, appelée température de Curie.

La ferroélectricité se manifeste donc lors d'une transition de phases, d'une phase paraélectrique haute température vers une phase ferroélectrique basse température, et peut apparaître suivant plusieurs processus. Dans certains matériaux, le barycentre des charges positives peut être distinct de celui des charges négatives pour toute température, dans chaque maille cristalline. Toutefois, les dipôles permanents associés sont orientés de façon désordonnée dans la phase paraélectrique, ce qui explique que la polarisation macroscopique soit nulle. A basse température, ils s'alignent, ce qui provoque l'apparition d'une polarisation macroscopique et de la ferroélectricité. Ces transitions sont qualifiées d'*ordre-désordre* (voir Figure 1.1). La polarisation peut également être nulle à toute échelle dans la phase paraélectrique mais être non triviale dans les mailles cristallines refroidies, à la suite d'un écartement des ions de leur position d'origine, comme c'est le cas pour le Titanate de Baryum (voir Figure 1.2). Nous allons étudier ces transitions, dites *displacives*, pour lesquelles la polarisation est la plus grande.

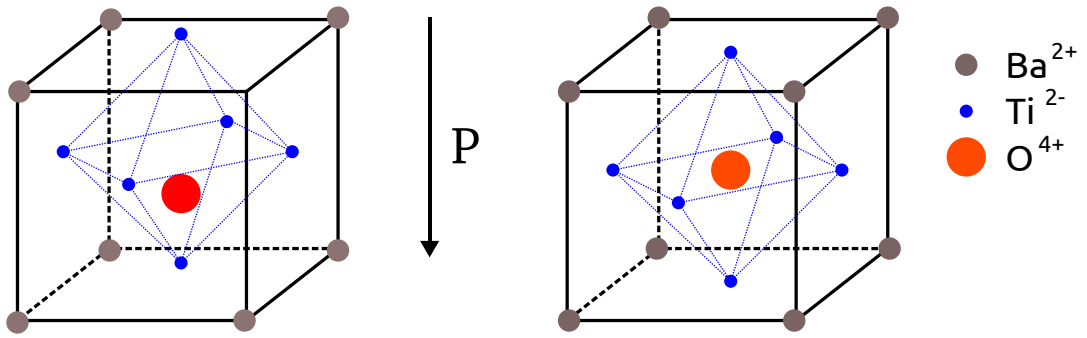
La polarisation en l'absence de champ électrique, dite *rémanente*, s'oriente souvent selon des axes préférentiels. S'il existe une unique direction privilégiée, les matériaux sont dits *uniaxiaux*. Ce sont ces derniers, plus simples à modéliser, qui nous intéresseront dans la suite.

1.1.2 Formation de domaines ferroélectriques

Nous nous intéressons dorénavant aux propriétés mésoscopiques de certaines nanostructures ferroélectriques, constituées d'un matériau ferroélectrique interagissant avec un environnement paraélectrique.

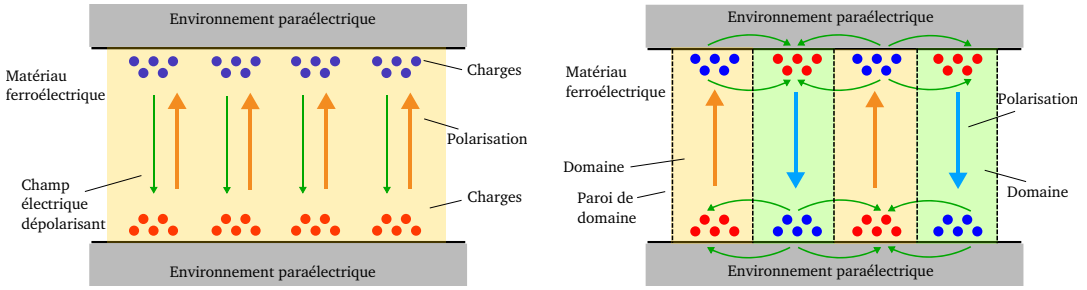
Dans un matériau ferroélectrique uniformément polarisé, la discontinuité du champ de polarisation à l'interface avec l'environnement paraélectrique provoque l'accumulation de charges en surface de l'échantillon ferroélectrique (voir Figure 1.3(a)). Ces charges agissent comme la source d'un champ électrique opposé à la polarisation, qu'on appelle *champ dépolarisant*.

L'effet de ce champ dépolarisant peut être très important. Il peut même compromettre



(a) Phase ferroélectrique ($T < T_c$). (b) Phase paraélectrique ($T > T_c$).

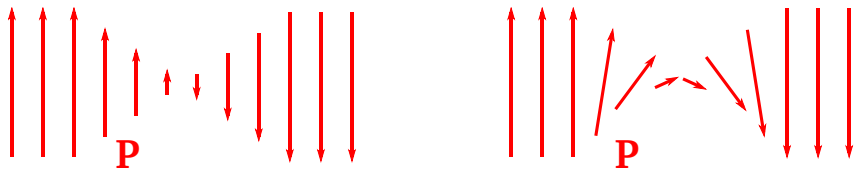
FIGURE 1.2 – Transition displacive dans une maille de Titane de Baryum ; T représente la température et $\mathbf{P}$ la polarisation.



(a) (b)

FIGURE 1.3 – Origine du champ dépolarisant dans la couche ferroélectrique (a) et écrantage par la formation de domaines (b).

la stabilité du système et créer un paradoxe selon lequel la ferroélectricité ne peut exister. Un mécanisme de compensation est alors nécessaire : l'*écrantage*. Dans le cas d'un matériau massif, l'écrantage du champ dépolarisant peut se faire par l'intermédiaire de charges libres dans le matériau ou grâce à des charges en surface induites par un dispositif extérieur, agissant comme la source d'un champ électrique orienté contre le champ dépolarisation. Dans des matériaux suffisamment petits (d'épaisseur <500nm), l'écrantage peut se réaliser par une modification de l'organisation de la polarisation dans le matériau : des régions uniformément polarisées se forment, et sont appelées *domaines*. Le changement d'orientation de la polarisation entre ces zones entraîne une alternance des charges à l'interface entre le matériau ferroélectrique et l'environnement paraélectrique, ce qui permet un confinement en surface du champ de dépolarisation (voir Figure 1.3(b)).



(a) Paroi d'Ising. (b) Paroi de Bloch.

FIGURE 1.4 – Evolution de la polarisation à travers différents types de parois séparant les domaines ferroélectriques.

Les parois entre les domaines s'étendent, en ferroélectricité, sur de très courtes distances [9]. On distingue généralement deux types de murs de domaines (voir Figure 1.4). Lorsque la polarisation diminue en amplitude pour se renverser, la paroi est dite d'*Ising*. Une rotation hélicoïdale de la polarisation entre deux domaines correspond plutôt à une paroi de *Bloch*.

Si nous soumettons une nanostructure ferroélectrique à un champ électrique extérieur, nous ajoutons un nouvel écrantage concurrent. La formation des domaines est donc étroitement liée à l'application d'un tel champ. Cette relation fait l'objet du paragraphe suivant.

1.1.3 Le cycle d'hystérésis ferroélectrique

La Figure 1.5 illustre le comportement non-linéaire de la polarisation en fonction d'un champ électrique appliqué, dans la phase ferroélectrique. L'axe des abscisses correspond à un paramètre représentatif du champ électrique $\mathbf{E}$ tandis que la polarisation $\mathbf{P}$ est caractérisée sur l'axe des ordonnées. Nous donnerons un choix concret de paramètres pour décrire ces champs vectoriels ultérieurement.

Tant que le champ électrique appliqué est faible, le nombre de domaines reste inchangé, et la polarisation dépend linéairement du champ électrique (arc (OA)). Lorsqu'il s'intensifie, les domaines orientés « défavorablement » (*i.e.* dans le sens opposé au champ électrique) disparaissent, ce qui provoque une augmentation brutale de la polarisation (arc (AB)). Il existe une tension au-delà de laquelle tous les domaines sont orientés dans la même direction (point B). C'est le stade de saturation, pour lequel l'échantillon ferroélectrique est monodomaine, et la polarisation dépend à nouveau linéairement du champ électrique.

Lorsque le champ électrique diminue, la polarisation baisse. Nous retrouvons une propriété fondamentale des matériaux ferroélectriques, qui conservent une polarisation, $P_r \neq 0$, en l'absence de champ électrique, dite *rémanente*. La polarisation s'annule lorsque le champ électrique atteint une certaine valeur $-E_c < 0$ appelée *champ coercitif*. Encore une fois, lorsque le champ appliqué est suffisamment intense, un seul domaine subsiste (point C).

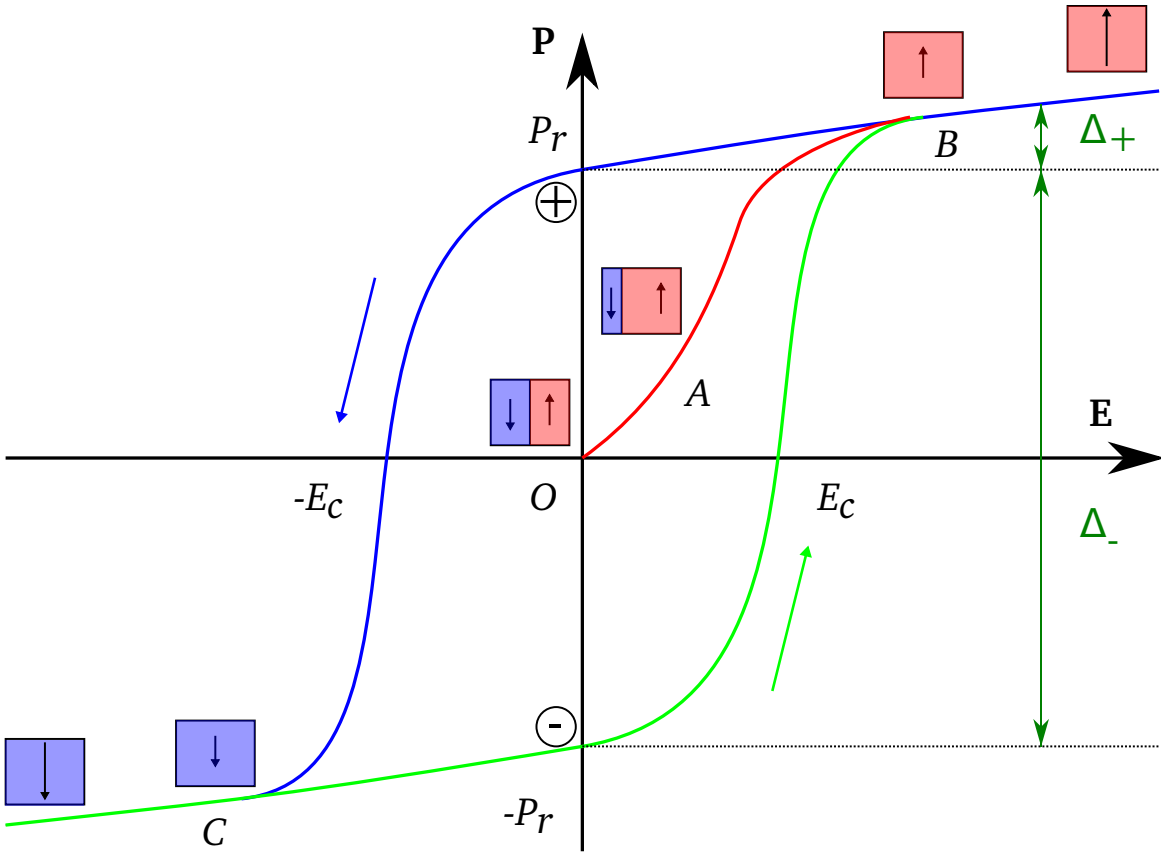


FIGURE 1.5 – Cycle d'hystérésis d'un matériau ferroélectrique.

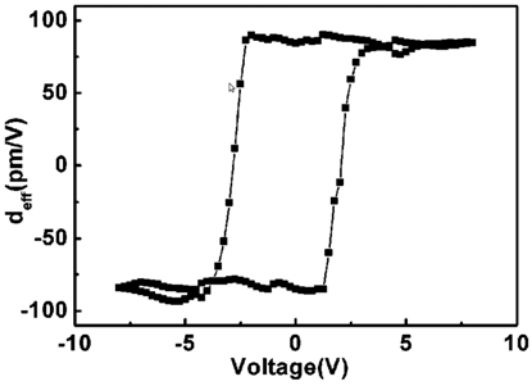


FIGURE 1.6 – Hystérésis d'un nanotube de PZT, extrait de [39].

L'arc de courbe (BC) ainsi construit (en bleu sur la Figure 1.5) est appelé demi-branche de l'hystérésis. Si nous augmentons à nouveau le champ électrique, une autre demi-branche (CB) se forme (en vert sur la Figure 1.5), symétrique à la première par rapport à l'origine : la polarisation vaut $-P_r \neq 0$ en l'absence de champ électrique, s'annule lorsque $\mathbf{E} = E_c$ et le matériau ferroélectrique retourne dans une configuration monodomaine quand le champ électrique est suffisamment fort. La réunion de ces deux courbes forme la boucle d'*hystérésis* de polarisation.

La description précédente concerne un cas idéal, qu'on retrouve toutefois pour des matériaux réels, comme dans le $Pb(Zr_{0.52}Ti_{0.48})O_3$ (Titano-Zirconate de Plomb ou plus simplement PZT, voir la Figure 1.6).

1.1.4 Comparaison avec les matériaux ferromagnétiques

Les matériaux ferroélectriques restent aujourd'hui bien moins compris que leurs homologues ferromagnétiques. Ces derniers possèdent une température de Curie en dessous de laquelle la dépendance entre l'*aimantation* $\mathbf{M}$ et le champ magnétique n'est plus linéaire. Les énergies intervenant dans les ferromagnétiques sont :

- *l'énergie magnétostatique* due au champ démagnétisant, opposé à $\mathbf{M}$. De manière analogue au champ de dépolarisation, la démagnétisation est générée par l'accumulation de charges en surface du matériau ferromagnétique, causée par la discontinuité de l'aimantation ;
- *l'énergie magnétocristalline* due à l'existence d'axes d'aimantation préférentiels ;
- *l'énergie magnétostrictive* provenant des distorsions de la maille en surface.

Comme dans le cas des matériaux ferroélectriques, lorsque l'épaisseur des matériaux ferromagnétiques diminue, les contributions énergétiques varient et les énergies surfaciques deviennent prépondérantes face aux énergies volumiques. Afin d'écranter les énergies magnétostatiques et magnétocristallines, un phénomène de formation de domaines intervient également. Ce mécanisme a été proposé par Landau [37] et Kittel [33] pour les systèmes magnétiques bien avant qu'on ne réutilise cette théorie pour les nanostructures ferroélectriques.

Nous retrouvons également que l'aimantation dépend du champ magnétique selon une courbe d'hystérésis. Si nous augmentons fortement le champ magnétique puis qu'on l'annule, le matériau conserve une aimantation rémanente. Cette propriété permet par exemple de fabriquer des aimants permanents. Nous comprenons alors que pour neutraliser un aimant,

il faut diminuer fortement le champ magnétique jusqu'à une certaine valeur, encore dite coercitive.

Le champ démagnétisant est traité comme une perturbation puisque l'énergie qui lui est associée est très faible devant les autres énergies, du fait de la faible valeur de la susceptibilité magnétique. Ceci marque une différence importante avec les matériaux ferroélectriques, pour lesquels l'énergie créée par le champ de dépolarisation prédomine. C'est pourquoi la texture des domaines ferroélectriques a un impact considérable sur les propriétés du système.

Pour davantage de détails sur les matériaux ferromagnétiques, nous renvoyons aux références [2, 32] par exemple.

1.1.5 Les ferroélectriques et les nanotechnologies

Il est remarquable que deux états non triviaux de polarisation puissent coexister dans les matériaux ferroélectriques, représentés par $\ominus$ et $\oplus$ sur la Figure 1.5. Ces représentations peuvent être exploitées pour stoker 0 ou 1 de l'algèbre booléenne, qui forment la base relative à la mémoire de tous les ordinateurs modernes et sont communément appelés *bits*. Cette idée est à l'origine des mémoires non-volatiles (*i.e.*, des mémoires qui conservent l'information hors-tension) FeRAM, acronyme de *Ferroelectric Random Access Memory* (*cf. e.g.* [57, 43]), qui constituent un champ d'application très important des matériaux ferroélectriques.

Pour coder l'état $\oplus$, il suffit de générer un champ électrique suffisamment supérieur au champ coercitif E_c, puis d'annuler ce champ. L'écriture de $\ominus$ se fait suivant le même principe, plutôt par l'intermédiaire d'un champ orienté dans l'autre direction. Pour la lecture, un dispositif capable de mesurer la Différence De Polarisation (DDP), Δ, avec l'état monodomaine positif est utilisé. Il existe deux DDP, $\Delta_+ < \Delta_-$ (voir Figure 1.5), selon que l'information stockée est $\oplus$ ou $\ominus$. Pour lire un bit, nous soumettons le dispositif à un champ électrique suffisamment fort pour que le profil de polarisation soit monodomaine, et nous mesurons la DDP. Si la DDP est égale à Δ_-, alors l'état stocké était $\ominus$. Dans ce cas, l'information a été effacée et il faut la réécrire, en imposant un champ électrique inférieur à $-E_c$ qu'on annule ensuite. Dans le cas où l'état était $\oplus$ (pour une DDP égale à Δ_+), l'information n'a pas été perdue au cours du processus de lecture, puisqu'il suffit de mettre le dispositif hors-tension pour la retrouver.

Cette « lecture destructive » est une limitation intrinsèque de la technologie FeRAM, puisque le nombre de cycles d'écriture/lecture est considérablement augmenté, ce qui peut endommager les caractéristiques électriques du matériau. Certains travaux (voir *e.g.* [30]) proposent quelques solutions pour pallier à ce problème. Des inconvénients extrinsèques limitent par ailleurs encore le développement de ces mémoires à grande échelle, comme leur grand coût de fabrication ou la difficulté de comprendre le comportement des dispositifs ferroélectriques miniaturisés. La simulation du comportement des nanostructures ferroélectriques représente donc un intérêt majeur pour ces applications. Les mémoires FeRAM restent toutefois bien meilleures par rapport à leurs homologues ferromagnétiques omniprésentes Flash et EEPROM, en terme de vitesse d'écriture/lecture (<100ns contre 1ms) et de consommation d'énergie (300mW contre >1000-5000mW) (voir *e.g.* [43]).

1.2 Modélisation d'une nanostructure ferroélectrique

Considérons une nanostructure constituée d'une couche ferroélectrique entièrement enclavée dans un environnement paraélectrique. Nous supposons qu'une partie du bord de la nanostructure se situe dans des plans de la forme ($z = \pm\alpha$), de sorte qu'il est possible de lui apposer des électrodes : ces électrodes permettent d'imposer un potentiel de courant

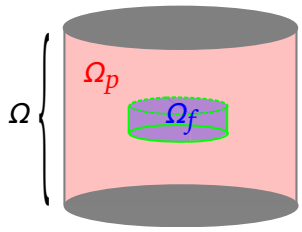


FIGURE 1.7 – Exemple de configuration géométrique.

au dessus et en dessous de la nanostructure et génèrent ainsi un champ électrique. Nous appellerons *dispositif ferroélectrique* l'ensemble formé par la nanostructure et les électrodes.

L'objectif de ce paragraphe est d'introduire un modèle pour étudier la formation de domaines ferroélectriques dans la nanostructure. Nous représentons la nanostructure par un ouvert $\Omega \subset \mathbf{R}^3$ et la couche ferroélectrique à travers un ouvert $\Omega_f \subset \Omega$. La région complémentaire $\Omega_p = \Omega \setminus \overline{\Omega_f}$ représente l'environnement paraélectrique. Nous nous plaçons enfin dans un repère orthonormé $(Oxyz)$ de sorte que (Oz) coïncide avec l'axe de polarisation du matériau ferroélectrique.

L'approche que nous adoptons est inspirée par les travaux d'I. Luk'yanchuk *et al.* [38], qui sont plutôt concernés par des configurations bidimensionnelles. Nous commençons par réaliser l'inventaire des énergies intervenant dans la nanostructure, ce qui nous aidera ensuite à établir un système d'équations aux dérivées partielles décrivant son comportement sous l'influence d'un champ électrique.

1.2.1 Bilan énergétique

Nous rappelons ici de façon succincte les différentes équations qui permettent de décrire les phénomènes électromagnétiques. Pour plus de détails, nous renvoyons au livre de J.A. Stratton [63] ainsi qu'à celui de L.D. Landau et E.M. Lifshitz [36] pour un point de vue physique ou bien à l'ouvrage de R. Dautray et J.-L. Lions [15] pour une présentation plus mathématique.

Dans un milieu Ω quelconque de $\mathbf{R}^3$, les phénomènes électromagnétiques sont décrits par les quatre champs vectoriels définis dans Ω :

- $\mathbf{E}$: champ électrique ;
- $\mathbf{D}$: champ de déplacement électrique ;
- $\mathbf{H}$: champ magnétique ;
- $\mathbf{B}$: induction magnétique.

Ces quatre grandeurs sont reliées par le système d'équations aux dérivées partielles de Maxwell :

$$\left\{\begin{array}{rcll} \partial_t \mathbf{B}(t,\mathrm{x}) + \nabla \times \mathbf{E}(t,\mathrm{x}) & = & 0, & \forall (t,\mathrm{x}) \in \mathbf{R}^+ \times \Omega, \\ \partial_t \mathbf{D}(t,\mathrm{x}) - \nabla \times \mathbf{H}(t,\mathrm{x}) & = & -\mathbf{j}(t,\mathrm{x}), & \forall (t,\mathrm{x}) \in \mathbf{R}^+ \times \Omega, \\ \nabla \cdot \mathbf{D}(t,\mathrm{x}) & = & 4\pi\rho(x,t), & \forall (t,\mathrm{x}) \in \mathbf{R}^+ \times \Omega, \\ \nabla \cdot \mathbf{B}(t,\mathrm{x}) & = & 0, & \forall (t,\mathrm{x}) \in \mathbf{R}^+ \times \Omega, \end{array}\right.$$

où $\mathbf{j}$ représente la densité de courant électrique et ρ désigne la densité de charges du milieu. Les quatre équations du système de Maxwell sont aussi respectivement connues sous le nom d'équations de Maxwell-Faraday, Maxwell-Ampère, Maxwell-Gauss et Maxwell-Thomson.

Plaçons-nous dans un contexte statique sans effets magnétiques et en l'absence de charges. Le champ électrique $\mathbf{E}$ et l'induction électrique $\mathbf{D}$ vérifient alors le système électrostatique

suivant :

$$\left\{ \begin{array}{rcll} \nabla \cdot \mathbf{D} & = & 0 & \text{dans } \Omega, \\ \nabla \times \mathbf{E} & = & 0 & \text{dans } \Omega. \end{array} \right. \tag{1.1}$$

La seconde équation de (1.1) conduit, lorsque Ω est simplement connexe, à l'existence d'une distribution scalaire φ, appelée potentiel électrique, de sorte que :

$$\mathbf{E} = -\nabla\varphi.$$

Nous nous plaçons maintenant dans le contexte où Ω représente la nanostructure ferroélectrique décrite avant. Nous disposons de l'équation d'état suivante, valable pour tous les diélectriques (voir *e.g.* [36]),

$$\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P}(\mathbf{E}). \tag{1.2}$$

Pour obtenir un modèle complet, il reste encore à expliciter le champ de polarisation électrique $\mathbf{P}(\mathbf{E})$. Dans la phase paraélectrique, nous avons par exemple :

$$\mathbf{P}(\mathbf{E}) = \frac{\varepsilon - 1}{4\pi}\mathbf{E} = -\frac{\varepsilon - 1}{4\pi}\nabla\varphi \quad \text{dans } \Omega, \tag{1.3}$$

où ε est la permittivité électrique du milieu Ω. Nous retrouvons avec (1.2) la relation bien connue :

$$\mathbf{D} = \varepsilon\mathbf{E}.$$

Dans la phase paraélectrique, nous obtenons de (1.1), (1.2) et (1.3),

$$\left\{ \begin{array}{rcll} -\nabla \cdot \varepsilon\nabla\varphi & = & 0 & \text{dans } \Omega, \\ 4\pi\mathbf{P} & = & (1-\varepsilon)\nabla\varphi & \text{dans } \Omega. \end{array} \right.$$

Le potentiel électrique est donc la solution d'une équation de Laplace et la polarisation s'en déduit immédiatement.

Pour introduire l'expression de $\mathbf{P}(\mathbf{E})$ dans la phase ferroélectrique, nous choisissons de considérer l'énergie potentielle liée à la nanostructure (voir *e.g.* [36]),

$$\mathcal{E}(\mathbf{P}, \mathbf{E}) = \int_\Omega \mathcal{F}_p(\mathbf{P}, \mathbf{E}) d\mathrm{x}, \tag{1.4}$$

où le potentiel $\mathcal{F}_p(\mathbf{P}, \mathbf{E})$ est à préciser. Nous rappelons que nous sommes dans le contexte où le matériau ferroélectrique est uniaxial selon (Oz), ce qui signifie que seule la troisième composante du champ de polarisation est reliée non-linéairement à la troisième composante du champ électrique, tandis que les deux autres dépendent linéairement des composantes du champ électrique, selon la relation (1.3). Plus précisément, nous pouvons introduire un champ scalaire P de sorte que :

$$\mathbf{P} = \frac{\varepsilon - 1}{4\pi}\mathbf{E} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ P \end{pmatrix}. \tag{1.5}$$

Afin de simplifier nos éléments de langage dans la suite, nous appellerons également *polarisation* le champ P.

Le potentiel peut alors s'écrire (voir *e.g.* [36]) :

$$\left\{ \begin{array}{rcll} \mathcal{F}_p(\mathbf{P}, \mathbf{E}) & = & \mathcal{F}(P, 0) - EP - \dfrac{\mathbf{E} \cdot (\varepsilon\mathbf{E})}{8\pi} & \text{dans } \Omega_f, \\ \mathcal{F}_p(\mathbf{P}, \mathbf{E}) & = & -\dfrac{\mathbf{E} \cdot (\varepsilon\mathbf{E})}{8\pi} & \text{dans } \Omega_p, \end{array} \right.$$

où E est la troisième composante du champ électrique. Le terme $-\int_{\Omega_f} EPdx$ pénalise l'énergie si E et P sont de signes opposés et symbolise ainsi l'effet du champ dépolarisant. L'énergie $-\frac{1}{8\pi}\int_\Omega \mathbf{E}\cdot(\varepsilon\mathbf{E})dx$ représente l'effet des parois de domaines et $\int_{\Omega_f}\mathcal{F}(P,0)dx$ est l'énergie liée à la nanostructure en l'absence de champ électrique, dite *énergie libre*.

Il ne reste plus qu'à expliciter le potentiel $\mathcal{F}(P,0)$ dans la phase ferroélectrique. Le *modèle de Kittel* donne une expression de $\mathcal{F}(P,0)$, où nous considérons que P est constant dans chaque domaine et prend la valeur $\pm P_r$,

$$\mathcal{F}(P,0) = \frac{1}{2}\frac{4\pi}{\varepsilon-1}(P-P_r)^2.$$

Grâce au calcul des variations, on peut montrer que les extrema de la fonctionnelle d'énergie $P \longmapsto \int_{\Omega_f}\mathcal{F}(P,0)dx$ vérifient l'équation d'état (voir *e.g.* [58]) :

$$P = P_r + \frac{\varepsilon-1}{4\pi}E.$$

Cette description très simple est utile pour modéliser certains phénomènes physiques. Cependant, elle ne fait pas intervenir la température, qui initie la transition de la phase paraélectrique vers la phase ferroélectrique. Nous porterons donc plutôt notre attention sur le modèle de Ginzburg-Landau, formalisé à partir de la théorie des transitions de phases, qui prend naturellement en compte ce paramètre physique.

1.2.2 Théorie des transitions de phases de Ginzburg-Landau

En 1935, L.D. Landau remarqua (*cf.* [37]) qu'une transition de phases s'accompagnait de la perte ou du gain d'éléments de symétrie (*i.e.* d'éléments qui laissent invariant le système). L'idée de Landau consiste à ajouter un paramètre afin de pouvoir caractériser la phase la moins symétrique : le *paramètre d'ordre*. C'est en 1945 que V.L. Ginzburg applique (*cf.* [27]) la théorie de Landau à la ferroélectricité. Il utilise P comme paramètre d'ordre, avec $P=0$ dans la phase paraélectrique en l'absence de champ électrique et $P\neq 0$ dans la phase ferroélectrique.

La théorie de Ginzburg-Landau consiste à développer le potentiel $\mathcal{F}(P,0)$ de l'énergie libre comme une série convergente en fonction du paramètre d'ordre, en supposant que $\mathcal{F}(0,0)=0$,

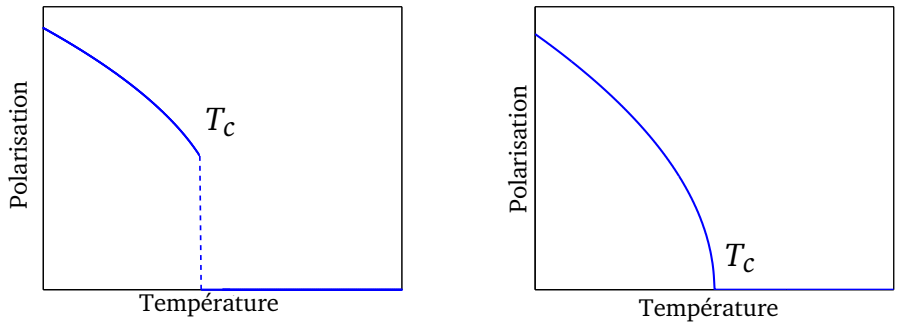
$$\mathcal{F}(P,0) = \sum_{k=1}^{\infty} p_k P^k + \kappa\nabla P\cdot(\xi\nabla P),$$

où le terme $\kappa\nabla P\cdot(\xi\nabla P)$ est généralement ajouté au *potentiel de Gibbs*, $\tilde{\mathcal{F}}(P,0)$,

$$\tilde{\mathcal{F}}(P,0) = \sum_{k=1}^{\infty} p_k P^k, \tag{1.6}$$

afin de lui imposer une pénalisation supplémentaire lorsque nous nous intéressons aux propriétés électrostatiques du matériau et que nous souhaitons prendre en compte des états non-uniformes (voir *e.g.* [58]). L'expression (1.6) n'est en réalité valable que pour P petit, ce qui est une hypothèse plausible du fait du faible déplacement des ions (*cf.* [36]). Dans tous les cas, nous garderons ce développement phénoménologique.

Comme il y a équivalence dans un matériau ferroélectrique uniaxial entre le déplacement des ions vers le haut ou vers le bas, le potentiel de Gibbs vérifie la relation $\tilde{\mathcal{F}}(-P,0)=\tilde{\mathcal{F}}(P,0)$.



(a) Transition d'ordre 1, $\beta < 0$. (b) Transition d'ordre 2, $\beta > 0$.

FIGURE 1.8 – Evolution de la polarisation suivant la transition de phase considérée.

En particulier, seuls les termes pairs subsistent dans le développement (1.6) :

$$\tilde{\mathcal{F}}(P,0) = \sum_{k=1}^{\infty} p_{2k} P^{2k}.$$

Le coefficient p_6 est, à notre connaissance (*cf.* [49]), toujours positif pour les matériaux ferroélectriques et on tronque usuellement la fonctionnelle comme suit (voir *e.g.* [36]) :

$$\tilde{\mathcal{F}}(P,0) = \alpha P^2 + \beta P^4 + \gamma P^6.$$

Le signe de β permet de distinguer deux types de transitions [67, 49], du *premier ordre* ($\beta < 0$) et du *second ordre* ($\beta > 0$). Le cas particulier $\beta = 0$, qui correspond à une classe de matériaux ferroélectriques dits *tricritiques*, est bien plus compliqué et ne sera pas abordé ici (voir *e.g.* [66] pour plus de détails).

Dans le cas d'une transition du second ordre, le coefficient β est strictement positif et la fonctionnelle $\tilde{\mathcal{F}}(P,0)$ est habituellement tronquée (voir *e.g.* [36]) :

$$\tilde{\mathcal{F}}(P,0) = \alpha P^2 + \beta P^4.$$

La polarisation évolue dans ce cas continûment vers 0 en fonction de la température (voir Figure 1.8(b)).

Pour les transitions du premier ordre, le comportement du matériau est plus compliqué au voisinage de la température de transition (voir par exemple la Figure 1.9 extraite de [44]) et la polarisation évolue de manière discontinue vers zéro en fonction de la température (voir Figure 1.8(a)).

Nous considérons pour toute la suite uniquement le cas $\beta > 0$. Dans la phase paraélectrique, nous imposons $\alpha > 0$ de sorte que $P = 0$ soit l'unique extremum de $\tilde{\mathcal{F}}(P,0)$, tandis que nous supposons au contraire $\alpha < 0$ dans la phase ferroélectrique pour que d'autres extrema puissent exister. Ainsi α peut s'écrire comme une fonction de la température, et nous avons :

$$\mathcal{F}(P,0) = a(T - T_c)P^2 + \beta P^4 + \kappa \nabla P \cdot (\xi \nabla P),$$

avec $a > 0$, que nous pouvons réécrire comme suit,

$$\mathcal{F}(P,0) = \frac{4\pi}{\varkappa_{\|}} \left(\frac{t}{2} P^2 + \frac{1}{4} \frac{1}{P_0^2} P^4 + \frac{1}{2} \nabla P \cdot (\xi \nabla P) \right),$$

où,

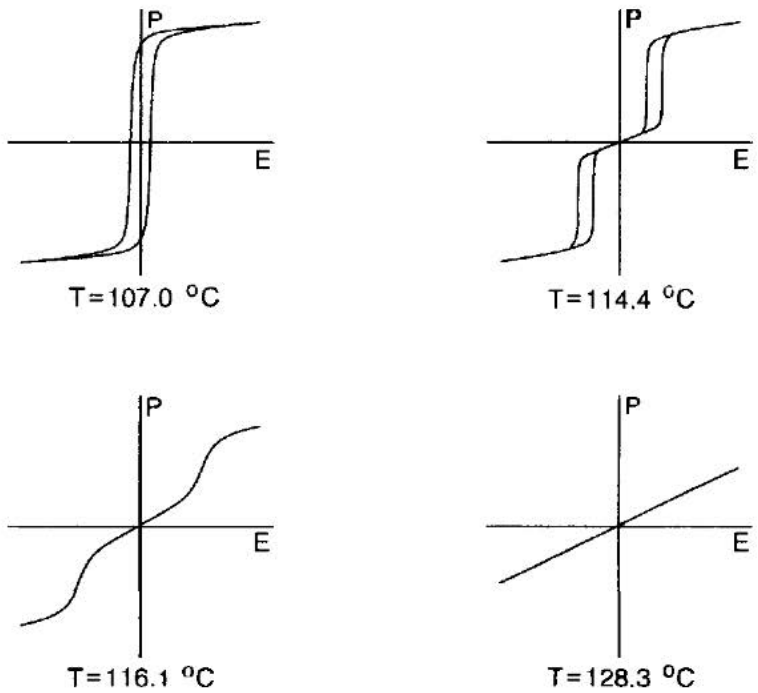


FIGURE 1.9 – Evolution de l'hystérésis de polarisation du Titanate de Baryum ($BaTiO_3$) au voisinage de sa température de Curie $T_c = 107°C$ (d'après [44]).

- $t = \frac{T-T_c}{T_c}$ est la température relative du système, avec $T \geq 0$ la température absolue et $T_c > 0$ la température critique du matériau ferroélectrique, de sorte que $t \in [-1, 0)$ dans la phase ferroélectrique ;
- $\varkappa_{\|} = \frac{C}{T_c}$ est le paramètre de déplacement, avec $C > 0$ la constante de Curie [66] ;
- ξ est le tenseur de longueurs de corrélation ;
- P_0 est la polarisation saturée du matériau à basse température.

Finalement, l'énergie du dispositif ferroélectrique est exprimée comme suit,

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(P,\varphi) &= \int_{\Omega_f} \frac{4\pi}{\varkappa_{\|}} \left(\frac{t}{2} P(\mathrm{x})^2 + \frac{1}{4}\frac{1}{P_0^2} P(\mathrm{x})^4 + \frac{1}{2} \nabla P(\mathrm{x}) \cdot (\xi(\mathrm{x}) \nabla P(\mathrm{x})) \right) d\mathrm{x} \\ &\quad + \int_{\Omega_f} \partial_z \varphi(\mathrm{x}) P(\mathrm{x}) d\mathrm{x} - \int_{\Omega} \frac{1}{8\pi} \nabla \varphi(\mathrm{x}) \cdot (\varepsilon(\mathrm{x}) \nabla \varphi(\mathrm{x}))\, d\mathrm{x}. \end{aligned} \tag{1.7}$$

Notons que le potentiel de Gibbs permet une compréhension intuitive du comportement de la polarisation en l'absence de champ électrique. Nous pouvons en effet montrer, à l'aide du calcul des variations, que les extrema de la fonctionnelle d'énergie $P \longmapsto \int_{\Omega_f} \tilde{\mathcal{F}}(P,0) d\mathrm{x}$, que nous appellerons *énergie de Gibbs*, vérifient l'équation d'état (voir *e.g.* [58]) :

$$\frac{4\pi}{\varkappa_{\|}} \left(t + \frac{1}{P_0^2} P^2 \right) P = 0.$$

Au dessus de la température de Curie, *i.e.* pour $t \geq 0$, l'énergie de Gibbs admet un unique extremum, pour lequel $P = 0$ (voir Figure 1.10). Pour $t < 0$, la situation est différente : elle admet deux minima atteints en $P = \pm P_r$ et un maximum en $P = 0$. Nous obtenons en particulier une estimation de la polarisation rémanente :

$$P_r \approx P_0 |t|^{1/2}. \tag{1.8}$$

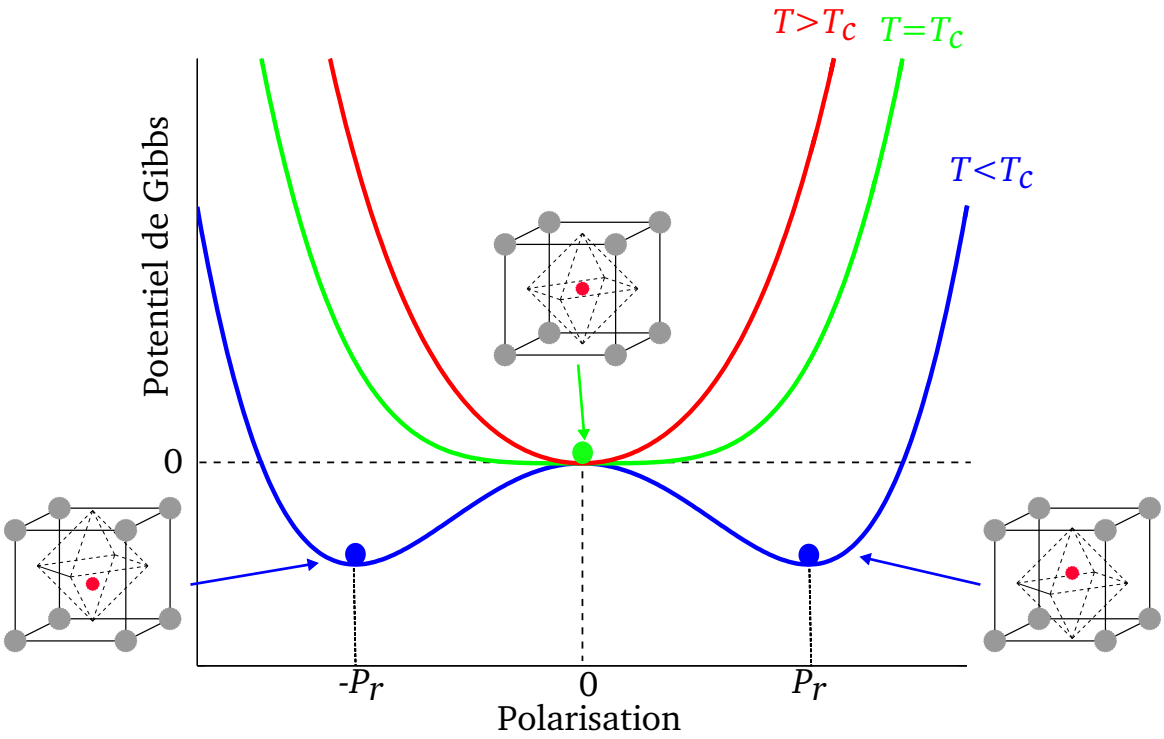


FIGURE 1.10 – Potentiel de Gibbs en fonction de la polarisation.

Le potentiel $\mathcal{F}(P,0) - EP$ permet de mieux comprendre plusieurs phénomènes. Tout d'abord, l'évolution de $\mathcal{F}(P,0) - EP$ en fonction de P pour différentes valeurs de E permet de justifier plus précisément pourquoi la polarisation est reliée au champ électrique suivant une boucle d'hystérésis. Sur la Figure 1.11, nous voyons que si E augmente, le puits de potentiel négatif devient de moins en moins marqué, jusqu'à ne plus être un minimum : seul le minimum positif subsiste, ce qui explique qu'il n'existe qu'un seul profil de polarisation lorsque le champ électrique est fort. Le même type de comportement se produit lorsque E diminue. Ces observations peuvent être expliquées analytiquement. Les états critiques associés à l'énergie $\int_{\Omega_f}(\mathcal{F}(P,0) - EP)dx$ vérifient l'équation d'état (voir *e.g.* [58]),

$$\frac{4\pi}{\varkappa_\parallel}\left(t + \frac{1}{P_0^2}P^2\right)P = E.$$

Cette équation admet, de par la méthode de Cardan (voir *e.g.* [3]), exactement trois solutions réelles distinctes si, et seulement si,

$$-4(tP_0^2)^3 - 27\left(-\frac{\varkappa_\parallel}{4\pi}P_0^2E\right)^2 > 0,$$

i.e. $|E| < E_c$, où une estimation du champ coercitif est donnée par,

$$E_c \simeq \frac{8\pi}{3\sqrt{3}\varkappa_\parallel}P_0|t|^{3/2}.$$

Sous cette condition, les solutions de l'équation sont :

$$P^{(k)} = \frac{2}{\sqrt{3}}|t|^{1/2}P_0\cos\left(\frac{1}{3}\mathrm{Arccos}\left(\frac{E}{E_c}\right) + \frac{2k\pi}{3}\right), \quad k = 0,1,2.$$

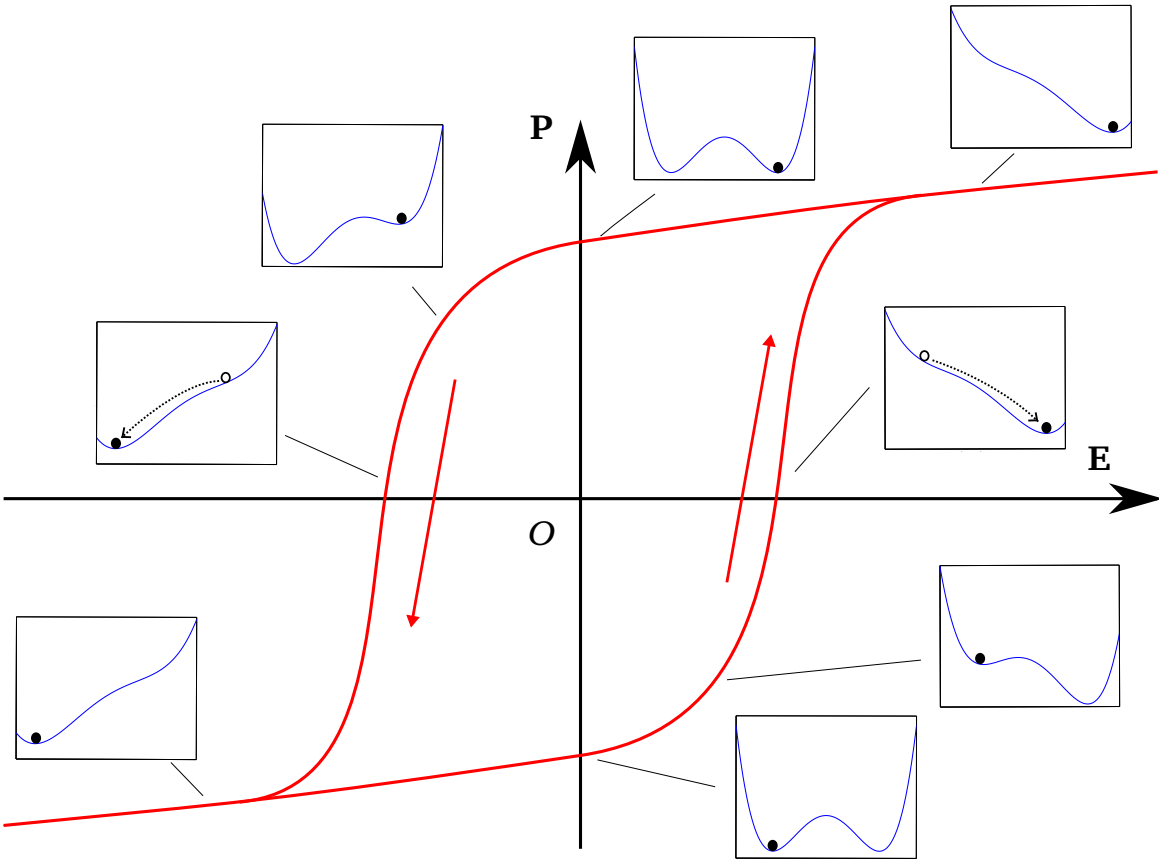


FIGURE 1.11 – Evolution des courbes de potentiel (dans les encadrés) le long de la boucle d'hystérésis ; les boules noires indiquent les états minimisants.

Nous retrouvons en particulier l'existence de plusieurs états de polarisation distincts à faible champ électrique et d'un unique état uniforme lorsque le champ est plus important. Lorsque $E \approx 0$, nous avons, avec les développements limités de Arccos puis cos,

$$\begin{aligned} P^{(0)} &\approx \frac{2}{\sqrt{3}}|t|^{1/2}P_0 \cos\left(\frac{1}{3}\left(\frac{\pi}{2} - \frac{3\sqrt{3}}{8\pi}\frac{\varkappa_\parallel}{P_0}\frac{1}{|t|^{3/2}}E\right)\right) \\ &\approx \frac{2}{\sqrt{3}}|t|^{1/2}P_0\left(\frac{\sqrt{3}}{2} + \frac{1}{2}\frac{\sqrt{3}}{8\pi}\frac{\varkappa_\parallel}{P_0}\frac{1}{|t|^{3/2}}E\right) \\ &= |t|^{1/2}P_0 + \frac{\varkappa_\parallel}{8\pi}\frac{1}{|t|}E. \end{aligned}$$

De même, nous pouvons montrer que,

$$P^{(1)} \approx -|t|^{1/2}P_0 + \frac{\varkappa_\parallel}{8\pi}\frac{1}{|t|}E.$$

Enfin, dans la phase paraélectrique, nous avons,

$$\begin{aligned} P^{(2)} &\approx \frac{2}{\sqrt{3}}|t|^{1/2}P_0 \cos\left(\frac{1}{3}\left(\frac{\pi}{2} - \frac{3\sqrt{3}}{8\pi}\frac{\varkappa_\parallel}{P_0}\frac{1}{|t|^{3/2}}E\right) + \frac{4\pi}{3}\right) \\ &\approx \frac{2}{\sqrt{3}}|t|^{1/2}P_0\left(-\frac{\sqrt{3}}{8\pi}\frac{\varkappa_\parallel}{P_0}\frac{1}{|t|^{3/2}}E\right) \\ &= \frac{\varkappa_\parallel}{4\pi t}E, \end{aligned}$$

et nous reconnaissons la loi de Curie (voir *e.g.* [58]).

1.2.3 Modèle ferroélectrique

Nous souhaitons déterminer, à l'aide du calcul des variations, un système d'équations aux dérivées partielles dont les inconnues (P, φ) sont les extrema locaux de l'énergie. Considérons $(P, \varphi) \in C^\infty(\overline{\Omega_f}) \times C^\infty(\overline{\Omega})$ et une perturbation $(\delta P, \delta\varphi) \in C^\infty(\overline{\Omega_f}) \times C^\infty(\overline{\Omega})$. Supposons que les composantes de ξ et ε sont bornées, et considérons la fonction,

$$j : \alpha \in \mathbf{R} \longmapsto \mathcal{E}(P + \alpha\delta P, \varphi + \alpha\delta\varphi) \in \mathbf{R}.$$

Le taux d'accroissement de j en 0 s'écrit, pour $\alpha \neq 0$,

$$\begin{aligned} \frac{j(\alpha) - j(0)}{\alpha} &= \frac{\mathcal{E}(P + \alpha\delta P, \varphi + \alpha\delta\varphi) - \mathcal{E}(P, \varphi)}{\alpha} \\ &= \int_{\Omega_f} \frac{4\pi}{\varkappa_\parallel}\Big(tP\delta P + \frac{t}{2}\alpha\delta P^2\Big)dx + \int_{\Omega_f} \frac{4\pi}{\varkappa_\parallel}\frac{1}{P_0^2}\Big(P^3\delta P \\ &\quad + \frac{3}{2}\alpha P^2\delta P^2 + \alpha^2 P\delta P^3 + \frac{1}{4}\alpha^3\delta P^4\Big)dx \\ &\quad + \int_{\Omega_f} \frac{4\pi}{\varkappa_\parallel}\left(\left(\frac{\xi + \xi^T}{2}\nabla P\right)\cdot\nabla\delta P + \frac{1}{2}\alpha\nabla\delta P\cdot(\xi\nabla\delta P)\right)dx \\ &\quad + \int_{\Omega_f}(\partial_z\varphi)\delta P dx + \int_{\Omega_f}(\partial_z\delta\varphi)P dx + \int_{\Omega_f}\alpha(\partial_z\delta\varphi)\delta P dx \\ &\quad - \int_{\Omega}\frac{1}{4\pi}\left(\left(\frac{\varepsilon + \varepsilon^T}{2}\nabla\varphi\right)\cdot\nabla\delta\varphi + \frac{1}{2}\alpha\nabla\delta\varphi\cdot(\varepsilon\nabla\delta\varphi)\right)dx, \end{aligned}$$

d'où,

$$\begin{aligned} j'(0) &= \int_{\Omega_f} \frac{4\pi}{\varkappa_\parallel} tP\delta P d\mathrm{x} + \int_{\Omega_f} \frac{4\pi}{\varkappa_\parallel} \frac{1}{P_0^2} P^3 \delta P d\mathrm{x} \\ &+ \int_{\Omega_f} \frac{4\pi}{\varkappa_\parallel} \left(\frac{\xi + \xi^T}{2} \nabla P \right) \cdot \nabla \delta P d\mathrm{x} + \int_{\Omega_f} (\partial_z \varphi) \delta P d\mathrm{x} \\ &+ \int_{\Omega_f} (\partial_z \delta\varphi) P d\mathrm{x} - \int_{\Omega} \frac{1}{4\pi} \left(\frac{\varepsilon + \varepsilon^T}{2} \nabla \varphi \right) \cdot \nabla \delta\varphi d\mathrm{x}. \end{aligned}$$

Si (P, φ) est un extremum de $\mathcal{E}$, nous avons en particulier $j'(0) = 0$, et alors,

$$\begin{aligned} &\int_{\Omega_f} \frac{4\pi}{\varkappa_\parallel} \left(tP\delta P + \frac{1}{P_0^2} P^3 \delta P + \left(\frac{\xi + \xi^T}{2} \nabla P \right) \cdot \nabla \delta P \right) d\mathrm{x} \\ &+ \int_{\Omega_f} (\partial_z \varphi) \delta P d\mathrm{x} + \int_{\Omega_f} (\partial_z \delta\varphi) P d\mathrm{x} \\ &- \int_{\Omega} \frac{1}{4\pi} \left(\frac{\varepsilon + \varepsilon^T}{2} \nabla \varphi \right) \cdot \nabla \delta\varphi d\mathrm{x} = 0. \end{aligned} \tag{1.9}$$

Pour $\delta P \in \mathcal{D}(\Omega_f)$ et $\delta\varphi \equiv 0$, (1.9) devient, à l'aide de la formule de Green,

$$\int_{\Omega_f} \left[\frac{4\pi}{\varkappa_\parallel} \left(tP + \frac{1}{P_0^2} P^3 - \nabla \cdot \frac{\xi + \xi^T}{2} \nabla P \right) + \partial_z \varphi \right] \delta P d\mathrm{x} = 0.$$

Rappelons le lemme fondamental du calcul des variations.

Lemme 1.1 (voir *e.g.* [14])**.**
Soient $n \in \mathbf{N}^\star$ et $\Omega \subset \mathbf{R}^n$. Soit $f \in L^1_{\mathrm{loc}}(\Omega)$ vérifiant,

$$\int_{\Omega} fg = 0 \quad \forall g \in \mathcal{D}(\Omega).$$

Alors, $f \equiv 0$ presque partout dans Ω.

Ce lemme fournit, puisque P, φ et ξ sont suffisamment régulières,

$$\frac{4\pi}{\varkappa_\parallel} \left(tP + \frac{1}{P_0^2} P^3 - \nabla \cdot \left(\frac{\xi + \xi^T}{2} \nabla P \right) \right) + \partial_z \varphi = 0 \quad \text{presque partout dans } \Omega_f. \tag{1.10}$$

Pour $\delta P \equiv 0$ et $\delta\varphi \in \mathcal{D}(\Omega_f)$ dans (1.9), nous obtenons, encore à l'aide de la formule de Green et du lemme fondamental du calcul des variations,

$$-\partial_z P + \frac{1}{4\pi} \nabla \cdot \left(\frac{\varepsilon + \varepsilon^T}{2} \nabla \varphi \right) = 0 \quad \text{presque partout dans } \Omega_f. \tag{1.11}$$

De même, avec $\delta P \equiv 0$ et $\delta\varphi \in \mathcal{D}(\Omega_p)$, il découle de (1.9) :

$$\nabla \cdot \left(\frac{\varepsilon + \varepsilon^T}{2} \nabla \varphi \right) = 0 \quad \text{presque partout dans } \Omega_p. \tag{1.12}$$

Finalement les équations (1.10)-(1.12) forment un système d'équations aux dérivées partielles, que nous appellerons *système de Ginzburg-Landau Electrostatique (GLE)*, puisqu'il fait intervenir à la fois les équations de l'Electrostatique et la théorie de Ginzburg-Landau.

Quitte à remplacer ξ par $\frac{\xi+\xi^T}{2}$ dans ce système, nous pouvons supposer sans perte de généralité, que ξ est symétrique. De même, nous considérons que le tenseur ε est symétrique. Le système (GLE) devient alors :

$$\left\{\begin{array}{rcll} tP + \left(\dfrac{P}{P_0}\right)^2 P - \nabla\cdot(\xi\nabla P) + \dfrac{\varkappa_\parallel}{4\pi}\partial_z\varphi & = & 0 & \text{dans } \Omega_f, \\ -\nabla\cdot(\varepsilon\nabla\varphi) + 4\pi\partial_z P & = & 0 & \text{dans } \Omega_f, \\ -\nabla\cdot(\varepsilon\nabla\varphi) & = & 0 & \text{dans } \Omega_p. \end{array}\right. \tag{1.13}$$

Notons qu'avec,

$$\mathbf{D} = \left\{\begin{array}{ll} \varepsilon\mathbf{E} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 4\pi P \end{pmatrix} & \text{dans } \Omega_f, \\ \varepsilon\mathbf{E} & \text{dans } \Omega_p, \end{array}\right. \tag{1.14}$$

les deux dernières équations deviennent :

$$\left\{\begin{array}{rcll} \nabla\cdot\mathbf{D} & = & 0 & \text{dans } \Omega_f, \\ \nabla\cdot\mathbf{D} & = & 0 & \text{dans } \Omega_p, \end{array}\right. \tag{1.15}$$

et sont donc une réécriture de l'équation de Maxwell-Gauss dans Ω_f et dans Ω_p.

Chapitre 2

Etude variationnelle du modèle

Nous introduisons dans ce chapitre un modèle qui permet d'étudier la formation des domaines dans des nanostructures ferroélectriques. Celui-ci fait usage du système (GLE) formé dans le chapitre précédent. Nous le complétons avec des conditions à l'interface ferroélectrique/paraélectrique, ainsi qu'avec des conditions aux limites. Après avoir introduit une formulation variationnelle du système (GLE), nous établissons un résultat d'existence de solutions.

2.1 Préliminaires

On se place dans le cadre où la nanostructure ferroélectrique est représentée par un ouvert $\Omega \subset \mathbf{R}^3$, tandis que la couche ferroélectrique est désignée par l'ouvert $\Omega_f \subset \Omega$ et $\Omega_p = \Omega \setminus \overline{\Omega_f}$ constitue l'environnement paraélectrique (voir par exemple la Figure 2.1). Ces trois ouverts sont par ailleurs supposés connexes. On note $S_f = \overline{\Omega_f} \cap \overline{\Omega_p}$ l'interface entre la couche ferroélectrique et l'environnement paraélectrique et $S = \partial\Omega$ la frontière de Ω. On suppose que S_f et S sont continûment lipschitziennes.

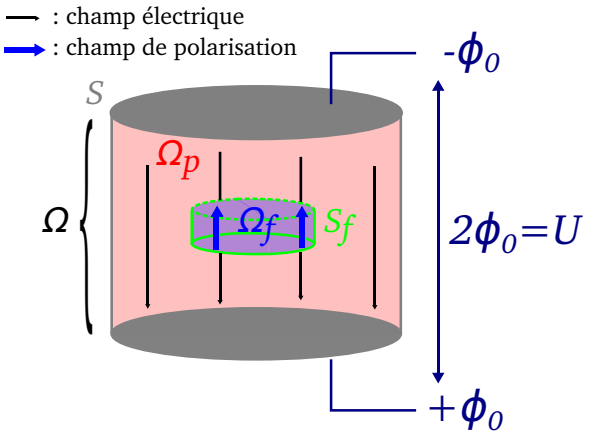


FIGURE 2.1 – Exemple de dispositif ferroélectrique.

Avec ces notations, les équations du système (GLE) se récrivent comme ci-dessous,

$$\begin{cases} tP + \left(\dfrac{P}{P_0}\right)^2 P - \nabla \cdot (\xi \nabla P) + \dfrac{\varkappa_{\|}}{4\pi}\partial_z \varphi &= 0 \quad \text{dans } \Omega_f, \\ -\nabla \cdot (\varepsilon \nabla \varphi) + 4\pi \partial_z P &= 0 \quad \text{dans } \Omega_f, \\ -\nabla \cdot (\varepsilon \nabla \varphi) &= 0 \quad \text{dans } \Omega_p. \end{cases} \tag{2.1}$$

Le champ φ vérifie à l'interface ferroélectrique/paraélectrique la condition de continuité :

$$\varphi|_{\Omega_f} = \varphi|_{\Omega_p} \quad \text{sur } S_f. \tag{2.2}$$

D'autre part, le champ de déplacement électrique étant tel que,

$$\nu \cdot (\mathbf{D}|_{\Omega_f} - \mathbf{D}|_{\Omega_p}) = 0 \quad \text{sur } S_f,$$

avec $\nu = (\nu_x, \nu_y, \nu_z)^T$ le vecteur unitaire de la normale extérieure à Ω_f, il suit que,

$$\nu \cdot ((\varepsilon \nabla \varphi)|_{\Omega_f} - (\varepsilon \nabla \varphi)|_{\Omega_p}) - 4\pi \nu_z P = 0 \quad \text{sur } S_f. \tag{2.3}$$

En effet, d'après (1.14), on a,

$$\mathbf{D}|_{\Omega_f} = -(\varepsilon \nabla \varphi)|_{\Omega_f} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 4\pi P \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \mathbf{D}|_{\Omega_p} = -(\varepsilon \nabla \varphi)|_{\Omega_p}.$$

Par ailleurs, le champ de polarisation vérifie,

$$\nu \cdot (\xi \nabla P) = 0 \quad \text{sur } S_f. \tag{2.4}$$

Enfin, le dispositif ferroélectrique est tel que les deux électrodes fixées sur les faces supérieures et inférieures y apposent respectivement un potentiel de courant $-\phi_0$ et ϕ_0, de façon à générer un courant électrique de tension $U = 2\phi_0$ (voir Figure 2.1) ; ce que l'on peut modéliser à travers une condition de Dirichlet sur toute la frontière,

$$\varphi = \varphi_S \quad \text{sur } S, \tag{2.5}$$

où φ_S est une fonction définie comme suit. En notant par z_{max} l'altitude maximale du dispositif et z_{min} son altitude minimale, de sorte que $\Omega \subset \mathbf{R}^2 \times [z_{min}, z_{max}]$, on a que cette fonction relie linéairement ϕ_0 à $-\phi_0$:

$$\varphi_S(x, y, z) = 2\frac{z - z_{max}}{z_{min} - z_{max}}\phi_0 - \phi_0 \quad \forall (x, y, z) \in S. \tag{2.6}$$

Les conditions (2.2)-(2.5) complètent finalement les équations (2.1) et nous avons donc que les champs P et φ satisfont :

$$\begin{cases} tP + \left(\dfrac{P}{P_0}\right)^2 P - \nabla\cdot(\xi\nabla P) + \dfrac{\varkappa_\parallel}{4\pi}\partial_z\varphi = 0 & \text{dans } \Omega_f, \\ -\nabla\cdot(\varepsilon\nabla\varphi) + 4\pi\partial_z P = 0 & \text{dans } \Omega_f, \\ -\nabla\cdot(\varepsilon\nabla\varphi) = 0 & \text{dans } \Omega_p, \\ \varphi|_{\Omega_f} = \varphi|_{\Omega_p} & \text{sur } S_f, \\ \nu\cdot((\varepsilon\nabla\varphi)|_{\Omega_f} - (\varepsilon\nabla\varphi)|_{\Omega_p}) - 4\pi\nu_z P = 0 & \text{sur } S_f, \\ \nu\cdot(\xi\nabla P) = 0 & \text{sur } S_f, \\ \varphi = \varphi_S & \text{sur } S. \end{cases}$$

Nous désignons encore par *système (GLE)* le modèle ainsi formulé, où,

- $t \in [-1, 0]$ est la température relative du système ;
- $P_0 \neq 0$ est la polarisation saturée du matériau à basse température ;
- $\varkappa_\parallel \geq 0$ est le paramètre de déplacement ;
- $\xi = (\xi_{i,j})_{1\leq i,j\leq 3}$ est le tenseur de longueurs de corrélation, ξ_0-elliptique et dont chaque composante est bornée ;
- $\varepsilon = (\varepsilon_{i,j})_{1\leq i,j\leq 3}$ le tenseur de permittivité, ε_0-elliptique et dont chaque composante est bornée ;
- φ_S est la fonction (régulière) introduite en (2.6).

2.2 Formulation variationnelle

En désignant par w une fonction (assez régulière) dans Ω telle que $w|_S = \varphi_S$, nous considérons depuis (GLE) le système qui s'écrit comme suit. Trouver $P : \overline{\Omega_f} \longrightarrow \mathbf{R}$, $\varphi : \overline{\Omega} \longrightarrow \mathbf{R}$ satisfaisant :

$$\begin{cases} tP + \left(\dfrac{P}{P_0}\right)^2 P - \nabla\cdot(\xi\nabla P) + \dfrac{\varkappa_\parallel}{4\pi}\partial_z\varphi = -\dfrac{\varkappa_\parallel}{4\pi}\partial_z w & \text{dans } \Omega_f, \quad (2.7) \\ -\nabla\cdot(\varepsilon\nabla\varphi) + 4\pi\partial_z P = \nabla\cdot(\varepsilon\nabla w) & \text{dans } \Omega_f, \quad (2.8) \\ -\nabla\cdot(\varepsilon\nabla\varphi) = \nabla\cdot(\varepsilon\nabla w) & \text{dans } \Omega_p, \quad (2.9) \\ \varphi|_{\Omega_f} = \varphi|_{\Omega_p} & \text{sur } S_f, \quad (2.10) \\ \nu\cdot((\varepsilon\nabla\varphi)|_{\Omega_f} - (\varepsilon\nabla\varphi)|_{\Omega_p}) - 4\pi\nu_z P = -\nu\cdot((\varepsilon\nabla w)|_{\Omega_f} - (\varepsilon\nabla w)|_{\Omega_p}) & \text{sur } S_f, \quad (2.11) \\ \nu\cdot(\xi\nabla P) = 0 & \text{sur } S_f, \quad (2.12) \\ \varphi = 0 & \text{sur } S. \quad (2.13) \end{cases}$$

Nous introduisons l'espace fonctionnel,

$$W = H^1(\Omega_f) \times H^1_0(\Omega),$$

que nous munissons du produit scalaire $(\cdot,\cdot)_W$, tel que pour $(P,\varphi),(Q,\psi) \in W$,

$$((P,\varphi),(Q,\psi))_W = \int_{\Omega_f} PQ\mathrm{d}x + \int_{\Omega_f} \nabla P\cdot\nabla Q\mathrm{d}x + \int_\Omega \nabla\varphi\cdot\nabla\psi\mathrm{d}x.$$

Nous noterons par $\|\cdot\|_W$ la norme associée à $(\cdot,\cdot)_W$, où :

$$\|(P,\varphi)\|_W = \left(\|P\|^2_{H^1(\Omega_f)} + |\varphi|^2_{H^1(\Omega)}\right)^{1/2}.$$

Une formulation variationnelle de (2.7)-(2.13) consiste à trouver $(P, \varphi) \in W$ tel que, pour tout $(Q, \psi) \in W$, on ait :

$$\begin{cases} \displaystyle\int_{\Omega_f} tPQ\mathrm{d}x + \int_{\Omega_f} \frac{P^3}{P_0^2} Q\mathrm{d}x + \int_{\Omega_f} (\xi\nabla P)\cdot\nabla Q\mathrm{d}x + \int_{\Omega_f} \frac{\varkappa_\parallel}{4\pi}(\partial_z\varphi)Q\mathrm{d}x \\ \qquad\qquad = -\displaystyle\int_{\Omega_f} \frac{\varkappa_\parallel}{4\pi}(\partial_z w)Q\mathrm{d}x, \qquad (2.14) \\ \displaystyle\int_{\Omega} (\varepsilon\nabla\varphi)\cdot\nabla\psi\mathrm{d}x - \int_{S_f} 4\pi\nu_z P\psi\mathrm{d}\sigma + \int_{\Omega_f} 4\pi(\partial_z P)\psi\mathrm{d}x \\ \qquad\qquad = -\displaystyle\int_{\Omega} (\varepsilon\nabla w)\cdot\nabla\psi\mathrm{d}x. \qquad (2.15) \end{cases}$$

Notons que si $P \in H^1(\Omega_f)$, alors nous avons en particulier $P \in L^q(\Omega_f)$, pour $1 \le q \le 6$ (voir *e.g.* [28]), et donc le terme $\int_{\Omega_f} \frac{1}{P_0^2} P^3 Q\mathrm{d}x$ est correctement défini :

$$\int_{\Omega_f} \frac{1}{P_0^2} P^3 Q\mathrm{d}x \le \frac{1}{P_0^2}\left(\int_{\Omega_f} P^6\mathrm{d}x\right)^{1/2} \|Q\|_{L^2(\Omega_f)} = \frac{1}{P_0^2}\|P\|^3_{L^6(\Omega_f)}\|Q\|_{L^2(\Omega_f)}.$$

Nous obtenons de plus que l'énergie libre (*cf.* chapitre précédent) est finie :

$$\begin{aligned} \frac{\varkappa_\parallel}{4\pi}\int_{\Omega_f}\left(\frac{t}{2}P^2 + \frac{1}{4}\frac{1}{P_0^2}P^4 + \frac{1}{2}\nabla P\cdot(\xi\nabla P)\right)\mathrm{d}x \;\le\; & \frac{\varkappa_\parallel}{4\pi}\left(\frac{t}{2}\|P\|^2_{L^2(\Omega_f)} + \frac{1}{4}\frac{1}{P_0^2}\|P\|^4_{L^4(\Omega_f)}\right. \\ & \left. + \frac{9}{2}\max_{1\le i,j\le 3}\|\xi_{i,j}\|_{L^\infty(\Omega_f)}|P|^2_{H^1(\Omega_f)}\right). \end{aligned}$$

Dans la suite, nous désignerons aussi les opérateurs ∂_x, ∂_y, ∂_z par ∂_1, ∂_2, ∂_3 respectivement.

Proposition 2.1.
Supposons que $(P, \varphi) \in H^2(\Omega_f) \times H^2(\Omega)$ *vérifie le système* (2.7)-(2.13), *avec* ε, ξ *et* w *tels que* $\xi_{i,j}\partial_a P \in H^1(\Omega_f)$, $\varepsilon_{i,j}\partial_a\varphi \in H^1(\Omega_f)$, $\varepsilon_{i,j}\partial_a\varphi \in H^1(\Omega_p)$, $w \in H^2(\Omega)$, $\varepsilon_{i,j}\partial_a w \in H^1(\Omega_f)$ *et* $\varepsilon_{i,j}\partial_a w \in H^1(\Omega_p)$ *pour tout* $1 \le i, j, a \le 3$. *Alors* (P, φ) *vérifie le problème variationnel* (2.14)-(2.15).

Preuve. Soit $(P, \varphi) \in H^2(\Omega_f) \times H^2(\Omega)$ vérifiant (2.7)-(2.13). Considérons $(Q, \psi) \in W$. L'intégration de l'équation (2.7) sur Ω_f contre la fonction-test Q fournit, après application de la formule de Green,

$$\begin{aligned} &\int_{\Omega_f} tPQ\mathrm{d}x + \int_{\Omega_f} \frac{P^3}{P_0^2}Q\mathrm{d}x + \int_{\Omega_f}(\xi\nabla P)\cdot\nabla Q\mathrm{d}x - \int_{S_f}\nu\cdot(\xi\nabla P)Q\mathrm{d}\sigma \\ &+ \int_{\Omega_f}\frac{\varkappa_\parallel}{4\pi}(\partial_z\varphi)Q\mathrm{d}x = -\int_{\Omega_f}\frac{\varkappa_\parallel}{4\pi}(\partial_z w)Q\mathrm{d}x, \end{aligned}$$

ce qui permet de retrouver (2.14), compte tenu de la condition aux limites (2.12).

L'intégration de (2.8), en utilisant la formule de Green, fournit,

$$\begin{aligned} &\int_{\Omega_f}(\varepsilon\nabla\varphi)\cdot\nabla\psi\mathrm{d}x - \int_{S_f}\nu\cdot(\varepsilon\nabla\varphi)|_{\Omega_f}\psi\mathrm{d}\sigma + \int_{\Omega_f}4\pi(\partial_z P)\psi\mathrm{d}x \\ &= -\int_{\Omega_f}(\varepsilon\nabla w)\cdot\nabla\psi\mathrm{d}x + \int_{S_f}\nu\cdot(\varepsilon\nabla w)|_{\Omega_f}\psi\mathrm{d}\sigma. \end{aligned} \qquad (2.16)$$

De même, en intégrant (2.9) sur Ω_p, on obtient, avec la formule de Green et comme $\psi|_S = 0$,

$$\begin{aligned}&\int_{\Omega_p} (\varepsilon\nabla\varphi)\cdot\nabla\psi d\mathrm{x} + \int_{S_f} \nu\cdot(\varepsilon\nabla\varphi)|_{\Omega_p}\psi d\sigma\\ &= -\int_{\Omega_p} (\varepsilon\nabla w)\cdot\nabla\psi d\mathrm{x} - \int_{S_f} \nu\cdot(\varepsilon\nabla w)|_{\Omega_p}\psi d\sigma.\end{aligned} \tag{2.17}$$

L'addition de (2.16) à (2.17) donne,

$$\begin{aligned}&\int_{\Omega} (\varepsilon\nabla\varphi)\cdot\nabla\psi d\mathrm{x} - \int_{S_f} \nu\cdot\left((\varepsilon\nabla\varphi)|_{\Omega_f} - (\varepsilon\nabla\varphi)|_{\Omega_p}\right)\psi d\sigma + \int_{\Omega_f} 4\pi(\partial_z P)\psi d\mathrm{x}\\ &= -\int_{\Omega} (\varepsilon\nabla w)\cdot\nabla\psi d\mathrm{x} + \int_{S_f} \nu\cdot\left((\varepsilon\nabla w)|_{\Omega_f} - (\varepsilon\nabla w)|_{\Omega_p}\right)\psi d\sigma,\end{aligned}$$

puis, avec (2.11),

$$\int_{\Omega} (\varepsilon\nabla\varphi)\cdot\nabla\psi d\mathrm{x} - \int_{S_f} 4\pi\nu_z P\psi d\sigma + \int_{\Omega_f} 4\pi(\partial_z P)\psi d\mathrm{x} = -\int_{\Omega} (\varepsilon\nabla w)\cdot\nabla\psi d\mathrm{x},$$

ce qui permet de retrouver (2.15). □

Proposition 2.2.
Soit le problème variationnel, où S et S_f sont C^1 par morceaux, associé à (2.14)-(2.15). Supposons que $(P,\varphi)\in W$ vérifie le problème variationnel et qu'en outre,

$$(P,\varphi)\in H^2(\Omega_f)\times(H^2(\Omega)\cap H_0^1(\Omega)),$$

avec ξ, ε et w tels que $\xi_{i,j}\partial_a P\in H^1(\Omega_f)$, $\varepsilon_{i,j}\partial_a\varphi\in H^1(\Omega_f)$, $\varepsilon_{i,j}\partial_a\varphi\in H^1(\Omega_p)$, $w\in H^2(\Omega)$, $\varepsilon_{i,j}\partial_a w\in H^1(\Omega_f)$ et $\varepsilon_{i,j}\partial_a w\in H^1(\Omega_p)$ pour tout $1\le i,j,a\le 3$. Alors on a que :

$$\left\{\begin{array}{rcll} tP+\left(\dfrac{P}{P_0}\right)^2 P - \nabla\cdot(\xi\nabla P) + \dfrac{\varkappa_\parallel}{4\pi}\partial_z\varphi &=& -\dfrac{\varkappa_\parallel}{4\pi}\partial_z w & \textit{dans } L^2(\Omega_f),\\ -\nabla\cdot(\varepsilon\nabla\varphi) + 4\pi\partial_z P &=& \nabla\cdot(\varepsilon\nabla w) & \textit{dans } L^2(\Omega_f),\\ -\nabla\cdot(\varepsilon\nabla\varphi) &=& \nabla\cdot(\varepsilon\nabla w) & \textit{dans } L^2(\Omega_p),\\ \nu\cdot(\xi\nabla P) &=& 0 & \textit{dans } L^2(S_f).\end{array}\right.$$

Preuve. Soit $(P,\varphi)\in H^2(\Omega_f)\times\left(H^2(\Omega)\cap H_0^1(\Omega)\right)$ vérifiant le problème variationnel. On a de (2.14) que, pour tout $Q\in\mathcal{D}(\Omega_f)$,

$$\begin{aligned}&\int_{\Omega_f} tPQ d\mathrm{x} + \int_{\Omega_f}\frac{P^3}{P_0^2}Q d\mathrm{x} - \int_{\Omega_f}\nabla\cdot(\xi\nabla P)Q d\mathrm{x} + \int_{\Omega_f}\frac{\varkappa_\parallel}{4\pi}(\partial_z\varphi)Q d\mathrm{x}\\ &= -\int_{\Omega_f}\frac{\varkappa_\parallel}{4\pi}(\partial_z w)Q d\mathrm{x},\end{aligned}$$

i.e.,

$$\int_{\Omega_f}\left(tP+\frac{P^3}{P_0^2} - \nabla\cdot(\xi\nabla P) + \frac{\varkappa_\parallel}{4\pi}(\partial_z\varphi)\right)Q d\mathrm{x} = -\int_{\Omega_f}\frac{\varkappa_\parallel}{4\pi}(\partial_z w)Q d\mathrm{x},$$

et donc,

$$tP+\frac{P^3}{P_0^2} - \nabla\cdot(\xi\nabla P) + \frac{\varkappa_\parallel}{4\pi}\partial_z\varphi = -\frac{\varkappa_\parallel}{4\pi}\partial_z w \quad \text{dans } \mathcal{D}'(\Omega_f).$$

Il suit qu'on a,

$$tP+\frac{P^3}{P_0^2} - \nabla\cdot(\xi\nabla P) + \frac{\varkappa_\parallel}{4\pi}\partial_z\varphi = -\frac{\varkappa_\parallel}{4\pi}\partial_z w \quad \text{dans } L^2(\Omega_f).$$

Pour $\psi \in \mathcal{D}(\Omega_f)$, la relation (2.15) s'écrit,

$$\int_{\Omega_f} \left(-\nabla \cdot (\varepsilon \nabla \varphi) + 4\pi(\partial_z P)\right) \psi d\mathrm{x} = \int_{\Omega_f} \nabla \cdot (\varepsilon \nabla w) \psi d\mathrm{x},$$

d'où,

$$-\nabla \cdot (\varepsilon \nabla \varphi) + 4\pi \partial_z P = \nabla \cdot (\varepsilon \nabla w) \quad \text{dans } \mathcal{D}'(\Omega_f).$$

On en déduit,

$$-\nabla \cdot (\varepsilon \nabla \varphi) + 4\pi \partial_z P = \nabla \cdot (\varepsilon \nabla w) \quad \text{dans } L^2(\Omega_f).$$

De la même façon, en considérant $\psi \in \mathcal{D}(\Omega_p)$ dans (2.15), on obtient que :

$$-\nabla \cdot (\varepsilon \nabla \varphi) = \nabla \cdot (\varepsilon \nabla w) \quad \text{dans } L^2(\Omega_p).$$

D'autre part, on a avec la formule de Green appliquée à (2.14), pour tout $Q \in H^1(\Omega_f)$,

$$\begin{aligned}
&\int_{\Omega_f} tPQ d\mathrm{x} + \int_{\Omega_f} \frac{P^3}{P_0^2} Q d\mathrm{x} - \int_{\Omega_f} \nabla \cdot (\xi \nabla P) Q d\mathrm{x} + \int_{S_f} \nu \cdot (\xi \nabla P) Q d\sigma \\
&+ \int_{\Omega_f} \frac{\varkappa_\parallel}{4\pi} (\partial_z \varphi) Q d\mathrm{x} = - \int_{\Omega_f} \frac{\varkappa_\parallel}{4\pi} (\partial_z w) Q d\mathrm{x},
\end{aligned}$$

puis, avec ce qui précède,

$$\int_{S_f} \nu \cdot (\xi \nabla P) Q d\sigma = 0.$$

Ainsi, puisque l'espace des traces sur S_f des éléments de $H^1(\Omega_f)$ est dense dans $L^2(S_f)$, l'interface S_f étant C^1 par morceaux, il suit que,

$$\nu \cdot (\xi \nabla P) = 0 \quad \text{dans } L^2(S_f).$$

□

Notons par ailleurs que si (P, φ) vérifie le problème variationnel (2.14)-(2.15) avec les hypothèses de la Proposition 2.2, alors, pour $\psi \in H_0^1(\Omega)$, on obtient depuis (2.15) que,

$$\begin{aligned}
&-\int_{\Omega_f} \nabla \cdot (\varepsilon \nabla \varphi) \psi d\mathrm{x} + \int_{S_f} \nu \cdot (\varepsilon \nabla \varphi)|_{\Omega_f} \psi d\sigma - \int_{S_f} 4\pi \nu_z P \psi d\sigma + \int_{\Omega_f} 4\pi (\partial_z P) \psi d\mathrm{x} \\
&-\int_{\Omega_p} \nabla \cdot (\varepsilon \nabla \varphi) \psi d\mathrm{x} - \int_{S_f} \nu \cdot (\varepsilon \nabla \varphi)|_{\Omega_p} \psi d\sigma = \int_{\Omega_f} \nabla \cdot (\varepsilon \nabla w) \psi d\mathrm{x} \\
&-\int_{S_f} \nu \cdot (\varepsilon \nabla w)|_{\Omega_f} \psi d\sigma + \int_{\Omega_p} \nabla \cdot (\varepsilon \nabla w) \psi d\mathrm{x} + \int_{S_f} \nu \cdot (\varepsilon \nabla w)|_{\Omega_p} \psi d\sigma,
\end{aligned}$$

i.e.,

$$\int_{S_f} \left(\nu \cdot \left((\varepsilon \nabla \varphi)|_{\Omega_f} - (\varepsilon \nabla \varphi)|_{\Omega_p}\right) - 4\pi \nu_z P\right) \psi d\sigma = -\int_{S_f} \nu \cdot \left((\varepsilon \nabla w)|_{\Omega_f} - (\varepsilon \nabla w)|_{\Omega_p}\right) \psi d\sigma,$$

ce qui entraîne que la relation (2.11) est, de manière variationnelle, vérifiée.

Notons que cette formulation variationnelle n'est pas la seule possible qui peut être associée à (GLE). Nous pourrions en effet également faire usage de l'espace variationnel suivant, qui considère explicitement les restrictions du potentiel électrique, $\varphi_f = \varphi|_{\Omega_f}$, $\varphi_p = \varphi|_{\Omega_p}$, dans la couche ferroélectrique et dans le milieu paraélectrique environnant :

$$\tilde{W} = \left\{((P, \varphi_f), \varphi_p) \in H^1(\Omega_f)^2 \times H^1(\Omega_p), \quad \varphi_f = \varphi_p \text{ sur } S_f, \quad \varphi_p = 0 \text{ sur } S\right\}.$$

2.3 Existence de solutions variationnelles

Nous nous attachons dans ce paragraphe à démontrer l'existence de solutions de la formulation variationnelle (2.14)-(2.15) associée au système (2.7)-(2.13). Nous procédons en deux étapes, en nous inspirant aussi de [21]. Nous commençons par considérer une suite de problèmes variationnels associés à (2.14)-(2.15), dans lesquels certains termes sont tronqués *au niveau n*. Nous montrons, à l'aide du Théorème de Schauder (voir *e.g.* [26]), que chacun de ces problèmes admet une solution (Propositions 2.4 et 2.5). Nous extrayons ensuite de cette suite de solutions une sous-suite dont nous montrons (Théorème 2.6) la convergence vers une solution variationnelle du système (2.7)-(2.13) à l'aide du Théorème de Vitali (voir *e.g.* [23]).

Pour tout $n \in \mathbf{N}$, nous définissons la fonction troncature au niveau n par,

$$x \in \mathbf{R} \longmapsto T_n(x) = \max\{\min\{x, n\}, -n\} \in \mathbf{R},$$

qui s'écrit également,

$$T_n(x) = \begin{cases} -n & \text{si} \quad x \leq -n, \\ x & \text{si} \quad -n \leq x \leq n, \\ n & \text{si} \quad x \geq n. \end{cases}$$

Notons qu'on a immédiatement les trois relations suivantes,

$$\begin{cases} |T_n(x)| \leq n, \ \forall (n,x) \in \mathbf{N} \times \mathbf{R}, & (2.18) \\ |T_n(x)| \leq |x|, \ \forall (n,x) \in \mathbf{N} \times \mathbf{R}, & (2.19) \\ \forall x \in \mathbf{R}, \ \exists N_x \in \mathbf{N} \ ; \ \forall n \geq N_x, \ T_n(x) = x. & (2.20) \end{cases}$$

Avant de passer à la preuve du résultat principal, établissons un lemme calculatoire sur T_n.

Lemme 2.3.
Soit $f \in C^1(\mathbf{R}, \mathbf{R})$ avec $\lim_{x \to -\infty} f(x) = +\infty$ et $\lim_{x \to +\infty} f(x) = -\infty$. Alors, pour $n \in \mathbf{N}$, l'application $T_n \circ f$ est lipschitzienne.

Preuve 1. Une approche immédiate pour établir cet énoncé est celle qui consiste à montrer que la dérivée de $T_n \circ f$ sur $\mathbf{R} \setminus \{-n, n\}$ est bornée. □

Nous détaillons ci-dessous une preuve plus calculatoire de cet énoncé.

Preuve 2. Soit $(x, y) \in \mathbf{R}^2$. Notons :

$$\mathcal{F} = \{x \in \mathbf{R}, \ T_n \circ f(x) = f(x)\} = \{x \in \mathbf{R}, \ |f(x)| \leq n\},$$

$$\mathcal{F}^+ = \{x \in \mathbf{R}, \ T_n \circ f(x) = n\} = \{x \in \mathbf{R}, \ f(x) \geq n\},$$

et,

$$\mathcal{F}^- = \{x \in \mathbf{R}, \ T_n \circ f(x) = -n\} = \{x \in \mathbf{R}, \ f(x) \leq -n\}.$$

Ces ensembles sont non vides et $\mathcal{F}$ est borné d'après les hypothèses. Nous définissons pour la suite $x_\star = \inf(\mathcal{F})$ et $x^\star = \sup(\mathcal{F})$.

Il y a neuf cas à traiter selon l'appartenance de x et y à $\mathcal{F}$, $\mathcal{F}^+$ ou $\mathcal{F}^-$. Premièrement, si $(x, y) \in \mathcal{F}^2$ et $I_{x,y} \subset [x_\star, x^\star]$ est le segment d'extrémités x et y, alors,

$$|T_n \circ f(x) - T_n \circ f(y)| = |f(x) - f(y)| \leq \sup_{I_{x,y}}(|f'|)|x - y| \leq \sup_{[x_\star, x^\star]}(|f'|)|x - y|.$$

Supposons dans un deuxième temps $x \in \mathcal{F}^+$ et $y \in \mathcal{F}$. Il existe $a_y \in \mathcal{F}^+$ satisfaisant $|a_y - y| = \inf_{u\in\mathcal{F}^+} |u-y|$. Si $f(a_y) > n$, alors, puisque f est continue, le théorème des valeurs intermédiaires entraîne l'existence de w entre a_y et y tel que $f(w) = n$, d'où $w \in \mathcal{F}^+$, ce qui contredit la définition de a_y. Donc $f(a_y) = n$. En notant $I_{a_y,y}$ le segment d'extrémités a_y et y, on a :

$$|T_n \circ f(x) - T_n \circ f(y)| = |n - f(y)| = |f(a_y) - f(y)| \leq \sup_{I_{a_y,y}} (|f'|)|a_y - y|.$$

Or $a_y \in \mathcal{F}$ (puisque $f(a_y) = n$), donc on a $I_{a_y,y} \subset [x_\star, x^\star]$. Le calcul précédent devient alors,

$$|T_n \circ f(x) - T_n \circ f(y)| \leq \sup_{[x_\star,x^\star]} (|f'|)|a_y - y| \leq \sup_{[x_\star,x^\star]} (|f'|)|x - y|.$$

Fixons ensuite $x \in \mathcal{F}^+$ et $y \in \mathcal{F}^-$. Soit $a_y \in \mathcal{F}^+$ tel que $|a_y - y| = \inf_{u\in\mathcal{F}^+} |u-y|$ et $a_x \in \mathcal{F}^-$ tel que $|a_x - a_y| = \inf_{v\in\mathcal{F}^-} |a_y - v|$. De même qu'avant, on montre que :

$$|T_n \circ f(x) - T_n \circ f(y)| = |f(a_y) - f(a_x)| \leq \sup_{[x_\star,x^\star]} (|f'|)|a_y - a_x| \leq \sup_{[x_\star,x^\star]} (|f'|)|x - y|.$$

Le cas $(x, y) \in (\mathcal{F}^+)^2$ est trivial. Les autres couples envisageables se traitent de manière similaire aux précédents et fournissent, pour tout $(x, y) \in \mathbf{R}^2$,

$$|T_n \circ f(x) - T_n \circ f(y)| \leq \sup_{[x_\star,x^\star]} (|f'|)|x - y|,$$

ce qui traduit que $T_n \circ f$ est lipschitzienne. □

Afin de simplifier les notations dans la suite, nous introduisons la fonction,

$$g : x \in \mathbf{R} \longmapsto (1-t)x - \frac{x^3}{P_0^2} \in \mathbf{R}.$$

Proposition 2.4.
Soient $n \in \mathbf{N}$ et $(\overline{P}_n, \overline{\varphi}_n) \in W$. Il existe un unique $(P_n, \varphi_n) \in W$ vérifiant, pour tout $(Q, \psi) \in W$,

$$\begin{cases} \displaystyle\int_{\Omega_f} P_n Q d\mathrm{x} + \int_{\Omega_f} (\xi \nabla P_n) \cdot \nabla Q d\mathrm{x} + \int_{\Omega_f} \frac{\varkappa_\parallel}{4\pi} (\partial_z \varphi_n) Q d\mathrm{x} \\ \displaystyle= \int_{\Omega_f} \left(T_n \circ g \circ \overline{P}_n\right) Q d\mathrm{x} - \int_{\Omega_f} \frac{\varkappa_\parallel}{4\pi} (\partial_z w) Q d\mathrm{x}, \\ \displaystyle\int_{\Omega} (\varepsilon \nabla \varphi_n) \cdot \nabla \psi d\mathrm{x} - \int_{S_f} 4\pi \nu_z P_n \psi d\sigma + \int_{\Omega_f} 4\pi (\partial_z P_n) \psi d\mathrm{x} \\ \displaystyle= -\int_{\Omega} (\varepsilon \nabla w) \cdot \nabla \psi d\mathrm{x}. \end{cases} \tag{2.21}$$

Preuve. En ajoutant à la première égalité la seconde multipliée par $\frac{\varkappa_\parallel}{16\pi^2}$, on obtient :

$$a\left((P_n, \varphi_n), (Q, \psi)\right) = L\left(Q, \psi\right) \quad \forall (Q, \psi) \in W,$$

où,

$$\begin{aligned} a\left((P_n, \varphi_n), (Q, \psi)\right) \;=\; & \int_{\Omega_f} P_n Q d\mathrm{x} + \int_{\Omega_f} (\xi \nabla P_n) \cdot \nabla Q d\mathrm{x} + \int_{\Omega} \frac{\varkappa_\parallel}{16\pi^2} (\varepsilon \nabla \varphi_n) \cdot \nabla \psi d\mathrm{x} \\ & + \int_{\Omega_f} \frac{\varkappa_\parallel}{4\pi} (\partial_z \varphi_n) Q d\mathrm{x} - \int_{S_f} \frac{\varkappa_\parallel}{4\pi} \nu_z P_n \psi d\sigma + \int_{\Omega_f} \frac{\varkappa_\parallel}{4\pi} (\partial_z P_n) \psi d\mathrm{x}, \end{aligned}$$

et,

$$L(Q,\psi) \;=\; \int_{\Omega_f}\left(T_n\circ g\circ \overline{P}_n\right)Q\mathrm{d}x - \int_{\Omega_f}\frac{\varkappa_{\|}}{4\pi}(\partial_z w)Q\mathrm{d}x - \int_{\Omega}\frac{\varkappa_{\|}}{16\pi^2}(\varepsilon\nabla w)\cdot\nabla\psi\mathrm{d}x.$$

Montrons que le théorème de Lax-Milgram s'applique ici. Nous avons d'abord :

$$\begin{aligned}
\left|\int_{\Omega_f}(\xi\nabla P_n)\cdot\nabla Q\mathrm{d}x\right| &= \left|\int_{\Omega_f}\sum_{i,j=1}^{3}\xi_{i,j}(\partial_j P_n)(\partial_i Q)\mathrm{d}x\right| \\
&\leq \max_{1\leq i,j\leq 3}\|\xi_{i,j}\|_{L^\infty(\Omega_f)}\sum_{i,j=1}^{3}\int_{\Omega_f}|(\partial_j P_n)(\partial_i Q)|\mathrm{d}x \\
&\leq \max_{1\leq i,j\leq 3}\|\xi_{i,j}\|_{L^\infty(\Omega_f)}\sum_{i,j=1}^{3}\|P_n\|_{H^1(\Omega_f)}\|Q\|_{H^1(\Omega_f)} \\
&\leq \left(9\max_{1\leq i,j\leq 3}\|\xi_{i,j}\|_{L^\infty(\Omega_f)}\right)\|(P_n,\varphi_n)\|_W\|(Q,\psi)\|_W.
\end{aligned}$$

De la même manière, nous obtenons,

$$\left|\int_{\Omega}(\varepsilon\nabla\varphi_n)\cdot\nabla\psi\mathrm{d}x\right| \leq \left(9\max_{1\leq i,j\leq 3}\|\varepsilon_{i,j}\|_{L^\infty(\Omega)}\right)\|(P_n,\varphi_n)\|_W\|(Q,\psi)\|_W.$$

De plus,

$$\left|\int_{\Omega_f}P_nQ\mathrm{d}x\right| \leq \|P_n\|_{L^2(\Omega_f)}\|Q\|_{L^2(\Omega_f)} \leq \|(P_n,\varphi_n)\|_W\|(Q,\psi)\|_W,$$

et,

$$\left|\int_{\Omega_f}(\partial_z\varphi_n)Q\mathrm{d}x\right| \leq \|\partial_z\varphi_n\|_{L^2(\Omega_f)}\|Q\|_{L^2(\Omega_f)} \leq \|\partial_z\varphi_n\|_{L^2(\Omega)}\|Q\|_{L^2(\Omega_f)} \leq \|(P_n,\varphi_n)\|_W\|(Q,\psi)\|_W.$$

Aussi, avec la formule de Green,

$$\begin{aligned}
\left|\int_{\Omega_f}(\partial_z P_n)\psi\mathrm{d}x - \int_{S_f}\nu_z P_n\psi d\sigma\right| &= \left|\int_{\Omega_f}(\partial_z\psi)P_n\mathrm{d}x\right| \\
&\leq \|\partial_z\psi\|_{L^2(\Omega_f)}\|P_n\|_{L^2(\Omega_f)} \\
&\leq \|(P_n,\varphi_n)\|_W\|(Q,\psi)\|_W.
\end{aligned}$$

Finalement,

$$|a\left((P_n,\varphi_n),(Q,\psi)\right)| \leq C\|(P_n,\varphi_n)\|_W\|(Q,\psi)\|_W,$$

avec,

$$C = 1 + 9\max_{1\leq i,j\leq 3}\|\xi_{i,j}\|_{L^\infty(\Omega_f)} + \frac{9\varkappa_{\|}}{16\pi^2}\max_{1\leq i,j\leq 3}\|\varepsilon_{i,j}\|_{L^\infty(\Omega)} + \frac{\varkappa_{\|}}{2\pi},$$

ce qui assure que la forme bilinéaire $a(\cdot,\cdot)$ est continue.

Montrons ensuite que la forme bilinéaire $a(\cdot,\cdot)$ est elliptique. On a d'abord,

$$\left|\int_{\Omega_f}(\xi\nabla P_n)\cdot\nabla P_n\mathrm{d}x\right| \geq \xi_0|P_n|^2_{H^1(\Omega_f)}.$$

De même,

$$\left|\int_{\Omega}(\varepsilon\nabla\varphi_n)\cdot\nabla\varphi_n\mathrm{d}x\right| \geq \varepsilon_0|\varphi_n|^2_{H^1(\Omega)}.$$

Par ailleurs la formule de Green fournit :

$$\frac{\varkappa_{\|}}{4\pi}\int_{\Omega_f}(\partial_z\varphi_n)P_n d\mathrm{x}+\frac{\varkappa_{\|}}{4\pi}\int_{\Omega_f}(\partial_z P_n)\varphi_n d\mathrm{x}-\frac{\varkappa_{\|}}{4\pi}\int_{S_f}\nu_z P_n\varphi_n d\sigma=0.$$

Il s'ensuit,

$$\begin{aligned} a\left((P_n,\varphi_n),(P_n,\varphi_n)\right) &\geq \|P_n\|^2_{L^2(\Omega_f)}+\xi_0|P_n|^2_{H^1(\Omega_f)}+\frac{\varkappa_{\|}}{16\pi^2}\varepsilon_0|\varphi_n|^2_{H^1(\Omega)} \\ &\geq \min\left\{1,\xi_0,\frac{\varkappa_{\|}}{16\pi^2}\varepsilon_0\right\}\|(P_n,\varphi_n)\|^2_W, \end{aligned}$$

ce qui montre l'ellipticité de $a(\cdot,\cdot)$.

Il reste finalement à voir que la forme linéaire $L(\cdot)$ est continue. La relation (2.18) conduit à :

$$\left|\int_{\Omega_f}T_n\circ g\circ\overline{P}_n Q d\mathrm{x}\right|\leq n\int_{\Omega_f}|Q|d\mathrm{x}\leq n\sqrt{|\Omega_f|}\|Q\|_{L^2(\Omega_f)}\leq n\sqrt{|\Omega_f|}\|(Q,\psi)\|_W.$$

D'autre part,

$$\left|\int_{\Omega_f}(\partial_z w)Q d\mathrm{x}\right|\leq\|\partial_z w\|_{L^2(\Omega_f)}\|Q\|_{L^2(\Omega_f)}\leq\|\partial_z w\|_{L^2(\Omega_f)}\|(Q,\psi)\|_W,$$

et,

$$\left|\int_{\Omega}(\varepsilon\nabla w)\cdot\nabla\psi d\mathrm{x}\right|\leq\left(9\max_{1\leq i,j\leq 3}\|\varepsilon_{i,j}\|_{L^\infty(\Omega)}\right)|w|_{H^1(\Omega)}\|(Q,\psi)\|_W.$$

On en déduit,

$$|L(Q,\psi)|\leq\left(n\sqrt{|\Omega_f|}+\frac{\varkappa_{\|}}{4\pi}\|\partial_z w\|_{L^2(\Omega_f)}+\frac{9\varkappa_{\|}}{16\pi^2}\max_{1\leq i,j\leq 3}\|\varepsilon_{i,j}\|_{L^\infty(\Omega)}|w|_{H^1(\Omega)}\right)\|(Q,\psi)\|_W,$$

ce qui montre que $L(\cdot)$ est continue. Le théorème de Lax-Milgram assure alors l'existence et l'unicité de $(P_n,\varphi_n)\in W$ tel que,

$$a\left((P_n,\varphi_n),(Q,\psi)\right)=L\left(Q,\psi\right)\quad\forall(Q,\psi)\in W.$$

En particulier, en choisissant $\psi=0$, nous obtenons,

$$\begin{aligned}\int_{\Omega_f}P_n Q d\mathrm{x}+\int_{\Omega_f}(\xi\nabla P_n)\cdot\nabla Q d\mathrm{x}+\int_{\Omega_f}\frac{\varkappa_{\|}}{4\pi}(\partial_z\varphi_n)Q d\mathrm{x} &= \int_{\Omega_f}\left(T_n\circ g\circ\overline{P}_n\right)Q d\mathrm{x} \\ &\quad -\int_{\Omega_f}\frac{\varkappa_{\|}}{4\pi}(\partial_z w)Q d\mathrm{x},\end{aligned}$$

tandis que pour $Q=0$, nous avons plutôt,

$$\int_{\Omega}(\varepsilon\nabla\varphi_n)\cdot\nabla\psi d\mathrm{x}-\int_{S_f}4\pi\nu_z P_n\psi d\sigma+\int_{\Omega_f}4\pi(\partial_z P_n)\psi d\mathrm{x}=-\int_{\Omega}(\varepsilon\nabla w)\cdot\nabla\psi d\mathrm{x}.$$

□

Proposition 2.5.
Soit $n\in\mathbf{N}$. Il existe $(P_n,\varphi_n)\in W$ tel que, pour tout $(Q,\psi)\in W$,

$$\begin{cases}\displaystyle\int_{\Omega_f}P_n Q d\mathrm{x}-\int_{\Omega_f}\left(T_n\circ g\circ P_n\right)Q d\mathrm{x}+\int_{\Omega_f}(\xi\nabla P_n)\cdot\nabla Q d\mathrm{x} \\ \displaystyle+\int_{\Omega_f}\frac{\varkappa_{\|}}{4\pi}(\partial_z\varphi_n)Q d\mathrm{x}=-\int_{\Omega_f}\frac{\varkappa_{\|}}{4\pi}(\partial_z w)Q d\mathrm{x}, \\ \displaystyle\int_{\Omega}(\varepsilon\nabla\varphi_n)\cdot\nabla\psi d\mathrm{x}-\int_{S_f}4\pi\nu_z P_n\psi d\sigma+\int_{\Omega_f}4\pi(\partial_z P_n)\psi d\mathrm{x} \\ \displaystyle=-\int_{\Omega}(\varepsilon\nabla w)\cdot\nabla\psi d\mathrm{x}.\end{cases}\tag{2.22}$$

Preuve. Pour chaque $(\overline{P}_n, \overline{\varphi}_n) \in W$, nous notons par (P_n, φ_n) la solution de (2.21), ce qui nous permet de définir l'application $f_n : (\overline{P}_n, \overline{\varphi}_n) \in W \longmapsto (P_n, \varphi_n) \in W$. L'idée de la preuve consiste à vérifier que f_n respecte les conditions du théorème du point fixe de Schauder. Chaque point fixe de f_n sera alors une solution de (2.22). Nous organisons cette preuve en trois parties. Premièrement, nous établissons que l'image de f_n est bornée et envoie donc une boule fermée B dans elle-même. Ensuite, nous montrons que $f_n(B)$ est relativement compacte dans W, puis que f_n est une application continue.

- Commençons par montrer que l'image de f_n est bornée. Soit $(P_n, \varphi_n) \in f_n(W)$. Il existe $(\overline{P}_n, \overline{\varphi}_n) \in W$ tel que $f_n(\overline{P}_n, \overline{\varphi}_n) = (P_n, \varphi_n)$. Nous avons, en choisissant (P_n, φ_n) comme fonction-test dans (2.21) :

$$\|(P_n, \varphi_n)\|_W \leq \frac{C_L}{\alpha},$$

où,

$$C_L = \left(n\sqrt{|\Omega_f|} + \frac{\varkappa_\parallel}{4\pi} \|\partial_z w\|_{L^2(\Omega_f)} + \frac{9\varkappa_\parallel}{16\pi^2} \max_{1\leq i,j\leq 3} \|\varepsilon_{i,j}\|_{L^\infty(\Omega)} |w|_{H^1(\Omega)} \right),$$

et,

$$\alpha = \min\left\{1, \xi_0, \frac{\varkappa_\parallel}{16\pi^2}\varepsilon_0\right\},$$

(voir la preuve de la Proposition 2.4 : C_L est la constante de continuité de l'application linéaire $L(\cdot)$ et α est la constante d'ellipticité de l'application bilinéaire $a(\cdot,\cdot)$). Ainsi $f_n(W)$ est bornée. Plus précisément, si $B \subset W$ est la boule fermée de centre 0 et de rayon C_L/α, l'application $f_n : B \longrightarrow B$ est correctement définie.

- Nous montrons ensuite que $f_n(B)$ est relativement compacte dans W. Nous considérons $(P_n^{(m)}, \varphi_n^{(m)})_{m\in\mathbf{N}}$ une suite d'éléments de $f_n(B)$. Pour tout $m \in \mathbf{N}$, il existe $(\overline{P}_n^{(m)}, \overline{\varphi}_n^{(m)}) \in B$ vérifiant $f_n(\overline{P}_n^{(m)}, \overline{\varphi}_n^{(m)}) = (P_n^{(m)}, \varphi_n^{(m)})$. Puisque $(\overline{P}_n^{(m)}, \overline{\varphi}_n^{(m)})_{m\in\mathbf{N}}$ est bornée, nous pouvons en extraire une sous-suite faiblement convergente dans W, que nous notons $(\overline{P}_n^{(m_k)}, \overline{\varphi}_n^{(m_k)})_{k\in\mathbf{N}}$. Désignons par $(\overline{P}_n, \overline{\varphi}_n)$ sa limite. Posons enfin $(P_n, \varphi_n) = f_n(\overline{P}_n, \overline{\varphi}_n)$ puis notons $\alpha_{m_k} = P_n^{(m_k)} - P_n$ et $\beta_{m_k} = \varphi_n^{(m_k)} - \varphi_n$, où $k \in \mathbf{N}$. En choisissant $(\alpha_{m_k}, \beta_{m_k})$ comme fonction-test, nous obtenons, avec (2.21) :

$$\begin{aligned}
&\int_{\Omega_f} \alpha_{m_k}^2 d\mathrm{x} + \int_{\Omega_f} (\xi\nabla\alpha_{m_k}) \cdot \nabla\alpha_{m_k} d\mathrm{x} + \int_{\Omega} \frac{\varkappa_\parallel}{16\pi^2} (\varepsilon\nabla\beta_{m_k}) \cdot \nabla\beta_{m_k} d\mathrm{x} \\
&+ \int_{\Omega_f} \frac{\varkappa_\parallel}{4\pi} (\partial_z\beta_{m_k})\alpha_{m_k} d\mathrm{x} + \int_{\Omega_f} \frac{\varkappa_\parallel}{4\pi} (\partial_z\alpha_{m_k})\beta_{m_k} d\mathrm{x} - \int_{S_f} \frac{\varkappa_\parallel}{4\pi} \nu_z \alpha_{m_k}\beta_{m_k} d\sigma \\
&= \int_{\Omega_f} \left(T_n \circ g \circ \overline{P}_n^{(m_k)} - T_n \circ g \circ \overline{P}_n \right) \alpha_{m_k} d\mathrm{x}.
\end{aligned}$$

Avec le Lemme 2.3, nous en déduisons,

$$\|(\alpha_{m_k}, \beta_{m_k})\|_W^2 \leq \frac{K_n}{\alpha} \|\overline{P}_n^{(m_k)} - \overline{P}_n\|_{L^2(\Omega_f)} \|(\alpha_{m_k}, \beta_{m_k})\|_W,$$

où K_n est la constante de Lipschitz de $T_n \circ g$. Ainsi,

$$\|(\alpha_{m_k}, \beta_{m_k})\|_W \leq \frac{K_n}{\alpha} \|\overline{P}_n^{(m_k)} - \overline{P}_n\|_{L^2(\Omega_f)}.$$

L'inclusion de $H^1(\Omega_f)$ dans $L^2(\Omega_f)$ étant compacte et $(\overline{P}_n^{(m_k)})_{k\in\mathbf{N}}$ convergeant faiblement vers $\overline{P}_n$ dans $H^1(\Omega_f)$, on obtient que $(\overline{P}_n^{(m_k)})_{k\in\mathbf{N}}$ converge fortement vers $\overline{P}_n$ dans $L^2(\Omega_f)$ et l'inégalité précédente assure que la suite $(P_n^{(m_k)}, \varphi_n^{(m_k)})_{k\in\mathbf{N}}$ converge fortement vers (P_n, φ_n) dans W. Donc $f_n(B)$ est relativement compacte dans W.

- Il reste à établir la continuité de f_n. Soit $(\overline{P}_n^{(m)}, \overline{\varphi}_n^{(m)})_{m\in\mathbf{N}}$ une suite qui converge vers $(\overline{P}_n, \overline{\varphi}_n)$ dans W. En reprenant le calcul précédent ainsi que des notations similaires, on montre que,

$$\|(\alpha_m, \beta_m)\|_W \leq \frac{K_n}{\alpha}\|\overline{P}_n^{(m)} - \overline{P}_n\|_{L^2(\Omega_f)} \leq \frac{K_n}{\alpha}\|(\overline{P}_n^{(m)} - \overline{P}_n, \overline{\varphi}_n^{(m)} - \overline{\varphi}_n)\|_W.$$

Ainsi $(f_n(\overline{P}_n^{(m)}, \overline{\varphi}_n^{(m)}))_{m\in\mathbf{N}}$ converge vers $f_n(\overline{P}_n, \overline{\varphi}_n)$ ce qui montre que f_n est continue. Finalement le théorème du point fixe de Schauder s'applique et permet de conclure que f_n admet un point fixe, autrement dit que le système (2.22) admet une solution. □

Tous les ingrédients sont maintenant réunis pour établir le résultat principal ici, à savoir le théorème suivant :

Théorème 2.6.
Le système (2.7)-(2.13) *admet une solution variationnelle.*

Preuve. Soit $(P_n, \varphi_n)_{n\in\mathbf{N}} \in W^{\mathbf{N}}$ une suite de solutions de (2.22) construite grâce à la Proposition 2.5. Nous organisons cette preuve en trois parties. Premièrement, nous montrons qu'une sous-suite $(P_{n_k}, \varphi_{n_k})_{k\in\mathbf{N}}$ converge faiblement dans W et presque partout dans $\Omega_f \times \Omega$ vers un couple (P, φ). Ensuite nous établissons que $(T_{n_k} \circ g \circ P_{n_k})_{k\in\mathbf{N}}$ converge dans $L^1(\Omega_f)$ vers $g \circ P$. Enfin nous montrons que (P, φ) est une solution variationnelle de (2.7)-(2.13).

Avant de commencer, notons que, pour tout $(Q, \psi) \in W$, l'ajout de la première équation de (2.22) à la seconde pondérée par $\frac{\varkappa_\parallel}{16\pi^2}$ fournit :

$$\begin{aligned}
&\int_{\Omega_f} P_n Q d\mathrm{x} - \int_{\Omega_f} (T_n \circ g \circ P_n) Q d\mathrm{x} + \int_{\Omega_f} (\xi \nabla P_n) \cdot \nabla Q d\mathrm{x} \\
&+ \int_{\Omega} \frac{\varkappa_\parallel}{16\pi^2} (\varepsilon \nabla \varphi_n) \cdot \nabla \psi d\mathrm{x} + \int_{\Omega_f} \frac{\varkappa_\parallel}{4\pi} (\partial_z \varphi_n) Q d\mathrm{x} + \int_{\Omega_f} \frac{\varkappa_\parallel}{4\pi} (\partial_z P_n) \psi d\mathrm{x} \\
&- \int_{S_f} \frac{\varkappa_\parallel}{4\pi} \nu_z P_n \psi d\sigma = - \int_{\Omega_f} \frac{\varkappa_\parallel}{4\pi} (\partial_z w) Q d\mathrm{x} - \int_{\Omega} \frac{\varkappa_\parallel}{16\pi^2} (\varepsilon \nabla w) \cdot \nabla \psi d\mathrm{x}.
\end{aligned} \tag{2.23}$$

- Puisque g diverge vers $\mp\infty$ en $\pm\infty$, il existe $\beta > 0$ tel que $g(x) \leq 0$ pour tout $x \geq \beta$ et $g(x) \geq 0$ pour tout $x \leq -\beta$. Fixons par ailleurs $n \in \mathbf{N}$. En choisissant (P_n, φ_n) comme fonction-test dans (2.23), nous obtenons, après simplification par la formule de Green,

$$\begin{aligned}
&\int_{\Omega_f} P_n^2 d\mathrm{x} - \int_{\Omega_f} (T_n \circ g \circ P_n) P_n \chi_{|P_n|>\beta} d\mathrm{x} + \int_{\Omega_f} (\xi \nabla P_n) \cdot \nabla P_n d\mathrm{x} \\
&+ \int_{\Omega} \frac{\varkappa_\parallel}{16\pi^2} (\varepsilon \nabla \varphi_n) \cdot \nabla \varphi_n d\mathrm{x} = \int_{\Omega_f} (T_n \circ g \circ P_n) P_n \chi_{|P_n|\leq\beta} d\mathrm{x} \\
&- \int_{\Omega_f} \frac{\varkappa_\parallel}{4\pi} (\partial_z w) P_n d\mathrm{x} - \int_{\Omega} \frac{\varkappa_\parallel}{16\pi^2} (\varepsilon \nabla w) \cdot \nabla \varphi_n d\mathrm{x}.
\end{aligned} \tag{2.24}$$

Or,

$$\begin{cases} -g(P_n) \geq 0 & \text{si } P_n > \beta > 0, \\ -g(P_n) \leq 0 & \text{si } P_n < -\beta < 0, \end{cases}$$

donc, si $|P_n| > \beta$, nous avons,

$$-(T_n \circ g \circ P_n) P_n \geq 0.$$

Ainsi, dans (2.24), les termes de gauche sont tous positifs. De plus, via (2.19),

$$\begin{aligned}\left|\int_{\Omega_f}(T_n\circ g\circ P_n)P_n\chi_{|P_n|\leq\beta}\mathrm{dx}\right| &\leq \left(\int_{\Omega_f}\left(T_n\circ g\circ P_n\chi_{|P_n|\leq\beta}\right)^2\mathrm{dx}\right)^{1/2}\|P_n\|_{L^2(\Omega_f)}\\ &\leq \left(\int_{\Omega_f}(g\circ P_n)^2\chi_{|P_n|\leq\beta}\mathrm{dx}\right)^{1/2}\|P_n\|_{L^2(\Omega_f)}\\ &\leq \left(|\Omega_f|\sup_{x\in[-\beta,\beta]}(g(x)^2)\right)^{1/2}\|P_n\|_{L^2(\Omega_f)}.\end{aligned}$$

On en déduit que :

$$\|(P_n,\varphi_n)\|_W^2 \leq \frac{C}{\alpha}\|(P_n,\varphi_n)\|_W, \tag{2.25}$$

avec,

$$C=\left(|\Omega_f|\sup_{x\in[-\beta,\beta]}(g(x)^2)\right)^{1/2}+\frac{\varkappa_\|}{4\pi}\|\partial_z w\|_{L^2(\Omega_f)}+\frac{9\varkappa_\|}{16\pi^2}\max_{1\leq i,j\leq 3}\|\varepsilon_{i,j}\|_{L^\infty(\Omega)}|w|_{H^1(\Omega)},$$

où α est la constante d'ellipticité de l'application bilinéaire $a(\cdot,\cdot)$ dans la preuve de la Proposition 2.4. Ainsi $(P_n,\varphi_n)_{n\in\mathbf{N}}$ est bornée dans W et nous pouvons en extraire une sous-suite $(P_{n_m},\varphi_{n_m})_{m\in\mathbf{N}}$ qui converge faiblement vers (P,φ) dans W. En particulier, $(P_{n_m})_{m\in\mathbf{N}}$ converge faiblement vers P dans $H^1(\Omega_f)$. Or l'inclusion de $H^1(\Omega_f)$ dans $L^2(\Omega_f)$ est compacte, donc la suite $(P_{n_m})_{m\in\mathbf{N}}$ converge fortement vers P dans $L^2(\Omega_f)$. Ainsi (voir *e.g.* [7]), il existe une sous-suite $(P_{n_{m_p}})_{p\in\mathbf{N}}$ qui converge presque partout vers P dans Ω_f. De même, $(\varphi_{n_{m_p}})_{p\in\mathbf{N}}$ converge faiblement vers φ dans $H_0^1(\Omega)$, donc fortement dans $L^2(\Omega)$. Il s'ensuit l'existence d'une sous-suite $(\varphi_{n_{m_{pq}}})_{q\in\mathbf{N}}$ qui converge vers φ presque partout dans Ω. Afin d'alléger les notations, nous noterons $(P_{n_k},\varphi_{n_k})_{k\in\mathbf{N}}$ la suite extraite ainsi construite qui converge presque partout dans $\Omega_f\times\Omega$ et faiblement dans W vers (P,φ).

- Montrons maintenant que la suite $(T_{n_k}\circ g\circ P_{n_k})_{k\in\mathbf{N}}$ converge dans $L^1(\Omega_f)$ vers $g\circ P$. Puisque $(P_{n_k})_{k\in\mathbf{N}}$ converge presque partout vers P dans Ω_f, nous obtenons, par continuité de g et grâce à (2.20), que $(T_{n_k}\circ g\circ P_{n_k})_{k\in\mathbf{N}}$ converge presque partout vers $g(P)$ dans Ω_f. Si nous montrons que $(T_{n_k}\circ g\circ P_{n_k})_{k\in\mathbf{N}}$ est uniformément intégrable, nous pourrons conclure à l'aide du théorème de convergence de Vitali (voir *e.g.* [51]).
  Commençons par montrer que $((T_{n_k}\circ g\circ P_{n_k})P_{n_k})_{k\in\mathbf{N}}$ est bornée dans $L^1(\Omega_f)$. En reproduisant les calculs précédents, on obtient à partir de (2.24) la majoration, pour $k\in\mathbf{N}$,
  $$-\int_{\Omega_f}(T_{n_k}\circ g\circ P_{n_k})P_{n_k}\chi_{|P_{n_k}|>\beta}\mathrm{dx}\leq C\|(P_{n_k},\varphi_{n_k})\|_W,$$
  d'où, avec (2.25),
  $$-\int_{\Omega_f}(T_{n_k}\circ g\circ P_{n_k})P_{n_k}\chi_{|P_{n_k}|>\beta}\mathrm{dx}\leq\frac{C^2}{\alpha}.$$
  De plus, via (2.19),
  $$\int_{\Omega_f}|(T_{n_k}\circ g\circ P_{n_k})P_{n_k}|\,\chi_{|P_{n_k}|\leq\beta}\mathrm{dx}\leq|\Omega_f|\sup_{x\in[-\beta,\beta]}|g(x)x|\,.$$
  Ainsi la suite $((T_{n_k}\circ g\circ P_{n_k})P_{n_k})_{k\in\mathbf{N}}$ est bornée $L^1(\Omega_f)$ par une constante :
  $$C'=\frac{C^2}{\alpha}+|\Omega_f|\sup_{x\in[-\beta,\beta]}|g(x)x|\,.$$

Soient $\eta > 0$, $E \subset \Omega_f$ et $M > 0$. Nous décomposons l'intégrale à majorer en deux parties :

$$\int_E |T_{n_k} \circ g \circ P_{n_k}| \, d\mathrm{x} = \int_{E\cap\{|P_{n_k}|>M\}} |T_{n_k} \circ g \circ P_{n_k}| \, d\mathrm{x}$$
$$+ \int_{E\cap\{|P_{n_k}|\leq M\}} |T_{n_k} \circ g \circ P_{n_k}| \, d\mathrm{x}.$$

Nous avons d'une part,

$$\begin{aligned}\int_{E\cap\{|P_{n_k}|>M\}} |T_{n_k} \circ g \circ P_{n_k}| \, d\mathrm{x} &\leq \frac{1}{M} \int_{E\cap\{|P_{n_k}|>M\}} |(T_{n_k} \circ g \circ P_{n_k})P_{n_k}| \, d\mathrm{x} \\ &\leq \frac{C'}{M}.\end{aligned}$$

En particulier, si nous choisissons $M = \frac{2C'}{\eta}$ dans l'expression précédente, nous obtenons,

$$\int_{E\cap\{|P_{n_k}|>M\}} |T_{n_k} \circ g \circ P_{n_k}| \, d\mathrm{x} < \frac{\eta}{2}.$$

D'autre part, avec (2.19), nous avons,

$$\int_{E\cap\{|P_{n_k}|\leq M\}} |T_{n_k} \circ g \circ P_{n_k}| \, d\mathrm{x} \leq \int_{E\cap\{|P_{n_k}|\leq M\}} |g \circ P_{n_k}| \, d\mathrm{x} \leq |E| \sup_{|x|\leq M} |g(x)| \, .$$

Donc, pour tout $E \subset \Omega_f$ vérifiant $|E| \leq \frac{\eta}{2 \sup_{|x|\leq M} |g(x)|}$:

$$\int_E |T_{n_k} \circ g \circ P_{n_k}| \, d\mathrm{x} < \eta.$$

Ainsi $(T_{n_k} \circ g \circ P_{n_k})_{k\in\mathbf{N}}$ est uniformément intégrable et le théorème de convergence de Vitali assure que $(T_{n_k} \circ g \circ P_{n_k})_{k\in\mathbf{N}}$ converge dans $L^1(\Omega_f)$ vers $g \circ P$.

- Afin de conclure, montrons (P, φ) que vérifie la formulation variationnelle (2.14)-(2.15). Soit $(Q, \psi) \in C^\infty(\overline{\Omega_f}) \times \mathcal{D}(\Omega)$. Nous avons d'abord, avec la formule de Green,

$$\begin{aligned}\left|\int_{\Omega_f} \partial_a(P_{n_k} - P)\partial_b Q d\mathrm{x}\right| &\leq \left|\int_{\Omega_f} (P_{n_k} - P)\partial_a\partial_b Q d\mathrm{x}\right| + \left|\int_{S_f} \nu_a(P_{n_k} - P)\partial_b Q d\sigma\right| \\ &\leq \|P_{n_k} - P\|_{L^2(\Omega_f)} \|\partial_a\partial_b Q\|_{L^2(\Omega_f)} \\ &\quad + \|P_{n_k} - P\|_{L^2(S_f)} \|\nu_a\partial_b Q\|_{L^2(S_f)},\end{aligned}$$

où $a, b \in [\![1, 3]\!]$. Or $(P_{n_k}, \varphi_{n_k})_{k\in\mathbf{N}}$ converge faiblement vers (P, φ) dans W. En particulier $(P_{n_k})_{k\in\mathbf{N}}$ converge faiblement vers P dans $H^1(\Omega_f)$, donc est bornée dans $H^1(\Omega_f)$ par une constante K_1. D'autre part, puisque Ω_f est borné et S_f est continûment lipschitzienne, on a (*cf.* [5]) l'existence de $K_2 > 0$ tel que,

$$\|P_{n_k} - P\|_{L^2(S_f)} \leq K_2 \|P_{n_k} - P\|^{1/2}_{H^1(\Omega_f)} \|P_{n_k} - P\|^{1/2}_{L^2(\Omega_f)}.$$

Ainsi,

$$\|P_{n_k} - P\|_{L^2(S_f)} \leq K_2 \sqrt{K_1 + \|P\|_{H^1(\Omega_f)}} \|P_{n_k} - P\|^{1/2}_{L^2(\Omega_f)},$$

donc $(P_{n_k}|_{S_f})_{k\in\mathbf{N}}$ converge vers $P|_{S_f}$ dans $L^2(S_f)$ (on rappelle que $(P_{n_k})_{k\in\mathbf{N}}$ converge vers P dans $L^2(\Omega_f)$). Avec ce qui précède, on en déduit :

$$\left|\int_{\Omega_f} \partial_a(P_{n_k} - P)\partial_b Q d\mathrm{x}\right| \longrightarrow 0 \quad \text{quand} \quad k \longrightarrow +\infty.$$

Ceci permet de constater que,

$$\left|\int_{\Omega_f} \xi\nabla(P_{n_k}-P)\cdot\nabla Q d\mathrm{x}\right| \longrightarrow 0 \quad \text{quand} \quad k\longrightarrow +\infty.$$

De manière similaire, nous pouvons montrer que,

$$\left|\int_{\Omega} \varepsilon\nabla(\varphi_{n_k}-\varphi)\cdot\nabla\psi d\mathrm{x}\right| \longrightarrow 0 \quad \text{quand} \quad k\longrightarrow +\infty.$$

De plus, avec la formule de Green, nous avons,

$$\left|\int_{\Omega_f} (\partial_z(\varphi_{n_k}-\varphi))\, Q d\mathrm{x}\right| \leq \|\varphi_{n_k}-\varphi\|_{L^2(\Omega_f)}\|\partial_z Q\|_{L^2(\Omega_f)} + \|\varphi_{n_k}-\varphi\|_{L^2(S_f)}\|\nu_z Q\|_{L^2(S_f)}.$$

Puisque $(\varphi_{n_k})_{k\in\mathbf{N}}$ est bornée dans Ω_f en tant que suite convergente de $L^2(\Omega_f)$, nous obtenons, avec les mêmes arguments que précédemment,

$$\left|\int_{\Omega_f} (\partial_z(\varphi_{n_k}-\varphi))\, Q d\mathrm{x}\right| \longrightarrow 0 \quad \text{quand} \quad k\longrightarrow +\infty.$$

Par ailleurs on a, encore avec la formule de Green,

$$\left|\int_{\Omega_f} \partial_z(P_{n_k}-P)\psi d\mathrm{x} - \int_{S_f} \nu_z(P_{n_k}-P)\psi d\sigma\right| \leq \|P_{n_k}-P\|_{L^2(\Omega_f)}\|\partial_z\psi\|_{L^2(\Omega_f)}.$$

Puisque $(P_{n_k})_{k\in\mathbf{N}}$ converge fortement dans $L^2(\Omega_f)$ vers P, on en déduit que,

$$\left|\int_{\Omega_f} \partial_z(P_{n_k}-P)\psi d\mathrm{x} - \int_{S_f} \nu_z(P_{n_k}-P)\psi d\sigma\right| \longrightarrow 0 \quad \text{quand} \quad k\longrightarrow +\infty.$$

De la même façon, on peut montrer que,

$$\left|\int_{\Omega_f} (P_{n_k}-P)Q d\mathrm{x}\right| \longrightarrow 0 \quad \text{quand} \quad k\longrightarrow +\infty.$$

Enfin, via l'inégalité de Hölder,

$$\left|\int_{\Omega_f} (T_{n_k}\circ g\circ P_{n_k} - g\circ P)Q d\mathrm{x}\right| \leq \|T_{n_k}\circ g\circ P_{n_k} - g\circ P\|_{L^1(\Omega_f)}\|Q\|_{L^\infty(\Omega_f)}.$$

Or on a montré précédemment que $(T_{n_k}\circ g\circ P_{n_k})_{k\in\mathbf{N}}$ converge vers $g\circ P$ dans $L^1(\Omega_f)$, donc,

$$\left|\int_{\Omega_f} (T_{n_k}\circ g\circ P_{n_k} - g\circ P)Q d\mathrm{x}\right| \longrightarrow 0 \quad \text{quand} \quad k\longrightarrow +\infty.$$

Finalement, en passant à la limite dans chaque terme de la formulation variationnelle (2.23), vérifiée par chaque terme de la suite $(P_{n_k},\varphi_{n_k})_{k\in\mathbf{N}}$, on obtient, pour tout $(Q,\psi)\in C^\infty(\overline{\Omega_f})\times\mathcal{D}(\Omega)$,

$$\begin{aligned}
&\int_{\Omega_f} PQ d\mathrm{x} - \int_{\Omega_f} (g\circ P)Q d\mathrm{x} + \int_{\Omega_f} (\xi\nabla P)\cdot\nabla Q d\mathrm{x}\\
&+\int_{\Omega} \frac{\varkappa_\parallel}{16\pi^2}(\varepsilon\nabla\varphi)\cdot\nabla\psi d\mathrm{x} + \int_{\Omega_f} \frac{\varkappa_\parallel}{4\pi}(\partial_z\varphi)Q d\mathrm{x} + \int_{\Omega_f} \frac{\varkappa_\parallel}{4\pi}(\partial_z P)\psi d\mathrm{x}\\
&-\int_{S_f} \frac{\varkappa_\parallel}{4\pi}\nu_z P\psi d\sigma = -\int_{\Omega_f} \frac{\varkappa_\parallel}{4\pi}(\partial_z w)Q d\mathrm{x} - \int_{\Omega} \frac{\varkappa_\parallel}{16\pi^2}(\varepsilon\nabla w)\cdot\nabla\psi d\mathrm{x}.
\end{aligned}$$

En particulier, en choisissant $\psi = 0$ puis $Q = 0$, on obtient :

$$\begin{cases} \displaystyle\int_{\Omega_f} tPQ d\mathrm{x} + \int_{\Omega_f} \frac{P^3}{P_0^2} Q d\mathrm{x} + \int_{\Omega_f} (\xi \nabla P) \cdot \nabla Q d\mathrm{x} + \int_{\Omega_f} \frac{\varkappa_{\|}}{4\pi} (\partial_z \varphi) Q d\mathrm{x} \\ \displaystyle\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad = -\int_{\Omega_f} \frac{\varkappa_{\|}}{4\pi} (\partial_z w) Q d\mathrm{x}, \\ \displaystyle\int_{\Omega} (\varepsilon \nabla \varphi) \cdot \nabla \psi d\mathrm{x} - \int_{S_f} 4\pi \nu_z P \psi d\sigma + \int_{\Omega_f} 4\pi (\partial_z P) \psi d\mathrm{x} \\ \displaystyle\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad = -\int_{\Omega} (\varepsilon \nabla w) \cdot \nabla \psi d\mathrm{x}. \end{cases}$$

Par densité de $C^\infty(\overline{\Omega_f})$ dans $H^1(\Omega_f)$ et de $\mathcal{D}(\Omega)$ dans $H_0^1(\Omega)$, on peut exprimer l'identité précédente pour tout $(Q, \psi) \in W$. Autrement dit, (P, φ) est une solution variationnelle du système (2.7)-(2.13).

□

Signalons qu'il n'y a pas unicité de solution pour tout choix de paramètres dans le système (2.7)-(2.13). Par exemple, si $\varkappa_{\|} = 0$ et $\phi_0 = 0$ (dans l'expression (2.6) de φ_S) avec $w = 0$, alors il existe deux couples distincts (P, φ), $(-P, -\varphi)$ satisfaisant la formulation variationnelle (2.14)-(2.15).

A partir d'une solution (P, φ) de la formulation (2.14)-(2.15), nous obtenons une solution variationnelle, $(P, \varphi + w)$, du système (GLE).

Chapitre 3

Méthode numérique et protocoles d'expérimentations

L'objectif de ce chapitre est de fournir des outils afin d'étudier numériquement les nanostructures modélisées par le système (GLE). Nous élaborons d'abord une méthode numérique pour la résolution de ce système. Celle-ci est basée sur une discrétisation par Eléments Finis nodaux de la formulation variationnelle (2.14)-(2.15). Afin de résoudre le système matriciel non-linéaire qui en résulte, nous nous appuyons sur une approche de quasi-Newton inexacte, globalisée par une technique de *linesearch*. Les solutions des systèmes linéaires obtenus à chaque étape de cette approche itérative sont déterminées avec l'algorithme GMRES, préconditionné par une factorisation LU incomplète.

Nous mettons ensuite en place des protocoles d'expérimentations numériques, afin de simuler le chauffage d'une nanostructure ou de produire son cycle d'hystérésis en tension. Ces protocoles sont par ailleurs mis en application dans des configurations géométriques classiques (cylindriques ou parallélépipédiques). Nous nous assurons également de l'adéquation des résultats obtenus avec certaines propriétés physiques, ainsi que de leur stabilité par raffinement du pas de maillage.

3.1 Approximations par Eléments Finis

Considérons un maillage tétraédrique conforme de $\overline{\Omega}$, de pas h, en désignant par $\mathcal{T}_h$ la collection de tétraèdres qui lui est associée. Ce maillage est construit de sorte que la collection $\mathcal{T}_{h_f}^f$,

$$\mathcal{T}_{h_f}^f = \left\{ T \in \mathcal{T}_h \; ; \; T \subset \overline{\Omega_f} \right\},$$

corresponde à un maillage conforme de $\overline{\Omega_f}$, de pas h_f. Les domaines $\overline{\Omega}$ et $\overline{\Omega_f}$ sont ici polyédriques, l'interface S_f étant composée de faces qui appartiennent chacune à la fois à un tétraèdre de $\overline{\Omega_f}$ et à un tétraèdre de $\overline{\Omega_p}$, et S étant constituée de faces de tétraèdres de $\overline{\Omega_p}$ ($\Omega_p = \Omega \setminus \overline{\Omega_f}$). Pour chaque $T \in \mathcal{T}_h$, nous considérons l'élément fini de Lagrange représenté par $(T, P_{1,T}, \Sigma_{1,T})$, où $P_{1,T}$ et $\Sigma_{1,T}$ sont respectivement l'espace des polynômes de degré inférieur ou égal à 1 définis sur T et le treillis principal d'ordre 1 de T, puis nous introduisons l'espace discret,

$$W_h = \left\{ (P_h, \varphi_h) \in C^0(\overline{\Omega_f}) \times C^0(\overline{\Omega}) \; ; \; P_h|_T \in P_{1,T} \;\; \forall T \in \mathcal{T}_{h_f}^f, \; \varphi_h|_T \in P_{1,T} \;\; \forall T \in \mathcal{T}_h, \; \varphi_h|_S = 0 \right\}.$$

Une formulation discrète associée à la formulation variationnelle continue (2.14)-(2.15) consiste à trouver $(P_h, \varphi_h) \in W_h$ tel que, pour tout $(Q_h, \psi_h) \in W_h$,

$$\begin{cases} \displaystyle\int_{\Omega_f} tP_hQ_h d\mathrm{x}x + \int_{\Omega_f} \frac{P_h^3}{P_0^2} Q_h d\mathrm{x} + \int_{\Omega_f} (\xi \nabla P_h) \cdot \nabla Q_h d\mathrm{x} + \int_{\Omega_f} \frac{\varkappa_\parallel}{4\pi} (\partial_z \varphi_h) Q_h d\mathrm{x} \\ \displaystyle = -\int_{\Omega_f} \frac{\varkappa_\parallel}{4\pi} (\partial_z w) Q_h d\mathrm{x}, \\ \displaystyle\int_{\Omega} (\varepsilon \nabla \varphi_h) \cdot \nabla \psi_h d\mathrm{x} - \int_{S_f} 4\pi \nu_z P_h \psi_h d\sigma + \int_{\Omega_f} 4\pi (\partial_z P_h) \psi_h d\mathrm{x} \\ \displaystyle = -\int_{\Omega} (\varepsilon \nabla w) \cdot \nabla \psi_h d\mathrm{x}. \end{cases} \tag{3.1}$$

Nous notons $\{\mathrm{x}_j,\ 1 \leq j \leq N\}$ l'ensemble des sommets de $\mathcal{T}_h$, que nous organisons de sorte que $\mathrm{x}_1, ..., \mathrm{x}_{N_f} \in \overline{\Omega_f}$ et $\mathrm{x}_1, ..., \mathrm{x}_{N^0} \in \Omega$, où N_f, N^0 et N désignent respectivement le nombre de nœuds dans $\overline{\Omega_f}$, Ω et $\overline{\Omega}$. En notant par v_j la fonction de forme associée à x_j, pour $j \in [\![1, N]\!]$, on a les décompositions suivantes, pour $(P_h, \varphi_h) \in W_h$,

$$P_h = \sum_{j=1}^{N_f} P_j v_j \quad \text{et} \quad \varphi_h = \sum_{j=1}^{N^0} \varphi_j v_j, \tag{3.2}$$

où $P_j \in \mathbf{R}$ pour tout $j \in [\![1, N_f]\!]$ et $\varphi_j \in \mathbf{R}$ pour tout $j \in [\![1, N^0]\!]$. Le problème (3.1) se récrit alors sous la forme d'un système matriciel non-linéaire ayant deux inconnues vectorielles ; il consiste à trouver $\mathcal{P} = (P_1, ..., P_{N_f})^T \in \mathbf{R}^{N_f}$ et $\Phi = (\varphi_1, ..., \varphi_{N^0})^T \in \mathbf{R}^{N^0}$ tels que :

$$\begin{cases} A\mathcal{P} + N(\mathcal{P}) + B\Phi &= F_1, \\ C\mathcal{P} + D\Phi &= F_2, \end{cases} \tag{3.3}$$

où A est la somme d'une matrice de masse et d'une matrice de rigidité relatives à Ω_f, D est une matrice de rigidité relative à Ω, tandis que B et C traduisent les termes d'interaction,

$$\begin{aligned} A &= \left(\int_{\Omega_f} (t v_i v_j + \nabla v_i \cdot (\xi \nabla v_j)) d\mathrm{x} \right)_{(i,j) \in [\![1, N_f]\!]^2}, \\ B &= \left(\int_{\Omega_f} \frac{\varkappa_\parallel}{4\pi} v_i (\partial_z v_j) d\mathrm{x} \right)_{(i,j) \in [\![1, N_f]\!] \times [\![1, N^0]\!]}, \\ C &= \left(-\int_{S_f} 4\pi \nu_z v_i v_j d\sigma + \int_{\Omega_f} 4\pi v_i (\partial_z v_j) d\mathrm{x} \right)_{(i,j) \in [\![1, N^0]\!] \times [\![1, N_f]\!]}, \\ D &= \left(\int_{\Omega} \nabla v_i \cdot (\varepsilon \nabla v_j) d\mathrm{x} \right)_{(i,j) \in [\![1, N^0]\!]^2}. \end{aligned}$$

La partie non-linéaire de (GLE) est exprimée à travers $N(\mathcal{P})$, tandis que le second membre est traduit par F_1 et F_2 :

$$N(\mathcal{P}) = \left(\int_{\Omega_f} \frac{1}{P_0^2} \left(\sum_{j=1}^{N_f} P_j v_j \right)^3 v_i d\mathrm{x} \right)_{i \in [\![1, N_f]\!]},$$

$$F_1 = \left(-\int_{\Omega_f} \frac{\varkappa_\parallel}{4\pi} (\partial_z w) v_i d\mathrm{x} \right)_{i \in [\![1, N_f]\!]} \quad \text{et} \quad F_2 = \left(-\int_{\Omega} (\varepsilon \nabla w) \cdot \nabla v_i d\mathrm{x} \right)_{i \in [\![1, N^0]\!]}.$$

Les coefficients des matrices présentées ci-dessus sont calculés à l'aide d'une formule de quadrature d'ordre 5,

$$\int_T f(\mathrm{x})d\mathrm{x} = \sum_{i=1}^{15} \omega_i f(\mathrm{x}_i) \quad \forall f \in P_{5,T}, \tag{3.4}$$

où $T \in \mathcal{T}_h$, $P_{5,T}$ est l'espace des polynômes de degré inférieur ou égal à 5 définis sur T et $\{(\mathrm{x}_i, \omega_i)\}_{1\leq i\leq 15}$ est l'ensemble des couples de points et poids de quadrature (avec $\omega_i > 0$, pour tout $i \in [\![1, 15]\!]$) présenté dans [65]. Notons que, lorsque ε et ξ sont constants sur chaque élément de $\mathcal{T}_h$, cette formule est exacte pour ces calculs, notamment avec le choix ci-dessous fait pour w,

$$w(x, y, z) = 2\frac{z - z_{max}}{z_{min} - z_{max}}\phi_0 - \phi_0 \quad \forall (x, y, z) \in \Omega,$$

où z_{min} et z_{max} désignent respectivement l'altitude minimale et l'altitude maximale de la nanostructure (de sorte que $\overline{\Omega} \subset \mathbf{R}^2 \times [z_{min}, z_{max}]$).

3.2 Résolution du système non-linéaire

Nous sommes concernés ici par un algorithme pour la résolution du système non-linéaire (3.3). D'abord, nous présentons la méthode de Newton inexacte, qui est localement convergente, et exposons ensuite une version modifiée de cette méthode, en lien avec un meilleur rayon de convergence.

3.2.1 L'algorithme de Newton inexact

Le système (3.3) peut se réécrire comme suit :

$$G(\mathrm{x}) = 0, \tag{3.5}$$

avec $G : \mathbf{R}^m \longrightarrow \mathbf{R}^m$ une fonction vectorielle polynomiale, et $m = N_f + N^0$. Notons par J_G,

$$J_G : \mathbf{R}^m \longrightarrow \mathcal{M}_{m,m}(\mathbf{R}),$$

la jacobienne de G ; celle-ci peut être calculée explicitement sans complication particulière. Afin de résoudre ce système, nous allons solliciter une approche s'appuyant sur la méthode de Newton. Pour rappel, la méthode de Newton consiste à générer itérativement une suite $(\mathrm{x}_k)_{k\geq 0}$,

$$\begin{cases} \mathrm{x}_{k+1} = \mathrm{x}_k + \delta\mathrm{x}_k, & (3.6) \\ \text{où } J_G(\mathrm{x}_k)\delta\mathrm{x}_k = -G(\mathrm{x}_k) \quad \forall k \in \mathbf{N}, & (3.7) \end{cases}$$

à partir d'un vecteur d'initialisation $\mathrm{x}_0 \in \mathbf{R}^m$, qui converge quadratiquement vers une solution $\mathrm{x}^\star$ de (3.5) si l'on choisit x_0 suffisamment proche de $\mathrm{x}^\star$. Dans la méthode de Newton inexacte, il s'agit de déterminer une solution approchée de (3.7) au lieu d'une solution exacte.

Si, pour $k \in \mathbf{N}$, la solution $\delta\mathrm{x}_k$ de (3.7) vérifie,

$$\|G(\mathrm{x}_k) + J_G(\mathrm{x}_k)\delta\mathrm{x}_k\|_2 \leq \eta_k \|G(\mathrm{x}_k)\|_2, \tag{3.8}$$

avec $\eta_k \in [0, 1)$ et $\|\cdot\|_2$ la norme euclidienne de $\mathbf{R}^m$, alors on a le résultat de convergence ci-dessous.

Théorème 3.1 (*cf.* [18]).
On suppose que $G \in C^1(\mathbf{R}^m, \mathbf{R}^m)$ *et qu'il existe* $\mathrm{x}^\star \in \mathbf{R}^m$ *tel que* $G(\mathrm{x}^\star) = 0$. *On considère la suite* $(\mathrm{x}_k)_{k\in\mathbf{N}}$ *définie en* (3.6), *où* $\delta\mathrm{x}_k$ *vérifie* (3.8). *On suppose qu'il existe* $\beta > 0$ *et* $\gamma \in (0,1)$ *tels que pour tout* $k \in \mathbf{N}$, *on ait,*

- $J_G(\mathrm{x}_k)$ *est inversible ;*
- $\|J_G(\mathrm{x}_k)^{-1}\|_2 \leq \beta$ *;*
- J_G *est* γ*-lipschitzienne dans un voisinage de* $\mathrm{x}^\star$.

Alors, la suite $(\mathrm{x}_k)_{k\in\mathbf{N}}$ *est bien définie. De plus, il existe* $\delta > 0$ *tel que, pour* $\mathrm{x}_0 \in \mathbf{R}^m$ *vérifiant* $\|\mathrm{x}_0 - \mathrm{x}^\star\|_2 < \delta$, *on ait :*

i) *si* $\eta_k = \eta$, *avec* $\eta \in (0,1)$, *pour tout* $k \in \mathbf{N}$, *alors* $(\mathrm{x}_k)_{k\in\mathbf{N}}$ *converge linéairement vers* $\mathrm{x}^\star$ *;*

ii) *si nous avons :*

$$\eta_k \longrightarrow 0 \quad \textit{quand} \quad k \longrightarrow +\infty,$$

alors $(\mathrm{x}_k)_{k\in\mathbf{N}}$ *converge super-linéairement vers* $\mathrm{x}^\star$ *;*

iii) *si nous avons :*

$$\eta_k = \underset{k\to+\infty}{\mathcal{O}}(\|G(\mathrm{x}_k)\|_2), \tag{3.9}$$

alors $(\mathrm{x}_k)_{k\in\mathbf{N}}$ *converge quadratiquement vers* $\mathrm{x}^\star$.

Nous convenons, dans la suite, du choix,

$$\eta_k = \min\{0.5, \|G(\mathrm{x}_k)\|_2\}, \tag{3.10}$$

qui vérifie la condition (3.9) et assure la convergence quadratique de la méthode.

La jacobienne J_G n'étant pas symétrique, l'algorithme GMRES avec redémarrage (*cf.* [53, 52]) est adopté pour résoudre chaque système linéaire rencontré. Les matrices ont été compressées avec la méthode CSR « Compressed Sparse Rows » (*cf.* [56]) et la méthode GMRES a été préconditionnée par une factorisation LU incomplète (voir *e.g.* [48]). Nous choisissons enfin (3.8) comme critère de sortie de l'algorithme GMRES.

Nous avons écrit en Fortran 90 une version séquentielle de la méthode GMRES avec redémarrage. Une version parallèle, fournie par la bibliothèque PETSc [55], a par ailleurs été utilisée. Cette dernière n'est pas significativement plus performante en terme de rapidité, mais a été utilisée sporadiquement pour des systèmes de très grande taille (avec ici un nombre d'inconnues supérieur à 2.10^6) et nous a permis de distribuer le stockage des matrices.

3.2.2 Globalisation par la méthode de recherche linéaire

Un inconvénient de la méthode de Newton est qu'elle n'est pas globalement convergente. Plusieurs techniques pour augmenter son rayon de convergence s'articulent autour de la minimisation de la *fonction de moindres-carrés*, ϕ, définie par,

$$\phi : \mathrm{x} \in \mathbf{R}^m \longmapsto \frac{1}{2}\|G(\mathrm{x})\|_2^2 \in \mathbf{R}^+,$$

pour laquelle des algorithmes itératifs d'optimisation, convergeant pour toute initialisation, existent. Les solutions $\mathrm{x} \in \mathbf{R}^m$ du système non-linéaire discret (3.5) satisfont,

$$\phi(\mathrm{x}) = \min_{\mathrm{y}\in\mathbf{R}^m} \phi(\mathrm{y}).$$

La fonction ϕ peut toutefois avoir des minima locaux x qui ne sont pas des zéros de G. Ceux-ci vérifient la condition d'optimalité du premier ordre,

$$J_G(\mathrm{x})^T G(\mathrm{x}) = 0. \tag{3.11}$$

Ainsi chaque minimum local x de ϕ est solution de (3.5) si $J_G(\mathrm{x})$ est inversible. Il reste à décrire comment estimer un de ces minima locaux.

Des techniques de globalisation très courantes sont les *méthodes à régions de confiance* (voir *e.g.* [13]). Elles s'appuient sur une approximation de ϕ en x_{k+1},

$$\phi(\mathrm{x}_k + \delta\mathrm{x}_k) \approx \phi(\mathrm{x}_k) + \psi_k(\delta\mathrm{x}_k).$$

Par exemple, le développement limité de ϕ à l'ordre 2 fournit,

$$\psi_k(\delta\mathrm{x}_k) = \nabla\phi(\mathrm{x}_k) \cdot \delta\mathrm{x}_k + \frac{1}{2}\delta\mathrm{x}_k^T \nabla^2\phi(\mathrm{x}_k)\delta\mathrm{x}_k.$$

On considère que ψ_k est un modèle de la variation de ϕ acceptable dans un voisinage de 0 de la forme $\{\mathrm{x} \in \mathbf{R}^m \ ; \ \|\mathrm{x}\|_2 \leq \Delta_k\}$, où $\Delta_k > 0$, appelé *région de confiance* de ψ_k. Pour déterminer l'accroissement $\delta\mathrm{x}_k$ à donner à x_k, l'idée de ces méthodes consiste à minimiser ψ_k sur la région de confiance, *i.e.*, trouver $\delta\mathrm{x}_k \in \mathbf{R}^m$ vérifiant,

$$\psi_k(\delta\mathrm{x}_k) = \min_{\|\delta\mathrm{x}\|_2 \leq \Delta_k} \psi_k(\delta\mathrm{x}).$$

Si $\phi(\mathrm{x}_k + \delta\mathrm{x}_k)$ est « suffisamment petit » devant $\phi(\mathrm{x}_k)$, alors on pose $\mathrm{x}_{k+1} = \mathrm{x}_k + \delta\mathrm{x}_k$ (voir *e.g.* [13] pour plus de détails). Sinon, on réduit Δ_k et on recommence le procédé de recherche de minimisation sur une région de confiance plus étroite.

Les algorithmes basés sur les méthodes à régions de confiance ont de bons rayons de convergence, mais sont délicats à implémenter, particulièrement lorsqu'un système comporte beaucoup d'inconnues. Nous leur préférons ici une autre grande famille de techniques de globalisation, à savoir les méthodes de recherche linéaire le long d'une direction de descente, aussi appelées « *linesearch* », qui fournissent en pratique de très bons résultats et sont bien plus simples à mettre en œuvre.

Notons, pour une itérée x_k de la méthode de Newton en laquelle J_G est inversible,

$$\delta\mathrm{x}_k \approx -J_G(\mathrm{x}_k)^{-1} G(\mathrm{x}_k),$$

où $\delta\mathrm{x}_k$ vérifie (3.8). Ce vecteur est une direction de descente de ϕ si $G(\mathrm{x}_k) \neq 0$, puisque l'inégalité de Cauchy-Schwarz entraîne,

$$\nabla\phi(\mathrm{x}_k)^T \delta\mathrm{x}_k = G(\mathrm{x}_k)^T (G(\mathrm{x}_k) + J_G(\mathrm{x}_k)\delta\mathrm{x}_k) - \|G(\mathrm{x}_k)\|_2^2 \leq (\eta_k - 1)\|G(\mathrm{x}_k)\|_2^2 < 0.$$

Il est alors naturel de faire décroître ϕ le long de $\delta\mathrm{x}_k$, *i.e.* de rechercher $\alpha_k > 0$ de sorte $\phi(\mathrm{x}_k + \alpha_k\delta\mathrm{x}_k)$ soit « suffisamment petit » devant $\phi(\mathrm{x}_k)$. Les algorithmes utilisant cette idée sont dits de *recherche linéaire*. Choisir simplement $\alpha_k > 0$ tel que,

$$\phi(\mathrm{x}_k + \alpha_k\delta\mathrm{x}_k) < \phi(\mathrm{x}_k), \tag{3.12}$$

n'assure pas la convergence de l'algorithme ainsi construit (voir [47] pour un contre-exemple). On considère plutôt la *condition d'Armijo* suivante :

$$\phi(\mathrm{x}_k + \alpha_k\delta\mathrm{x}_k) \leq \phi(\mathrm{x}_k) + \alpha_{\mathrm{Armijo}}\alpha_k \nabla\phi(\mathrm{x}_k)^T \delta\mathrm{x}_k, \tag{3.13}$$

où $\alpha_{\text{Armijo}} \in (0,1)$ est un paramètre fixé. Notons que cette condition est plus forte que (3.12) puisque $\nabla\phi(\mathrm{x}_k)^T\delta\mathrm{x}_k < 0$. L'inconvénient est qu'elle peut conduire à un calcul qui affecte à α_k de très petites valeurs. On demande en conséquence qu'une contrainte supplémentaire, appelée *condition de courbure*, soit vérifiée :

$$\nabla\phi(\mathrm{x}_k + \alpha_k\delta\mathrm{x}_k)^T\delta\mathrm{x}_k \geq \alpha_{\text{courbure}}\nabla\phi(\mathrm{x}_k)^T\delta\mathrm{x}_k, \tag{3.14}$$

avec $\alpha_{\text{courbure}} \in (\alpha_{\text{Armijo}}, 1)$. Ces conditions, regroupées sous le nom de *conditions de Wolfe* (*cf.* [69, 70]), ne sont pas déraisonnables, puisqu'un tel α_k existe si $\phi \in C^1(\mathbf{R}^m, \mathbf{R})$ (*cf. e.g.* [47]).

Les résultats permettant de démontrer la convergence globale d'un algorithme utilisant une recherche linéaire s'obtiennent classiquement avec la condition de Zoutendijk (*cf.* [71]),

$$\exists C > 0 \ ; \ \forall k \in \mathbf{N}, \ \ \phi(\mathrm{x}_{k+1}) < \phi(\mathrm{x}_k) - C\frac{(\nabla\phi(\mathrm{x}_k)^T\delta\mathrm{x}_k)^2}{\|\delta\mathrm{x}_k\|_2^2}.$$

Les 2 propositions suivantes détaillent des hypothèses suffisantes pour globaliser notre algorithme.

Proposition 3.2 (voir *e.g.* [47])**.**
Considérons la méthode de Newton inexacte avec une recherche linéaire satisfaisant la condition de Zoutendijk, notons $(\mathrm{x}_k)_{k\in\mathbf{N}}$ *la suite qu'elle génère, et supposons que la suite de conditionnements, en norme-2,* $(\mathrm{cond}_2(J_G(\mathrm{x}_k)))_{k\in\mathbf{N}}$ *soit bornée, ainsi que* $(J_G(\mathrm{x}_k))_{k\in\mathbf{N}}$*. Alors* $(G(\mathrm{x}_k))_{k\in\mathbf{N}}$ *converge vers* 0*.*

Proposition 3.3 (voir *e.g.* [47])**.**
Supposons $\phi \in C^1(\mathbf{R}^m, \mathbf{R})$*, et considérons un algorithme à direction de descente qui génère une suite* $(\mathrm{x}_k)_{k\in\mathbf{N}}$ *respectant les conditions de Wolfe. Alors,* $(\phi(\mathrm{x}_k))_{k\in\mathbf{N}}$ *respecte la condition de Zoutendijk.*

Une des grandes lacunes des résultats précédents est qu'on semble perdre la convergence quadratique de la méthode de Newton inexacte.

Afin de conserver partiellement le taux de convergence de l'algorithme de Newton classique, une hybridation de plusieurs algorithmes est effectuée : tout d'abord, nous utilisons la méthode avec recherche linéaire, qui fournit une itérée proche d'un zéro de G. Ensuite, nous initialisons l'algorithme de Newton inexact (sans recherche linéaire) avec cette dernière itérée afin de revenir à la convergence quadratique des méthodes classiques.

Finalement nous avons exhibé deux conditions, (3.13) et (3.14), sur α_k, qui permettent de décider si $\phi(\mathrm{x}_k+\alpha_k\delta\mathrm{x}_k)$ est « suffisamment petit » devant $\phi(\mathrm{x}_k)$. La stratégie de recherche linéaire que nous adoptons pour déterminer α_k consiste à construire une suite $\alpha_k^{(0)}$, $\alpha_k^{(1)}$, ... qui décroît de sorte qu'un de ses termes vérifie la condition d'Armijo, mais pas trop rapidement pour que la condition de courbure puisse être respectée également. Afin de réduire la vitesse de décroissance, nous imposons $\alpha_k^{(i)} \geq \alpha_{\text{coeff}}\alpha_k^{(i-1)}$, où $\alpha_{\text{coeff}} \in (0,1)$. Nous calculons chaque terme de cette suite jusqu'à ce que l'un d'entre eux, $\alpha_k^{(i)}$, satisfasse les conditions de Wolfe, auquel cas nous posons $\alpha_k = \alpha_k^{(i)}$.

Posons,

$$\theta_k : \alpha \in \mathbf{R} \longmapsto \phi(\mathrm{x}_k + \alpha\delta\mathrm{x}_k) \in \mathbf{R}.$$

Les conditions de Wolfe se récrivent alors,

$$\begin{cases} \theta_k(\alpha_k) \leq \theta_k(0) + \alpha_{\text{Armijo}}\alpha_k\theta_k'(0), \\ \theta_k'(\alpha_k) \geq \alpha_{\text{courbure}}\theta_k'(0). \end{cases}$$

Une façon de construire $(\alpha_k^{(i)})_{i\in\mathbf{N}}$ est de déterminer une suite d'approximations du minimum de θ_k. Nous choisissons en premier lieu $\alpha_k^{(0)} = 1$. Si les conditions de Wolfe ne sont pas respectées, nous formons une interpolation quadratique de θ_k à partir des valeurs déjà calculées $\theta_k(0)$, $\theta_k'(0)$ et $\theta_k(\alpha_k^{(0)})$ pour calculer le prochain pas :

$$\theta_k^{\text{quad}}(\alpha) = \frac{\theta_k(\alpha_k^{(0)}) - \theta_k(0) - \alpha_k^{(0)}\theta_k'(0)}{(\alpha_k^{(0)})^2}\alpha^2 + \theta_k'(0)\alpha + \theta_k(0) \quad \forall \alpha \in \mathbf{R}.$$

L'itérée suivante de notre suite de pas est alors choisie comme le minimum de θ_k^{quad},

$$\alpha_k^{(1)} = -\frac{\theta_k'(0)(\alpha_k^{(0)})^2}{2\left(\theta_k(\alpha_k^{(0)}) - \theta_k(0) - \theta_k'(0)\alpha_k^{(0)}\right)} \approx \frac{\|G(\mathrm{x}_k)\|_2^2(\alpha_k^{(0)})^2}{\|G(\mathrm{x}_k + \alpha_k^{(0)}\delta\mathrm{x}_k)\|_2^2 + (2\alpha_k^{(0)} - 1)\|G(\mathrm{x}_k)\|_2^2}.$$

Les $\alpha_k^{(i)}$ suivants, pour $i \geq 2$, s'obtiennent à partir d'une interpolation cubique de θ_k en les positions déjà connues, $\theta_k(0)$, $\theta_k'(0)$, $\theta_k(\alpha_k^{(i-1)})$ et $\theta_k(\alpha_k^{(i-2)})$,

$$\theta_k^{\text{cub}}(\alpha) = a\alpha^3 + b\alpha^2 + \theta_k'(0)\alpha + \theta_k(0) \quad \forall \alpha \in \mathbf{R},$$

où,

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{1}{\alpha_k^{(i-1)} - \alpha_k^{(i-2)}} \begin{pmatrix} \frac{1}{(\alpha_k^{(i-1)})^2} & -\frac{1}{(\alpha_k^{(i-2)})^2} \\ -\frac{\alpha_k^{(i-2)}}{(\alpha_k^{(i-1)})^2} & \frac{\alpha_k^{(i-1)}}{(\alpha_k^{(i-2)})^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \theta_k(\alpha_k^{(i-1)}) - \theta_k(0) - \theta_k'(0)\alpha_k^{(i-1)} \\ \theta_k(\alpha_k^{(i-2)}) - \theta_k(0) - \theta_k'(0)\alpha_k^{(i-2)} \end{pmatrix}. \tag{3.15}$$

Un minimum de θ_k est atteint entre 0 et $\alpha_k^{(i-1)}$, et est donné par (voir *e.g.* [47]) :

$$\alpha_k^{(i)} = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 3a\theta_k'(0)}}{3a} \approx \frac{-b + \sqrt{b^2 + 3a\|G(\mathrm{x}_k)\|_2^2}}{3a}.$$

L'Algorithme 3.4 détaille finalement la méthode présentée. Nous rappelons qu'il hybride une méthode de Newton inexacte classique (voir l'Algorithme 3.3), qui converge localement et quadratiquement, et une méthode de quasi-Newton inexacte globalisée par une technique de recherche linéaire (voir l'Algorithme 3.2, s'appuyant sur l'Algorithme 3.1) qui ne converge plus quadratiquement.

Notons que nous ne pouvons pas *a priori* savoir si les points critiques retournés par l'Algorithme 3.4 sont des minima locaux de la fonctionnelle d'énergie $\mathcal{E}$ définie par (1.7), sans de coûteux calculs supplémentaires. Au lieu de rechercher les états critiques, nous aurions pu directement minimiser $\mathcal{E}$. Les méthodes d'optimisation élémentaires (de type gradient ou Newton, voir par exemple [48]) ne convergent pas nécessairement vers un minimum local, puisque $\mathcal{E}$ n'est pas quadratique. Certaines modifications existent afin de corriger cela. J.J. Moré et D.C. Sorensen [45] ont par exemple adapté la méthode des régions de confiance en un algorithme qui converge toujours vers un minimum local, mais qui nécessite un calcul exact de la plus petite valeur propre de la hessienne de l'énergie. Nous avons essayé de remplacer ce calcul exact par une simple estimation de cette valeur (par le théorème des disques de Gershgörin) ce qui nous a fourni un algorithme ne convergeant que dans des contextes très simples (notamment lorsque $\varkappa_\parallel = 0$). Le principal obstacle dans l'adaptation de cette méthode a été que la fonctionnelle $\mathcal{E}$ n'est pas minorée ici. Enfin certains algorithmes probabilistes permettent également de déterminer des minima locaux (voir *e.g.* [20]) mais ne sont pas adaptés aux problèmes de grandes tailles de par le coût en temps de calcul, car ils demandent un nombre important d'évaluations avant de converger.

Algorithme 3.1 Recherche linéaire le long d'une direction de descente, `lnsrch`.

entrées : Fonction $G : \mathbf{R}^m \longrightarrow \mathbf{R}^m$, itérée $\mathrm{x} \in \mathbf{R}^m$, direction de descente $\delta\mathrm{x} \in \mathbf{R}^m$, paramètres d'Armijo $\alpha_{\text{Armijo}} \in (0,1)$ et de courbure $\alpha_{\text{courbure}} \in (\alpha_{\text{Armijo}}, 1)$, pas minimal dans la recherche linéaire $\alpha_{\min} > 0$, paramètre $\alpha_{\text{coeff}} \in (0,1)$ pour éviter la décroissance trop rapide de la suite de pas.

sorties : Pas α le long de la direction de descente, erreur err en sortie d'algorithme (valant 0 en cas de détermination correcte du pas et 1 si la recherche linéaire le long de la direction de descente a conduit à un pas $\alpha < \alpha_{\min}$ ou si la condition de courbure n'est plus respectée).

1: $err \leftarrow 0$;
2: **boucler**
3: $\alpha^{(0)} \leftarrow 1$;
4: **si** les conditions de Wolfe sont vérifiées **alors**
5: $\alpha \leftarrow \alpha^{(0)}$;
6: **sortie de l'algorithme**.
7: **sinon si** $\alpha^{(0)} < \alpha_{\min}$ **ou** la condition de courbure est violée **alors**
8: $err \leftarrow 1$;
9: **sortie de l'algorithme**.
10: **fin si**
11: $\alpha^{(1)} \leftarrow \max\left\{\dfrac{\|G(\mathrm{x})\|_2^2(\alpha^{(0)})^2}{\|G(\mathrm{x}+\alpha^{(0)}\delta\mathrm{x})\|_2^2 + (2\alpha^{(0)}-1)\|G(\mathrm{x})\|_2^2}, \alpha_{\text{coeff}}\alpha^{(0)}\right\}$;
12: **si** les conditions de Wolfe sont vérifiées **alors**
13: $\alpha \leftarrow \alpha^{(1)}$;
14: **sortie de l'algorithme**.
15: **sinon si** $\alpha^{(1)} < \alpha_{\min}$ **ou** la condition de courbure est violée **alors**
16: $err \leftarrow 1$;
17: **sortie de l'algorithme**.
18: **fin si**
19: $i \leftarrow 2$;
20: $\alpha^{(i)} \leftarrow \max\left\{\dfrac{-b+\sqrt{b^2+3a\|G(\mathrm{x})\|_2^2}}{3a}, \alpha_{\text{coeff}}\alpha^{(i-1)}\right\}$, où a et b sont définis par (3.15) ;
21: **si** les conditions de Wolfe sont vérifiées **alors**
22: $\alpha \leftarrow \alpha^{(i)}$;
23: **sortie de l'algorithme**.
24: **sinon si** $\alpha^{(i)} < \alpha_{\min}$ **ou** la condition de courbure est violée **alors**
25: $err \leftarrow 1$;
26: **sortie de l'algorithme**.
27: **fin si**
28: Mettre à jour $i \leftarrow i+1$;
29: Retourner à l'étape 20 ;
30: **fin de boucle**

Algorithme 3.2 Newton inexact avec globalisation par recherche linéaire, `quasi_newt`.

entrées : Fonction coût $G : \mathbf{R}^m \longrightarrow \mathbf{R}^m$, vecteur d'initialisation $\mathrm{x}_0 \in \mathbf{R}^m$, paramètre $\beta \in [\![1, m]\!]$ de redémarrage dans GMRES, tolérances relative $\epsilon_{\text{relatif}} > 0$ et absolue $\epsilon_{\text{absolue}} > 0$ pour le critère de sortie de la méthode de Newton, nombre maximal d'itérations $n_{\text{itermax}} \in \mathbf{N}^\star$. Les paramètres $\alpha_{\text{Armijo}} \in (0, 1)$, $\alpha_{\text{courbure}} \in (\alpha_{\text{Armijo}}, 1)$, $\alpha_{\min} > 0$ et $\alpha_{\text{coeff}} \in (0, 1)$ permettent de régler la recherche linéaire (voir Algorithme 3.1).

sorties : Approximation $\mathrm{x} \in \mathbf{R}^m$ d'un zéro de G, erreur err en sortie d'algorithme, valant 0 en cas de convergence, valant 1 si la recherche linéaire le long de la direction de descente n'a pas abouti et valant 2 si le nombre maximal d'itérations autorisé est atteint.

1: $\mathrm{x} \leftarrow \mathrm{x}_0$, $j \leftarrow 1$;
2: Evaluer la jacobienne $J_G(\mathrm{x})$ ainsi que la fonction de coût $G(\mathrm{x})$;
3: **si** $\|G(\mathrm{x})\|_2 \leq \epsilon_{\text{relatif}} \|G(\mathrm{x}_0)\|_2$ **et** $\|G(\mathrm{x})\|_2 \leq \epsilon_{\text{absolu}}$ **alors**
4: $\quad err \leftarrow 0$;
5: $\quad$ **sortie de l'algorithme**.
6: **fin si**
7: Calculer une solution approchée $\delta\mathrm{x}$ de $J_G(\mathrm{x})\delta\mathrm{x} = -G(\mathrm{x})$ vérifiant une condition du type (3.8) :

$$\|G(\mathrm{x}) + J_G(\mathrm{x})\delta\mathrm{x}\|_2 \leq \eta \|G(\mathrm{x})\|_2,$$

avec $\eta = \min\{0.5, \|G(\mathrm{x})\|_2\}$. On utilise la méthode de GMRES(β) avec redémarrage et préconditionnée par une factorisation LU incomplète ;
8: Recherche du pas : $(\alpha, err) \leftarrow$ `lnsrch`$(G, \mathrm{x}, \delta\mathrm{x}, \alpha_{\text{Armijo}}, \alpha_{\text{courbure}}, \alpha_{\min}, \alpha_{\text{coeff}})$ (voir Algorithme 3.1) ;
9: **si** $err \neq 1$ **alors**
10: $\quad$ **si** $j = n_{\text{itermax}}$ **alors**
11: $\quad\quad err \leftarrow 2$;
12: $\quad$ **sinon**
13: $\quad\quad$ Mettre à jour $\mathrm{x} \leftarrow \mathrm{x} + \alpha\delta\mathrm{x}$ et $j \leftarrow j + 1$;
14: $\quad\quad$ Retourner à l'étape 2 ;
15: $\quad$ **fin si**
16: **fin si**
17: **sortie de l'algorithme.**

Algorithme 3.3 Algorithme de Newton inexact, `newt`.

entrées : Fonction coût $G : \mathbf{R}^m \longrightarrow \mathbf{R}^m$, vecteur d'initialisation $\mathrm{x}_0 \in \mathbf{R}^m$, paramètre $\beta \in [\![1, m]\!]$ de redémarrage dans GMRES, tolérances relative $\epsilon_{\text{relatif}} > 0$ et absolue $\epsilon_{\text{absolue}} > 0$ pour le critère de sortie de la méthode de Newton, nombre maximal d'itérations $n_{\text{itermax}} \in \mathbf{N}^\star$.

sorties : Approximation $\mathrm{x} \in \mathbf{R}^m$ d'un zéro de G, erreur err en sortie d'algorithme (valant 0 en cas de convergence et 2 si le nombre maximal d'itérations autorisé est atteint).

1: $\mathrm{x} \leftarrow \mathrm{x}_0$, $j \leftarrow 1$;
2: Evaluer la jacobienne $J_G(\mathrm{x})$ ainsi que la fonction de coût $G(\mathrm{x})$;
3: **si** $\|G(\mathrm{x})\|_2 \leq \epsilon_{\text{relatif}}\|G(\mathrm{x}_0)\|_2$ **et** $\|G(\mathrm{x})\|_2 \leq \epsilon_{\text{absolu}}$ **alors**
4: $\quad err \leftarrow 0$;
5: $\quad$ **sortie de l'algorithme**.
6: **fin si**
7: Calculer une solution approchée $\delta\mathrm{x}$ de $J_G(\mathrm{x})\delta\mathrm{x} = -G(\mathrm{x})$ vérifiant la condition (3.8) :

$$\|G(\mathrm{x}) + J_G(\mathrm{x})\delta\mathrm{x}\|_2 \leq \eta\|G(\mathrm{x})\|_2,$$

avec $\eta = \min\{0.5, \|G(\mathrm{x})\|_2\}$. On utilise la méthode de GMRES(β) avec redémarrage et préconditionnée par une factorisation LU incomplète ;
8: **si** $j = n_{\text{itermax}}$ **alors**
9: $\quad err \leftarrow 2$;
10: **sinon**
11: $\quad$ Mettre à jour $\mathrm{x} \leftarrow \mathrm{x} + \delta\mathrm{x}$ et $j \leftarrow j + 1$;
12: $\quad$ Retourner à l'étape 2 ;
13: **fin si**
14: **sortie de l'algorithme.**

Algorithme 3.4 Algorithme hybride principal.

entrées : Fonction coût $G : \mathbf{R}^m \longrightarrow \mathbf{R}^m$, vecteur d'initialisation $\mathrm{x}_0 \in \mathbf{R}^m$, paramètre $\beta \in [\![1, m]\!]$ de redémarrage dans GMRES, tolérances relative $\epsilon_{\text{relatif}} > 0$ et absolue $\epsilon_{\text{absolue}} > 0$ pour le critère de sortie de la méthode de Newton, nombre maximal d'itérations $n_{\text{itermax}} \in \mathbf{N}^\star$. Les paramètres $\alpha_{\text{Armijo}} \in (0, 1)$, $\alpha_{\text{courbure}} \in (\alpha_{\text{Armijo}}, 1)$, $\alpha_{\min} > 0$ et $\alpha_{\text{coeff}} \in (0, 1)$ permettent de régler la recherche linéaire (voir Algorithme 3.1).

sorties : Approximation $\mathrm{x} \in \mathbf{R}^m$ d'un zéro de G, erreur err en sortie d'algorithme (valant 0 en cas de convergence et 2 si le nombre maximal d'itérations autorisé est atteint).

1: $(\mathrm{x}, err) \leftarrow$ `quasi_newt`$(G, \mathrm{x}_0, \beta, \epsilon_{\text{relatif}}, \epsilon_{\text{absolue}}, n_{\text{itermax}}, \alpha_{\text{Armijo}}, \alpha_{\text{courbure}}, \alpha_{\min}, \alpha_{\text{coeff}})$ (voir Algorithme 3.2) ;
2: **si** $err \neq 0$ **alors**
3: $\quad (\mathrm{x}, err) \leftarrow$ `newt`$(G, x_0, \beta, \epsilon_{\text{relatif}}, \epsilon_{\text{absolue}}, n_{\text{itermax}})$ (voir Algorithme 3.3).
4: **fin si**
5: **sortie de l'algorithme.**

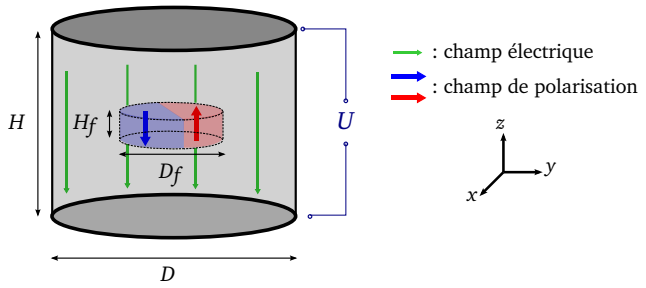


FIGURE 3.1 – Configuration géométrique.

3.3 Protocoles d'expérimentations numériques

D'abord, nous décrivons précisément les valeurs des paramètres intervenant dans l'Algorithme 3.4. Nous expliquons ensuite comment déterminer la température critique correspondant au dispositif ferroélectrique puis nous présentons une technique qui permet d'investiguer l'existence d'un cycle d'hystérésis en tension. L'influence du paramètre $\varkappa_{\|}$ dans (GLE) est en outre étudiée.

3.3.1 Présentation du contexte d'expérimentation numérique

Ici, la couche Ω_f et le domaine Ω sont deux cylindres bornés (voir Figure 3.1), qui partagent le même centre $(0,0,0)^T$ et le même axe (Oz) :

$$\overline{\Omega_f} = \left\{(x,y,z) \in \mathbf{R}^3 \; ; \; x^2+y^2 \leq \left(\frac{D_f}{2}\right)^2 \text{ et } z \in \left[-\frac{H_f}{2}, \frac{H_f}{2}\right]\right\},$$

$$\overline{\Omega} = \left\{(x,y,z) \in \mathbf{R}^3 \; ; \; x^2+y^2 \leq \left(\frac{D}{2}\right)^2 \text{ et } z \in \left[-\frac{H}{2}, \frac{H}{2}\right]\right\},$$

avec $D_f > 0$, $H_f > 0$, $D > 0$ et $H > 0$.

Nous choisissons ici arbitrairement $(D_f, H_f) = (0.8, 0.1)$ et $(D, H) = (2.4, 1.7)$, en considérant par la suite le système d'unités CGS. Nous fixons de plus $P_0 = 1$, $\varepsilon|_{\Omega_p} =: \varepsilon_p I_3$, avec I_3 le tenseur unité, $\varepsilon_p = 0.1$, et $\varkappa_{\|} = 10$. Le tenseur de permittivité dans Ω_f, ainsi que le tenseur ξ, sont choisis diagonaux et constants :

$$\varepsilon|_{\Omega_f} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{\perp x} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{\perp y} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{\|z} \end{pmatrix}, \qquad \xi = \begin{pmatrix} \xi_{\perp x} & 0 & 0 \\ 0 & \xi_{\perp y} & 0 \\ 0 & 0 & \xi_{\|z} \end{pmatrix},$$

avec dans ce paragraphe $\varepsilon_{\perp x} = \varepsilon_{\perp y} = 10$, $\varepsilon_{\|z} = 0.1$ et $\xi_{\perp x} = \xi_{\perp y} = \xi_{\|z} = 0.1$. Nous rappelons que le dispositif comporte deux électrodes qui imposent un potentiel de courant $\pm\phi_0$ sur les faces inférieure et supérieure de Ω, qui apparaît dans l'expression de φ_S en (2.6), reconsidérée avec les notations ci-dessus, sous la forme,

$$\varphi_S(x,y,z) = -\frac{2z}{H}\phi_0 \quad \forall (x,y,z) \in S. \tag{3.16}$$

Dans toute la suite, nos calculs ont été effectués en Fortran 90 puis exécutés depuis un *cluster* comportant des nœuds de type Intel Xeon E5520 à 2.27Ghz.

Les maillages utilisés dans la suite ont tous été générés à l'aide du logiciel libre Gmsh [24, 25]. Les géométries polyédriques approchant les cylindres qui nous intéressent ici sont

	Maillage 1	*Maillage 2*	*Maillage 3*
Pas dans $\overline{\Omega_f}$ *(*h_f*)*	$7.31.10^{-2}$	$4.44.10^{-2}$	$2.28.10^{-2}$
Pas dans $\overline{\Omega}$ *(*h_Ω*)*	$1.66.10^{-1}$	$8.71.10^{-2}$	$4.79.10^{-2}$
Nœuds dans $\overline{\Omega_f}$ *(*N_f*)*	1 906	10 557	13 454
Nœuds dans $\overline{\Omega}$ *(*N*)*	29 321	207 288	1 510 698
Taille du système ($N_f + N^0$*)*	25 183	193 675	1 499 982

TABLE 3.1 – Quelques caractéristiques des maillages de $\overline{\Omega}$ considérés.

identiques pour chaque maillage présenté : si on note $\mathcal{T}_{h_i}$ le i^{e} maillage de $\overline{\Omega}$ évoqué sur la Table 3.1, où $i \in [\![1,3]\!]$, et $\mathcal{T}^f_{h_{f,i}}$ celui de $\overline{\Omega_f}$ qui lui est associé, alors on a :

$$\bigcup_{T\in\mathcal{T}_{h_i}} \overline{T} = \bigcup_{T\in\mathcal{T}_{h_j}} \overline{T} \quad \text{et} \quad \bigcup_{T\in\mathcal{T}^f_{h_{f,i}}} \overline{T} = \bigcup_{T\in\mathcal{T}^f_{h_{f,j}}} \overline{T} \quad \forall (i,j) \in [\![1,3]\!]^2.$$

Sans indication contraire, les calculs que nous commenterons dans ce paragraphe sont réalisés à partir du maillage 1, dont quelques caractéristiques sont présentées sur la Table 3.1.

Afin de calibrer les paramètres de l'Algorithme 3.4, nous nous inspirons des suggestions données dans la littérature, notamment dans [19], puis nous vérifions *a posteriori* que ces choix sont satisfaisants. Ainsi nous considérons $\alpha_{\text{Armijo}} = 10^{-4}$, $\alpha_{\text{courbure}} = 0.1$ et $\alpha_{\text{coeff}} = 0.1$. Le paramètre $\alpha_{\min} = 10^{-4}$ n'est pas choisi trop petit, afin de ne pas autoriser l'algorithme à calculer des itérées trop rapprochées. Enfin nous fixons le paramètre de redémarrage β dans la méthode de GMRES à $\beta = 2000$ et la tolérance de sortie demandée est $\epsilon_{\text{relatif}} = 10^{-6}$.

L'Algorithme 3.4 ne converge *a priori* pas pour toute initialisation. En pratique, nous n'avons noté que très peu de cas de divergence ; un autre choix de vecteur initial est alors considéré le cas échéant.

3.3.2 Protocole de chauffage du dispositif

Dans ce paragraphe, nous présentons un protocole pour déterminer la température critique correspondant au dispositif ferroélectrique. Pour cela, nous nous plaçons dans le cadre où aucun champ électrique n'est appliqué, ce qui correspond au cas $U = 0$. Nous rappelons que dans la phase ferroélectrique, il est possible d'avoir $P \neq 0$ avec $U = 0$. Ainsi, pour estimer la température de transition entre les phases ferroélectrique et paraélectrique, il faut détecter la température t_c la plus basse telle que $P = 0$ pour tout $t \geq t_c$. Supposons donnés plusieurs états critiques (P, φ) en une température t_0 suffisamment faible, vérifiant $P \neq 0$. Chaque état doit s'annuler au delà d'une certaine température. La température critique est alors la plus grande des températures où l'on a encore $P \neq 0$.

Plusieurs difficultés se présentent à nous. La première est qu'il faut obtenir différents états ferroélectriques non triviaux, ce qui revient à nous interroger sur la manière d'initialiser l'Algorithme 3.4, itératif, que nous utilisons. Bien que comportant une étape de globalisation, cet algorithme reste toutefois sensible à la considération des données initiales. La seconde difficulté est qu'il faut trouver une manière de « chauffer » numériquement ces différents états.

Afin d'obtenir des états ferroélectriques variés pour différentes températures, nous initialisons l'Algorithme 3.4 avec des vecteurs aléatoires de taille $N_f + N^0$, répartis suivant la loi uniforme de $[-1,1]^{N_f+N^0}$.

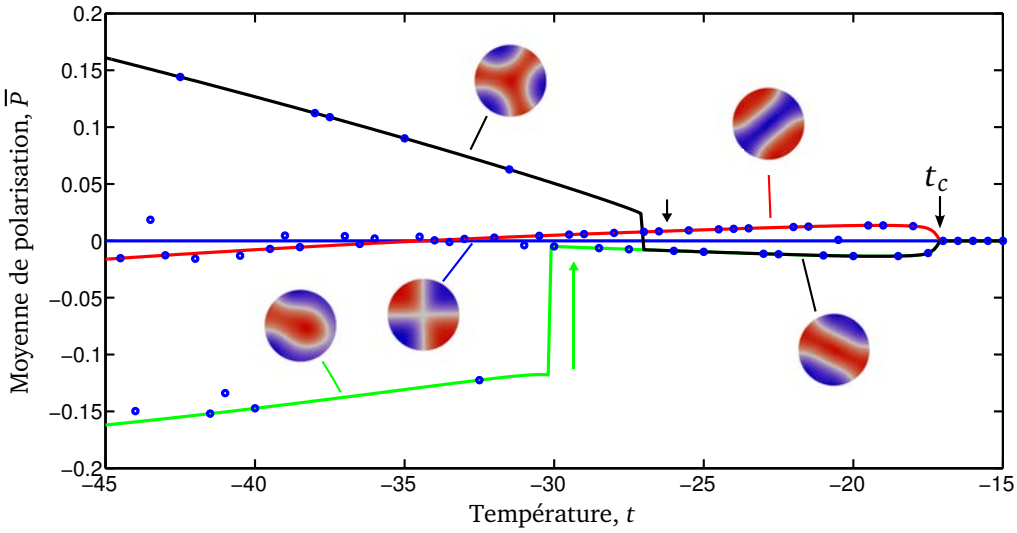


FIGURE 3.2 – Recherche de la température critique associée au dispositif.

Les moyennes de polarisation $\overline{P}$ des diverses solutions $(P, \varphi) \in W_h$ obtenues,

$$\overline{P} = \frac{1}{|\Omega_f|} \int_{\Omega_f} P dx,$$

sont représentées par des marques « • » sur la Figure 3.2. Une approximation de la température critique est d'ores et déjà possible, puisque des valeurs de P non nulles subsistent jusque $t = -17.1$, ce qui entraîne $t_c > -17.1$.

Il reste à voir comment reproduire numériquement le chauffage ou le refroidissement d'une nanostructure ferroélectrique que l'on suppose être dans sa phase ferroélectrique. Donnons-nous pour cela un état métastable $(P^{(0)}, \varphi^{(0)})$ non trivial en une température t_0 qui s'associe à la représentation discrète $(\mathcal{P}^{(0)}, \Phi^{(0)})^T \in \mathbf{R}^{N_f+N^0}$.

Nous initialisons notre méthode itérative avec le vecteur $(\mathcal{P}^{(0)}, \Phi^{(0)})^T$, ce qui nous fournit une nouvelle solution $(\mathcal{P}^{(1)}, \Phi^{(1)})^T$ en $t = t_0 + \delta t$. En procédant ainsi de proche en proche, nous construisons une suite $((\mathcal{P}^{(k)}, \Phi^{(k)})^T)_{k\in\mathbf{N}}$ d'états critiques : pour $k \in \mathbf{N}$, nous initialisons l'algorithme avec $(\mathcal{P}^{(k)}, \Phi^{(k)})^T$, tout en considérant $t = t_0 + (k+1)\delta t$, et nous notons $(\mathcal{P}^{(k+1)}, \Phi^{(k+1)})^T$ la solution ainsi obtenue. Sur la Figure 3.2, on peut voir l'évolution de la moyenne de polarisation $\overline{P}$ représentée par des traits continus lorsqu'on chauffe (avec $\delta t = 0.1$) ou refroidit (avec $\delta t = -0.1$) plusieurs états critiques.

Tant que $\overline{P}$ évolue continûment en fonction de t, la répartition de la polarisation dans Ω_f n'évolue pas brusquement : les *profils* de polarisation restent similaires. Nous les avons représentés à travers des coupes de P en $(z = 0)$ pour diverses températures sur la Figure 3.2 ; les zones bleues indiquent une polarisation négative, tandis que la polarisation est positive dans les zones rouges. Nous dessinerons toujours ainsi les profils de polarisation dans le reste de ce manuscrit.

Les changements brusques de texture de polarisation permettent de comprendre l'importance que revêt le choix de δt. Nous avons observé que lorsqu'on chauffe (ou refroidit) un état critique à partir de $t = t_0$ jusqu'à une température t_1 où une polarisation de même texture qu'en $t = t_0$ existe, alors nous retrouvons cette solution, pour n'importe quel choix de δt. Par contre, lorsqu'une polarisation ayant une texture semblable n'existe plus en $t = t_1$, des solutions variées peuvent être obtenues selon le choix du pas de température.

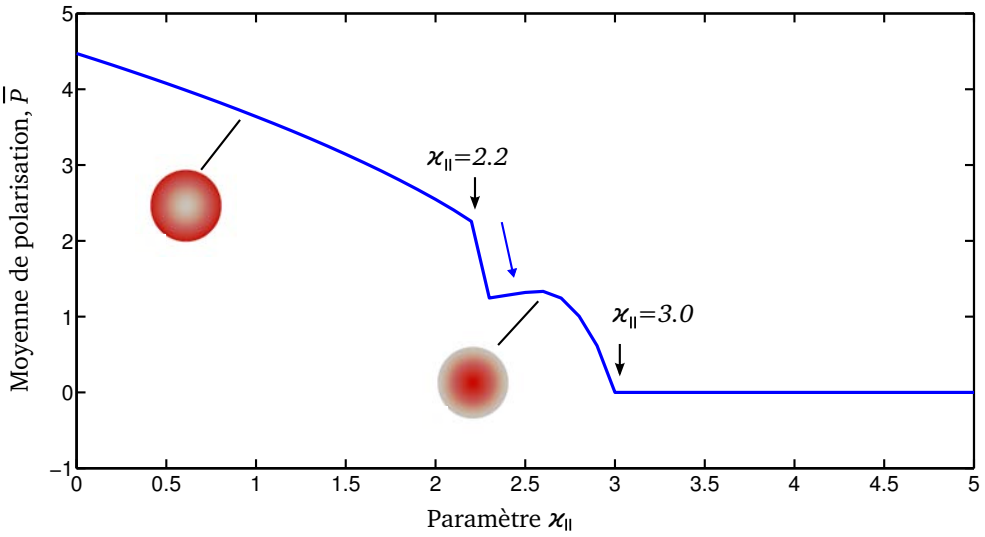


FIGURE 3.3 – Etude de l'influence du paramètre $\varkappa_{\|}$ sur la moyenne de polarisation.

Nous convenons donc dans la suite de mener les calculs avec un pas δt grossier, sauf aux températures où la texture d'un état change brusquement, pour lesquelles nous choisirons plusieurs pas δt plus fins, et nous indiquerons si des solutions variées sont alors obtenues.

Signalons pour conclure que le chauffage des différents états obtenus a permis de déduire une meilleure estimation de la température critique : $t_c \approx -16.9$. En rappel, nous ne sommes pas ici dans le cas où $t \in [-1, 0]$, comme le requièrent les contextes physiques.

En s'inspirant du protocole expérimental consistant à chauffer un dispositif ferroélectrique, nous sommes en mesure de commenter également l'influence du paramètre $\varkappa_{\|}$: nous construisons une suite de vecteurs $((\mathcal{P}^{(k)}, \Phi^{(k)})^T)_{k\in\mathbf{N}}$ associés à des états métastables $(P^{(k)}, \varphi^{(k)})_{k\in\mathbf{N}}$. Pour $k \in \mathbf{N}$, nous calculons $(\mathcal{P}^{(k+1)}, \Phi^{(k+1)})^T$ en initialisant notre méthode itérative avec $(\mathcal{P}^{(k)}, \Phi^{(k)})^T$, tout en considérant $\varkappa_{\|} = (k+1)\delta\varkappa$, où $\delta\varkappa > 0$ est le pas selon lequel $\varkappa_{\|}$ varie.

Nous représentons sur la Figure 3.3 la moyenne de chaque polarisation obtenue en fonction de $\varkappa_{\|}$, pour $\delta\varkappa = 0.1$, à partir de $\varkappa_{\|} = 0$. Lorsque $\varkappa_{\|} \in [0, 2.2]$, la polarisation, positive dans tout Ω_f, diminue en restant presque uniformément répartie dans Ω_f, tandis que pour $\varkappa_{\|} \in [2.3, 2.9]$ elle devient brusquement plus importante près de l'axe (Oz), puis s'annule à partir de $\varkappa_{\|} = 3.0$. En particulier, cette méthode ne nous a pas permis de retrouver un état critique non trivial en l'absence de champ électrique, lorsque $\varkappa_{\|} = 10$. Nous ne ferons donc plus varier ce paramètre à l'avenir.

3.3.3 Protocole de simulation de cycles d'hystérésis en tension

Le protocole que nous adopterons pour l'investigation numérique du comportement hystérétique du système se conçoit comme celui qui a été défini plus haut lorsque nous avons inspecté le comportement de la polarisation en fonction de la température t ou du paramètre $\varkappa_{\|}$. Supposons donné $(\mathcal{P}^{(0)}, \Phi^{(0)})^T$ le vecteur associé à un état métastable $(P^{(0)}, \varphi^{(0)})$, lorsque $U = U^{(0)}$. On calcule, pour tout $k \in \mathbf{N}$, $(\mathcal{P}^{(k+1)}, \Phi^{(k+1)})^T$ en initialisant notre méthode itérative avec $(\mathcal{P}^{(k)}, \Phi^{(k)})^T$, en $U = U^{(0)} + (k+1)\delta U$, ce qui fournit une suite $((\mathcal{P}^{(k)}, \Phi^{(k)})^T)_{k\in\mathbf{N}}$ de solutions.

Pour $U^{(0)} = 0$, les profils de polarisation découverts lors de la recherche de la température

critique peuvent être réutilisés. Nous pouvons ainsi, en augmentant la tension et en la diminuant, avec $\delta U > 0$ et $\delta U < 0$, obtenir l'évolution d'un profil de polarisation pour n'importe quelle tension. Une autre alternative, pour la considération de $U^{(0)}$, consiste à choisir $|U^{(0)}|$ « suffisamment grand » pour qu'un seul état quasi-uniforme existe, comme cela pourrait être indiqué par des arguments de la Physique (*cf. e.g.* Figure 1.5). Introduisons notamment β tel que,

$$\beta(P) = \frac{\dfrac{1}{|\Omega_f|}\displaystyle\int_{\Omega_f} P(\mathrm{x})^4 d\mathrm{x}}{\left(\dfrac{1}{|\Omega_f|}\displaystyle\int_{\Omega_f} P(\mathrm{x})^2 d\mathrm{x}\right)^2}.$$

Dans le cas où la polarisation P est quasi-uniforme, nous avons $\beta(P) \approx 1$. Nous considérerons donc que $|U^{(0)}|$ est « suffisamment grand » lorsque $\beta(P) \approx 1$, par exemple lorsque $|\beta(P) - 1| < 10^{-1}$. Dans notre contexte et avec $t = -20$, cette inégalité est vraie pour $|U| \geq \pm 150$. L'évolution de β pour différentes tensions est représentée sur la Figure 3.4(a), et l'on retrouve que la polarisation est quasiment uniforme pour les tensions les plus basses et les plus hautes.

La boucle d'hystérésis attendue n'est toutefois pas lisible à travers $\beta(P)$. Pour l'obtenir, nous gardons U comme paramètre décrivant $\mathbf{E}$ puisque c'est par son intermédiaire qu'on fait varier le champ électrique appliqué. Nous caractérisons par contre $\mathbf{P}$ plutôt à travers $\overline{P}$. Ce paramètre présente en effet l'avantage de changer de signe, en étant par exemple négatif lorsque la polarisation est uniformément orientée vers le bas, ce qui est attendu (*cf.* la courbe modèle représentée sur la Figure 1.5). L'évolution de $\overline{P}$ en fonction de U est tracée sur la Figure 3.4(b) et décrit bien une boucle d'hystérésis. On y lit par exemple l'existence de deux états métastables opposés non triviaux lorsque le champ électrique s'annule.

Comme pour la température, le choix du pas δU auquel nous travaillons est important. De la même façon que pour l'étude thermique, nous avons considéré un pas $\delta U = \pm 1$ grossier, sauf aux tensions où la texture de polarisation change brusquement, pour lesquelles nous avons adopté plusieurs pas $\delta U = \pm 0.1, \pm 0.2$, plus fins.

Finalement, tous les ingrédients sont réunis pour investiguer l'existence d'une boucle d'hystérésis. Le paramètre β permet de décider quelles sont les tensions pertinentes pour mener les calculs.

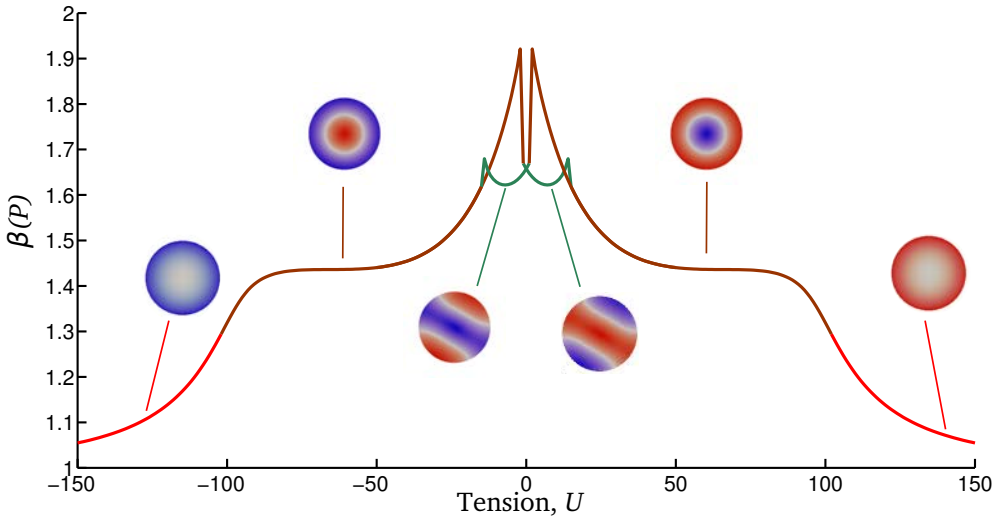
3.3.4 Stabilité de la méthode numérique par raffinement du pas de maillage

Il est possible de vérifier la stabilité de notre méthode numérique, en s'assurant que les résultats obtenus sur des maillages de différents pas ne sont pas trop éloignés les uns des autres.

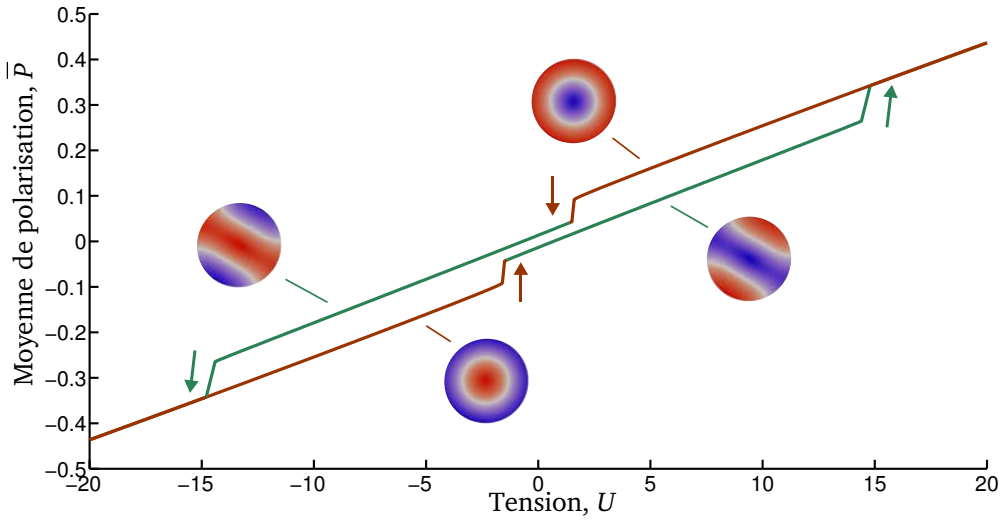
Pour cela, nous reprenons les maillages décrits par la Table 3.1. Si (P_i, φ_i) désigne la solution de (GLE) obtenue sur le i^{e} maillage ($1 \leq i \leq 3$), nous considérons des erreurs exprimées relativement à la solution *a priori* la plus précise, *i.e.* celle calculée sur le maillage le plus fin, à savoir le j^{e} maillage, où $1 \leq i < j \leq 3$. Notons,

$$\|u\|_{2,\varphi} = \frac{1}{\sqrt{N^{0(i)}}}\sqrt{\sum_{k=1}^{N^{0(i)}} |u(\mathrm{x}_k^{(i)})|^2}, \quad \|u\|_{\infty,\varphi} = \max_{1\leq k\leq N^{0(i)}} |u(\mathrm{x}_k^{(i)})|,$$

où u est une fonction dont les valeurs aux nœuds intérieurs du i^{e} maillage de $\overline{\Omega}$ sont repré-



(a)



(b)

FIGURE 3.4 – Evolution en fonction de U de $\beta(P)$ (a) et $\overline{P}$ (b).

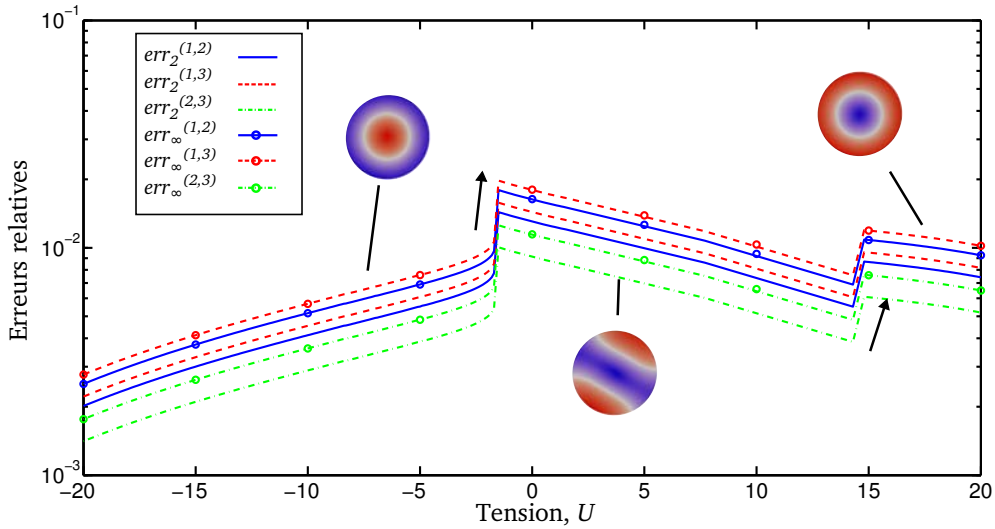


FIGURE 3.5 – Erreurs relatives commises entre les potentiels électriques obtenus sur différents maillages ; l'échelle est logarithmique sur l'axe des ordonnées et linéaire sur l'axe des abscisses.

sentées par $u(\mathrm{x}_k^{(i)})$, $1 \leq k \leq N^{0(i)}$. Posons :

$$err_2^{(i,j)} = \frac{\|\varphi_j - \varphi_i\|_{2,\varphi}}{\|\varphi_j\|_{2,\varphi}}, \quad err_\infty^{(i,j)} = \frac{\|\varphi_j - \varphi_i\|_{\infty,\varphi}}{\|\varphi_j\|_{\infty,\varphi}}. \tag{3.17}$$

Nous avons représenté sur la Figure 3.5 les erreurs portant sur φ $(err_2^{(i,j)}, err_\infty^{(i,j)})$ lors d'une étude en tension, qui a consisté à augmenter U entre -20 et 20, avec un pas $\delta U = 1$. Les solutions sont similaires entre les différents maillages (les erreurs portant sur φ sont inférieures à 2%) et les changements de texture de polarisation ont lieu aux mêmes tensions, ce qui montre une certaine stabilité quantitative et qualitative de notre approche numérique. Les erreurs sur P, non reportées ici par soucis de lisibilité, sont encore plus faibles que celles sur φ.

Notons enfin que la stabilité par raffinement de pas de maillage a systématiquement été vérifiée pour tous les calculs de ce manuscrit.

3.4 Application des protocoles à d'autres configurations géométriques

Nous avons maintenant à notre disposition tous les outils pour investiguer de manière systématique les propriétés physiques des dispositifs ferroélectriques. L'objet de ce paragraphe est d'appliquer les protocoles établis précédemment à de nouveaux exemples. Nous choisissons des paramètres physiques différents de ceux utilisés avant, afin de pouvoir inspecter le comportement de notre algorithme dans un cas nouveau, à savoir $P_0 = 1$, $\xi = I_3$, $\varepsilon_{\perp x} = 10$, $\varepsilon_{\perp y} = 5$, $\varepsilon_{\|z} = 1$, $\varepsilon|_{\Omega_p} = 1$ et $\varkappa_\| = 11.5$. Le premier exemple auquel nous nous intéressons reprend celui de deux cylindres concentriques (voir Figure 3.1), où cette fois $(D_f, H_f) = (8, 1)$ et $(D, H) = (24, 17)$, tandis que le second illustre le cas des parallélépipèdes tangents extérieurs à ces cylindres (voir Figure 3.6) :

$$\overline{\Omega_f} = [-d_x, d_x] \times [-d_y, d_y] \times [-d_z, d_z] \quad \text{et} \quad \overline{\Omega} = [-D_x, D_x] \times [-D_y, D_y] \times [-D_z, D_z],$$

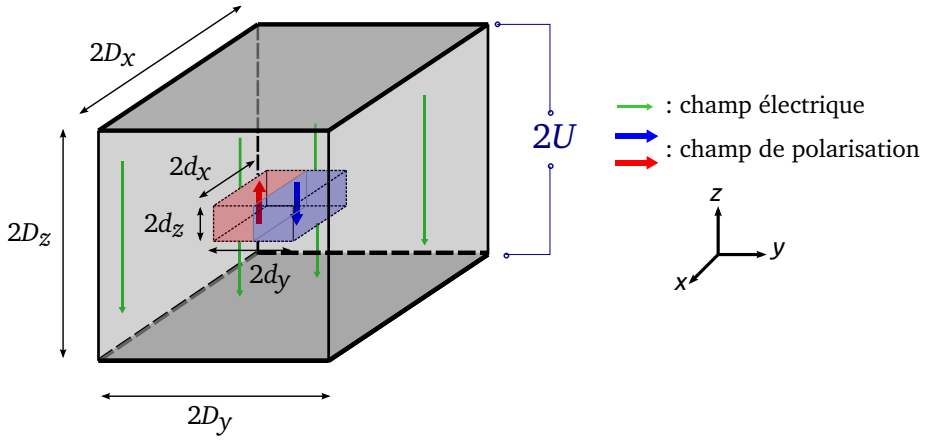


FIGURE 3.6 – Configuration dans le cas où Ω_f et Ω sont parallélépipédiques.

Géométrie	*Cylindrique*	*Parallélépipédique*
Pas dans $\overline{\Omega_f}$ (h_f)	0.58	0.59
Pas dans $\overline{\Omega}$ (h)	0.72	0.69
Nœuds dans $\overline{\Omega_f}$ (N_f)	4 142	5 097
Nœuds dans $\overline{\Omega}$ (N)	261 895	353 965
Taille du système $(N_f + N^0)$	229 137	308 640

TABLE 3.2 – Quelques caractéristiques des maillages considérés.

avec $d_x = d_y = 4$, $d_z = 0.5$, $D_x = D_y = 12$ et $D_z = 8.5$. Quelques caractéristiques des maillages de ces deux géométries que nous avons utilisés sont fournies sur la Table 3.2.

3.4.1 Etude thermique

Afin de trouver numériquement la température critique et de découvrir plusieurs états métastables en l'absence de champ électrique, nous avons reproduit le travail effectué dans le Paragraphe 3.3.2. Ainsi nous observons sur la Figure 3.7 plusieurs états de polarisation qui ont été déterminés avec des démarrages aléatoires et déterministes dans notre algorithme itératif, puis qui ont été chauffés et refroidis. Les courbes obtenues sont encore une fois, et pour les deux exemples que nous étudions, presque affines par morceaux. Chacun de ces morceaux correspond à une même classe de solutions, dans le sens où les profils de polarisation, dessinés sur la Figure 3.7, ont la même texture.

Sur la Figure 3.8, plusieurs représentations de la polarisation sont données : tout d'abord, le champ scalaire P est représenté sur le plan $(z = 0)$, tandis que le champ vectoriel de polarisation $\mathbf{P}$ est dessiné sur $(z = 0)$ et $(y = 0)$. On rappelle qu'on reconstitue $\mathbf{P} = (\mathbf{P}_x, \mathbf{P}_y, \mathbf{P}_z)^T$

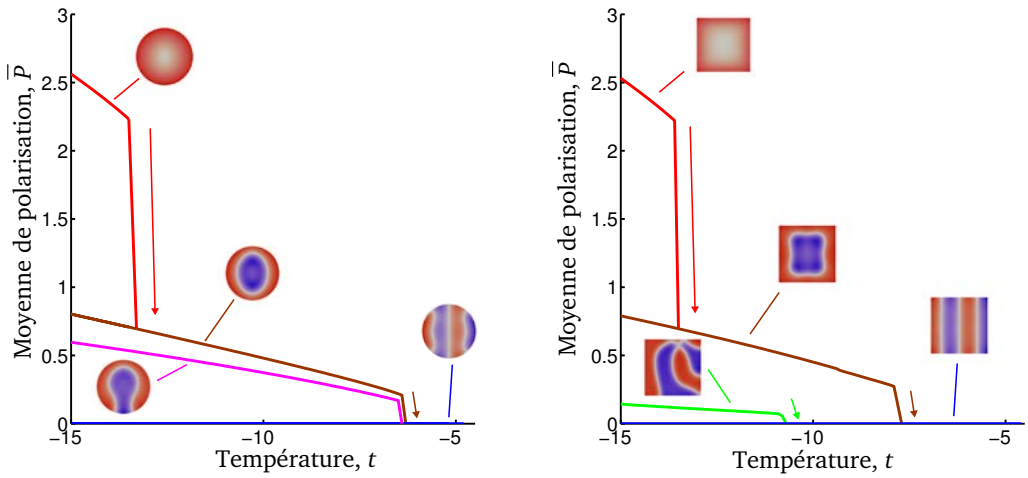


FIGURE 3.7 – Chauffage et refroidissement d'états critiques en l'absence de champ électrique extérieur lorsque Ω et Ω_f sont cylindriques (a) ou parallélépipédiques (b).

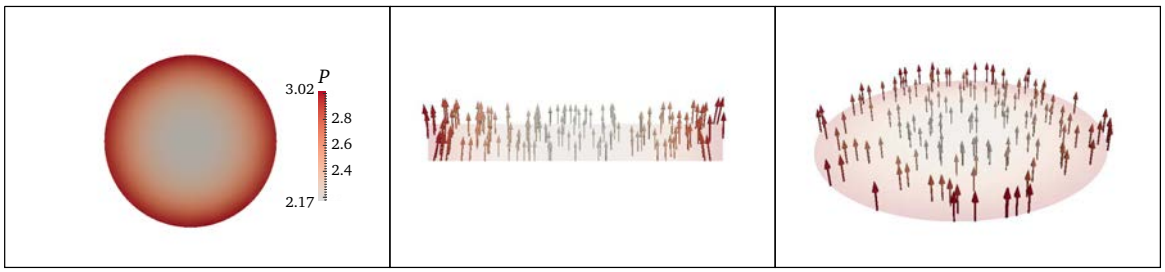
à partir de P et φ comme suit (*cf.* (1.5)) :

$$\begin{cases} \mathbf{P}_x &= -\dfrac{\varepsilon_{\perp x}-1}{4\pi}\partial_x\varphi & \text{dans } \Omega_f, \\ \mathbf{P}_y &= -\dfrac{\varepsilon_{\perp y}-1}{4\pi}\partial_y\varphi & \text{dans } \Omega_f, \\ \mathbf{P}_z &= -\dfrac{\varepsilon_{\parallel z}-1}{4\pi}\partial_z\varphi + P & \text{dans } \Omega_f. \end{cases}$$

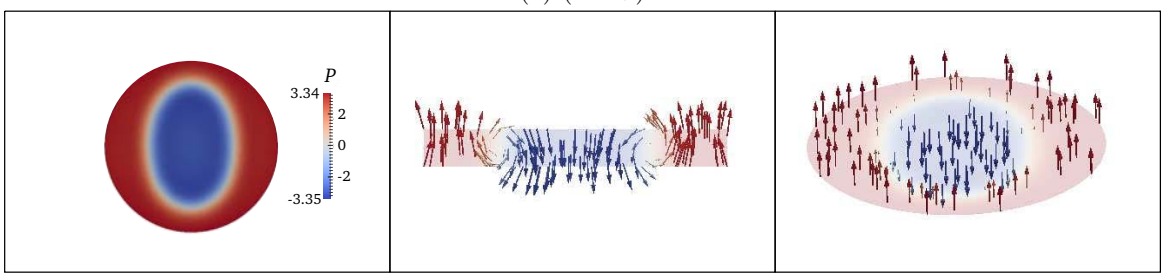
A la vue de la ressemblance des courbes représentées sur la Figure 3.7, nous nous contentons de décrire la courbe relative à la géométrie cylindrique. Le profil dans Ω_f représenté sur la Figure 3.8 (a) est dit *monodomaine* (PM+), puisque $\mathbf{P}$ est orienté, en tout point, dans le même sens et la même direction suivant (Oz). Cet état n'existe pas pour toute température, mais seulement pour $t \leq -13.5$. Si nous le chauffons encore, le profil bascule vers un autre état, que nous appellerons *cylindres-concentriques* (PC+) : voir Figure 3.8 (b). Dans cet état, la polarisation est toujours dirigée selon l'axe (Oz), mais pas partout dans le même sens : dans un « cylindre » intérieur à Ω_f, $\mathbf{P}$ est dirigé vers le bas, tandis qu'en périphérie le champ de polarisation est dirigé vers le haut : la polarisation est donc répartie dans deux domaines. Cet état critique subsiste si nous le refroidissons, mais s'annule brusquement si nous le chauffons lorsque $t = -6.4$. De la même façon, nous pouvons suivre sur la Figure 3.7 l'évolution en température de chaque état critique que nous avons déterminé, ce qui nous fournit une température critique approchée $t_c \approx -4.8$.

Les polarisations présentées sont toutes positives en moyenne, c'est pourquoi nous les avons notées avec le symbole « + ». Lorsque $U = 0$, si P est une polarisation électrique admissible, alors $-P$ l'est également. Ainsi, l'opposé de chaque état critique découvert existe, et sera plutôt noté avec un signe négatif « - ». Par exemple, nous désignerons par (PM-) l'état monodomaine où le champ de polarisation est orienté vers le bas.

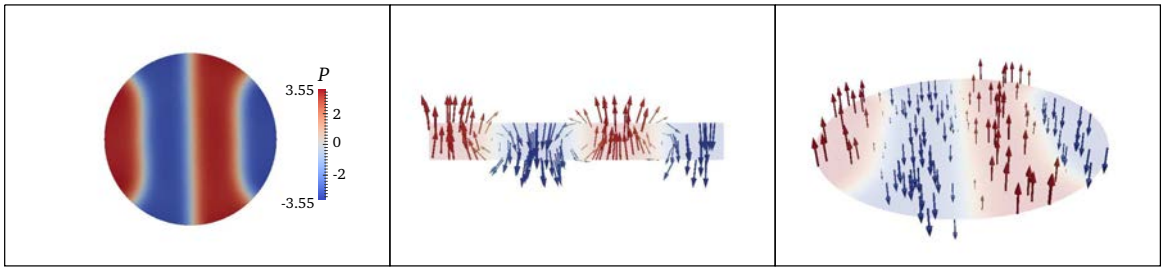
Finalement une certaine forme de stabilité de notre algorithme a été établie. En effet, toutes les études thermiques présentées jusqu'ici ont conduit à des résultats similaires, à la fois pour plusieurs jeux de paramètres physiques mais également pour différentes géométries. De plus, bien que les paramètres considérés ne correspondent à aucun matériau



(a) (PM+)

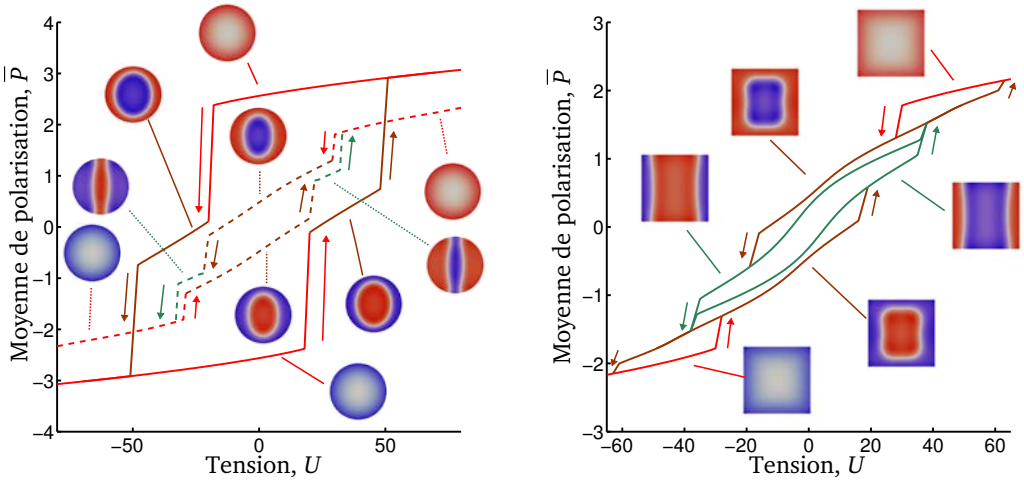


(b) (PC+)



(c) (P4B+)

FIGURE 3.8 – Profils de polarisation en $t = -15$ lorsque Ω_f et Ω sont cylindriques : à gauche, champ scalaire P, coupe en $(z = 0)$; au milieu, champ vectoriel de polarisation $\mathbf{P}$, coupe en $(y = 0)$; à droite, champ vectoriel de polarisation $\mathbf{P}$, coupe en $(z = 0)$; (a) correspond à un état monodomaine, (b) à un domaine cylindrique et (c) à 4 domaines agencés en bandes.



(a) (b)

FIGURE 3.9 – Hystérésis en tension pour $t = -15$ (—) et $t = -10$ (- - -) lorsque Ω_f et Ω sont cylindriques (a), et pour $t = -10$ lorsque Ω_f et Ω sont parallélépipédiques (b).

ferroélectrique réel, nous avons montré que notre algorithme converge vers des solutions dans lesquelles la polarisation s'agence en domaines, ce qui évoque une des propriétés physiques connues pour les matériaux ferroélectriques.

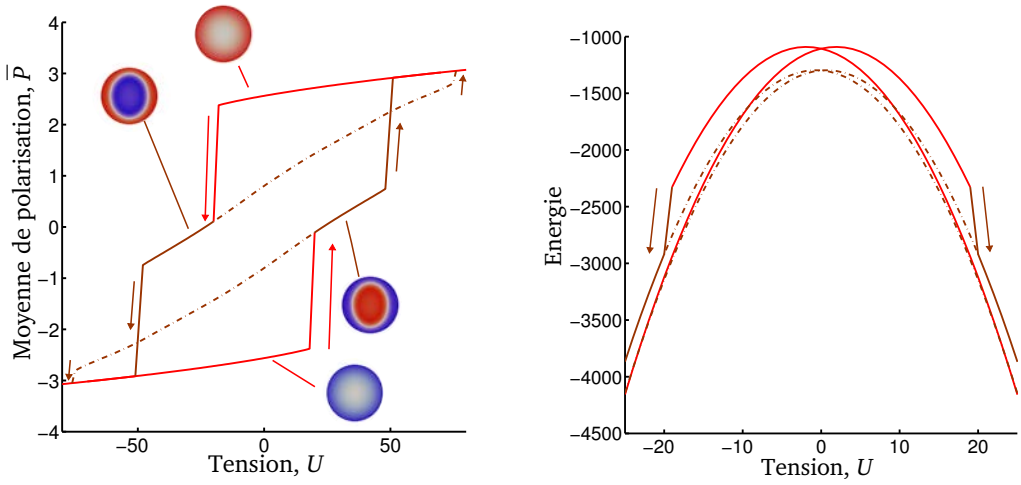
3.4.2 Cycle d'hystérésis en tension

La Figure 3.9 représente l'évolution de $\overline{P}$ lorsqu'on fait varier la tension à partir de l'état monodomaine (PM-) à basse tension lorsque Ω est un parallélépipède ou un cylindre. Encore une fois, on se contente de la description d'un seul exemple, à savoir le cas du cylindre pour $t = -15$.

Tout d'abord, l'existence de l'état (PM-) pour $U \ll 0$ est cohérente, puisque le champ électrique est alors suffisamment fort pour que la polarisation soit orientée dans son sens. Comme dans le cas de l'étude thermique, certains changements d'états ont lieu. Ainsi, (PM-) bascule vers (PC-) à la tension $U_1 = 19$, puis vers (PM+) lorsque la tension vaut $U_2 = 38$. L'évolution à partir de (PM+) lorsqu'on diminue la tension peut se lire de manière symétrique, puisque (PM+) bascule vers (PC+) lorsque $U = -U_1$, puis vers (PM-) lorsque $U = -U_2$. On retrouve le cycle d'hystérésis en tension, propre aux dispositifs ferroélectriques, dans chacun des exemples présentés ici.

On peut par ailleurs observer sur la Figure 3.10 que chaque changement de profil entraîne une baisse de l'énergie du système, donnée par (1.7). Ainsi ces résultats respectent la lecture que l'on avait faite de la courbe d'hystérésis présentée dans le Chapitre 1 : des domaines de polarisation apparaissent ou disparaissent afin d'abaisser l'énergie du système.

Ainsi le saut de (PM-) vers (PC-) en $U = U_1$ correspond à une baisse d'énergie lorsqu'on augmente U. Celui-ci doit donc être irréversible car le retour de (PC-) vers (PM-) correspondrait à une augmentation de l'énergie du système. C'est ce que l'on constate sur la Figure 3.9 : l'état (PC-) subsiste pour des tensions inférieures à U_1. Ce phénomène forme une *boucle d'hystérésis locale* et se retrouve à la fois pour $t = -10$ et $t = -15$ lorsque les géométries sont cylindriques ou parallélépipédiques.



(a) (b)

FIGURE 3.10 – Hystérésis en tension lorsque Ω_f et Ω sont cylindriques (a) et évolution de l'énergie (b) ; la température vaut $t = -15$ et les boucles d'hystérésis locales apparaissent en traits interrompus (-·-).

3.4.3 Etude de l'influence de la taille de l'environnement paraélectrique

En pratique, l'environnement paraélectrique est « suffisamment grand » par rapport à la couche ferroélectrique. Ceci implique en particulier que si nous agrandissons Ω_p, le comportement de la couche ferroélectrique ne doit pas varier. Nous considérons plusieurs agrandissements de l'environnement paraélectrique, et nous reportons sur la Table 3.3 les maillages associés, construits de sorte que les pas soient approximativement les mêmes.

Il s'agit ici de voir si les propriétés thermiques et électriques de la nanostructure ferroélectrique sont conservées. Afin de comparer les résultats obtenus, nous utilisons les erreurs relatives en normes ℓ^2 et ℓ^∞ entre une solution $(P^{(i)}, \varphi^{(i)})$ obtenue sur la nanostructure $\Omega^{(i)}$ et une solution $(P^{(j)}, \varphi^{(j)})$ sur $\Omega^{(j)}$, définies, pour tout $0 \leq i < j \leq 2$, par (3.17). Les erreurs sont donc calculées relativement à la nanostructure la plus grande, puisque c'est *a priori* la plus stable. Notons que nous observons uniquement l'erreur sur φ, mais l'erreur sur P est systématiquement du même ordre de grandeur.

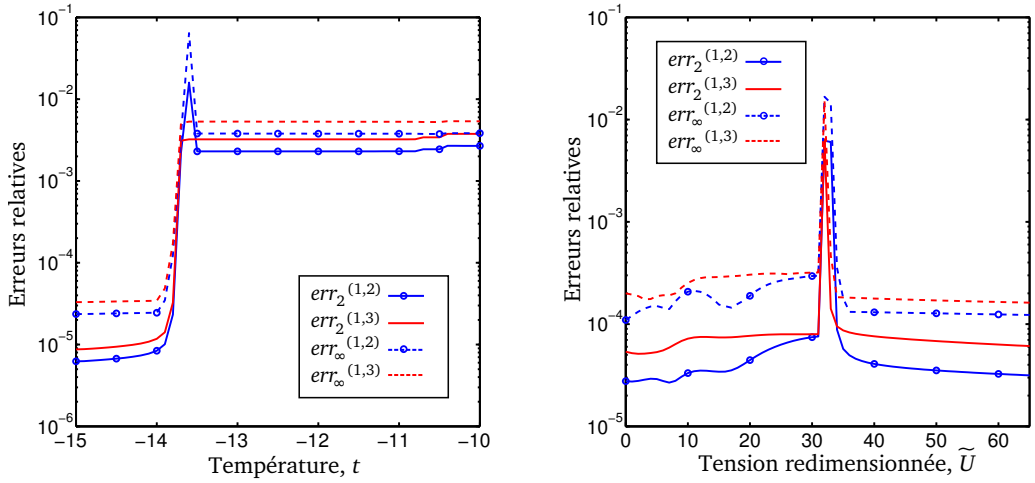
Pour l'étude en température, on se contente de présenter la transition de l'état monodomaine vers (PC) (voir Figure 3.11(a)). Pour un pas de température $\delta t = 0.1$, on obtient que ce saut a lieu pour la même valeur de t quel que soit l'agrandissement considéré, ainsi qu'une erreur inférieure à 6%. Cette transition thermique est donc stabilisée par agrandissement de l'environnement paraélectrique. Pour d'autres températures, les erreurs entre les solutions associées à ces états sont encore plus basses.

Afin de suivre le comportement des erreurs en fonction de la tension, nous avons considéré, pour chaque $\Omega^{(i)}$, les « tensions redimensionnées » $\tilde{U} = UH_i/H_0$, où H_i représente la hauteur de $\Omega^{(i)}$. Nous suivons l'évolution de l'état (PM+), unique état métastable en $\tilde{U} = 65$, jusque $\tilde{U} = 0$, avec un pas $\delta\tilde{U} = -1$, lorsque $t = -10$. Nous constatons sur la Figure 3.11(b) que le saut de l'état (PM+) vers (PC+) existe pour tous les agrandissements et a lieu à la même tension redimensionnée $\tilde{U}$. Les erreurs sont très convenables encore pour cette étude puisqu'elles ne dépassent pas 2%.

Indiquons par ailleurs que le temps CPU correspondant à 1 simulation (calcul de $(P^{(j)}, \varphi^{(j)})$ sur $\Omega^{(j)}$) est de l'ordre de 15mn, 1h30, ou alors 3h, selon que le maillage correspondant à

Dispositif	$\Omega = \Omega^{(0)}$	$\Omega^{(1)}$	$\Omega^{(2)}$
D_x	12	15	18
D_y	12	15	18
D_z	8.5	11	13.5
Pas dans $\overline{\Omega_f}$ (h_f)	0.59	0.60	0.60
Pas dans $\overline{\Omega}$ (h)	0.69	0.69	0.68
Nœuds dans $\overline{\Omega_f}$ (N_f)	5 097	4 108	4 002
Nœuds dans $\overline{\Omega}$ (N)	353 965	861 627	1 942 532
Taille du système $(N_f + N^0)$	308 640	781 024	1 797 620

TABLE 3.3 – Quelques caractéristiques des maillages correspondant aux agrandissements de Ω_p et donc de Ω, qui est ici de géométrie parallélépipédique, comme Ω_f.



(a) (b)

FIGURE 3.11 – Evolutions des erreurs liées aux agrandissements de l'environnement paraélectrique en fonction de la température (a) et de la tension (b) lorsque Ω_f et Ω sont parallélépipédiques ; l'échelle est logarithmique sur l'axe des ordonnées et linéaire sur l'axe des abscisses.

l'agrandissement $\Omega^{(0)}$, $\Omega^{(1)}$ ou $\Omega^{(2)}$ est respectivement considéré.

Chapitre 4

Etude numérique d'une classe de nanostructures ferroélectriques sous des considérations concrètes

Dans le chapitre précédent, nous avons établi plusieurs protocoles afin d'étudier des nanostructures ferroélectriques. Cependant, ces protocoles n'ont pas été exécutés dans des cas concrets. Notamment, les cas qui y ont été étudiés ne concernent pas des matériaux existants. En particulier, la température critique relative et les valeurs des paramètres physiques qui y ont été considérées ne sont pas liées à une application potentielle. Dans le présent chapitre, nous menons une étude numérique d'une classe de nanostructures, où la couche ferroélectrique est constituée de Nitrite de Sodium ($NaNO_2$). Cette couche sera de configuration géométrique cylindrique ou parallélépipédique : en reconsidérant le dispositif expérimental basé sur des applications de tensions de courant, nous mènerons une étude du comportement des nanostructures en tension et en température, tout en investiguant l'influence de l'environnement paraélectrique.

Notons que nous avons récemment publié dans un Journal (*cf.* [42]) une partie des résultats qui seront présentés dans ce chapitre, à savoir en particulier ceux qui apparaissent aux Paragraphes 4.1.2 et 4.1.3.

4.1 Configuration cylindrique

4.1.1 Présentation de la nanostructure

Nous considérons dans toute cette première partie du chapitre le cas où Ω_f et Ω (*cf.* aussi Figure 3.1) sont tels que,

$$\begin{aligned}
\overline{\Omega_f} &= \left\{(x,y,z) \in \mathbf{R}^3 \; ; \; x^2+y^2 \leq \left(\frac{D_f}{2}\right)^2 \text{ et } z \in \left[-\frac{H_f}{2}, \frac{H_f}{2}\right]\right\}, \\
\overline{\Omega} &= \left\{(x,y,z) \in \mathbf{R}^3 \; ; \; x^2+y^2 \leq \left(\frac{D}{2}\right)^2 \text{ et } z \in \left[-\frac{H}{2}, \frac{H}{2}\right]\right\}.
\end{aligned}$$

P_0	$\xi_{\perp x}$	$\xi_{\perp y}$	$\xi_{\parallel z}$	$\varepsilon_{\perp x}$	$\varepsilon_{\perp y}$	$\varepsilon_{\parallel z}$	$\varkappa_{\parallel}$
1	1	1	1	10	5	1	11.5

TABLE 4.1 – Caractéristiques physiques liées à la considération du $NaNO_2$.

Les notations des chapitres précédents sont reprises ici. Les valeurs des caractéristiques physiques liées au $NaNO_2$ (voir *e.g.* [60]), données dans le système d'unités CGS, sont reportées sur la Table 4.1. Notons qu'en fait, $\varepsilon_{\|z}$ n'est pas exactement égal à 1 pour le $NaNO_2$, mais nous avons plutôt $\varepsilon_{\|z} \gtrsim 1$. Nous appellerons *nanotube* la couche ferroélectrique considérée.

Nous avons posé $(D, H) = (24, 17)$, puis considéré $(D_f, H_f) = (8, 1)$ dans un premier temps. Nous calibrons dans ce paragraphe successivement les valeurs des paramètres ε_p, H_f et D_f. Notons que pour chaque simulation, nous avons vérifié que les valeurs de D et H étaient suffisamment importantes pour que les propriétés de la nanostructure restent stables par agrandissement de l'environnement paraélectrique. Les maillages sont générés de sorte que le pas h_f, relatif à $\overline{\Omega_f}$, et le pas h, relatif à $\overline{\Omega}$, satisfassent $h_f \approx 0.47$, $h \approx 0.61$. Nous avons vérifié que h_f et h étaient suffisamment petits pour que les propriétés de la nanostructure restent stables. Enfin, chaque étude a été réalisée avec un pas de température ou de tension égal à 10^{-2}.

Pour chaque valeur de ε_p, $\varepsilon_p \in \{10, 20, ..., 90\}$, nous avons mené une étude thermique (*cf.* Figure 4.1 (a) pour quelques valeurs de ε_p). La température critique de l'état monodomaine augmente avec la permittivité de l'environnement paraélectrique et, pour $\varepsilon_p \geq 40$, cet état subsiste lorsque $t \geq -1$. D'autre part, l'hystérésis en tension est obtenue (*cf.* Figure 4.1 (b)), pour $t = -0.9$ et $U \in [-0.4, 0.4]$. Les états monodomaines basculent les uns vers les autres, et les boucles d'hystérésis sont d'autant plus grandes que ε_p l'est. A la vue de ces observations, nous nous donnons pour la suite une permittivité de l'environnement paraélectrique élevée, à savoir $\varepsilon_p = 90$, de sorte que l'état monodomaine existe lorsque $t \in [-1, 0]$.

La température critique augmente avec la hauteur H_f et seul l'état monodomaine existe (*cf.* Figure 4.1 (c)) pour $t \in [-1, 0]$. D'autre part, les cycles d'hystérésis ne comportent encore une fois que des états monodomaines. Nous fixons alors arbitrairement $H_f = 1.7$, qui correspond à 10% de la hauteur H.

Un autre paramètre caractéristique est D_f. La première chose à noter est que le choix de D_f n'affecte que très peu la valeur de la température critique (*cf.* Figure 4.1 (e)) mais influence le nombre d'états métastables distincts existants. Pour $D_f \in \{16, 20\}$, l'état (PC+) apparaît en plus de (PM+). L'hystérésis en tension est également plus riche pour ces diamètres, en lesquels les états monodomaines ne basculent plus les uns vers les autres, mais plutôt (*cf.* Figure 4.1 (e)) par l'intermédiaire de (PC±). Nous choisissons $D_f = 16$ pour la suite.

Finalement nous disposons d'un nanotube de $NaNO_2$, avec $\varepsilon_p = 90$, $t = -0.9$, $H_f = 1.7$ et $D_f = 16$, qui nous apporte des renseignements très fournis.

Il est nécessaire de s'assurer que le comportement de la nanostructure reste stable pour $\varepsilon_{\|z}$ proche de 1 puisque, en fait, $\varepsilon_{\|z} \gtrsim 1$ pour le $NaNO_2$, C'est le cas ici puisque, pour $\varepsilon_{\|z} \in \{1, 1.01, ..., 1.04\}$, le comportement de la nanostructure reste inchangé, à la fois en température et en tension. Notons que pour $\varepsilon_{\|z} \in \{1.05, 1.06, ..., 1.1\}$, la température de transition entre les états (PM+) et (PC+) est augmentée de 10^{-2} et les sauts entre ces états lorsque la tension varie sont également décalés.

Détaillons, pour conclure, l'étude de stabilité par agrandissement de Ω_p pour ce jeu de paramètres $(\varepsilon_p, H_f, D_f)$. Nous considérons différents agrandissements reportés sur la Table 4.2. Le maillage 1 correspond au maillage du nanotube qui est utilisé dans toute cette partie, le maillage 2 (resp. 3) à un agrandissement de 50% (resp. 100%) du maillage 1. Les erreurs commises, calculées à partir de (3.17), ont été représentées pour l'étude en température sur la Figure 4.2, et sont satisfaisantes puisque inférieures à 6%. Signalons que nous obtenons des résultats similaires pour une étude en tension, avec une erreur plutôt inférieure à 8%.

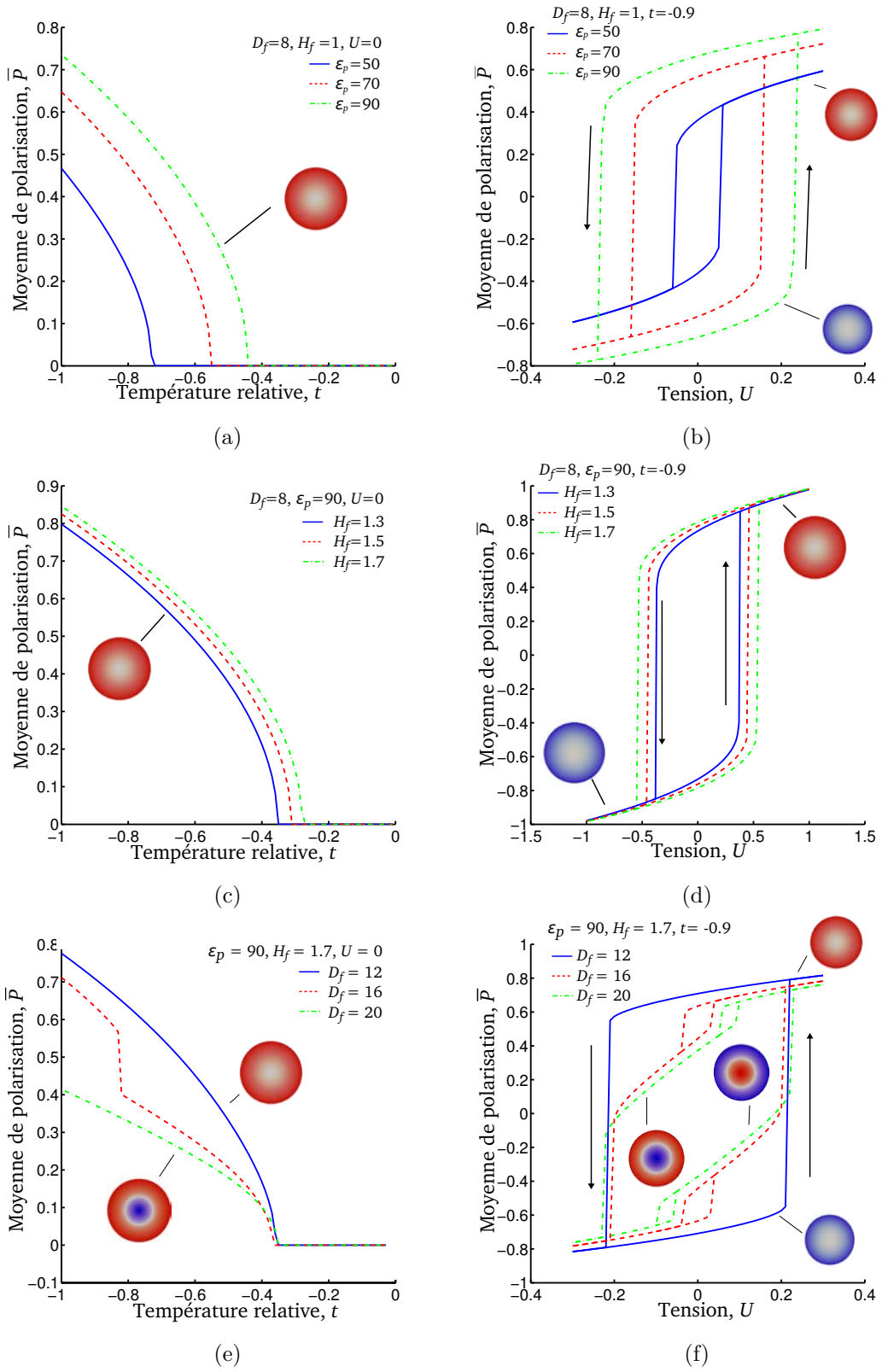


FIGURE 4.1 – Evolution de $\overline{P}$, en température (pour $U = 0$) et en tension (pour $t = -0.9$), pour différentes valeurs de ε_p (a)-(b) ou de H_f (c)-(d) ou encore de D_f (e)-(f).

	Maillage 1	*Maillage 2*	*Maillage 3*
Diamètre de Ω *(D)*	24	36	48
Hauteur de Ω *(H)*	17	25.5	34
Pas dans $\overline{\Omega_f}$ *(*h_f*)*	0.47	0.47	0.47
Pas dans $\overline{\Omega}$ *(h)*	0.61	0.61	0.61
Nœuds dans $\overline{\Omega_f}$ *(*N_f*)*	49 211	44 100	43 967
Nœuds dans $\overline{\Omega}$ *(N)*	482 440	1 190 507	2 582 904
Taille du système $(N_f + N^0)$	485 621	1 145 704	2 467 108

TABLE 4.2 – Quelques caractéristiques des maillages correspondant aux agrandissements de Ω_p et donc de Ω.

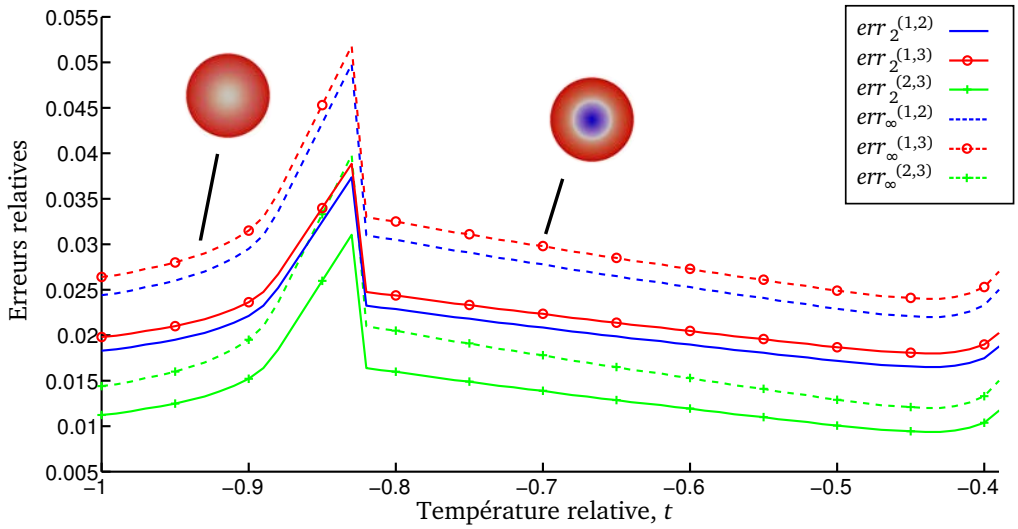


FIGURE 4.2 – Erreurs commises lors de l'agrandissement de l'environnement paraélectrique.

Indiquons par ailleurs que le temps CPU correspondant à 1 simulation est de l'ordre de 20mn, ou 2h, ou alors 6h, selon que le maillage 1, ou le maillage 2, ou encore le maillage 3 est respectivement considéré.

4.1.2 Etats métastables

Ce paragraphe sera consacré à la recherche d'états métastables puis à l'étude de leur comportement en température. On fixe donc $U = 0$. A l'aide de démarrages aléatoires et déterministes dans l'Algorithme 3.4 introduit au Chapitre 3, on obtient (*cf.* Figure 4.3) différents états critiques en plusieurs températures $t \in [-1, 0]$, que l'on chauffe et refroidit avec un pas de température $\delta t = \pm 0.01$, sauf lorsqu'une transition d'état a lieu, auquel cas $\delta t \in \{\pm 0.001, \pm 0.002\}$.

Pour les différentes solutions numériques obtenues, une coupe du champ scalaire P en $(z = 0)$ est représentée en $t = -0.9$ sur la Figure 4.4, ainsi que des coupes en $(z = 0)$ et

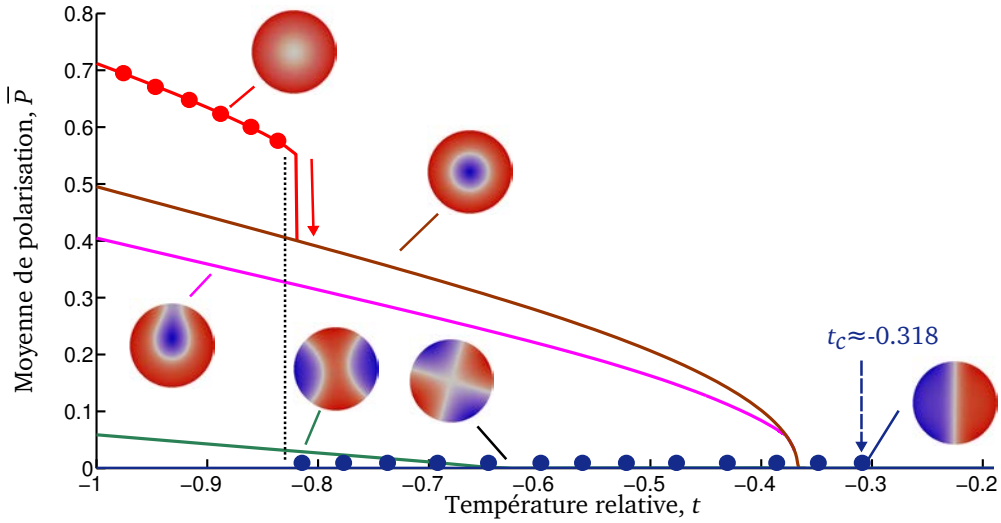
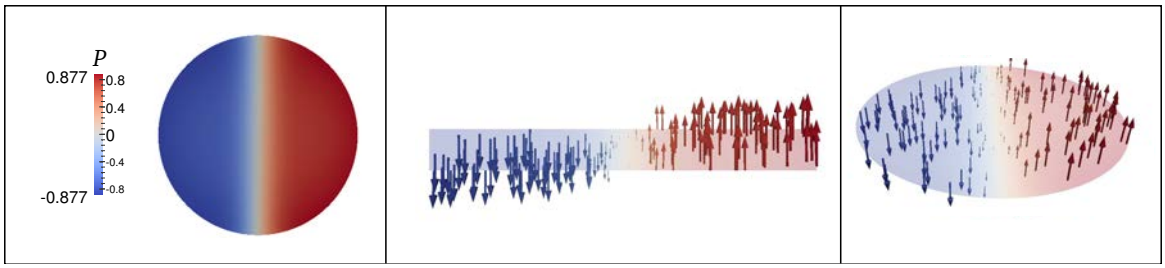


FIGURE 4.3 – Etude thermique du nanotube de $NaNO_2$.

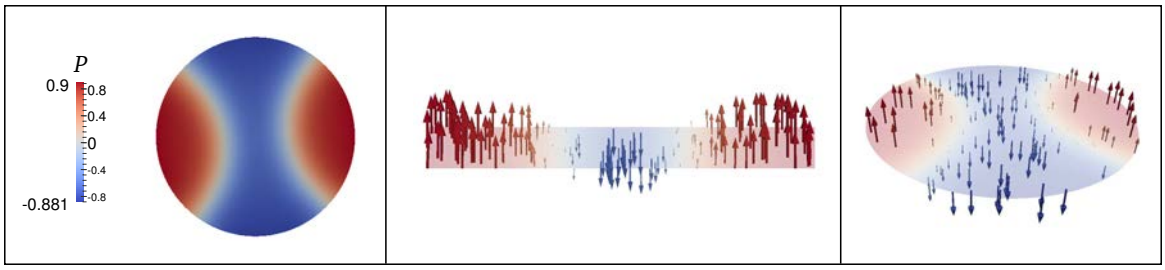
($y = 0$) du champ vectoriel de polarisation $\mathbf{P}$, reconstitué à partir de P et $\mathbf{E} = -\nabla\varphi$ (*cf.* (1.5)). On retrouve l'état monodomaine (PM+), pour lequel P est positif dans tout Ω_f et $\mathbf{P}$ est orienté selon (Oz), ainsi que (*cf.* Figure 4.4(e)) l'état formé de cylindres concentriques (PC+) qui délimitent deux domaines de polarisations alternées et toujours orientées selon la direction (Oz). Des états dans lesquels (*cf.* Figures 4.4(a)-(b)) les domaines s'organisent en bandes (P2B) et (P3B+), un état (*cf.* Figure 4.4(d)) en forme de gouttelette (PG+) et un profil (*cf.* Figure 4.4(c)) constitué de 4 domaines agencés en damier (P4D) ont également été découverts. Toutes les polarisations P obtenues ont une moyenne non nulle, hormis celles associées aux états (P2B) et (P4D) pour lesquelles les domaines orientés vers le haut et vers le bas se compensent, la moyenne maximale étant celle du profil monodomaine. Les solutions (P, φ) affichées dans ce paragraphe vérifient toutes $\overline{P} \geq 0$, mais nous rappelons que le couple $(-P, -\varphi)$ satisfait également (GLE) en $U = 0$. Nous noterons aussi ici avec un signe « - » les solutions opposées à celles notées avec « + » (par exemple, (PM-) désigne l'état monodomaine orienté vers le bas).

Les murs de domaines sont du type Ising, puisque la polarisation change d'amplitude à travers le mur tout en restant parallèle à l'axe (Oz). A haute température, le profil des parois de domaine devient plus lisse et il n'y a pas de changement substantiel de la valeur de $P(x, y, z)$ pour x et y fixés : $P(x, y, z) \approx P(x, y, 0)$ pour tout $(x, y, z) \in \overline{\Omega_f}$. Cela fait une différence avec les *pervoskites ferroélectriques*, qui possèdent une permittivité élevée, où le flux de polarisation se réduit au bord du nanotube (voir *e.g.* [34, 38, 62]). La différence entre ces cas est le ratio $\varepsilon_p/\varepsilon_{\|z}$, qui réduit substantiellement l'effet du champ de dépolarisation dans le nanotube, en donnant une plus grande importance à la contribution du terme $-\varepsilon_p \int_{\Omega_p} |\nabla\varphi|^2 dx$ dans l'énergie. Un autre fait remarquable est la déviation des murs de domaines par rapport au plan préférentiel ($z = 0$), clairement visible pour l'état (P4D). Notons également que les parois de domaines peuvent se courber, comme le montrent les états (P3B+) et (PG+).

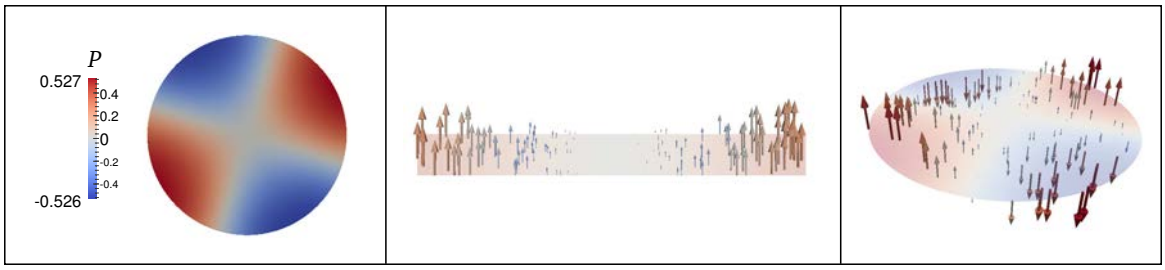
Les polarisations diminuent en moyenne suivant la température pour tous les états obtenus, essentiellement car l'amplitude de P décroît, mais également par un mouvement des parois de leurs domaines. Par exemple, les parois dans (P3B+) bougent, de sorte que le volume occupé par le domaine orienté vers le haut diminue, ce qui contribue à la décroissance



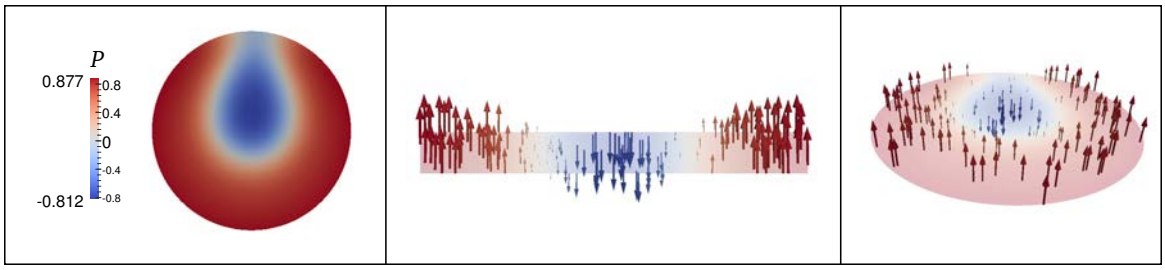
(a) (P2B)



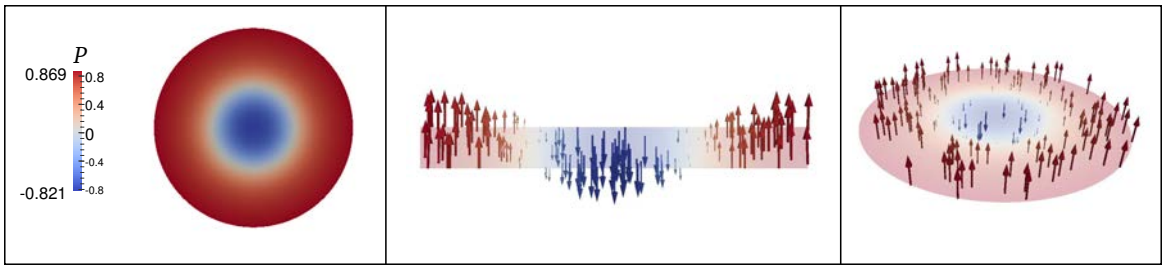
(b) (P3B+)



(c) (P4D)



(d) (PG+)



(e) (PC+)

FIGURE 4.4 – Profils de polarisation des états métastables pour le nanotube de $NaNO_2$, $t = -0.9$: à gauche, champ scalaire P, coupe en $(z = 0)$; au milieu, champ vectoriel de polarisation $\mathbf{P}$, coupe en $(y = 0)$; à droite, champ vectoriel de polarisation $\mathbf{P}$, coupe en $(z = 0)$.

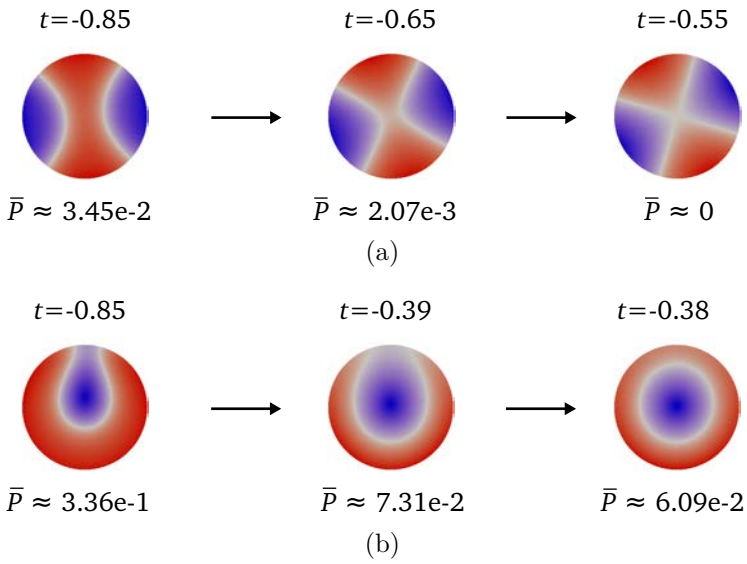


FIGURE 4.5 – Evolution de profils de polarisation par un déplacement des parois de domaine, (P3B+)→(P4D) (a) et (PG+)→(PC+) (b).

de la polarisation moyenne. Ce déplacement conduit à une transformation *continue* de l'état (P3B+) vers (P4D), pour lequel la polarisation est nulle en moyenne, et correspond à la formation d'un domaine supplémentaire (*cf.* Figure 4.5(a)). De la même façon, (*cf.* Figure 4.5(b)), le domaine orienté vers le bas s'étend dans (PG+), qui devient (PC+) ; dans ce cas le nombre de domaines reste le même, mais leur nature topologique change.

Les mouvements des parois pour les autres états métastables ne se traduisent plus par des changements dans l'organisation des domaines de polarisation. Ces autres états évoluent tous continûment, jusqu'à basculer brutalement vers l'état trivial, hormis (PM+) et (PC+). Lorsqu'il est chauffé, l'état monodomaine (PM+) bascule brutalement vers (PC+) en $t = -0.818$, quel que soit le pas de température δt choisi. L'état (PC+) bascule vers l'état (P2B) en $t = -0.366$.

L'état (P2B) est le plus persistant. La moyenne de sa polarisation est toujours nulle ; la valeur absolue maximale de la polarisation dans chaque domaine diminue continûment jusqu'à devenir de l'ordre de 10^{-3} en $t = -0.32$, puis s'annule en $t = -0.318$, qui est donc la température critique de cet état ainsi que celle de la nanostructure.

A chaque température, nous avons identifié la solution la plus stable, *i.e.* l'état critique d'énergie la plus basse (voir les bulles sur la Figure 4.3). L'état monodomaine (PM+) est le plus stable à basse température. Au delà de $t = -0.83$, l'état le plus stable est plutôt (P2B). Cette température de transition thermodynamique est à peine plus basse que la température de basculement de l'état (PM+) vers (PC+).

Signalons que les moyennes $\overline{P}$ associées aux états métastables semblent dépendre de la température suivant des relations $\overline{P} \approx \alpha\sqrt{t - t^\star}$, voir par exemple [58]. Ces relations sont typiques de la dépendance température/polarisation dans les nanostructures ferroélectriques que nous étudions et sont à rapprocher de l'estimation (1.8) obtenue au Chapitre 1 à partir du potentiel de Gibbs.

Certains de ces états ont déjà été observés dans d'autres travaux. L'état (P2B) a par exemple été retrouvé expérimentalement dans le cas d'un nanofilm de Titanate de Plomb (voir [64]).

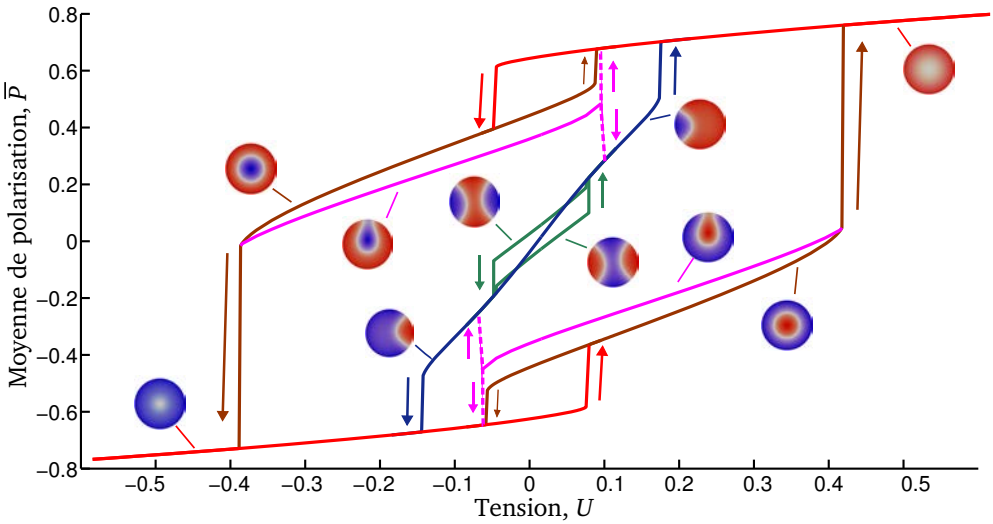


FIGURE 4.6 – Hystérésis pour le nanotube de $NaNO_2$.

4.1.3 Cycle d'hystérésis en tension

Plusieurs états critiques ont été découverts dans le précédent paragraphe en absence d'alimentation électrique (*i.e.* pour $U = 0$). L'objet de ce paragraphe va être d'abord de comprendre leur comportement lorsqu'une tension est appliquée, puis dans un second temps d'investiguer si on peut naviguer entre certains de ces états, grâce à l'influence de la température et du champ électrique. Fixons $t = -0.9$.

La Figure 4.6 présente la courbe d'hystérésis obtenue pour le nanotube de $NaNO_2$. La tension U varie entre -0.6 et 0.6, avec un pas valant $\delta U = 0.01$, sauf lorsqu'une transition d'états a lieu, auquel cas $\delta U \in \{0.001, 0.002\}$. Nous avons choisi de ne représenter nos résultats que sur l'intervalle $[-0.6, 0.6]$, car pour $|U| > 0.6$, $\beta(P) \approx 1$ et seul l'état monodomaine persiste. En particulier, les profils (P2B±), (P3B±) et (PG±) sont suivis, à partir de $U = 0$.

Par un mouvement des murs de domaines dans le plan ($z = 0$), les volumes des 2 domaines orientés vers le bas dans l'état métastable (P3B+) diminuent lorsque le champ électrique croît. A partir de la tension $U_1 = 0.062$, l'un de ces domaines, orienté contre le champ électrique (*i.e.* vers le bas lorsque la tension est positive) disparaît brutalement : transition (P3B+)→(P2B). Le volume du domaine restant qui est aussi orienté vers le bas continue de se réduire, jusqu'à disparaître à son tour en $U_2 = 0.161$: transition (P2B)→(PM+). Ces basculements brutaux sont irréversibles. Par exemple, on ne peut pas atteindre l'état (P3B+) à partir de l'état (P2B) par variation de la tension. Des transitions d'états similaires existent si l'on diminue la tension à partir de (P3B+) : les domaines orientés contre le champ électrique (*i.e.* vers le haut lorsque la tension est négative) occupent de moins en moins d'espace et disparaissent, de sorte que (P3B+) bascule vers (P2B) en $U_3 = -0.064$, qui bascule lui-même vers (PM-) en $U_4 = -0.161$.

Le comportement de (P3B-) est « symétrique » à celui de (P3B+), dans le sens où ces deux états basculent vers d'autres en les mêmes tensions opposées :

$$(\text{P3B}-) \underset{U=-U1}{\longrightarrow} (\text{P2B}) \underset{U=-U2}{\longrightarrow} (\text{PM}-) \quad \text{et} \quad (\text{P3B}-) \underset{U=-U3}{\longrightarrow} (\text{P2B}) \underset{U=-U4}{\longrightarrow} (\text{PM}+).$$

L'évolution de l'état (PG+) est différente. Lorsque le champ électrique diminue, le domaine périphérique orienté vers le haut occupe de moins en moins d'espace et sa forme

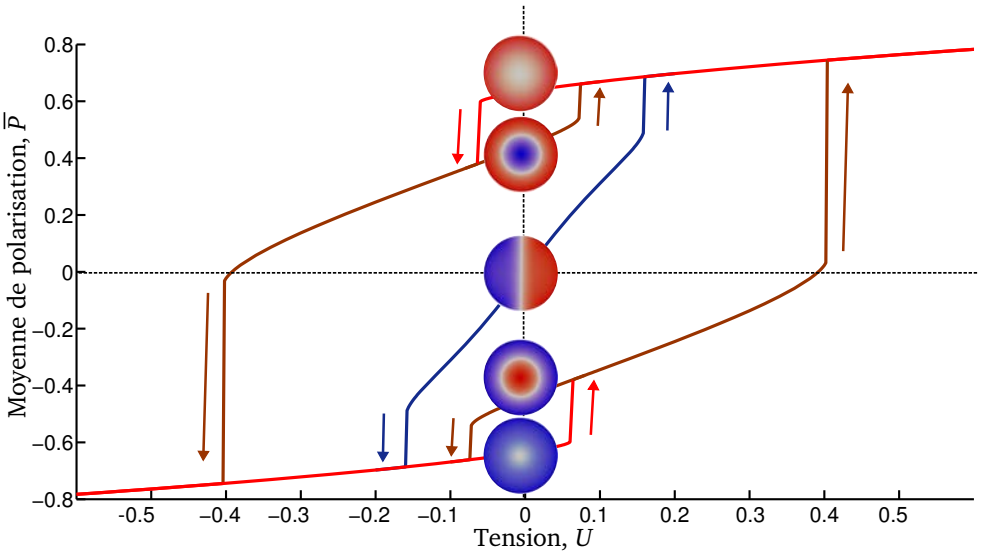


FIGURE 4.7 – Hystérésis multibits pour le nanotube de $NaNO_2$.

se rapproche de celle d'un cylindre évidé, comme lors de l'étude thermique (*cf.* Figure 4.5(b)). L'état (PG+) se rapproche ainsi de (PC+), puis le domaine orienté vers le haut est renversé : (PC+) bascule brusquement vers (PM-) pour $U = -0.404$. L'augmentation du champ électrique à partir de zéro, sur l'état (PG+), provoque encore l'augmentation du volume du domaine orienté « favorablement » (*i.e.* vers le haut) jusqu'à $U = 0.080$, où (PG+) change brusquement. Le nouvel état dépend du pas de tension utilisé : soit vers (P2B) pour $\delta U \in \{10^{-3}, 10^{-2}\}$, soit vers (PC+) pour $\delta U \in \{2.10^{-3}, 3.10^{-3}, 5.10^{-3}\}$.

Une sensibilité de notre algorithme au niveau des transitions d'états critiques est soulignée, et c'est pourquoi nous travaillons systématiquement avec plusieurs pas à leurs voisinages. Dans le cas présent, le saut le plus cohérent nous paraît être (PG+)→(PM+), puisqu'il correspond à la disparition du domaine orienté « défavorablement » (et donc orienté dans le sens contraire du champ électrique).

Ces états restent stables pour de petites valeurs de $|U|$ et disparaissent lorsque le champ électrique devient plus intense. Les domaines de polarisation sont alors tous renversés, et donc orientés dans le sens du champ électrique. Par exemple, pour U grand ($U \gg 0$), seul l'état monodomaine (PM+) subsiste. La polarisation n'y est toutefois pas uniformément répartie et demeure plus importante en périphérie.

La diminution du champ électrique à partir d'une haute tension provoque une diminution de la polarisation près de l'axe (Oz). Cet effet est connu sous le nom de branchement de Landau-Lifshitz [36]. Cette propriété qualitative peut être traduite quantitativement à l'aide du paramètre β, puisque pour un champ parfaitement uniforme on a $\beta(P) = 1$. Par exemple, pour $U = 0.5$ où la polarisation est quasi-uniforme, on a $|\beta(P) - 1| \approx 5.47.10^{-3}$, tandis que $|\beta(P) - 1| \approx 1.03.10^{-1}$ en $U = 0$ où la variation de la polarisation est marquée. Notons que le fait que la polarisation ne s'annule pas lorsque $U = 0$ était attendu (*cf.* la définition de polarisation rémanente au Chapitre 1). Si l'on continue à abaisser la tension, la transition vers (PC+) se manifeste brusquement en $U = -0.060$. La moyenne de la polarisation de ce nouvel état est plus petite que celle de l'originel (PM+), mais est encore positive. Lorsque le champ électrique orienté vers le bas croît encore, le volume du domaine orienté dans son sens augmente également.

Pour un certain champ électrique critique obtenu avec $U = -0.404$, qui n'est autre que le

champ coercitif du système, le domaine interne s'étend soudainement au volume entier : c'est la transition vers l'état (PM-). Cela forme la demi-branche de l'*hystérésis globale*. L'autre moitié peut se décrire par « symétrie » ; lorsqu'on retourne en arrière à partir de (PM-), les transitions suivantes se produisent :

$$(\mathrm{PM}-) \underset{U=0.060}{\longrightarrow} (\mathrm{PC}-) \underset{U=0.404}{\longrightarrow} (\mathrm{PM}+).$$

Par ailleurs, si on augmente la tension à partir de (PC+), cet état métastable persiste pour $U > -0.060$. Le rayon du domaine central orienté vers le bas diminue, jusqu'à disparaître soudainement en $U = 0.072$. On obtient une boucle plus petite, appelée *hystérésis locale*.

La moyenne de la polarisation, $\overline{P}$, est croissante par rapport à U, tant qu'il n'y a pas de transition d'états. Cette croissance s'explique en partie par le mouvement des parois de domaines, qui favorise toujours le domaine orienté dans le sens du champ, mais également par une augmentation de la valeur absolue maximale de la polarisation dans chaque domaine.

Finalement nous avons découvert plusieurs états métastables à certaines tensions fixées, en particulier en l'absence de champ électrique. La Figure 4.7 présente l'ensemble des états métastables entre lesquels on peut naviguer. Nous avons vu que pour de hautes tensions, un unique état critique existe : (PM+). Par la variation du champ électrique et le parcours des hystérésis globale et locale (*cf.* Figure 4.6), on peut atteindre les états (PM±), (PC±) en $U = 0$. D'autre part, en chauffant l'état (PM+) en l'absence de champ électrique, on peut parvenir (*cf.* Figure 4.3) à (P2B) : on parle de « *reboot thermique* ». Une telle commutation entre ces 5 états permet d'envisager un stockage d'informations sur 5 bits (chaque bit étant associé ici à un état).

4.1.4 Influence de la température sur les transitions d'états

Nous avons fixé jusqu'ici soit la tension à $U = 0$, soit la température à $t = -0.9$. Afin de comprendre l'interaction entre la température et le champ électrique, on investigue l'existence d'hystérésis pour plusieurs températures, avec U qui varie entre -0.6 et 0.6, et selon un pas de tension $\delta U = 10^{-2}$. On considère à cet effet t entre -0.95 et -0.05, avec un pas de température $\delta t = 10^{-1}$. On observe 4 types de courbes en tension (*cf.* Figure 4.8(a)), suivant la façon dont les états basculent les uns vers les autres :

1. Pour $t \leq -0.75$, on retrouve, comme dans les études précédentes, que chacune des transitions (PM)→(PC) et (PC)→(PM) est brutale. En particulier, l'irréversibilité de ces transitions entraîne la formation de deux boucles d'hystérésis locales, ainsi qu'une boucle globale. La première transition (PM)→(PC) a lieu pour $|U|$ de plus en plus grand lorsque la température diminue, ce qui entraîne une apparition des boucles d'hystérésis locales pour $|U|$ non proche de la tension nulle. Notons que ceci était prévisible, puisque l'étude thermique menée précédemment nous informe que pour $t \geq -0.818$, les états (PM) et (PC) ne coexistent plus lorsque $U = 0$. De plus la différence des moyennes de polarisations (*i.e.* la « hauteur » du saut ici) entre ces deux états diminue lorsque t augmente, jusqu'à ce que le basculement devienne presque continu.
2. Pour $-0.65 \leq t \leq -0.45$, la transition (PM)→(PC) est lisse et réversible. L'étude de $\max(P)$ et $\min(P)$ (*cf.* Figure 4.8(b)) en fonction de la tension permet de mieux comprendre cette transition, ainsi que de visualiser où se situent les différents états, puisqu'on peut les distinguer selon les signes de $\min(P)$ et $\max(P)$:
   - si $\min(P) \geq 0$ et $\max(P) \geq 0$, état (PM+) ;
   - si $\min(P) \leq 0$ et $\max(P) \geq 0$, état (PC) ;

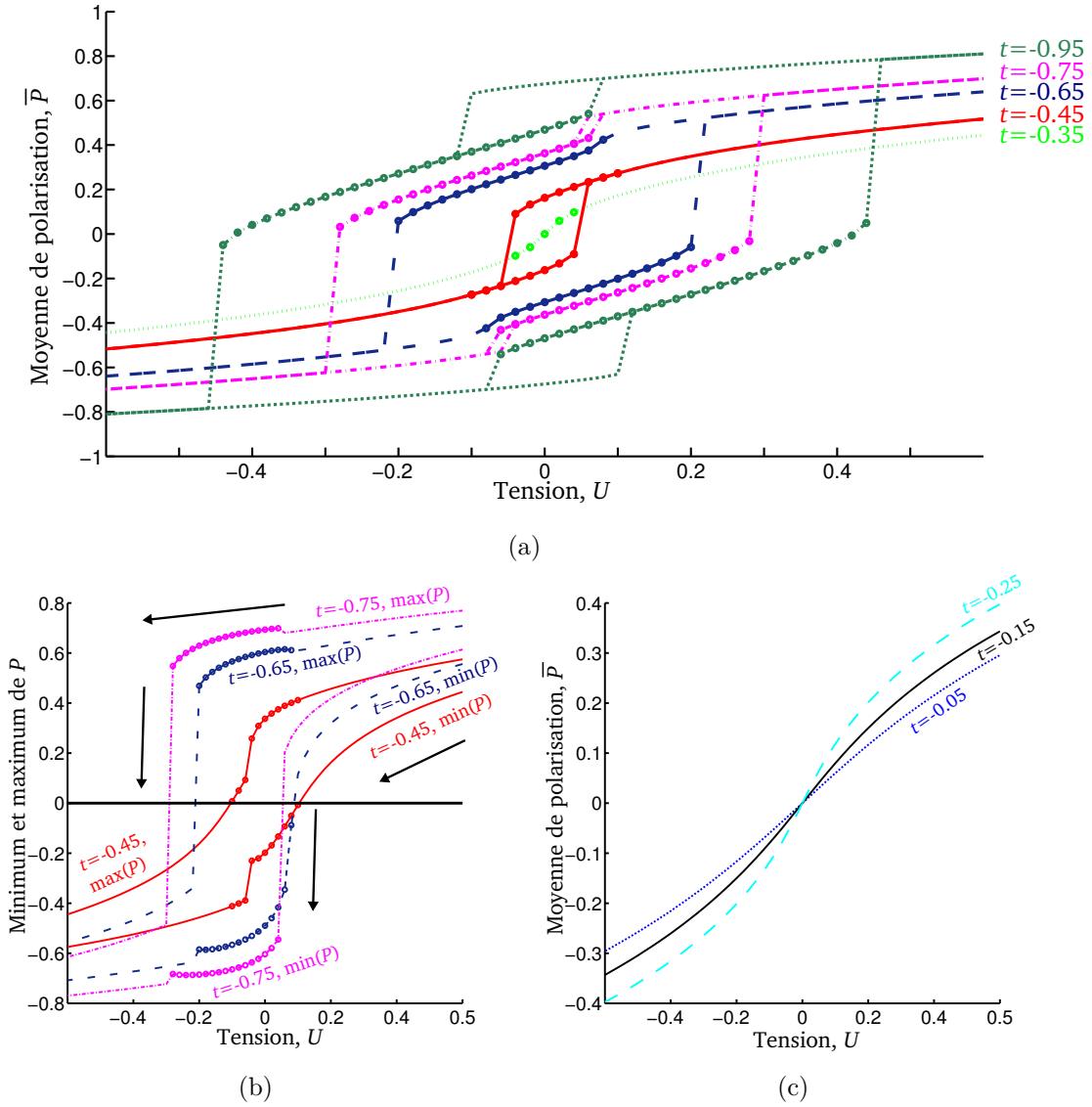


FIGURE 4.8 – Influence de la température sur le comportement en tension pour le nanotube de $NaNO_2$; (a) étude de $\overline{P}$ pour de petites températures, (b) évolution de min(P) et max(P) lorsque la tension diminue, (c) étude de $\overline{P}$ pour de grandes températures ; les états (PC±) sont indiqués par des bulles.

- si $\min(P) \leq 0$ et $\max(P) \leq 0$, état (PM-).

  On retrouve ainsi sur la Figure 4.8(b) que les 2 transitions d'états sont brutales lorsque $t = -0.75$ et même plus précisément que lors de la transition (PM+)→(PC), seul le domaine central change brutalement tandis que c'est plutôt le domaine périphérique qui bascule lors de la transition (PC)→(PM-). On lit également que, pour $t = -0.65$ et $t = -0.45$, $\min(P)$ évolue continûment lorsque la tension diminue, jusqu'à devenir négatif, ce qui explique que la transition est lisse.

  La transition lisse (PM)→(PC) pour $-0.65 \leq t \leq -0.45$ induit en particulier la perte des deux boucles d'hystérésis locales. L'hystérésis globale subsiste puisque la transition d'états (PC)→(PM) reste brutale.

3. Pour $t = -0.35$, chacun des changements (PM)→(PC) et (PC)→(PM) devient lisse et réversible. En particulier, l'aspect d'hystérésis disparaît, ce qui était prévisible puisque seuls les états (P2B) et l'état trivial (état (0), cas $P \equiv 0 \equiv \varphi$), de moyennes nulles, ont été déterminés pour cette température (la manifestation d'une hystérésis nécessiterait l'apparition d'au moins un état de moyenne positive et de son opposé, à $U = 0$). Concernant cette température, l'état (PC) bascule continûment vers (0) pour $U = 0$ ($|P|$ diminue dans chacun des domaines jusqu'à s'annuler) : (PM+)↔(PC+)↔(0)↔(PC-)↔(PM-) ;
4. Pour $t \leq -0.25$, seul l'état monodomaine apparaît. Dans sa phase paraélectrique, la polarisation se comporte presque linéairement en fonction de U : $P \approx \chi(t)U$, où $t \longmapsto \chi(t)$ est décroissante (*cf.* Figure 4.8(c)).

4.1.5 Influence d'autres paramètres sur les transitions d'états

Nous avons obtenu plusieurs types de transitions d'états en tension sous l'influence de la température dans le paragraphe précédent. Nous nous intéressons ici à l'influence de deux autres paramètres du système : la taille de la couche ferroélectrique, qui sera caractérisée ici à travers le diamètre D_f, puis la permittivité ε_p du milieu paraélectrique environnant. Dans les études qui vont suivre, nous inspecterons plus particulièrement les transitions (PM)→(PC) et (PC)→(PM), car ce sont les seules qui apparaissent lorsque nous recherchons une hystérésis en tension à partir de $|U|$ grand. Pour les études thermiques suivantes, nous nous plaçons dans le cas où $U = 0$ tandis que nous fixons $t = -0.9$ pour l'investigation d'hystérésis en tension.

Nous commençons par étudier l'influence de D_f sur la polarisation. Ainsi, nous considérons $D_f \in \{2, 3, 4, ..., 20\}$ et nous générons les maillages correspondants, en prenant soin d'avoir des pas dans $\overline{\Omega_f}$ et $\overline{\Omega}$ qui restent inchangés.

Lorsqu'on chauffe la nanostructure ferroélectrique, on retrouve (*cf.* Figure 4.9) les transitions d'états métastables lisses ou abruptes rencontrées au paragraphe précédent. Pour $12 \leq D_f \leq 15$, la transition (PM)→(PC), lorsque la température augmente, est lisse et réversible, et s'opère suivant le mécanisme décrit au paragraphe précédent. Pour $16 \leq D_f \leq 19$, la transition (PM)→(PC) devient abrupte et irréversible. Notons que la température t_t de cette transition diminue lorsque D_f augmente tandis que les températures critiques t_{PM}, t_{PC}, des états (PM) et (PC) restent plutôt constantes. En conséquence, pour D_f grand, $t_t \leq -1$ donc seul l'état (PC) existe. De manière similaire, pour D_f petit, on a $t_t \geq \max\{t_{PM}, t_{PC}\}$ et seul l'état (PM) existe.

Les transitions lisses observées pour l'étude thermique ne sont pas retrouvées pour l'étude en tension (*cf.* Figure 4.9). On obtient cependant à nouveau les transitions abruptes

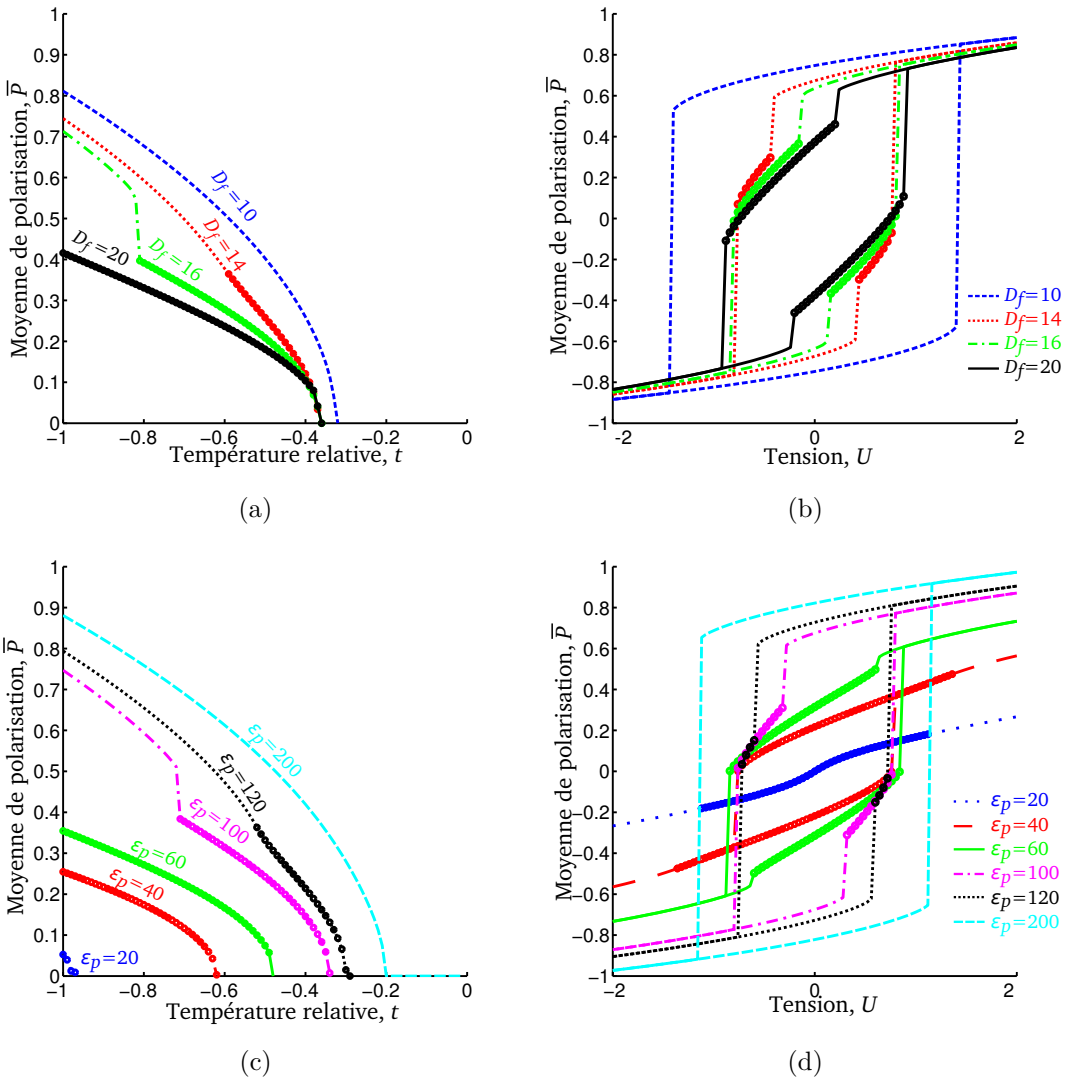


FIGURE 4.9 – Influence de D_f sur l'évolution de la moyenne de la polarisation en température (a), en tension (b) et influence de ε_p sur son comportement en température (c) et en tension (d) ; les profils (PC±) sont représentés par des bulles.

(PM)→(PC)→(PM) lorsque $12 \leq D_f \leq 20$. Sur la Figure 4.9, les hystérésis locales ne sont pas tracées (pour ne pas surcharger le graphique), mais elles existent puisque toutes les transitions sont irréversibles. Pour $2 \leq D_f \leq 11$, un nouveau type d'hystérésis est observé, avec l'unique basculement abrupt (PM±)→(PM∓).

Pour l'étude de l'influence de la permittivité du milieu paraélectrique, on considère $\varepsilon_p \in \{10, 20, ..., 200\}$. Remarquablement, lors de l'étude thermique du dispositif, on retrouve (*cf.* Figure 4.9(c)) les mêmes types de transitions (PM)→(PC) observées sous l'influence de D_f, à savoir : une transition lisse pour $120 \leq \varepsilon_p \leq 160$ et abrupte pour $80 \leq \varepsilon_p \leq 110$. De même, la température de transition entre les états varie en fonction de ε_p et seul l'état monodomaine est retrouvé pour $\varepsilon_p \geq 170$ tandis c'est plutôt uniquement l'état (PC) qui est déterminé pour $\varepsilon_p \leq 70$. Cette pauvreté d'états métastables pour ε_p grand ($\varepsilon_p \geq 140$) persiste lors de l'étude en tension, dans laquelle un échange des états monodomaines est une nouvelle fois observé (*cf.* Figure 4.9(d)). De plus, les 3 types d'évolution en tension observées pour différentes températures sont encore obtenues, à savoir des transitions abruptes (PM)→(PC)→(PM) pour $60 \leq \varepsilon_p \leq 130$, une transition lisse puis abrupte pour $30 \leq \varepsilon_p \leq 50$ (ce qui entraîne la perte des hystérésis locales) et des transitions uniquement lisses pour $\varepsilon_p = 20$ (ce qui entraîne la perte de la boucle d'hystérésis). Pour $\varepsilon_p \leq 10$, on retrouve enfin que P est presque linéaire par rapport à U.

La première chose à retenir de cette étude est qu'il semble y avoir certains liens entre les transitions d'états en température et en tension. Une relation facile à expliquer est que si la transition en température (PM)→(PC) est brutale, alors il existe une température pour laquelle les états (PM) et (PC) coexistent puisque l'état (PC) est stable par refroidissement. En particulier, on doit les retrouver en $U = 0$, ce qui induit qu'il existe des boucles d'hystérésis locales et ainsi que chacune des transitions d'états (PM)→(PC)→(PM) est nécessairement abrupte. Les autres liens sont moins évidents à comprendre. Par exemple, il semble que si l'état monodomaine est seul à apparaître lors de l'étude thermique, on ne retrouve également que cet état lors de l'étude en tension. Ceci peut être justifié formellement, puisque lorsque $|U|$ augmente, les domaines orientés défavorablement au champ électrique sont habituellement renversés ; ainsi si un unique domaine existe lorsque $U = 0$, il serait très contre-intuitif qu'un domaine apparaisse lorsque la tension augmente.

Un autre fait à noter est qu'on retrouve les mêmes types de transitions sous l'influence des différents paramètres t, D_f et ε_p. Par exemple, les transitions en température obtenues lorsque D_f varie apparaissent également sous l'influence de ε_p. De même, les transitions en tension sous l'influence de t ou de D_f existent également pour certaines considérations de ε_p. Ainsi, si on dispose d'un matériau ferroélectrique de petite taille, on peut imiter le comportement d'un matériau de grande taille en influant plutôt sur la permittivité de l'environnement paraélectrique : on parle de *dopage de matériau.*

Les propriétés ne sont toutefois pas parfaitement conservées, puisque les températures critiques t_{PM}, t_{PC}, des états (PM) et (PC) dépendent très fortement de ε_p et très peu de D_f. Il est alors naturel de se demander si l'on peut influer sur t_{PM}, t_{PC}, lorsque la hauteur H_f de la couche varie. Nous mènerons une étude afin de répondre à cette question dans la seconde partie de ce chapitre, cette fois-ci lorsque la couche ferroélectrique est de configuration géométrique parallélépipédique.

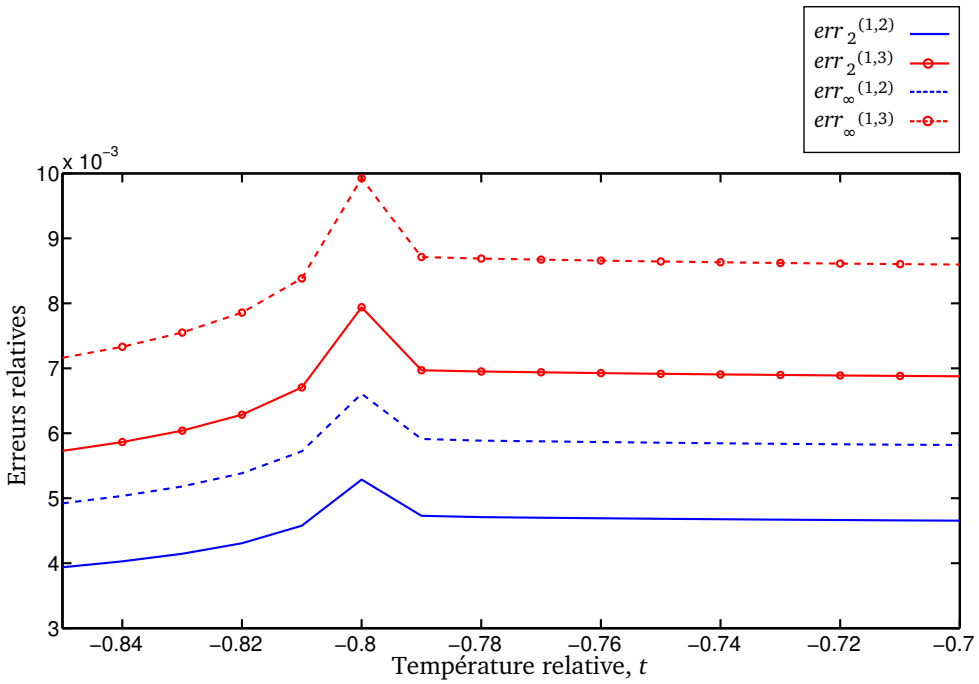


FIGURE 4.10 – Erreurs commises lors de différents agrandissements de l'environnement paraélectrique, sous configuration parallélépipédique, en fonction de la température.

4.2 Configuration parallélépipédique

Nous appellerons *nanocristal parallélépipédique*, ou plus simplement *nanocristal*, une couche de $NaNO_2$ dans une configuration parallélépipédique. Le domaine Ω sera également de configuration parallélépipédique. Après un calibrage géométrique de la nanostructure, nous mènerons une étude en deux temps. D'une part, nous comparerons son comportement à celui du nanotube, que ce soit en température, en tension, ainsi que sous l'influence de la permittivité du milieu paraélectrique environnant. D'autre part, nous inspecterons l'influence des paramètres géométriques sur la température critique du système.

4.2.1 Description de la nanostructure

Nous disposons ici d'une couche ayant une hauteur et un volume dont les valeurs numériques rappellent celles considérées dans le contexte cylindrique. Notamment,

$$\begin{aligned} \overline{\Omega_f} &= [-d_x, d_x] \times [-d_y, d_y] \times [-d_z, d_z], \\ \overline{\Omega} &= [-D_x, D_x] \times [-D_y, D_y] \times [-D_z, D_z], \end{aligned}$$

où $d_x = d_y = 7.09$ et $d_z = 0.85$. Les valeurs de la Table 4.1 sont reprises ici. Pour calibrer les paramètres de Ω, on choisit d'étudier, selon la température, la transition d'états (PM+)→(PC+), pour $U = 0$ et différentes valeurs de D_x, D_y et D_z. La valeur de la température de transition t_t augmente avec le volume de l'environnement paraélectrique, à partir de $t_t = -0.92$ jusqu'à se stabiliser à $t_t = -0.80$ pour $D_x = 15$, $D_y = 15$ et $D_z = 15$. En effet, si on considère plusieurs agrandissements, dont les maillages sont décrits sur la Table 4.3, alors les erreurs entre les différentes solutions numériques obtenues sont négligeables, car inférieures à 1% (*cf.* Figure 4.10, l'erreur est maximale sur l'intervalle de températures qui y est

	Maillage 1	*Maillage 2*	*Maillage 3*
Largeur de Ω *(*$2D_x$*)*	30	32	34
Hauteur de Ω *(*$2D_z$*)*	30	32	34
Pas dans $\overline{\Omega_f}$ *(*h_f*)*	0.47	0.47	0.47
Pas dans $\overline{\Omega}$ *(*h*)*	0.61	0.61	0.61
Nœuds dans $\overline{\Omega_f}$ *(*N_f*)*	43 124	58 041	57 704
Nœuds dans $\overline{\Omega}$ *(*N*)*	1 178 044	1 852 418	2 552 340
Taille du système ($N_f + N^0$*)*	1 121 858	1 772 141	2 292 108

TABLE 4.3 – Caractéristiques des différents maillages pour l'agrandissement du milieu paraélectrique lorsque le dispositif est parallélépipédique.

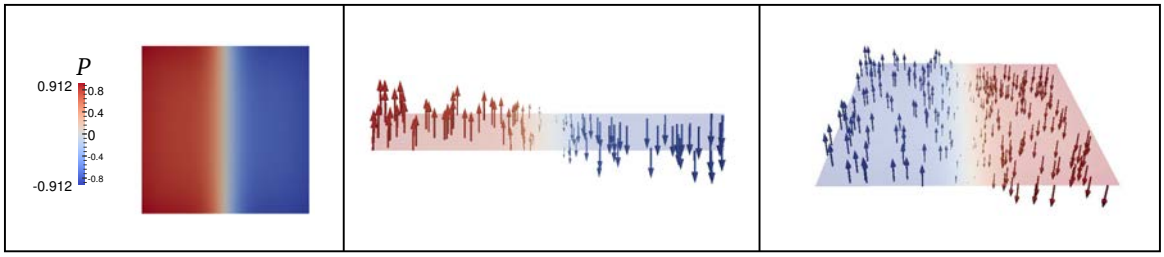
représenté ; les notations de (3.17) sont reprises). La considération de $D_x = D_y = D_z = 15$ est alors faite.

Indiquons que pour 1 simulation, le temps CPU est de 2h, ou 3h30, ou encore 8h, selon que le maillage 1, ou maillage 2, ou encore le maillage 3 est considéré sur la Table 4.3.

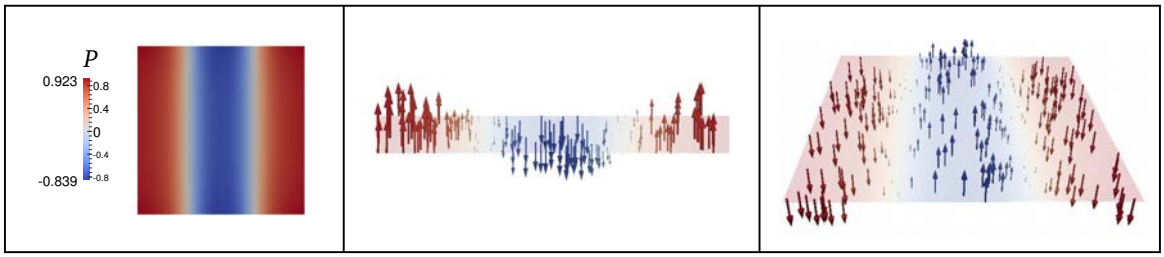
4.2.2 Comparaison avec la configuration cylindrique

Commençons par l'étude thermique (*cf.* Figure 4.12), en fixant $U = 0$; de fortes similarités avec le nanotube (*cf.* Figure 4.3) existent. Tout d'abord, des états semblables apparaissent (*cf.* Figure 4.11) : l'état monodomaine (PM), l'état 2 bandes (P2B), plusieurs états 3 bandes (*cf.* Figures 4.11(b)-(c)), notés ici (P3B+) et (P3B+,bis), un état constitué de 4 domaines agencés en damier (P4D), un état « goutelette » (PG+) et enfin un état ayant un domaine central cylindrique (PC+). Les mêmes remarques que précédemment peuvent ici être faites sur les parois de domaines, qui sont encore de type Ising. On retrouve ainsi les transitions brutales (PM+)→(PC+)→(P2B) ainsi que la transition lisse (P3B+,bis)→(P4D) causée par un déplacement des parois de domaines. En revanche, l'état (PG+) ne se rapproche plus continûment de (PC+) mais s'annule, quel que soit le pas de température considéré. Enfin, l'état (P3B+) bascule vers (PG+) ; cette transition se comprend mieux en observant les déplacements des parois de domaines, puisque la taille du domaine central de (P3B+) augmente près du centre jusqu'à ce que celui-ci devienne qualitativement assez proche (*cf.* Figure 4.13) de l'état (PG+). Encore une fois, (PM+) est l'état le plus stable pour de basses températures, environ jusqu'au saut (PM+)→(PC+), puis c'est au tour de (P2B) ; l'état d'énergie minimale est indiqué par des bulles sur la Figure 4.12.

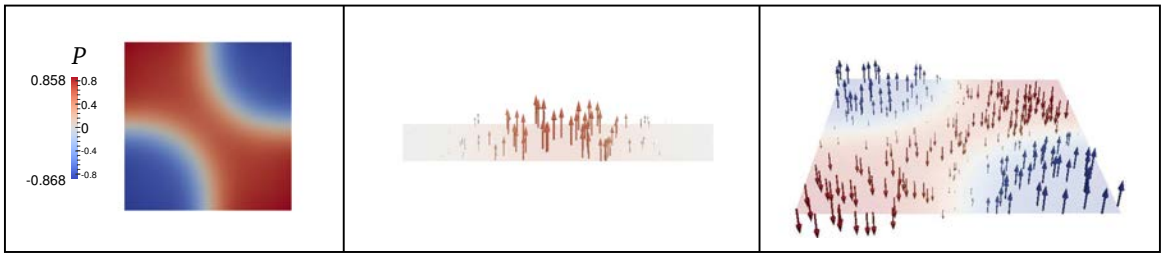
Les résultats, lorsque la température est fixée à $t = -0.9$ et la tension varie, sont encore à rapprocher de ceux du nanotube. On retrouve les transitions (PM±)→ (PC±)→(PM∓), dont le caractère irréversible entraîne l'existence d'une boucle d'hystérésis globale et de boucles locales (*cf.* Figure 4.14). La perte d'un domaine de polarisation orienté défavorablement au champ électrique généré par l'application de la tension U est également retrouvée pour l'état (P3B), qui bascule vers (P2B). Enfin, la transition (P2B)→(PM) est à nouveau obtenue, même si une différence avec le cas du nanotube existe, puisque cette transition a lieu pour une valeur de $|U|$ plus grande que celle relative aux transitions (PC±)→(PM±).



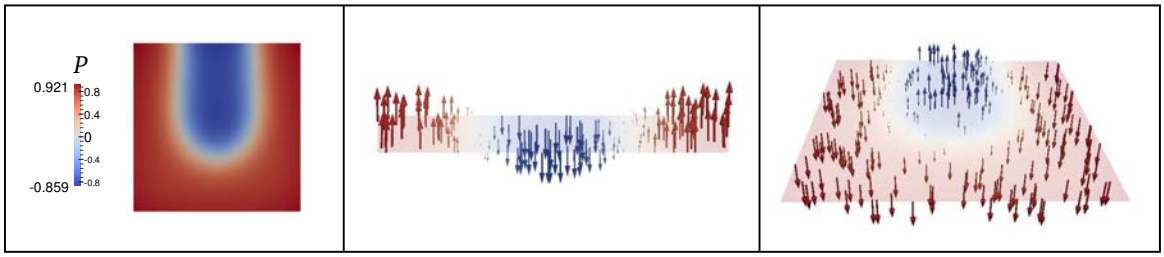
(a) (P2B)



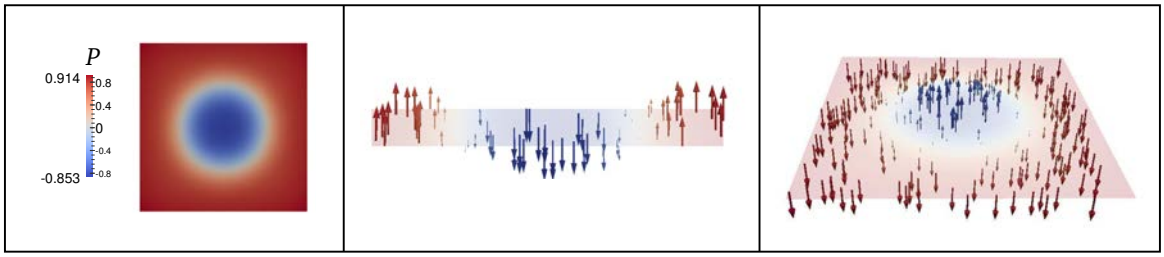
(b) (P3B+)



(c) (P3B+,bis)



(d) (PG+)



(e) (PC+)

FIGURE 4.11 – Profils de polarisation des états métastables pour le nanocristal, $t = -0.9$: à gauche, champ scalaire P, coupe en $(z = 0)$; au milieu, champ vectoriel de polarisation $\mathbf{P}$, coupe en $(y = 0)$; à droite, champ vectoriel de polarisation $\mathbf{P}$, coupe en $(z = 0)$.

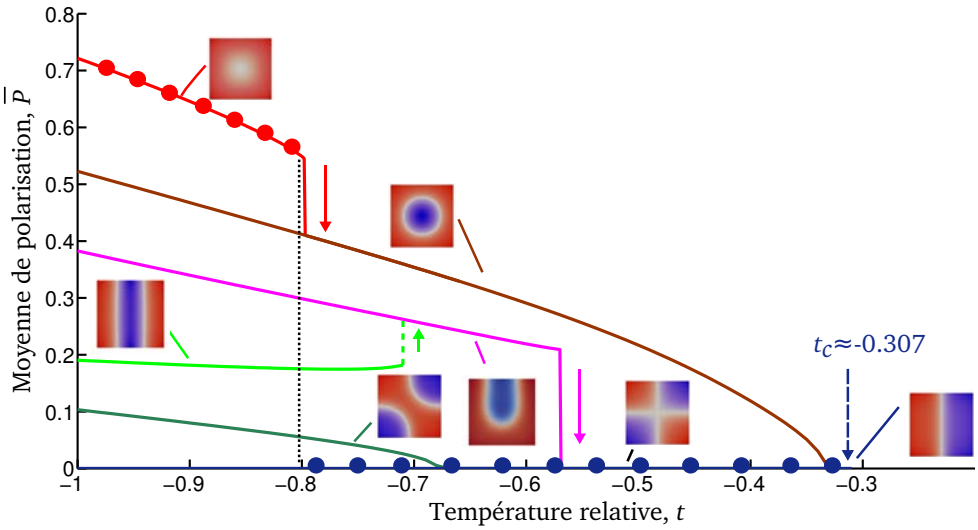


FIGURE 4.12 – Etude thermique du nanocristal ; les états qui minimisent l'énergie sont indiqués par des bulles.

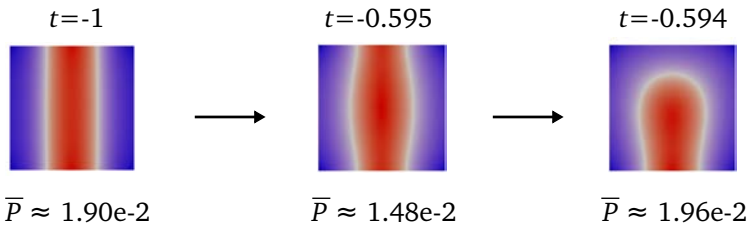


FIGURE 4.13 – Transition de l'état (P3B+) vers (PG+) en température.

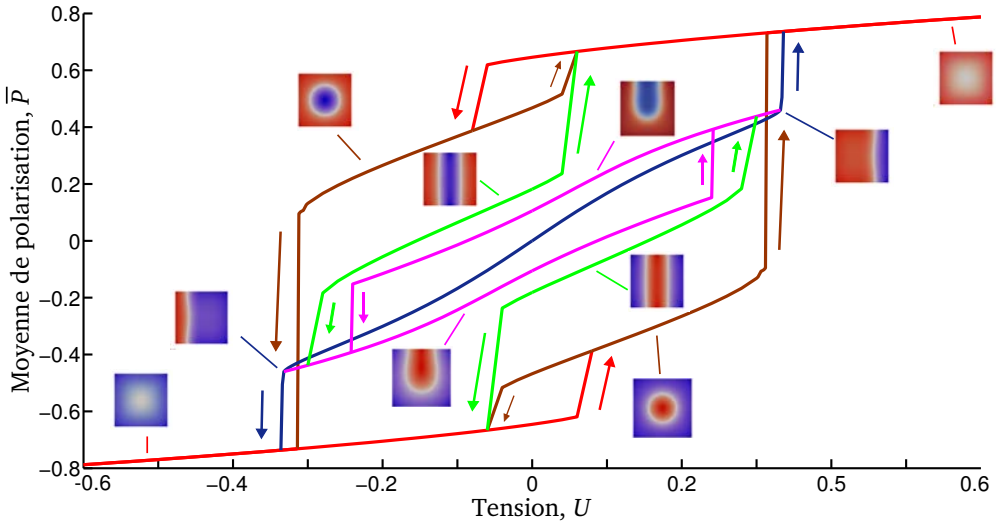


FIGURE 4.14 – Hystérésis en tension du nanocristal parallélépipédique de $NaNO_2$.

Notons que la commutation possible entre les états (PM±), (PC±) et (P2B) existant en $U = 0$ et $t = -0.9$, à l'aide d'une réinitialisation thermique ou d'une variation du champ électrique, permet d'envisager un « stockage multibits » de l'information aussi dans le contexte du nanocristal.

Pour étudier l'influence du paramètre $D_f = 2d_x = 2d_y$, plusieurs maillages ont été considérés, avec $D_f \in \{2, 3, 4, ..., 20\}$. Ces maillages sont construits de sorte que leurs pas, dans $\overline{\Omega_f}$ et $\overline{\Omega}$, restent inchangés relativement à ces considérations. On observe à nouveau la transition (PM)→(PC) et on retrouve les 4 situations observées dans le cas du nanotube, pour des gammes de valeurs de D_f assez proches (*cf.* Figure 4.15(a)) lorsque la température varie (avec $U = 0$) :

- pour $D_f \leq 11$, seul l'état (PM) apparaît ;
- pour $12 \leq D_f \leq 13$, transition (PM)→(PC) est lisse et réversible ;
- pour $14 \leq D_f \leq 16$, la transition (PM)→(PC) est brutale et irréversible ;
- pour $D_f \geq 17$, seul l'état (PC) apparaît.

De la même façon lors de l'étude en tension (avec $t = -0.9$), il y a encore une fois (*cf.* Figure 4.15(b)) un échange des états (PM±)↔(PM∓) pour $D_f \leq 11$ et uniquement des transitions brutales (PM)→(PC)→(PM) pour de plus grandes valeurs de D_f.

Enfin, l'étude de l'influence de la permittivité ε_p conduit aux mêmes conclusions que pour le nanotube, en considérant $\varepsilon_p \in \{10, 20, ..., 200\}$. On obtient encore (*cf.* Figure 4.15(c)-(d)) les 4 types de transitions décrits avant. On a notamment lorsque la tension varie (avec $t = -0.9$) :

- pour $10 \leq \varepsilon_p \leq 30$, toutes les transitions (PM)→(PC)→(PM) sont lisses et réversibles ;
- pour $40 \leq \varepsilon_p \leq 60$, la transition (PM)→(PC) est lisse mais (PC)→(PM) est abrupte et irréversible (en particulier, une boucle d'hystérésis globale se forme)
- pour $70 \leq \varepsilon_p \leq 110$, toutes les transitions (PM)→(PC)→(PM) sont abruptes et irréversibles (en particulier, une boucle d'hystérésis globale ainsi que deux boucles locales existent) ;
- pour $\varepsilon_p \geq 120$, l'échange (PM±)↔(PM∓) est brutal et irréversible.

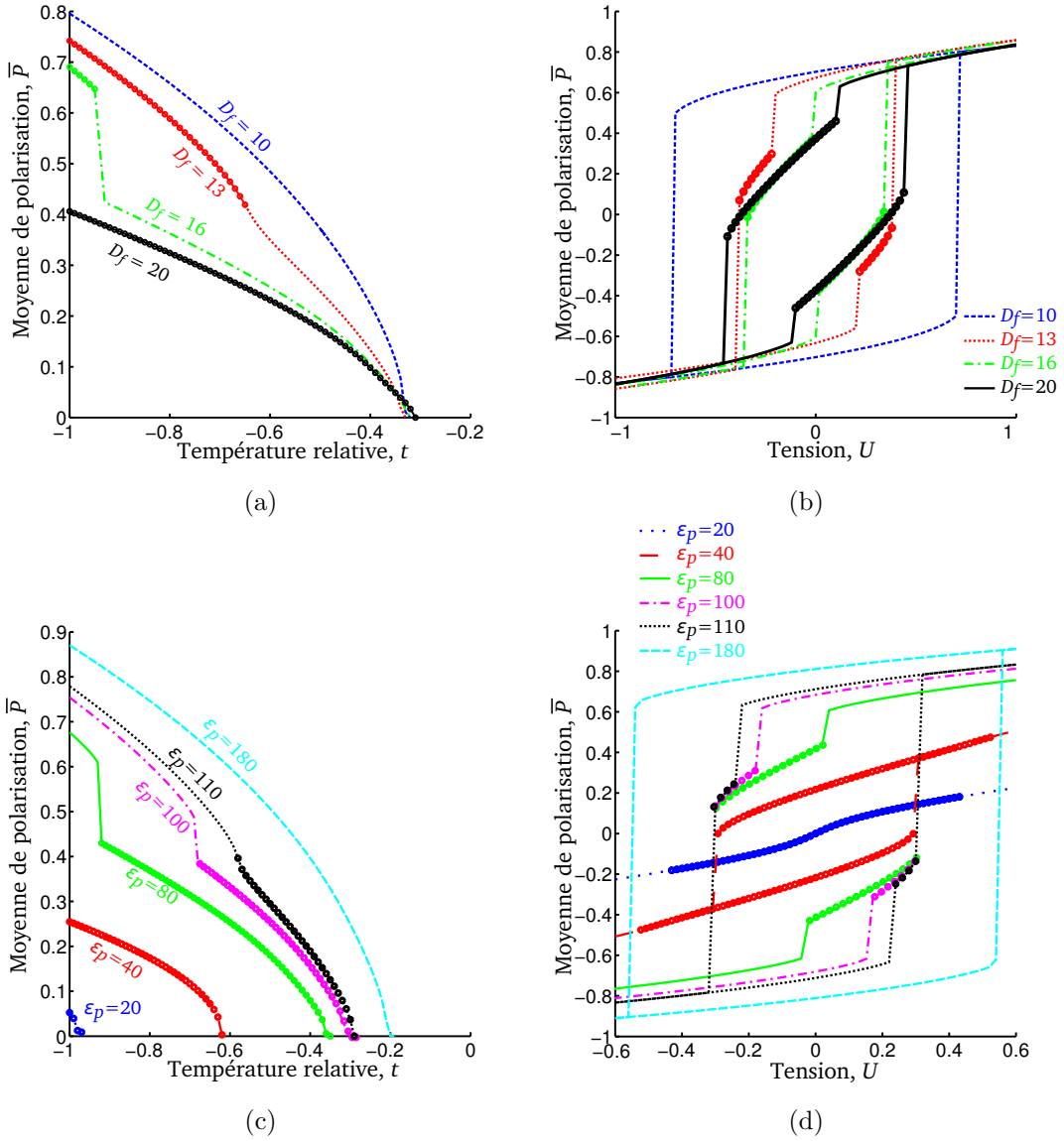


FIGURE 4.15 – Influence du paramètre $D_f = 2d_x = 2d_y$ (a)-(b) et de la permittivité de l'environnement paraélectrique ε_p (c)-(d).

Finalement, les propriétés des nanostructures ferroélectriques observées pour des géométries cylindriques ou parallélépipédiques sont très semblables, et les aspects les plus importants, à savoir l'hystérésis multibits ou le dopage de matériaux, sont retrouvés dans les deux cas.

4.2.3 Caractérisation de la température critique

Nous avons remarqué que la permittivité ε_p a une grande influence sur la température critique t_c de la nanostructure (*cf.* Figure 4.15(c)), contrairement au paramètre D_f (*cf.* Figure 4.15(a)).

On veut comprendre ici comment se comporte t_c à la fois selon ε_p et la hauteur H_f de la couche ferroélectrique. Pour cela, nous allons considérer plusieurs couples (ε_p, H_f), où $\varepsilon_p \in \{1, 2, .., 9, 10, 20, ..., 200\}$, $H_f \in \{1.1, 1.4, 1.7, 2, 2.25, 2.5\}$, en posant par ailleurs $D_f = 14.18$. Pour chaque (ε_p, H_f) fixé, on reproduit une étude thermique ; chacun des états métastables obtenus possède une température critique, déterminée à 10^{-2} près, et on considère que la plus grande d'entre elles est la température critique de la nanostructure. Notons que c'est systématiquement celle de l'état (P2B), qui existe pour chacun des cas considérés, qui est la plus grande.

Les résultats obtenus sont reportés sur la Figure 4.16, où la température critique est représentée en fonction de ε_p, pour plusieurs valeurs de H_f. Il en découle qu'un ajustement peut être fait : par exemple, si l'on veut parvenir à une température critique $t_c = -0.5$, lorsque le nanocristal est de hauteur $H_f = 2.5$, alors il faut disposer d'un environnement paraélectrique de permittivité $\varepsilon_p \approx 31$. On peut également parvenir à cette même température critique lorsque le nanocristal est de hauteur $H_f = 1.4$, en considérant plutôt un environnement paraélectrique tel que $\varepsilon_p \approx 54$.

On retrouve par ailleurs que t_c dépend de ε_p, mais on a de plus une dépendance vis-à-vis de H_f : la température critique augmente avec la hauteur. L'étude indique que $\varepsilon_p \longmapsto t_c(\varepsilon_p)$ croît très lentement pour ε_p grand.

Signalons pour conclure que nous avons aussi reproduit l'intégralité de cette étude pour $D_f = 16$ et on a obtenu très sensiblement les mêmes résultats. Ceci confirme l'idée, déjà évoquée, que le paramètre D_f n'a pas d'influence prépondérante sur la température critique.

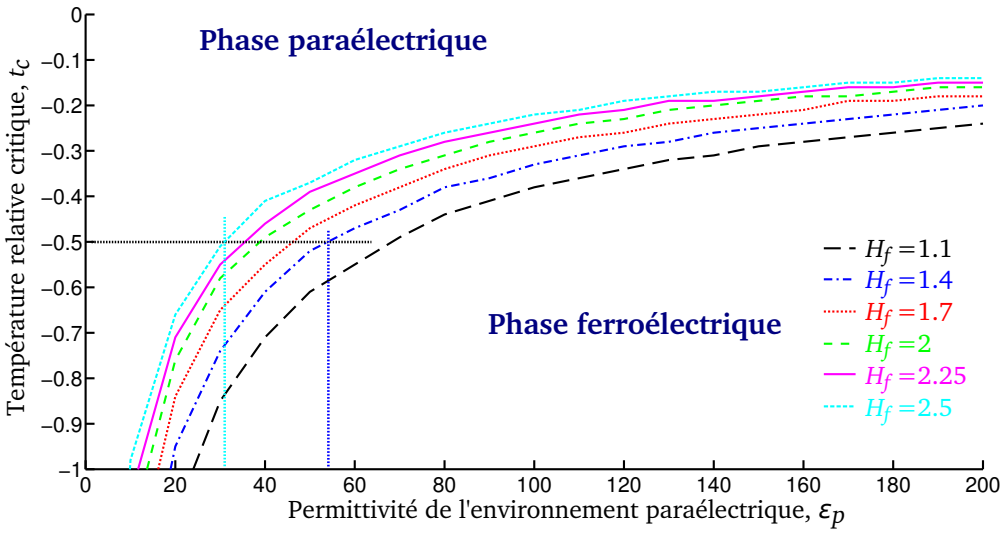


FIGURE 4.16 – Evolution de la température critique t_c sous l'influence de ε_p et H_f.

Deuxième partie

Nanostructures avec superposition de couches ferroélectriques / paraélectriques

Chapitre 5

Formation de domaines dans un super-réseau ferroélectrique

Nous sommes concernés dans ce chapitre par une classe de nanostructures qui diffère de celle considérée précédemment, dans le sens où les nanostructures sont ici constituées d'une superposition de trois couches. La couche centrale est ferroélectrique et les deux autres sont paraélectriques. La modélisation effectuée pour l'étude numérique de ces nanostructures, soumises à l'action de champs électriques stationnaires, est basée sur une variante du couplage des équations de Ginzburg-Landau et d'Electrostatique réalisé dans la première partie. Nous discrétisons par éléments finis le système non-linéaire qui en résulte et nous nous intéressons en particulier à l'investigation numérique de la permittivité dite *effective*.

5.1 Présentation du modèle

Dans toute la suite, la couche ferroélectrique, représentée par Ω_f,

$$\Omega_f = (-d_x, d_x) \times (-d_y, d_y) \times (-a_f, a_f),$$

est située entre deux couches paraélectriques (*cf.* Figure 5.1), désignées par,

$$\Omega_p^- = (-d_x, d_x) \times (-d_y, d_y) \times (-a_f - a_p, -a_f),$$

et,

$$\Omega_p^+ = (-d_x, d_x) \times (-d_y, d_y) \times (a_f, a_f + a_p),$$

où $d_x > 0$, $d_y > 0$, $a_f > 0$, $a_p > 0$. On pose $d_z = a_f + a_p$, et représente par $S_f^{\pm}$,

$$S_f^{\pm} = \left\{(x, y, \pm a_f) \in \mathbf{R}^3 \ ; \ -d_x \leq x \leq d_x, \ -d_y \leq y \leq d_y\right\},$$

les interfaces entre la couche ferroélectrique et les couches paraélectriques. Aussi on pose,

$$S^{\pm} = \left\{(x, y, \pm d_z) \in \mathbf{R}^3 \ ; \ -d_x \leq x \leq d_x, \ -d_y \leq y \leq d_y\right\},$$

$$\Gamma_x = \left\{(\pm d_x, y, z) \in \mathbf{R}^3 \ ; \ -d_y \leq y \leq d_y, \ -d_z < z < d_z\right\},$$

et,

$$\Gamma_y = \left\{(x, \pm d_y, z) \in \mathbf{R}^3 \ ; \ -d_x < x < d_x, \ -d_z < z < d_z\right\},$$

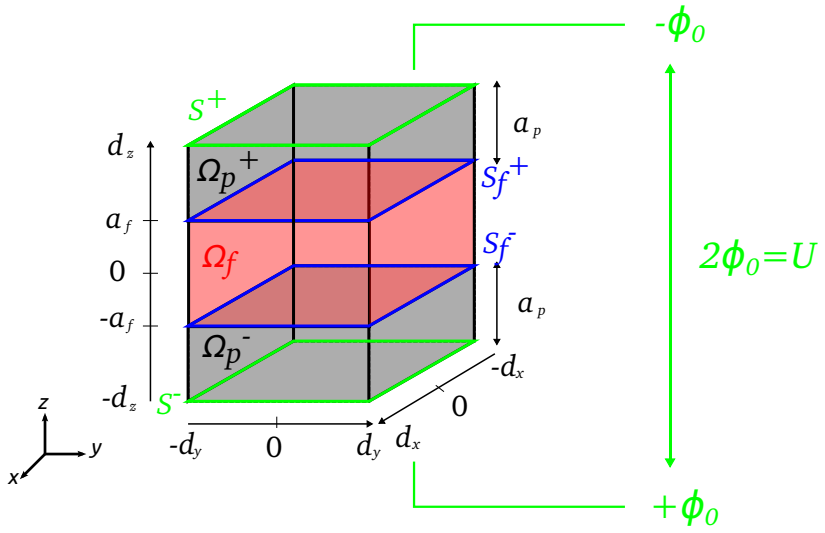


FIGURE 5.1 – Géométrie d'un film ferroélectrique entre deux couches paraélectriques.

pour désigner les parties frontalières de Ω,

$$\Omega = (-d_x, d_x) \times (-d_y, d_y) \times (-d_z, d_z).$$

De même,

$$\Gamma_x^f = \left\{(\pm d_x, y, z) \in \mathbf{R}^3 \ ; \ -d_y \leq y \leq d_y, \ -a_f < z < a_f\right\},$$

et,

$$\Gamma_y^f = \left\{(x, \pm d_y, z) \in \mathbf{R}^3 \ ; \ -d_x < x < d_x, \ -a_f < z < a_f\right\},$$

désignent les parties frontalières latérales de la couche Ω_f. Enfin, on convient de noter,

$$\Omega_p = \Omega_p^- \cup \Omega_p^+, \quad S = S^- \cup S^+, \quad S_f = S_f^- \cup S_f^+,$$

dans toute la suite.

Nous considérons un dispositif ferroélectrique (*cf.* Figure 5.1), constitué de la nanostructure ainsi que de deux électrodes fixées sur les faces $S^{\pm}$, qui y imposent des potentiels $\mp\phi_0$, de façon à générer un courant électrique de tension $U = 2\phi_0$.

La description d'états critiques du dispositif s'appuie ici sur la modélisation qui a été effectuée aux Chapitres 1 et 2. Plus précisément, en vue de l'étude de ces états critiques que nous mènerons, nous sommes ici concernés par une variante du couplage des équations de Ginzburg-Landau et d'Electrostatique qui a été réalisé au Paragraphe 2.1 du Chapitre 2. La couche ferroélectrique est donc aussi considérée comme étant de type uniaxial, et cette variante de couplage fournit le système non-linéaire d'équations ci-dessous, où les inconnues sont représentées par P et φ. Le champ électrique $\mathbf{E}$ dérive du potentiel scalaire φ, $\mathbf{E} = -\nabla\varphi$, tandis que la fonction scalaire P permet de décrire la troisième composante du champ de polarisation $\mathbf{P}$ conformément à (1.5). Afin de simplifier nos éléments de langage dans la suite, nous appellerons également *polarisation* le champ P. Nous sommes donc concernés ici

par le système qui consiste à trouver $P : \overline{\Omega_f} \longrightarrow \mathbf{R}$, $\varphi : \overline{\Omega} \longrightarrow \mathbf{R}$, de sorte que,

$$\begin{cases} 2a_3^\star P + 4a_{33}^\star P^3 - 2k_2 \Delta P + \partial_z \varphi = 0 & \text{dans } \Omega_f, \quad (5.1) \\ -\varepsilon_0(\varepsilon_\perp \partial_{xx}^2 + \varepsilon_\perp \partial_{yy}^2 + \varepsilon_\parallel \partial_{zz}^2)\varphi + \partial_z P = 0 & \text{dans } \Omega_f, \quad (5.2) \\ -\varepsilon_0(\varepsilon_p \partial_{xx}^2 + \varepsilon_p \partial_{yy}^2 + \varepsilon_p \partial_{zz}^2)\varphi = 0 & \text{dans } \Omega_p, \quad (5.3) \\ \varphi|_{\Omega_p} = \varphi|_{\Omega_f} & \text{sur } S_f, \quad (5.4) \\ \varepsilon_0(\varepsilon_\parallel \partial_z \varphi|_{\Omega_f} - \varepsilon_p \partial_z \varphi|_{\Omega_p}) = P & \text{sur } S_f, \quad (5.5) \\ \partial_x P = 0 & \text{sur } \Gamma_x^f, \quad (5.6) \\ \partial_y P = 0 & \text{sur } \Gamma_y^f, \quad (5.7) \\ \partial_z P = 0 & \text{sur } S_f, \quad (5.8) \\ \partial_x \varphi = 0 & \text{sur } \Gamma_x, \quad (5.9) \\ \partial_y \varphi = 0 & \text{sur } \Gamma_y, \quad (5.10) \\ \varphi = \mp \phi_0 & \text{sur } S^\pm. \quad (5.11) \end{cases}$$

Nous désignerons dans la suite par (GLE-N) ce système.

Notons que les équations (5.1)-(5.3) sont une réécriture de (1.13), qui était introduit au Chapitre 1.

Une différence par rapport à la formulation (GLE) présentée au Chapitre 2, est que le présent dispositif a fait appel, dans la modélisation, en dehors d'une nouvelle configuration géométrique de la nanostructure, à une considération partielle des conditions de Neumann en ce qui concerne le potentiel φ (voir notamment (5.9)-(5.10)).

Afin que la modélisation traduite à travers le système (GLE-N) puisse rendre compte du comportement d'un super-réseau ferroélectrique, à savoir un réseau où les couches ferroélectriques et paraélectriques, infinies dans les directions (Ox) et (Oy), se superposent dans la direction (Oz), nous serons concernés par des considérations de valeurs des paramètres géométriques d_x et d_y, ainsi que d'états, rendant minimale l'énergie libre associée (*cf.* Paragraphe 5.4.1).

Une autre différence par rapport à (GLE) est que les valeurs des paramètres physiques intervenant dans (GLE-N) évoqueront celles d'un matériau ferroélectrique et d'un environnement paraélectrique ayant fait l'objet d'une considération dans une récente étude physique expérimentale dont les résultats ont été publiés dans la revue *Nature* (*cf.* [72]). En particulier, dans [72], le matériau ferroélectrique n'est pas de type uniaxial, et notre approche de modélisation conduirait plutôt dans ce cas à un système comportant comme inconnues les deux premières composantes de $\mathbf{P}$ en plus de la troisième composante de $\mathbf{P}$ et du potentiel φ ; les deux premières composantes de $\mathbf{P}$ étant alors en interaction non-linéaire avec les deux premières composantes de $\mathbf{E}$. Notre approche conduirait donc à un système comportant bien plus d'équations que (GLE-N), dans le cas du matériau de type non uniaxial. Cependant, il s'agira aussi ici de distinguer la couche ferroélectrique Ω_f comme étant le matériau qui fait référence au Titanate de Plomb $PbTiO_3$ (PTO) et les couches Ω_p^+, Ω_p^- comme représentant l'environnement paraélectrique qui fait référence au Titanate de Strontium $SrTiO_3$ (STO). Dans nos investigations numériques alors, nous affecterons des valeurs numériques aux paramètres géométriques et physiques de (GLE-N) qui font référence en outre à de telles couches pour Ω_f, Ω_p^+ et Ω_p^-.

Dans le système (GLE-N), $a_3^\star$ dépend de la température T,

$$a_3^\star \approx \left[3.8(T - T_{c0}) + 0.95.10^5 u_m\right].10^{32},$$

Paramètre	*Valeur*	*Unité*
$a_3^\star$	$\left[3.8(T-T_{c0})+0.95.10^5 u_m\right] 10^{32}$	$Kg.nm^3.s^{-4}.A^{-2}$
u_m	-2.10^{-3}	
T_{c0}	752	K
$T_c(u_m)$	802	K
$a_{33}^\star$	$0.5.10^{71}$	$Kg.nm^7.s^{-6}.A^{-4}$
k_2	$2.9.10^{35}$	$Kg.nm.s^{-4}.A^{-2}$
ε_0	$8.85.10^{-39}$	$Kg^{-1}.nm^{-3}.s^4.A^2$

TABLE 5.1 – Valeurs numériques des paramètres physiques relatifs à la couche PTO, et qui resteront inchangées.

avec u_m et T_{c0} des constantes liées au matériau qui s'associe à Ω_f. D'autre part, ε_0 désigne la permittivité électrique du vide, puis $\varepsilon_\perp > 0$, $\varepsilon_\parallel > 0$ et $\varepsilon_p > 0$. Enfin, $k_2 > 0$ et $a_{33}^\star > 0$ sont d'autres constantes physiques caractérisant le matériau ferroélectrique. La considération de T est effectuée dans $[0, T_c(u_m))$, où,

$$T_c(u_m) = T_{c0} - \frac{0.95}{3.8} 10^5 u_m.$$

Dans les investigations numériques, nous considérerons les valeurs de la Table 5.1 en ce qui concerne les paramètres physiques qui y apparaissent. Par ailleurs, nous affecterons différentes valeurs numériques à $\varepsilon_\perp$, $\varepsilon_\parallel$ et ε_p. Les paramètres géométriques a_f et a_p, indiquant les tailles des couches ferroélectrique et paraélectrique, prennent des valeurs s'exprimant en nanomètres (nm). Il en sera de même pour les paramètres d_x et d_y qui renseignent sur les largeurs de ces couches.

Un redimensionnement des grandeurs de la Table 5.1, difficiles à manipuler en double précision, est préférable. Dans [38], des développements analytiques en lien avec une famille de nanostructures ferroélectriques bidimensionnelles sont menés afin d'en déterminer des propriétés universelles ; un redimensionnement, qui y est notamment réalisé, est adapté ici au cas tridimensionnel en vue d'une résolution numérique en double précision d'un système équivalent à (5.1)-(5.11). Notamment, en notant, $P = \alpha P'$ et $\varphi = \beta\varphi'$, où,

$$\alpha = \left(\tau \frac{a_3^\star}{a_{33}^\star}\right)^{1/2} \quad \text{et} \quad \beta = \left(\tau^3 \frac{(a_3^\star)^3 a_f^2}{a_{33}^\star}\right)^{1/2}, \tag{5.12}$$

avec,

$$\tau = \frac{k_2^{1/2}}{a_3^\star (\varepsilon_0 \varepsilon_\perp)^{1/2} a_f}.$$

5.2 Détermination analytique d'états de polarisation uniformes

Lorsque $\phi_0 = 0$, le couple $(P, \varphi) = (0, 0)$ est solution du système (5.1)-(5.11). Dans ce paragraphe, nous envisageons de déterminer l'expression analytique d'autres états uniformes, pour toute considération de ϕ_0. Nous commençons par traiter le cas $\phi_0 = 0$ et nous

introduisons les notations,

$$\Omega_f^{\pm} = \Omega_f \cap (\mathbf{R}^2 \times \mathbf{R}^{\pm}),\ \varphi_p^{\pm} = \varphi|_{\Omega_p^{\pm}} \text{ et } \varphi_f^{\pm} = \varphi|_{\Omega_f^{\pm}}.$$

Nous recherchons en fait (P, φ) satisfaisant (5.1)-(5.11), où P est une fonction constante et φ est affine par morceaux dans Ω. En particulier, on suppose que φ est affine dans Ω_p^+ et linéaire dans Ω_f^+ (nous verrons *a posteriori* que cette hypothèse est correcte). Ainsi, il existe $A \in \mathbf{R}$ tel que,

$$\varphi_f^+(x, y, z) = Az \quad \forall (x, y, z) \in \Omega_f^+.$$

De plus, d'après (5.11), $\varphi(a_f + a_p) = 0$, donc il existe $B \in \mathbf{R}$ tel que,

$$\varphi_p^+(x, y, z) = B(z - a_f - a_p) \quad \forall (x, y, z) \in \Omega_p^+.$$

L'équation (5.4) fournit ensuite,

$$\varphi_f^+(x, y, a_f) = \varphi_p^+(x, y, a_f) \quad \forall (x, y) \in [-d_x, d_x] \times [-d_y, d_y],$$

i.e.,

$$Aa_f = -Ba_p. \tag{5.13}$$

L'équation (5.5) permet de noter que,

$$\varepsilon_0(\varepsilon_{\|} A - \varepsilon_p B) = P,$$

ce qui devient, avec (5.13),

$$\varepsilon_0 \left(\varepsilon_{\|} A + \varepsilon_p \frac{a_f}{a_p} A \right) = P.$$

Alors,

$$A = \frac{P}{\varepsilon_0 \left(\varepsilon_{\|} + \varepsilon_p \frac{a_f}{a_p} \right)},$$

et, avec (5.13),

$$B = -\frac{a_f}{a_p} \frac{P}{\varepsilon_0 \left(\varepsilon_{\|} + \varepsilon_p \frac{a_f}{a_p} \right)}.$$

Finalement,

$$\varphi_f^+(x, y, z) = \frac{z}{\varepsilon_0 \left(\varepsilon_{\|} + \varepsilon_p \frac{a_f}{a_p} \right)} P \quad \forall (x, y, z) \in \Omega_f^+, \tag{5.14}$$

et,

$$\varphi_p^+(x, y, z) = \frac{a_f + a_p - z}{\varepsilon_0 \left(\varepsilon_{\|} \frac{a_p}{a_f} + \varepsilon_p \right)} P \quad \forall (x, y, z) \in \Omega_p^+. \tag{5.15}$$

En procédant de la même manière, on obtient également,

$$\varphi_f^-(x, y, z) = \frac{z}{\varepsilon_0 \left(\varepsilon_{\|} + \varepsilon_p \frac{a_f}{a_p} \right)} P \quad \forall (x, y, z) \in \Omega_f^-, \tag{5.16}$$

et,

$$\varphi_p^-(x, y, z) = -\frac{a_f + a_p + z}{\varepsilon_0 \left(\varepsilon_{\|} \frac{a_p}{a_f} + \varepsilon_p \right)} P \quad \forall (x, y, z) \in \Omega_p^-, \tag{5.17}$$

ce qui détermine complètement φ sur Ω. Notons que le potentiel électrique obtenu est impair.

Les équations (5.2)-(5.11) sont toutes vérifiées. L'équation (5.1) fournit,

$$P\left(2a_3^\star + \frac{1}{\varepsilon_0\left(\varepsilon_\parallel + \varepsilon_p\frac{a_f}{a_p}\right)} + 4a_{33}^\star P^2\right) = 0. \tag{5.18}$$

Ainsi, pour l'expression φ déterminée avant, il existe $P \neq 0$ de sorte que (P, φ) satisfasse (5.1)-(5.11) si, et seulement si,

$$2a_3^\star + \frac{1}{\varepsilon_0\left(\varepsilon_\parallel + \varepsilon_p\frac{a_f}{a_p}\right)} < 0.$$

Le cas échéant,

$$P = \pm\left(-\frac{1}{4a_{33}^\star}\left(2a_3^\star + \frac{1}{\varepsilon_0\left(\varepsilon_\parallel + \varepsilon_p\frac{a_f}{a_p}\right)}\right)\right)^{1/2}, \tag{5.19}$$

et φ vérifient (5.1)-(5.11).

Cette condition, dans le cas de la couche PTO, en utilisant l'expression de $a_3^\star$ depuis la Table 5.1, se traduit comme suit,

$$T - T_{c0} + \frac{0.95}{3.8}10^5 u_m + \frac{10^{-32}}{2\times 3.8\times\varepsilon_0\left(\varepsilon_\parallel + \varepsilon_p\frac{a_f}{a_p}\right)} < 0. \tag{5.20}$$

Ainsi des états de polarisations uniformes non nuls, pour lesquels $\varphi|_{\Omega_f}$ est linéaire et $\varphi|_{\Omega_p^\pm}$ sont affines, ne peuvent exister qu'en dessous d'une certaine température critique, égale à,

$$T_{c\phi}(u_m) = T_c(u_m) - \frac{10^{-32}}{2\times 3.8\times\varepsilon_0\left(\varepsilon_\parallel + \varepsilon_p\frac{a_f}{a_p}\right)}.$$

Dans le cas général où $\phi_0 \neq 0$, on procède de même en adaptant les calculs précédents pour la détermination de φ. Par ailleurs, la condition nécessaire et suffisante d'existence de trois polarisations distinctes associées est donnée par $4p^3 + 27q^2 < 0$, avec,

$$p = \frac{1}{4a_{33}^\star}\left(2a_3^\star + \frac{1}{\varepsilon_0\left(\varepsilon_\parallel + \varepsilon_p\frac{a_f}{a_p}\right)}\right), \quad q = -\frac{1}{4a_{33}^\star}\frac{\varepsilon_0\varepsilon_p\frac{\phi_0}{a_p}}{\varepsilon_0\left(\varepsilon_\parallel + \varepsilon_p\frac{a_f}{a_p}\right)}.$$

Ces polarisations sont les solutions de,

$$2a_3^\star P + 4a_{33}^\star P^3 = -\frac{P - \varepsilon_0\varepsilon_p\frac{\phi_0}{a_p}}{\varepsilon_0\left(\varepsilon_\parallel + \varepsilon_p\frac{a_f}{a_p}\right)}.$$

Cette étude permet d'illustrer l'influence de l'environnement paraélectrique sur les propriétés de la nanostructure ferroélectrique. Posons ainsi $\phi_0 = 0$ ici et $\varepsilon_\parallel = 20$. Par exemple, dans le cas de couches paraélectriques de permittivité $\varepsilon_p = 200$, on a l'existence d'une polarisation constante non triviale pour $(a_f, a_p) = (3, 0.1)$ si $T < T_{c\phi}(u_m)$, avec,

$$T_{c\phi}(u_m) \approx 777.30.$$

Si $(a_f, a_p) = (3, 5)$, on a,

$$T_{c\phi}(u_m) \approx -259.98,$$

ce qui signifie qu'il n'y a aucune température $T \geq 0$ telle qu'un profil de polarisation constant non trivial existe, avec φ linéaire dans Ω_f et affine dans Ω_p^+, Ω_p^-. Par contre, pour $\varepsilon_p = 500$, avec encore $(a_f, a_p) = (3, 5)$, on a,

$$T_{c\phi}(u_m) \approx 337.39,$$

et l'on retrouve l'existence de trois polarisations constantes. Ce résultat est à rapprocher des études paramétriques réalisées aux Paragraphes 4.1.5 et 4.2.2 du Chapitre 4, dans lesquelles nous avions déjà observé que la température critique augmentait avec la permittivité du milieu paraélectrique environnant.

5.3 Formulation variationnelle et Approximations par Eléments Finis

5.3.1 Formulation variationnelle

On se donne w une fonction (assez régulière) dans Ω vérifiant $w|_{S^\pm} = \mp\phi_0$ et considère, depuis (5.1)-(5.11), le problème qui consiste à trouver $P : \overline{\Omega_f} \longrightarrow \mathbf{R}$ et $\varphi : \overline{\Omega} \longrightarrow \mathbf{R}$ tels que,

$$\begin{cases}
2a_3^\star P + 4a_{33}^\star P^3 - 2k_2\Delta P + \partial_z\varphi = -\partial_z w & \text{dans } \Omega_f, \quad (5.21)\\
-\varepsilon_0(\varepsilon_\perp\partial_{xx}^2 + \varepsilon_\perp\partial_{yy}^2 + \varepsilon_\parallel\partial_{zz}^2)\varphi + \partial_z P = \varepsilon_0(\varepsilon_\perp\partial_{xx}^2 + \varepsilon_\perp\partial_{yy}^2 + \varepsilon_\parallel\partial_{zz}^2)w & \text{dans } \Omega_f, \quad (5.22)\\
-\varepsilon_0(\varepsilon_p\partial_{xx}^2 + \varepsilon_p\partial_{yy}^2 + \varepsilon_p\partial_{zz}^2)\varphi = \varepsilon_0(\varepsilon_p\partial_{xx}^2 + \varepsilon_p\partial_{yy}^2 + \varepsilon_p\partial_{zz}^2)w & \text{dans } \Omega_p, \quad (5.23)\\
\varphi|_{\Omega_p} = \varphi|_{\Omega_f} & \text{sur } S_f, \quad (5.24)\\
\varepsilon_0(\varepsilon_\parallel\partial_z\varphi|_{\Omega_f} - \varepsilon_p\partial_z\varphi|_{\Omega_p}) - P = -\varepsilon_0(\varepsilon_\parallel\partial_z w|_{\Omega_f} - \varepsilon_p\partial_z w|_{\Omega_p}) & \text{sur } S_f, \quad (5.25)\\
\partial_x P = 0 & \text{sur } \Gamma_x^f, \quad (5.26)\\
\partial_y P = 0 & \text{sur } \Gamma_y^f, \quad (5.27)\\
\partial_z P = 0 & \text{sur } S_f, \quad (5.28)\\
\partial_x\varphi = -\partial_x w & \text{sur } \Gamma_x, \quad (5.29)\\
\partial_y\varphi = -\partial_y w & \text{sur } \Gamma_y, \quad (5.30)\\
\varphi = 0 & \text{sur } S^\pm. \quad (5.31)
\end{cases}$$

Introduisons l'espace fonctionnel,

$$W = H^1(\Omega_f) \times \{\varphi \in H^1(\Omega)\ ;\ \varphi = 0 \text{ sur } S\}.$$

Une formulation variationnelle du système (5.21)-(5.31) consiste à trouver $(P, \varphi) \in W$ tel que, pour tout $(Q, \psi) \in W$,

$$\begin{cases}
2a_3^\star \displaystyle\int_{\Omega_f} PQ d\mathrm{x} + 4a_{33}^\star \int_{\Omega_f} P^3 Q d\mathrm{x} + 2k_2 \int_{\Omega_f} \nabla P \cdot \nabla Q d\mathrm{x} + \int_{\Omega_f} (\partial_z\varphi) Q d\mathrm{x} \\
\qquad\qquad = -\displaystyle\int_{\Omega_f} (\partial_z w) Q d\mathrm{x}, \qquad (5.32)\\
\varepsilon_0 \displaystyle\int_\Omega (\varepsilon\nabla\varphi)\cdot\nabla\psi d\mathrm{x} + \int_{\Omega_f} (\partial_z P)\psi d\mathrm{x} - \int_{S_f} (\nu_z P)\psi d\sigma \\
\qquad\qquad = -\varepsilon_0 \displaystyle\int_\Omega (\varepsilon\nabla w)\cdot\nabla\psi d\mathrm{x}, \qquad (5.33)
\end{cases}$$

où $\nu = (\nu_x, \nu_y, \nu_z)^T$ désigne le vecteur unitaire de la normale extérieure à Ω_f, et,

$$\varepsilon = \begin{cases} \begin{pmatrix} \varepsilon_\perp & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_\perp & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_\parallel \end{pmatrix} & \text{dans} \quad \Omega_f, \\ \\ \begin{pmatrix} \varepsilon_p & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_p & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_p \end{pmatrix} & \text{dans} \quad \Omega_p, \end{cases}$$

est un tenseur constant dans Ω_f, puis dans Ω_p.

Proposition 5.1.

i) Supposons qu'il existe $(P, \varphi) \in H^2(\Omega_f) \times H^2(\Omega)$ *satisfaisant* (5.21)-(5.31)*, avec* $w \in H^2(\Omega)$*. Alors,* (P, φ) *vérifie le problème variationnel* (5.32)-(5.33)*.*

ii) Supposons qu'il existe $(P, \varphi) \in W \cap (H^2(\Omega_f) \times H^2(\Omega))$ *satisfaisant* (5.32)-(5.33)*, avec* $w \in H^2(\Omega)$*. Alors* (P, φ) *vérifie :*

$$\begin{cases} 2a_3^\star P + 4a_{33}^\star P^3 - 2k_2 \Delta P + \partial_z \varphi &= -\partial_z w & \textit{dans } L^2(\Omega_f), \\ -\varepsilon_0(\varepsilon_\perp \partial_{xx}^2 + \varepsilon_\perp \partial_{yy}^2 + \varepsilon_\parallel \partial_{zz}^2)\varphi + \partial_z P &= \varepsilon_0(\varepsilon_\perp \partial_{xx}^2 + \varepsilon_\perp \partial_{yy}^2 + \varepsilon_\parallel \partial_{zz}^2) w & \textit{dans } L^2(\Omega_f), \\ -\varepsilon_0(\varepsilon_p \partial_{xx}^2 + \varepsilon_p \partial_{yy}^2 + \varepsilon_p \partial_{zz}^2)\varphi &= \varepsilon_0(\varepsilon_p \partial_{xx}^2 + \varepsilon_p \partial_{yy}^2 + \varepsilon_p \partial_{zz}^2) w & \textit{dans } L^2(\Omega_p), \\ \partial_x P &= 0 & \textit{dans } L^2(\Gamma_x^f), \\ \partial_y P &= 0 & \textit{dans } L^2(\Gamma_y^f), \\ \partial_z P &= 0 & \textit{dans } L^2(S_f). \end{cases}$$

Preuve. *i)* Soient $(P, \varphi) \in H^2(\Omega_f) \times H^2(\Omega)$ vérifiant (5.21)-(5.31) et $(Q, \psi) \in W$. L'intégration de (5.21) sur Ω_f contre la fonction-test Q fournit, après application de la formule de Green,

$$\begin{aligned} &2a_3^\star \int_{\Omega_f} PQ d\mathrm{x} + 4a_{33}^\star \int_{\Omega_f} P^3 Q d\mathrm{x} + 2k_2 \int_{\Omega_f} \nabla P \cdot \nabla Q d\mathrm{x} - 2k_2 \int_{\partial\Omega_f} (\nu \cdot \nabla P) Q d\sigma \\ &+ \int_{\Omega_f} (\partial_z \varphi) Q d\mathrm{x} = -\int_{\Omega_f} (\partial_z w) Q d\mathrm{x}, \end{aligned}$$

où $\partial\Omega_f$ est la frontière de Ω_f. Cette relation se simplifie avec les conditions (5.26)-(5.28) comme suit,

$$\begin{aligned} &2a_3^\star \int_{\Omega_f} PQ d\mathrm{x} + 4a_{33}^\star \int_{\Omega_f} P^3 Q d\mathrm{x} + 2k_2 \int_{\Omega_f} \nabla P \cdot \nabla Q d\mathrm{x} \\ &+ \int_{\Omega_f} (\partial_z \varphi) Q d\mathrm{x} = -\int_{\Omega_f} (\partial_z w) Q d\mathrm{x}. \end{aligned}$$

L'intégration de (5.22) donne, en utilisant la formule de Green,

$$\begin{aligned} &\int_{\Omega_f} (\partial_z P) \psi d\mathrm{x} + \varepsilon_0 \int_{\Omega_f} (\varepsilon \nabla \varphi) \cdot \nabla \psi d\mathrm{x} - \varepsilon_0 \int_{\partial\Omega_f} (\nu \cdot (\varepsilon \nabla \varphi)) \psi d\sigma \\ &= -\varepsilon_0 \int_{\Omega_f} (\varepsilon \nabla w) \cdot \nabla \psi d\mathrm{x} + \varepsilon_0 \int_{\partial\Omega_f} (\nu \cdot (\varepsilon \nabla w)) \psi d\sigma. \end{aligned} \tag{5.34}$$

De même, en notant $\mathbf{n} = (\mathbf{n}_x, \mathbf{n}_y, \mathbf{n}_z)^T$ le vecteur unitaire de la normale extérieure à Ω, on obtient, à partir de (5.23),

$$\begin{aligned} &\varepsilon_0 \int_{\Omega_p} (\varepsilon \nabla \varphi) \cdot \nabla \psi d\mathrm{x} - \varepsilon_0 \int_{\overline{\Omega_p} \cap \partial\Omega} \mathbf{n} \cdot (\varepsilon \nabla \varphi) \psi d\sigma + \varepsilon_0 \int_{\overline{\Omega_p} \cap S_f} \nu \cdot (\varepsilon \nabla \varphi) \psi d\sigma \\ &= -\varepsilon_0 \int_{\Omega_p} (\varepsilon \nabla w) \cdot \nabla \psi d\mathrm{x} + \varepsilon_0 \int_{\overline{\Omega_p} \cap \partial\Omega} \mathbf{n} \cdot (\varepsilon \nabla w) \psi d\sigma - \varepsilon_0 \int_{\overline{\Omega_p} \cap S_f} \nu \cdot (\varepsilon \nabla w) \psi d\sigma, \end{aligned} \tag{5.35}$$

où la même notation de mesure superficielle « $d\sigma$ » est utilisée sur S_f et $\partial\Omega$. L'addition de (5.34) à (5.35) donne,

$$\begin{aligned}
&\int_{\Omega_f}(\partial_z P)\psi d\mathrm{x} + \varepsilon_0\int_{\Omega}(\varepsilon\nabla\varphi)\cdot\nabla\psi d\mathrm{x} - \varepsilon_0\int_{S_f}\nu_z(\varepsilon_\parallel\partial_z\varphi|_{\Omega_f} - \varepsilon_p\partial_z\varphi|_{\Omega_p})\psi d\sigma\\
&-\int_{\Gamma_x^f}\varepsilon_0\mathbf{n}_x(\varepsilon_\perp\partial_x\varphi)\psi d\sigma - \int_{\Gamma_y^f}\varepsilon_0\mathbf{n}_y(\varepsilon_\perp\partial_y\varphi)\psi d\sigma\\
&-\int_{\overline{\Omega_p}\cap\Gamma_x}\varepsilon_0\mathbf{n}_x(\varepsilon_p\partial_x\varphi)\psi d\sigma - \int_{\overline{\Omega_p}\cap\Gamma_y}\varepsilon_0\mathbf{n}_y(\varepsilon_p\partial_y\varphi)\psi d\sigma - \int_{S}\varepsilon_0\mathbf{n}_z(\varepsilon_p\partial_z\varphi)\psi d\sigma\\
&= -\varepsilon_0\int_{\Omega}(\varepsilon\nabla w)\cdot\nabla\psi d\mathrm{x} + \varepsilon_0\int_{S_f}\nu_z(\varepsilon_\parallel\partial_z w|_{\Omega_f} - \varepsilon_p\partial_z w|_{\Omega_p})\psi d\sigma\\
&+\int_{\Gamma_x^f}\varepsilon_0\mathbf{n}_x(\varepsilon_\perp\partial_x w)\psi d\sigma + \int_{\Gamma_y^f}\varepsilon_0\mathbf{n}_y(\varepsilon_\perp\partial_y w)\psi d\sigma\\
&+\int_{\overline{\Omega_p}\cap\Gamma_x}\varepsilon_0\mathbf{n}_x(\varepsilon_p\partial_x w)\psi d\sigma + \int_{\overline{\Omega_p}\cap\Gamma_y}\varepsilon_0\mathbf{n}_y(\varepsilon_p\partial_y w)\psi d\sigma + \int_{S}\varepsilon_0\mathbf{n}_z(\varepsilon_p\partial_z w)\psi d\sigma,
\end{aligned}$$

ce qui se simplifie, avec les conditions (5.25),(5.29)-(5.30), et puisque ψ s'annule sur S, en,

$$\varepsilon_0\int_{\Omega}(\varepsilon\nabla\varphi)\cdot\nabla\psi d\mathrm{x} + \int_{\Omega_f}(\partial_z P)\psi d\mathrm{x} - \int_{S_f}(\nu_z P)\psi d\sigma = -\varepsilon_0\int_{\Omega}(\varepsilon\nabla w)\cdot\nabla\psi d\mathrm{x}.$$

ii) Soient $(P,\varphi)\in W\cap(H^2(\Omega_f)\times H^2(\Omega))$ vérifiant (5.32)-(5.33), avec $w\in H^2(\Omega)$. On tire de (5.32), en choisissant $Q\in\mathcal{D}(\Omega_f)$,

$$\int_{\Omega_f}\left(2a_3^\star P + 4a_{33}^\star P^3 - 2k_2\Delta P + \partial_z\varphi\right)Q d\mathrm{x} = -\int_{\Omega_f}(\partial_z w)Q d\mathrm{x},$$

et donc,

$$2a_3^\star P + 4a_{33}^\star P^3 - 2k_2\Delta P + \partial_z\varphi = -\partial_z w \quad \text{dans} \quad \mathcal{D}'(\Omega_f).$$

Il suit qu'on a,

$$2a_3^\star P + 4a_{33}^\star P^3 - 2k_2\Delta P + \partial_z\varphi = -\partial_z w \quad \text{dans} \quad L^2(\Omega_f).$$

Ensuite, pour $\psi\in\mathcal{D}(\Omega_f)$, (5.33) devient,

$$\int_{\Omega_f}\left(-\varepsilon_0(\varepsilon_\perp\partial_{xx}^2 + \varepsilon_\perp\partial_{yy}^2 + \varepsilon_\parallel\partial_{zz}^2)\varphi + \partial_z P\right)\psi d\mathrm{x} = \int_{\Omega_f}\left(\varepsilon_0(\varepsilon_\perp\partial_{xx}^2 + \varepsilon_\perp\partial_{yy}^2 + \varepsilon_\parallel\partial_{zz}^2)w\right)\psi d\mathrm{x},$$

d'où,

$$-\varepsilon_0(\varepsilon_\perp\partial_{xx}^2 + \varepsilon_\perp\partial_{yy}^2 + \varepsilon_\parallel\partial_{zz}^2)\varphi + \partial_z P = \varepsilon_0(\varepsilon_\perp\partial_{xx}^2 + \varepsilon_\perp\partial_{yy}^2 + \varepsilon_\parallel\partial_{zz}^2)w \quad \text{dans} \quad \mathcal{D}'(\Omega_f),$$

puis,

$$-\varepsilon_0(\varepsilon_\perp\partial_{xx}^2 + \varepsilon_\perp\partial_{yy}^2 + \varepsilon_\parallel\partial_{zz}^2)\varphi + \partial_z P = \varepsilon_0(\varepsilon_\perp\partial_{xx}^2 + \varepsilon_\perp\partial_{yy}^2 + \varepsilon_\parallel\partial_{zz}^2)w \quad \text{dans} \quad L^2(\Omega_f).$$

De même, en choisissant $\psi\in\mathcal{D}(\Omega_p)$ dans (5.33), on obtient,

$$-\varepsilon_0(\varepsilon_p\partial_{xx}^2 + \varepsilon_p\partial_{yy}^2 + \varepsilon_p\partial_{zz}^2)\varphi = \varepsilon_0(\varepsilon_p\partial_{xx}^2 + \varepsilon_p\partial_{yy}^2 + \varepsilon_p\partial_{zz}^2)w \quad \text{dans} \quad L^2(\Omega_p).$$

D'autre part, on a avec la formule de Green appliquée à (5.32) pour $Q\in H^1(\Omega_f)$,

$$\begin{aligned}
&\int_{\Omega_f}\left(2a_3^\star P + 4a_{33}^\star P^3 - 2k_2\Delta P + \partial_z\varphi\right)Q d\mathrm{x} + \int_{\partial\Omega_f}2k_2(\nu\cdot\nabla P)Q d\sigma\\
&= -\int_{\Omega_f}(\partial_z w)Q d\mathrm{x},
\end{aligned}$$

ce qui se simplifie avec ce qui précède en,

$$\int_{\partial\Omega_f} 2k_2(\nu\cdot\nabla P)Qd\sigma = 0,$$

d'où, puisque $\partial\Omega_f$ est C^1 par morceaux et donc l'espace des traces sur $\partial\Omega_f$ des éléments de $H^1(\Omega_f)$ est dense dans $L^2(\partial\Omega_f)$,

$$2k_2(\nu\cdot\nabla P) = 0 \quad \text{dans} \quad L^2(\partial\Omega_f),$$

puis, comme $\nu|_{\Gamma_x^f} = (\pm 1, 0, 0)^T$, $\nu|_{\Gamma_y^f} = (0, \pm 1, 0)^T$ et $\nu|_{S_f} = (0, 0, \pm 1)^T$, on en déduit,

$$\left\{\begin{array}{lcll} \partial_x P & = & 0 & \text{dans } L^2(\Gamma_x^f), \\ \partial_y P & = & 0 & \text{dans } L^2(\Gamma_y^f), \\ \partial_z P & = & 0 & \text{dans } L^2(S_f). \end{array}\right.$$

□

Notons par ailleurs que si (P, φ) vérifie le problème variationnel (5.32)-(5.33), avec les hypothèses de la Proposition 5.1, alors, pour $\psi \in H_0^1(\Omega)$, on obtient, avec la formule de Green dans (5.33),

$$\begin{aligned} &\int_{\Omega_f} (\partial_z P)\psi d\mathrm{x} - \varepsilon_0 \int_{\Omega_f} \nabla\cdot(\varepsilon\nabla\varphi)\psi d\mathrm{x} - \varepsilon_0 \int_{\Omega_p} \nabla\cdot(\varepsilon\nabla\varphi)\psi d\mathrm{x} \\ &+ \int_{S_f} \nu_z\varepsilon_0(\varepsilon_\parallel \partial_z\varphi|_{\Omega_f} - \varepsilon_p\partial_z\varphi|_{\Omega_p})\psi d\sigma - \int_{S_f} (\nu_z P)\psi d\sigma \\ &= \varepsilon_0 \int_{\Omega_f} \nabla\cdot(\varepsilon\nabla w)\psi d\mathrm{x} + \varepsilon_0 \int_{\Omega_p} \nabla\cdot(\varepsilon\nabla w)\psi d\mathrm{x} \\ &- \int_{S_f} \nu_z\varepsilon_0(\varepsilon_\parallel \partial_z w|_{\Omega_f} - \varepsilon_p\partial_z w|_{\Omega_p})\psi d\sigma, \end{aligned}$$

ce qui se simplifie en,

$$\int_{S_f} \left(\nu_z\varepsilon_0(\varepsilon_\parallel \partial_z\varphi|_{\Omega_f} - \varepsilon_p\partial_z\varphi|_{\Omega_p}) - \nu_z P\right)\psi d\sigma = -\int_{S_f} \nu_z\varepsilon_0(\varepsilon_\parallel \partial_z w|_{\Omega_f} - \varepsilon_p\partial_z w|_{\Omega_p})\psi d\sigma.$$

On déduit ainsi que la relation (5.25) est, de manière variationnelle, vérifiée.

Remarque 5.2.
La détermination analytique d'états de polarisation uniformes effectuée au Paragraphe 5.2 permet de noter que la formulation variationnelle (5.32)-(5.33) *possède au moins une solution. Les mêmes développements au Paragraphe 5.2 indiquent cependant qu'il n'y a pas unicité de solutions pour toute considération des données.*

5.3.2 Approximations par Eléments Finis

Considérons un maillage tétraédrique conforme de $\overline{\Omega}$, de pas h, et notons $\mathcal{T}_h$ la collection de tétraèdres qui lui est associée. Ce maillage est construit de sorte que la collection $\mathcal{T}_{h_f}^f$,

$$\mathcal{T}_{h_f}^f = \{T \in \mathcal{T}_h \ ; \ T \subset \overline{\Omega_f}\},$$

corresponde à un maillage conforme de $\overline{\Omega_f}$, de pas h_f. La région S_f est composée de faces qui appartiennent chacune à la fois à un tétraèdre de $\overline{\Omega_f}$ et à un tétraèdre de $\overline{\Omega_p}$. Pour

chaque $T \in \mathcal{T}_h$, nous considérons l'élément fini de Lagrange représenté par $(T, P_{1,T}, \Sigma_{1,T})$, où $P_{1,T}$ et $\Sigma_{1,T}$ sont respectivement l'espace des polynômes de degré inférieur ou égal à 1 définis sur T et le treillis principal d'ordre 1 de T, puis nous introduisons l'espace discret,

$$W_h = \left\{(P_h, \varphi_h) \in C^0(\overline{\Omega_f}) \times C^0(\overline{\Omega})\ ;\ P_h|_T \in P_{1,T}\ \ \forall T \in \mathcal{T}_{h_f}^f,\ \ \varphi_h|_T \in P_{1,T}\ \ \forall T \in \mathcal{T}_h,\ \varphi_h|_S = 0\right\}.$$

Une formulation discrète associée à la formulation variationnelle continue (5.32)-(5.33) consiste à trouver $(P_h, \varphi_h) \in W_h$ tel que, pour tout $(Q_h, \psi_h) \in W_h$,

$$\left\{\begin{aligned} 2a_3^\star \int_{\Omega_f} P_h Q_h \mathrm{dx} + 4a_{33}^\star \int_{\Omega_f} P_h^3 Q_h \mathrm{dx} + 2k_2 \int_{\Omega_f} \nabla P_h \cdot \nabla Q_h \mathrm{dx} + \int_{\Omega_f} (\partial_z \varphi_h) Q_h \mathrm{dx} \\ = -\int_{\Omega_f} (\partial_z w) Q_h \mathrm{dx}, \\ \varepsilon_0 \int_{\Omega} (\varepsilon \nabla \varphi_h) \cdot \nabla \psi_h \mathrm{dx} + \int_{\Omega_f} (\partial_z P_h) \psi_h \mathrm{dx} - \int_{S_f} (\nu_z P_h) \psi_h d\sigma \\ = -\varepsilon_0 \int_{\Omega} (\varepsilon \nabla w) \cdot \nabla \psi_h \mathrm{dx}. \end{aligned}\right. \tag{5.36}$$

Considérons l'ensemble $\{\mathrm{x}_j,\ 1 \leq j \leq N\}$ des sommets de $\mathcal{T}_h$ ordonnés de sorte que $\mathrm{x}_1, ..., \mathrm{x}_{N_f} \in \overline{\Omega_f}$ et également $\mathrm{x}_1, ..., \mathrm{x}_{N^{00}} \in \Omega \cup \Gamma_x \cup \Gamma_y$, où N_f, N^{00} et N désignent respectivement le nombre de nœuds dans $\overline{\Omega_f}$, dans $\Omega \cup \Gamma_x \cup \Gamma_y$ et dans $\overline{\Omega}$. En notant v_j la fonction de forme associée à x_j, pour $j \in [\![1, N]\!]$, on a les décompositions suivantes, pour $(P_h, \varphi_h) \in W_h$,

$$P_h = \sum_{j=1}^{N_f} P_j v_j \quad \text{et} \quad \varphi_h = \sum_{j=1}^{N^{00}} \varphi_j v_j,$$

où $P_j \in \mathbf{R}$ pour tout $j \in [\![1, N_f]\!]$ et $\varphi_j \in \mathbf{R}$ pour tout $j \in [\![1, N^{00}]\!]$. Le problème (5.36) se récrit alors sous la forme d'un système matriciel non-linéaire ayant deux inconnues vectorielles ; il consiste à trouver $\mathcal{P} = (P_1, ..., P_{N_f})^T \in \mathbf{R}^{N_f}$ et $\Phi = (\varphi_1, ..., \varphi_{N^{00}})^T \in \mathbf{R}^{N^{00}}$ tels que :

$$\left\{\begin{aligned} A\mathcal{P} + N(\mathcal{P}) + B\Phi &= F_1, \\ C\mathcal{P} + D\Phi &= F_2, \end{aligned}\right.$$

où A est la somme d'une matrice de masse et d'une matrice de rigidité relatives à Ω_f, D est une matrice de rigidité relative à Ω, tandis que B et C traduisent les termes d'interaction,

$$\begin{aligned} A &= \left(2a_3^\star \int_{\Omega_f} v_i v_j \mathrm{dx} + 2k_2 \int_{\Omega_f} \nabla v_i \cdot \nabla v_j \mathrm{dx}\right)_{(i,j) \in [\![1, N_f]\!]^2}, \\ B &= \left(\int_{\Omega_f} v_i (\partial_z v_j) \mathrm{dx}\right)_{(i,j) \in [\![1, N_f]\!] \times [\![1, N^{00}]\!]}, \\ C &= \left(\int_{\Omega_f} v_i (\partial_z v_j) \mathrm{dx} - \int_{S_f} \nu_z v_i v_j d\sigma\right)_{(i,j) \in [\![1, N^{00}]\!] \times [\![1, N_f]\!]}, \\ D &= \left(\varepsilon_0 \int_{\Omega} \nabla v_i \cdot (\varepsilon \nabla v_j) \mathrm{dx}\right)_{(i,j) \in [\![1, N^{00}]\!]^2}. \end{aligned}$$

La partie non-linéaire de (GLE-N) est exprimée à travers $N(\mathcal{P})$, tandis que le second

membre est traduit par F_1 et F_2,

$$N(\mathcal{P}) = \left(4a_{33}^{\star} \int_{\Omega_f} \left(\sum_{j=1}^{N_f} P_j v_j \right)^3 v_i \mathrm{d}x \right)_{i \in [\![1,N_f]\!]},$$

$$F_1 = \left(-\int_{\Omega_f} (\partial_z w) v_i \mathrm{d}x \right)_{i \in [\![1,N_f]\!]} \quad \text{et} \quad F_2 = \left(-\varepsilon_0 \int_{\Omega} (\varepsilon \nabla w) \cdot \nabla v_i \mathrm{d}x \right)_{i \in [\![1,N^{00}]\!]}.$$

Les coefficients des matrices présentées ci-dessus sont calculés à l'aide de la formule de quadrature d'ordre 5 évoquée en (3.4) au Chapitre 3. Celle-ci est exacte pour le calcul des intégrales qui y apparaissent, où par ailleurs le choix ci-dessous est fait pour w,

$$w(x,y,z) = -\frac{z}{d_z}\phi_0 \quad \forall (x,y,z) \in \Omega.$$

La jacobienne de G,

$$G : (\mathcal{P}, \Phi)^T \in \mathbf{R}^{N_f+N^{00}} \longmapsto \begin{pmatrix} A\mathcal{P} + N(\mathcal{P}) + B\Phi - F_1 \\ C\mathcal{P} + D\Phi - F_2 \end{pmatrix} \in \mathbf{R}^{N_f+N^{00}},$$

pouvant être calculée explicitement sans complication particulière, le système matriciel non-linéaire précédent peut être résolu à l'aide de l'Algorithme 3.4, présenté au Paragraphe 3.2.2 du Chapitre 3.

5.4 Etude numérique

5.4.1 Caractérisation de la largeur des nanocouches

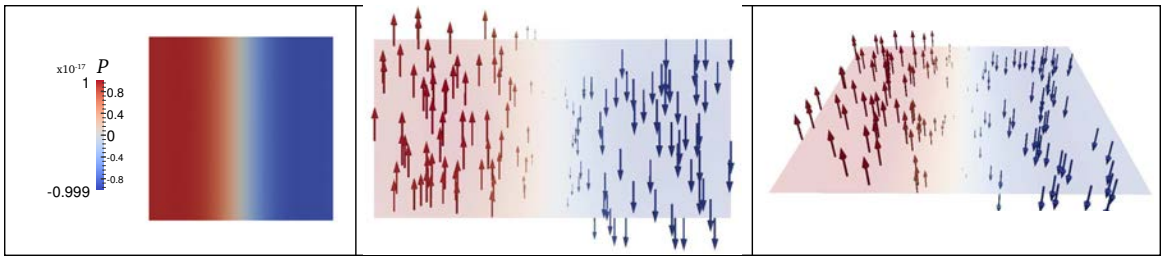
Comme évoqué au Paragraphe 5.1, relativement au système (GLE-N), nous sommes particulièrement concernés par des considérations de valeurs des paramètres géométriques d_x et d_y, ainsi que d'états, rendant minimale l'énergie libre (*cf.* aussi Paragraphe 1.2.1). En effet, une façon convenable de tronquer les couches (infinies dans les directions (Ox) et (Oy)) consiste, pour un état donné, à choisir d_x et d_y minimisant l'énergie libre. Pour chaque solution (P, φ) de (5.32)-(5.33), on pose,

$$\mathcal{F}(P,\varphi) = -\frac{c}{(2d_x)(2d_y)(2a_f)} \int_{\Omega_f} P^4 \mathrm{d}x,$$

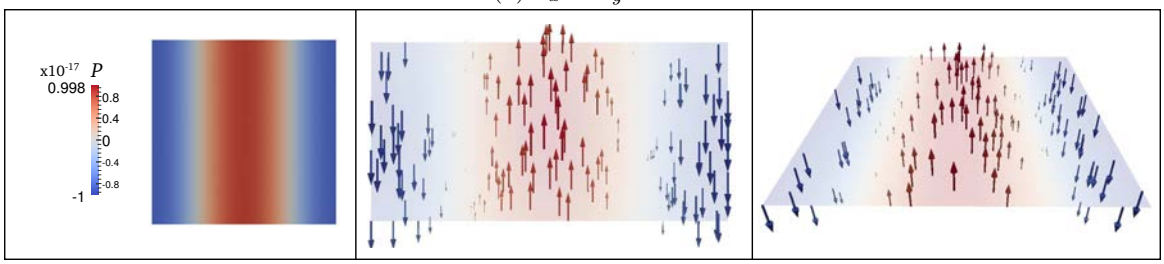
où $c > 0$ est une constante qui dépend de $a_{33}^{\star}$. Dans les simulations numériques, nous serons donc concernés par des évaluations de l'énergie $\mathcal{F}$, obtenues en faisant varier d_x et d_y.

Dans tout ce paragraphe, nous fixons $a_f = 3$, $\varepsilon_p = 200$, $\varepsilon_\perp = 100$, $\varepsilon_\parallel = 20$, et considérons en premier lieu $a_p = 3$. Pour chacune des expériences que nous mènerons, on considère $d_x \in \{2, 2.5, ..., 11\}$ et $d_y = d_x$, et nous générons les maillages correspondants, en prenant soin d'avoir des pas dans $\overline{\Omega_f}$ et $\overline{\Omega}$ qui restent inchangés et valent respectivement $h_f \approx 0.27$ et $h \approx 0.35$ (voir par exemple la Table 5.2, maillage 1, pour le cas $d_x = d_y = 3.5$). Ainsi, 19 maillages ont été générés. Enfin on impose $T = 0$ ainsi que $\phi_0 = 0$.

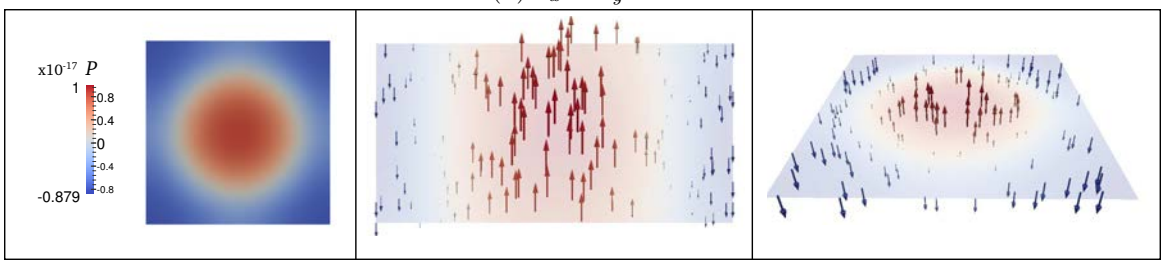
Notons que pour chaque simulation, nous avons obtenu des résultats similaires pour des maillages de pas $h_f \approx 0.22$, $h \approx 0.30$, ainsi que pour des maillages de pas $h_f \approx 0.14$, $h \approx 0.20$. Quelques caractéristiques des maillages lorsque $d_x = d_y = 3.5$ sont données sur la Table 5.2 (voir maillage 2 et maillage 3) ; le temps CPU correspondant à 1 simulation pour



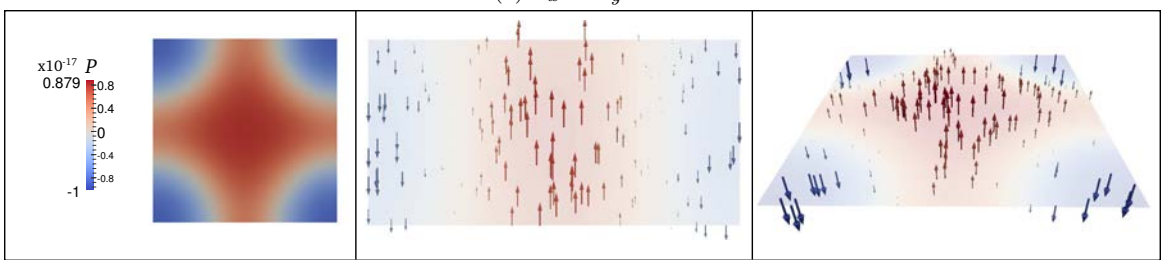
(a) $d_x = d_y = 2$



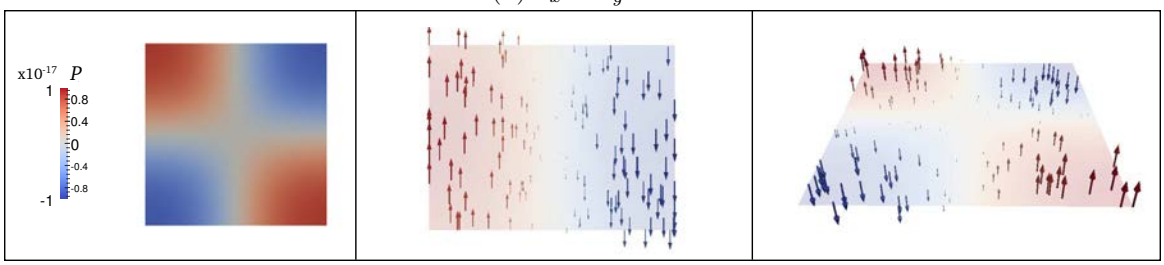
(b) $d_x = d_y = 4$



(c) $d_x = d_y = 6$

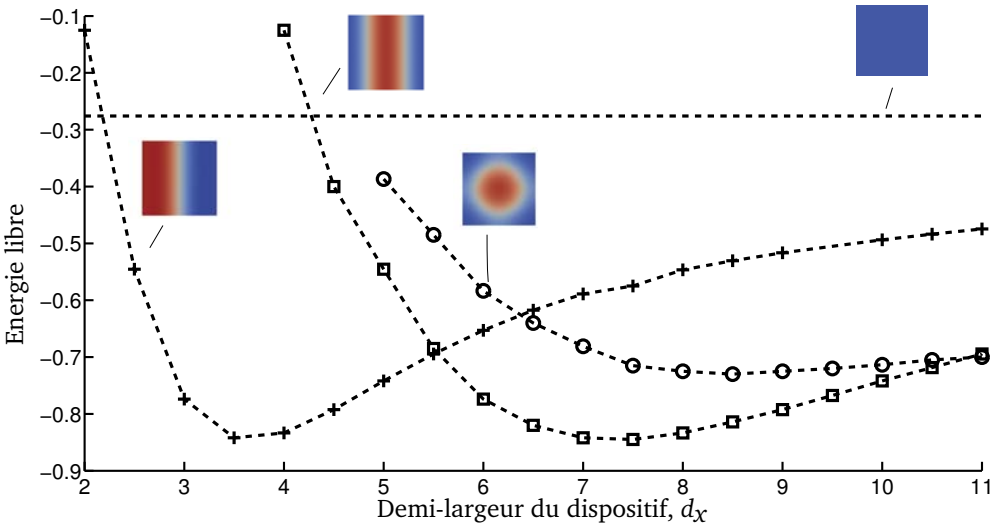


(d) $d_x = d_y = 6$

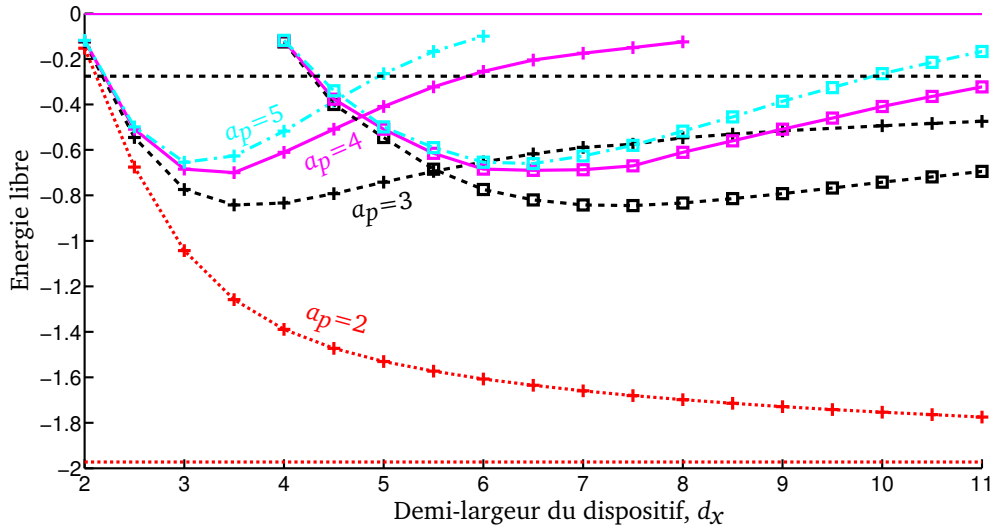


(e) $d_x = d_y = 4$

FIGURE 5.2 – Profils de polarisation avec $a_f = a_p = 3$: à gauche, champ scalaire P, coupe en $(z = 0)$; au milieu, champ vectoriel de polarisation $\mathbf{P}$, coupe en $(y = 0)$ pour (a)-(c) et $(y = 3)$ pour (d)-(e) ; à droite, champ vectoriel de polarisation $\mathbf{P}$, coupe en $(z = 0)$.

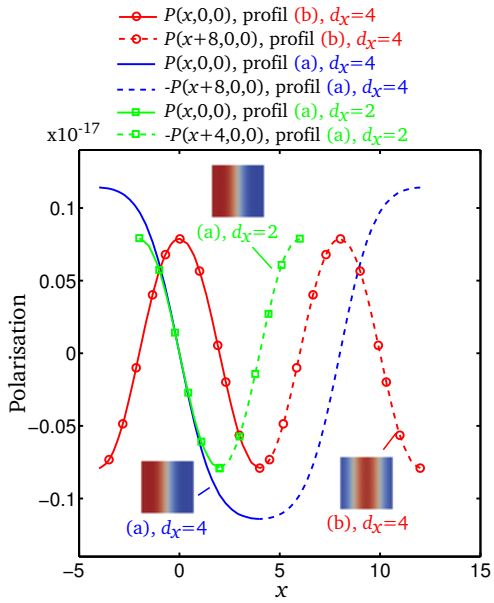


(a)

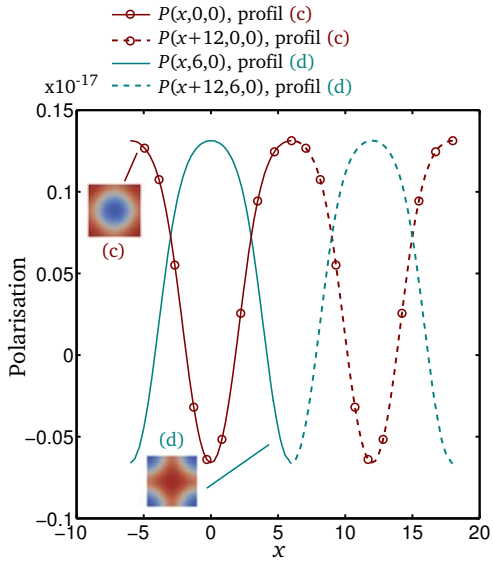


(b)

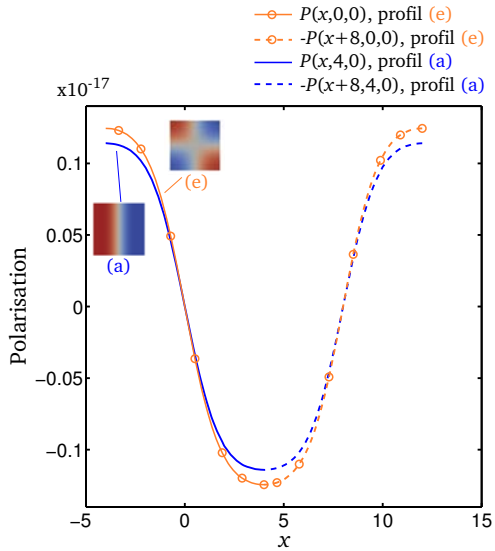
FIGURE 5.3 – Energie libre en fonction de $d_x = d_y$, pour $a_p = 3$ (a) et pour plusieurs valeurs $a_p \in \{2, 3, 4, 5\}$ (b) ; la courbe sans marque représente l'énergie de l'état uniforme, celle avec des croix « + » l'état (P2B), avec des carrés « □ » l'état (P3B), avec des cercles « ∘ » l'état (PC) ; le style des courbes correspond à une valeur de a_p : $a_p = 5$ est représenté par $(- \cdot -)$, $a_p = 4$ par (—), $a_p = 3$ par (- - -) et $a_p = 2$ par $(\cdots)$.



(a) $d_x = d_y = 2, 4$



(b) $d_x = d_y = 6$



(c) $d_x = d_y = 4$

FIGURE 5.4 – Représentation du champ scalaire de polarisation P pour $a_p = a_f = 3$.

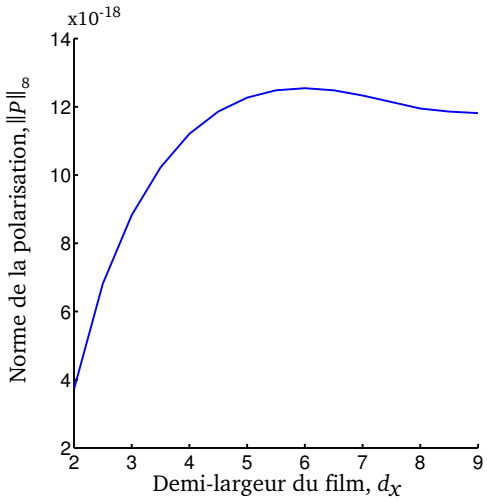


FIGURE 5.5 – Evolution de la norme infinie de la polarisation associée à l'état (P2B) en fonction de d_x.

	Maillage 1	*Maillage 2*	*Maillage 3*
Pas dans $\overline{\Omega_f}$ *(*h_f*)*	0.27	0.22	0.14
Pas dans $\overline{\Omega}$ *(*h*)*	0.35	0.30	0.20
Nœuds dans $\overline{\Omega_f}$ *(*N_f*)*	120 207	227 029	700 591
Nœuds dans $\overline{\Omega}$ *(*N*)*	350 532	670 305	2 220 129
Taille du système ($N_f + N^{00}$*)*	466 643	890 844	2 823 476

TABLE 5.2 – Quelques caractéristiques des maillages considérés, pour $d_x = d_y = 3.5$.

le maillage 1, ou le maillage 2, ou encore le maillage 3, est de 20mn, ou 1h40, ou encore 9h respectivement.

Pour chaque valeur de d_x, des démarrages aléatoires et déterministes ont été pris en compte pour initialiser notre méthode numérique itérative et plusieurs états ont été obtenus. On retrouve des états métastables, (P2B) et (P3B), constitués de 2 et 3 bandes respectivement (*cf.* Figure 5.2(a)-(b)), ainsi que l'état (PC), dont l'un des deux domaines est cylindrique (*cf.* Figure 5.2(c)) et un autre (P4D) où les quatre domaines sont agencés en « damier » (*cf.* Figure 5.2(e)).

L'énergie libre pour les états (P2B), (P3B) et (PC) en fonction de d_x est représentée sur la Figure 5.3(a). L'énergie minimale est atteinte avec l'état (P2B) en $d_x = d_x^\star = 3.5$. Notons que (P3B) minimise également $\mathcal{F}$, en $d_x = 2d_x^\star$. Plus précisément, les énergies $\mathcal{F}_{P2B}(d_x)$ de (P2B) et $\mathcal{F}_{P3B}(d_x)$ de (P3B), correspondant à une demi-largeur d_x, sont associées par la relation,

$$\mathcal{F}_{P3B}(2d_x) \simeq \mathcal{F}_{P2B}(d_x),$$

ce qui suggère que ces états sont reliés périodiquement. Les représentations pour chaque état de $x \in [-d_x, d_x] \longmapsto P(x, 0, 0) \in \mathbf{R}$, avec $d_x \in \{2, 4\}$ étayent cette hypothèse (*cf.* Figure 5.4(a)), puisque les répétitions antipériodique et périodique des courbes associées à (P2B) avec $d_x = 2$ et (P3B) avec $d_x = 4$ sont les mêmes, au déphasage $\delta \simeq 2$ près. Cette relation traduit le fait que ce sont les mêmes domaines qui apparaissent pour chacun des états : la texture de polarisation de (P3B) n'est autre que la juxtaposition de deux profils de polarisation associés à (P2B) (qui sont translatés d'un vecteur $(\pm\delta, 0, 0)^T$ par rapport au profil centré en $(0, 0, 0)^T$). Ce sont donc les mêmes états. On lit également sur la Figure 5.4(a) que la demi-largeur d_x influe sur la polarisation. L'évolution de la polarisation à travers les murs de domaines reste identique, mais la valeur absolue maximale de P augmente avec d_x (*cf.* Figure 5.5) jusque $d_x = 5.5$, puis diminue.

On observe par ailleurs sur la Figure 5.3(a) que l'énergie minimale de (PC) est atteinte en $d_x = 8.5$. Notons que celle associée à l'état représenté sur la Figure 5.2(d) en est très proche. La Figure 5.4(b) représente graphiquement la fonction $x \in [-d_x, d_x] \longmapsto P(x, y, 0) \in \mathbf{R}$ pour quelques valeurs de y ; on retrouve des courbes très similaires, à un déphasage $\delta \simeq 6$ près. Ainsi (PC) et l'état représenté sur la Figure 5.2(d) sont les mêmes, dans le sens où leur répétition périodique suivant les directions (Ox) et (Oy) aboutit au même profil.

Le cas représenté sur la Figure 5.2(e) est plus difficile à analyser, n'ayant pas réussi à obtenir cet état pour toutes les valeurs de d_x considérées dans cette étude. Cependant son énergie est beaucoup plus importante que les autres présentées ici, et n'apparaît donc pas comme minimale. Ses profils de polarisation étant toutefois très similaires à ceux de (P2B), inspectons s'il existe un lien entre les deux états. Les représentations de $x \in [-d_x, d_x] \longmapsto P(x, y, 0)$ pour quelques valeurs de y, relativement à ces deux états, ont une allure proche (*cf.* Figure 5.4(c)). Ceci pourrait laisser croire que ce sont les mêmes états. Cependant, les profils agencés en damier possèdent des murs de domaines dirigés suivant deux axes distincts (Ox) et (Oy), ce qui marque une différence importante avec les profils de l'état (P2B) et explique la différence importante entre les énergies. Notons pour finir que le fait contre-intuitif qu'un état ayant plus de domaines ait une énergie plus importante (alors que l'apparition des domaines intervient justement pour abaisser l'énergie du système) s'explique ici par le volume considérable occupé par les parois de domaines, qui augmente l'énergie du système (ce qui est dû au changement de polarisation à travers les parois, voir *e.g.* [58]).

De façon générale, pour les profils « en bandes », les fonctions $x \longmapsto P(x, y, 0)$ conservent la même similarité pour différentes considérations de $y \in [-d_y, d_y]$, ce qui traduit une uniformité des domaines dans la direction (Oy). Au contraire, les fonctions $g_z : x \longmapsto P(x, 0, z)$

sont distinctes pour différents choix de $z \in [-d_z, d_z]$, et $\|g_z\|_\infty$ diminue lorsque $|z|$ augmente, ce qui traduit le fait que la polarisation est moins importante près des interfaces ferroélectrique/paraélectrique. Par exemple, pour l'état (P2B) lorsque $d_x = 2$, on a $\|g_0\|_\infty \approx 8.10^{-19}$ tandis que $\|g_3\|_\infty \approx 6.10^{-19}$. Notons enfin qu'on a, pour $z \in [-a_f, a_f]$, $g_{-z} = g_z$, ce qui établit une symétrie par rapport au plan $(z = 0)$.

La même étude a été réalisée dans des environnements paraélectriques de tailles différentes (*cf.* Figure 5.3(b)). Pour $a_p = 2$, l'état uniforme est minimisant. Dans ce cas, la valeur optimale de d_x associée à l'état (P2B) ne semble pas être atteignable, puisque son énergie décroît asymptotiquement vers l'énergie de l'état uniforme sans la rejoindre. Pour les autres valeurs $a_p \in \{3, 4, 5\}$ considérées, c'est l'état (P2B) qui est d'énergie minimale. Cette énergie est atteinte en une valeur de d_x qui diminue lorsque a_p augmente.

5.4.2 Caractérisation de la permittivité effective et simulations numériques

Très récemment, des expérimentations physiques et des simulations ont été menées dans le contexte des couches PTO/STO par P. Zubko, J.C. Wojdel *et al.* dans [72], pour établir que la permittivité effective peut être de signe négatif. Basée sur le calcul *ab initio*, l'approche numérique des simulations dans [72] est connue comme étant en général particulièrement coûteuse en temps CPU. En effet, sur le plan du temps de calcul, une telle approche perd d'intérêt face à une méthode numérique qui serait dédiée à un modèle basé sur les Equations aux Dérivées Partielles pour mener la même investigation numérique. Bien que ne traduisant pas un tel modèle, où Ω_f représente la couche PTO, et toutes les composantes du champ vectoriel de polarisation sont en interaction non-linéaire avec celles du champ électrique, nous mènerons ici l'investigation numérique portant sur la permittivité effective à partir du système (GLE-N) avec l'association de Ω_f à une couche PTO. Ceci, dans l'espoir de disposer, à court terme, d'une approche numérique efficace qui serait en mesure d'être reproduite dans le cas de la généralisation du modèle (GLE-N) prenant en compte une interaction non-linéaire de toutes les composantes du champ vectoriel de polarisation avec celles du champ électrique.

Commençons par préciser la notion de *permittivité effective*, à partir d'un « champ électrique moyen » $\overline{E}(\phi_0)$ et d'un « champ d'induction moyen » $\overline{D}(\phi_0)$.

Définition 5.3.
La permittivité effective entre deux potentiels appliqués $\phi_0^{(1)}$ et $\phi_0^{(2)}$ est définie par ε_{eff},

$$\varepsilon_{eff} = \left(\left(\frac{1}{\overline{\varepsilon}} - \frac{\alpha_p}{\varepsilon_p} \right) \frac{1}{\alpha_f} \right)^{-1},$$

où,

$$\overline{\varepsilon} = \frac{1}{\varepsilon_0} \frac{\overline{D}(\phi_0^{(2)}) - \overline{D}(\phi_0^{(1)})}{\overline{E}(\phi_0^{(2)}) - \overline{E}(\phi_0^{(1)})}, \quad \alpha_f = \frac{a_f}{a_f + a_p} \quad \textit{et} \quad \alpha_p = \frac{a_p}{a_f + a_p},$$

avec, pour $i \in \{1, 2\}$,

$$\overline{E}(\phi_0^{(i)}) = \frac{1}{8 d_x d_y d_z} \int_\Omega \mathbf{E}_z^{(i)} d\mathrm{x}, \tag{5.37}$$

$$\overline{D}(\phi_0^{(i)}) = \frac{1}{8 d_x d_y d_z} \left(\int_{\Omega_f} (\varepsilon_0 \varepsilon_\parallel \mathbf{E}_z^{(i)} + P^{(i)}) d\mathrm{x} + \int_{\Omega_p} \varepsilon_0 \varepsilon_p \mathbf{E}_z^{(i)} d\mathrm{x} \right), \tag{5.38}$$

en désignant par $\mathbf{E}_z^{(i)}$ la troisième composante du champ électrique puis par $P^{(i)}$ le champ scalaire de polarisation, qui correspondent à l'application du potentiel $\phi_0^{(i)}$.

Dans tout ce paragraphe, on considère $\varepsilon_p = 200$, $\varepsilon_\perp = 100$ et $\varepsilon_\parallel = 20$.

Il est nécessaire, en premier lieu, de déterminer pour chaque température et chaque état métastable, pour quelle valeur de $d_x = d_y$ l'énergie est minimale. Fixons ϕ_0. Pour ne pas travailler sur de nombreux maillages comme au paragraphe précédent, en chaque température, on introduit un protocole d'expérimentation numérique : si l'on connaît la valeur $d_x = d_x^{(0)}$ minimisant en $T = T_0$ l'énergie $\mathcal{F}$, que nous renotons dans la suite $\mathcal{F}(d_x)$, on recherche la valeur optimale de d_x en $T = T_0 + \delta T$ à partir de $d_x = d_x^{(0)}$, suivant l'Algorithme 5.1, où $\delta T > 0$ désigne le pas de variation de la température. Cette approche permet éventuellement de ne pas refaire tous les calculs réalisés lors de l'étude du paragraphe précédent à chaque température. Ces expérimentations numériques engendrent tout de même beaucoup de calculs, puisque pour les lignes 2-4, 8 et 11 dans l'Algorithme 5.1, plusieurs simulations doivent souvent être réalisées, avec des initialisations différentes de la méthode itérative, avant d'obtenir l'état métastable auquel on s'intéresse. Enfin, il faut tout de même déterminer la valeur de d_x optimale en une température initiale, et reproduire au moins une fois la même étude que celle du paragraphe précédent : en particulier, cela n'économise pas la production de nombreux maillages.

Algorithme 5.1 Recherche de d_x minimisant l'énergie en une température T.

entrées : Température T ; demi-largeur de la nanostructure d_x^{old} optimale à la température précédente ; pas δd_x de recherche de la demi-largeur d_x optimale.

sorties : Demi-largeur de la nanostructure d_x^{new} optimale à la température T.

1: $d_x^{new} \leftarrow d_x^{old}$;
2: Calculer la solution pour $d_x = d_x^{new}$ en la température T puis l'énergie $\mathcal{F}(d_x^{new})$ associée ;
3: Calculer la solution pour $d_x = d_x^{new} - \delta d_x$ en la température T puis l'énergie $\mathcal{F}(d_x^{new} - \delta d_x)$ associée ;
4: Calculer la solution pour $d_x = d_x^{new} + \delta d_x$ en la température T puis l'énergie $\mathcal{F}(d_x^{new} + \delta d_x)$ associée ;
5: **tant que** $\mathcal{F}(d_x^{new}) > \mathcal{F}(d_x^{new} + \delta d_x)$ **ou** $\mathcal{F}(d_x^{new}) > \mathcal{F}(d_x^{new} - \delta d_x)$ **faire**
6: **si** $\mathcal{F}(d_x^{new}) > \mathcal{F}(d_x^{new} + \delta d_x)$ **alors**
7: $d_x^{new} \leftarrow d_x^{new} + \delta d_x$;
8: Calculer la solution pour $d_x = d_x^{new} + \delta d_x$ en la température T puis l'énergie $\mathcal{F}(d_x^{new} + \delta d_x)$ associée ;
9: **sinon**
10: $d_x^{new} \leftarrow d_x^{new} - \delta d_x$;
11: Calculer la solution pour $d_x = d_x^{new} - \delta d_x$ en la température T puis l'énergie $\mathcal{F}(d_x^{new} - \delta d_x)$ associée ;
12: **fin si**
13: **fin tant que**
14: **sortie de l'algorithme.**

En travaillant en une température initiale $T_0 = 0$, avec les pas $\delta T = 10$, $\delta d_x = 0.5$, on obtient que chaque demi-largeur d_x minimisant l'énergie en T_0 reste optimale pour toute température et tout $\phi_0 \in \{0, 0.25.10^{16}, 0.5.10^{16}\}$ considérés ici. Pour $a_p = a_f = 3$, on rappelle que $d_x = 3.5$ (voir paragraphe précédent) et l'état (P2B) est minimisant tandis que pour $a_p = a_f = 1, 2$, c'est l'état uniforme qui est minimisant, et il ne semble pas exister de valeur de d_x minimisant l'énergie de (P2B) (voir le cas $a_f = a_p = 2$ sur la Figure 5.3). En association à l'état (P2B), on prend $d_x = 9$, au voisinage duquel on considère que l'énergie

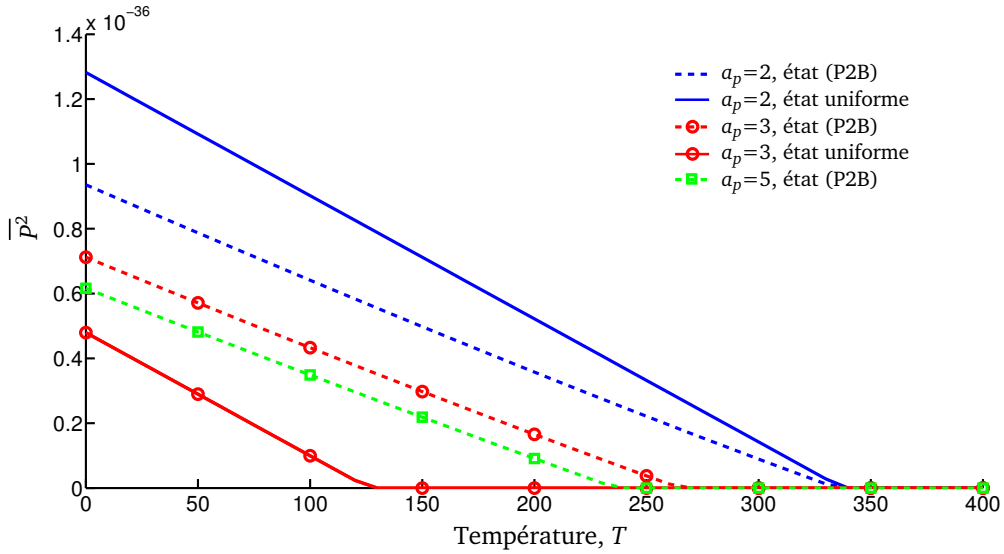


FIGURE 5.6 – Comportement de $\overline{P^2}$ en fonction de la température, pour $\phi_0 = 0$.

libre est localement constante, puisqu'on a, à la fois pour $a_p = a_f = 1$ et $a_p = a_f = 2$,

$$\frac{|\mathcal{F}(d_x = 9) - \mathcal{F}(d_x = 8.5)|}{|\mathcal{F}(d_x = 9)|} < 10^{-2} \quad \text{et} \quad \frac{|\mathcal{F}(d_x = 9) - \mathcal{F}(d_x = 9.5)|}{|\mathcal{F}(d_x = 9)|} < 10^{-2}.$$

Cette recherche de la largeur optimale de la nanostructure fournit des solutions pour tous T, et on peut reproduire l'évolution de la polarisation en fonction de la température, comme nous le faisions dans la Partie I de ce manuscrit. Sur la Figure 5.6, on constate à nouveau que $\overline{P^2}$ dépend linéairement de T et que la température critique du dispositif est strictement inférieure à sa température de Curie.

Avant de mener des investigations numériques portant directement sur la permittivité effective, commençons par nous intéresser à une reformulation des expressions (5.37) et (5.38), de la Définition 5.3 concernant ce paramètre, en exploitant la forme géométrique qu'a la nanostructure représentée ici par Ω.

Soit (P, φ) une solution classique de (GLE-N). D'abord, on a, à l'aide de la formule de Green, puisque $\varphi = \mp\phi_0$ sur $(z = \pm d_z)$, que,

$$\begin{aligned} \overline{E}(\phi_0) &= \frac{1}{8d_x d_y d_z} \int_\Omega (-\partial_z \varphi) d\mathrm{x} \\ &= -\frac{1}{8d_x d_y d_z} \int_{S\cap(z=d_z)} (\mathbf{n}_z \varphi) d\sigma - \frac{1}{8d_x d_y d_z} \int_{S\cap(z=-d_z)} (\mathbf{n}_z \varphi) d\sigma, \end{aligned}$$

où $\mathbf{n} = (\mathbf{n}_x, \mathbf{n}_y, \mathbf{n}_z)^T$ est le vecteur unitaire de la normale extérieure à Ω. Ainsi,

$$\overline{E}(\phi_0) = \frac{1}{8d_x d_y d_z} \phi_0 \left(\int_{S\cap(z=d_z)} d\sigma + \int_{S\cap(z=-d_z)} d\sigma \right).$$

On a donc que,

$$\overline{E}(\phi_0) = \frac{\phi_0}{d_z}, \tag{5.39}$$

et alors,

$$\overline{E}(\phi_0) = \frac{U}{2d_z}.$$

Nous avons par ailleurs l'énoncé suivant, qui concerne une reformulation de $\overline{D}$.

Proposition 5.4.
Pour toute solution classique (P, φ) de (GLE-N) (avec $\varphi = \pm\phi_0$ sur $S^{\mp}$), on a que,

$$\overline{D}(\phi_0) = \frac{1}{4d_x d_y} \int_{S\cap(z=d_z)} \varepsilon_0 \varepsilon_p \mathbf{E}_z d\sigma, \tag{5.40}$$

où $\mathbf{E} = (\mathbf{E}_x, \mathbf{E}_y, \mathbf{E}_z)^T$ désigne le champ électrique.

Preuve. Commençons par introduire les fonctions suivantes,

$$F : \alpha \in [-a_f, a_f] \longmapsto F(\alpha) = \int_{\overline{\Omega_f}\cap(z=\alpha)} \left(\varepsilon_0 \varepsilon_{\|} \mathbf{E}_z + P\right) d\sigma,$$

$$G^- : \alpha \in [-d_z, -a_f] \longmapsto G^-(\alpha) = \int_{\overline{\Omega_p^-}\cap(z=\alpha)} \varepsilon_0 \varepsilon_p \mathbf{E}_z d\sigma,$$

et,

$$G^+ : \alpha \in [a_f, d_z] \longmapsto G^+(\alpha) = \int_{\overline{\Omega_p^+}\cap(z=\alpha)} \varepsilon_0 \varepsilon_p \mathbf{E}_z d\sigma.$$

On organise cette preuve en cinq étapes. On commence par montrer que $F(\alpha) = F(-a_f)$ pour tout $\alpha \in [-a_f, a_f]$, puis $G^-(\alpha) = G^-(-d_z)$ pour tout $\alpha \in [-d_z, -a_f]$ et ensuite $G^+(\alpha) = G^+(d_z)$ pour tout $\alpha \in [a_f, d_z]$. Ensuite, on établit la relation $F(\pm a_f) = G^{\pm}(\pm a_f)$. Finalement, on déduit qu'on a bien (5.40).

- Soit $\alpha \in (-a_f, a_f]$. Depuis (5.2), on a que $\nabla \cdot \mathbf{D}_f = 0$ dans Ω_f, donc aussi dans l'ouvert $R_\alpha = (-d_x, d_x) \times (-d_y, d_y) \times (-a_f, \alpha)$, où on a posé,

  $$\mathbf{D}_f = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}_f \text{ dans } \Omega_f,$$

  avec,

  $$\mathbf{P}_f = \begin{pmatrix} \varepsilon_0(\varepsilon_\perp - 1)\mathbf{E}_x \\ \varepsilon_0(\varepsilon_\perp - 1)\mathbf{E}_y \\ \varepsilon_0(\varepsilon_\| - 1)\mathbf{E}_z + P \end{pmatrix} \text{ dans } \Omega_f.$$

  Par la formule de Green, il vient, en notant $\nu = (\nu_x, \nu_y, \nu_z)^T$ le vecteur unitaire de la normale extérieure à R_α, que,

  $$\int_{\partial R_\alpha} \nu \cdot \mathbf{D}_f d\sigma = 0,$$

  i.e.,

  $$\begin{aligned} &\int_{\partial R_\alpha \cap \Gamma_x^f} \nu \cdot \mathbf{D}_f d\sigma + \int_{\partial R_\alpha \cap \Gamma_y^f} \nu \cdot \mathbf{D}_f d\sigma + \int_{S_f^-} \nu \cdot \mathbf{D}_f d\sigma \\ &+ \int_{\partial R_\alpha \cap (z=\alpha)} \nu \cdot \mathbf{D}_f d\sigma = 0. \end{aligned} \tag{5.41}$$

Puisque $\nu_y = \nu_z = 0$ sur Γ_x^f, on a,

$$\int_{\partial R_\alpha \cap \Gamma_x^f} \nu \cdot \mathbf{D}_f d\sigma = -\int_{\partial R_\alpha \cap \Gamma_x^f} \nu_x (\varepsilon_0 \varepsilon_\perp \partial_x \varphi) d\sigma,$$

puis, d'après la condition de Neumann (5.9),

$$\int_{\partial R_\alpha \cap \Gamma_x^f} \nu \cdot \mathbf{D}_f d\sigma = 0.$$

En procédant de même, avec cette fois la condition de Neumann (5.10), on montre que,

$$\int_{\partial R_\alpha \cap \Gamma_y^f} \nu \cdot \mathbf{D}_f d\sigma = 0.$$

Ainsi (5.41) devient,

$$\int_{S_f^-} \nu \cdot \mathbf{D}_f d\sigma + \int_{\partial R_\alpha \cap (z=\alpha)} \nu \cdot \mathbf{D}_f d\sigma = 0.$$

Alors, comme $\nu_x = \nu_y = 0$ sur $S_f^- = \partial R_\alpha \cap (z = -a_f)$ ainsi que sur $\partial R_\alpha \cap (z = \alpha)$ et puisque les troisièmes composantes de ν sur ces faces sont opposées, on a que,

$$\int_{\partial R_\alpha \cap (z=\alpha)} (\varepsilon_0 \varepsilon_\parallel \mathbf{E}_z + P) d\sigma = \int_{\partial R_\alpha \cap (z=-a_f)} (\varepsilon_0 \varepsilon_\parallel \mathbf{E}_z + P) d\sigma.$$

Finalement,

$$F(\alpha) = F(-a_f) \quad \forall \alpha \in [-a_f, a_f]. \tag{5.42}$$

- Soit $\alpha \in (-d_z, -a_f]$. Depuis (5.3), on a que $\nabla \cdot \mathbf{D}_p = 0$ dans Ω_p, donc aussi dans $R_\alpha = (-d_x, d_x) \times (-d_y, d_y) \times (-d_z, \alpha)$, où on a posé $\mathbf{D}_p = \varepsilon_0 \varepsilon_p \mathbf{E}$ dans Ω_p. Par la formule de Green, on a que,

$$\int_{\partial R_\alpha \cap \Gamma_x} \nu \cdot \mathbf{D}_p d\sigma + \int_{\partial R_\alpha \cap \Gamma_y} \nu \cdot \mathbf{D}_p d\sigma + \int_{S^-} \nu \cdot \mathbf{D}_p d\sigma + \int_{\partial R_\alpha \cap (z=\alpha)} \nu \cdot \mathbf{D}_p d\sigma = 0,$$

qu'on peut simplifier, en procédant comme avant et puisque φ vérifie une condition de Neumann sur Γ_x et Γ_y, en,

$$\int_{\partial R_\alpha \cap (z=\alpha)} (\varepsilon_0 \varepsilon_p \mathbf{E}_z) d\sigma = \int_{S^-} (\varepsilon_0 \varepsilon_p \mathbf{E}_z) d\sigma,$$

puis,

$$G^-(\alpha) = G^-(-d_z) \quad \forall \alpha \in [-d_z, -a_f]. \tag{5.43}$$

- On montre de la même façon que,

$$G^+(\alpha) = G^+(d_z) \quad \forall \alpha \in [a_f, d_z]. \tag{5.44}$$

- L'équation (5.5) fournit,

$$\int_{S_f^+} \varepsilon_0 \varepsilon_p \mathbf{E}_z d\sigma = \int_{S_f^+} (\varepsilon_0 \varepsilon_\parallel \mathbf{E}_z + P) d\sigma,$$

i.e.,

$$F(a_f) = G^+(a_f). \tag{5.45}$$

De même, on a,

$$F(-a_f) = G^-(-a_f). \tag{5.46}$$

- On déduit de ce qui précède, en utilisant le théorème de Fubini, que,

$$\begin{aligned}
\overline{D}(\phi_0) &= \frac{1}{8d_xd_yd_z}\left(\int_{\Omega_f}(\varepsilon_0\varepsilon_{\|}\mathbf{E}_z+P)d\mathrm{x}+\int_{\Omega_p}\varepsilon_0\varepsilon_p\mathbf{E}_zd\mathrm{x}\right)\\
&= \frac{1}{8d_xd_yd_z}\int_{-a_f}^{a_f}\int_{\Omega_f\cap(z=\alpha)}(\varepsilon_0\varepsilon_{\|}\mathbf{E}_z+P)dxdyd\alpha\\
&\quad+\frac{1}{8d_xd_yd_z}\int_{-d_z}^{-a_f}\int_{\Omega_p^-\cap(z=\alpha)}\varepsilon_0\varepsilon_p\mathbf{E}_zdxdyd\alpha\\
&\quad+\frac{1}{8d_xd_yd_z}\int_{a_f}^{d_z}\int_{\Omega_p^+\cap(z=\alpha)}\varepsilon_0\varepsilon_p\mathbf{E}_zdxdyd\alpha.
\end{aligned}$$

Ainsi, on obtient que,

$$\begin{aligned}
\overline{D}(\phi_0) &= \frac{1}{8d_xd_yd_z}\left(\int_{-a_f}^{a_f}F(\alpha)d\alpha+\int_{-d_z}^{-a_f}G^-(\alpha)d\alpha+\int_{a_f}^{d_z}G^+(\alpha)d\alpha\right)\\
&= \frac{1}{8d_xd_yd_z}\left(2a_fF(a_f)+a_pG^-(-d_z)+a_pG^+(d_z)\right),
\end{aligned}$$

avec (5.42)-(5.44). Aussi, avec (5.42)-(5.46), on a que,

$$\overline{D}(\phi_0)=\frac{1}{8d_xd_yd_z}2d_zG^+(d_z).$$

Alors,

$$\overline{D}(\phi_0)=\frac{1}{4d_xd_y}\int_{S\cap(z=d_z)}\varepsilon_0\varepsilon_p\mathbf{E}_zd\sigma.$$

□

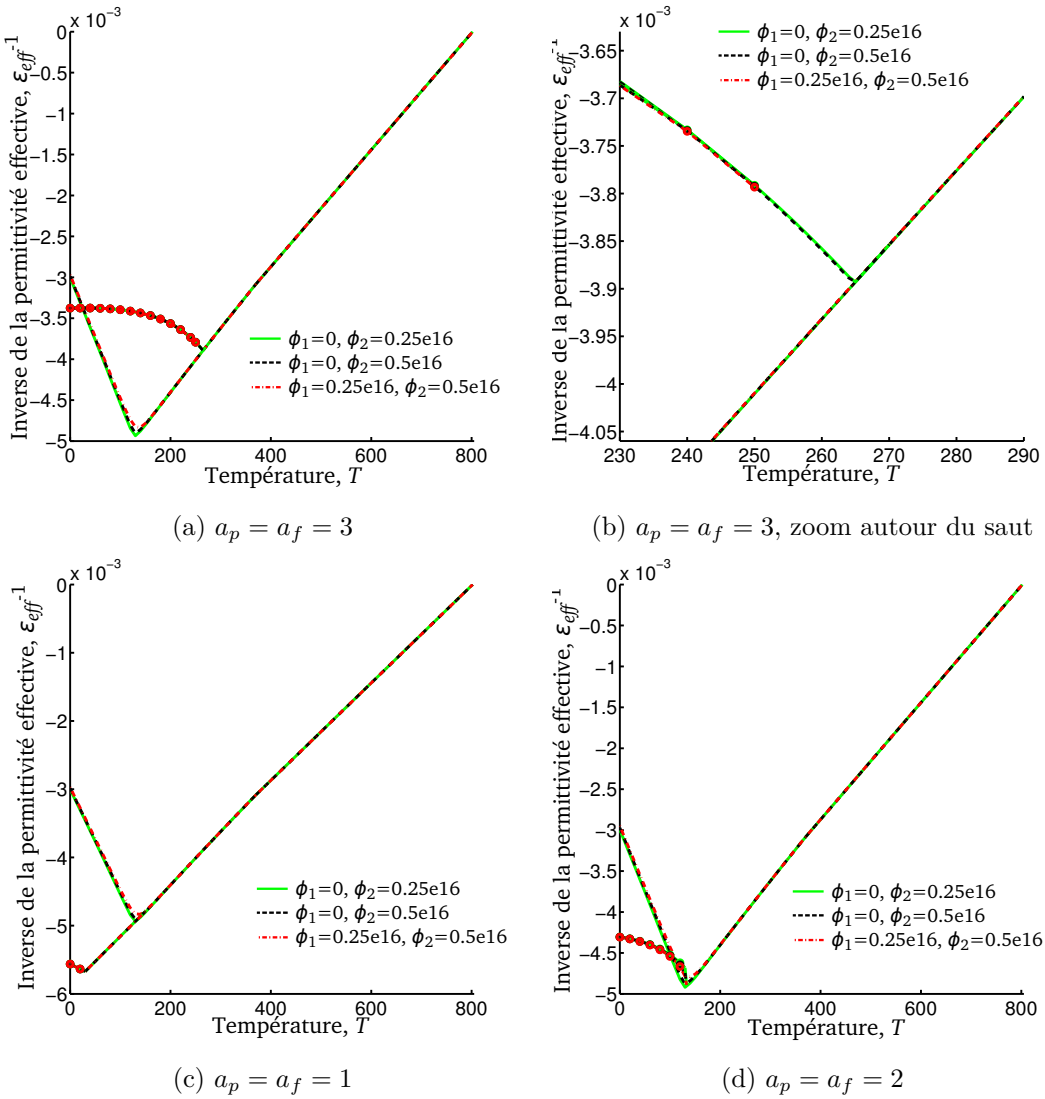
Notons que le dernier point de la preuve de la Proposition 5.4 peut être adapté pour ramener $\overline{D}(\varphi)$ à un calcul d'intégrale sur toute autre surface ($z=\alpha$), avec $\alpha\in[-d_z,d_z]$.

Nous utilisons dans les investigations numériques les formules (5.39) et (5.40) qui, contrairement à leurs expressions équivalentes introduites en (5.37) et (5.38), sont très peu susceptibles à des erreurs d'arrondi sur le plan des calculs numériques et nécessitent par ailleurs dans leurs évaluations un temps de calcul moins coûteux.

La Figure 5.7 présente certains de nos résultats numériques. Constatons d'abord que les valeurs numériques prises par la permittivité effective indiquent que ce paramètre est très peu influencé par des choix de « faibles » potentiels électriques appliqués sur S, comme ceux liés ici aux considérations de ϕ_0 telles que $\phi_0\in\{0,0.25.10^{16},0.50.10^{16}\}$ (le redimensionnement des grandeurs évoqué en (5.12) associe ici le potentiel φ, où $\varphi\sim10^{15}$, au potentiel redimensionné φ', où $\varphi'\sim10^{-3}$).

On rappelle qu'on a l'existence de polarisations uniformes non triviales sous une certaine température $T_{c\phi}(u_m,\phi_0)$, dont deux disparaissent pour des températures plus élevées. Relativement à l'état de polarisation uniforme, on obtient que sur chacune de ces gammes de températures, ε_{eff}^{-1} dépend linéairement de T.

On observe en particulier que la permittivité effective prend des valeurs négatives.



(a) $a_p = a_f = 3$

(b) $a_p = a_f = 3$, zoom autour du saut

(c) $a_p = a_f = 1$

(d) $a_p = a_f = 2$

FIGURE 5.7 – Valeurs de l'inverse de la permittivité effective en fonction de la température, relatives à deux potentiels appliqués au bord, ϕ_1 et ϕ_2, avec $a_f = a_p = 3$ (a) et (b) pour un zoom, puis $a_p = a_f = 1$ (c), $a_p = a_f = 2$ (d) ; les valeurs de ε_{eff}^{-1} pour l'état (P2B) sont marquées par des cercles, tandis que celles pour l'état uniforme sont représentées sans marque.

Le comportement de la permittivité effective associée à l'état (P2B) est plus difficile à traduire d'un point de vue de modélisation physique. Il est prédit dans [72], où des expérimentations physiques sont menées avec des couches PTO/STO, que ε_{eff}^{-1} prend l'allure d'une fonction affine pour $T < T_{c\phi}(u_m, \phi_0)$, ce qu'on retrouve dans nos simulations. Par contre, le comportement pour $T_{c\phi}(u_m, \phi_0) < T < T_c$ est encore mal compris. Nous avons obtenu que ε_{eff}^{-1} chute, de par une transition d'état vers l'état trivial, en s'inclinant (*cf.* Figure 5.7(b)).

Qualitativement, ces résultats sont en cohérence avec les résultats expérimentaux de [72]. Les valeurs obtenues sont cependant très différentes, même dans le cas des polarisations uniformes. Ceci provient bien entendu du fait que notre système (GLE-N) traduit un modèle où seules les troisièmes composantes de $\mathbf{E}$ et $\mathbf{P}$ sont en interaction non-linéaire, pendant que nous représentons la couche PTO par Ω_f.

D'autres dispositifs ont également été considérés et les évolutions de ε_{eff}^{-1} pour $a_f = a_p = 1, 2$ sont aussi représentées sur la Figure 5.7. Pour $a_f = a_p = 1$, la température de transition pour l'état (P2B) est inférieure à $T_{c\phi}(u_m, \phi_0)$, avec chute vers l'état trivial. Pour $a_f = a_p = 2$, la température de transition $T_{c\phi}(u_m, \phi_0)$ de l'état uniforme est proche de la température critique T_c du matériau. Encore une fois, l'état (P2B) chute vers l'état trivial en s'inclinant. Notons que la norme infinie de chacune des polarisations associées à l'état (P2B) tend vers 0, lorsque la température augmente. On a que $\|P\|_\infty \sim \sqrt{T - T_c}$, ce qui est à rapprocher du comportement observé sur la Figure 5.6.

Chapitre 6

Etude basée sur un modèle avec conditions périodiques

Nous sommes encore concernés dans ce chapitre par une classe de nanostructures qui sont constituées d'une superposition de trois couches, la couche centrale étant ferroélectrique et les deux autres étant paraélectriques. Un nouveau modèle est proposé, et diffère de celui du chapitre précédent dans la prescription des conditions aux limites. Le cas des conditions périodiques est ici considéré. Une première méthode numérique, s'appuyant sur des approximations par Différences Finies, est d'abord mise en place. En vue d'une discrétisation plus précise des conditions à l'interface ferroélectrique/paraélectrique, une seconde méthode numérique, faisant intervenir à la fois des approximations par Différences Finies et par Éléments Finis, est introduite. Nous menons finalement des investigations numériques pour inspecter le comportement de la permittivité effective, à la fois dans le contexte où la permittivité du milieu paraélectrique est constante et dans le cadre où elle dépend de la température.

6.1 Présentation du modèle

Les nanostructures que nous considérons sont encore constituées d'une couche ferroélectrique enclavée entre deux couches paraélectriques. On reprend les notations du chapitre précédent, introduites au Paragraphe 5.1, de même que la configuration géométrique des dispositifs qui y est présentée (*cf.* Figure 5.1). Le modèle auquel nous nous intéressons ici est basé sur le même couplage d'équations de Ginzburg-Landau et d'Electrostatique présenté au chapitre précédent, et se distingue dans la prescription des conditions aux limites. Les inconnues du système sont encore le potentiel φ, duquel dérive le champ électrique ($\mathbf{E} = -\nabla\varphi$) et P, qui permet de décrire le champ vectoriel de polarisation à travers (1.5).

Nous sommes, dans ce chapitre, concernés par le système qui consiste à trouver les fonc-

tions $P : \overline{\Omega_f} \longrightarrow \mathbf{R}$ et $\varphi : \overline{\Omega} \longrightarrow \mathbf{R}$, de sorte que :

$$\begin{cases}
2a_3^\star P + 4a_{33}^\star P^3 - 2k_2 \Delta P + \partial_z \varphi = 0 & \text{dans } \Omega_f, \quad (6.1)\\
-\varepsilon_0(\varepsilon_\perp \partial_{xx}^2 + \varepsilon_\perp \partial_{yy}^2 + \varepsilon_\parallel \partial_{zz}^2)\varphi + \partial_z P = 0 & \text{dans } \Omega_f, \quad (6.2)\\
-\varepsilon_0(\varepsilon_p \partial_{xx}^2 + \varepsilon_p \partial_{yy}^2 + \varepsilon_p \partial_{zz}^2)\varphi = 0 & \text{dans } \Omega_p, \quad (6.3)\\
\varphi|_{\Omega_p} = \varphi|_{\Omega_f} & \text{sur } S_f, \quad (6.4)\\
\varepsilon_0(\varepsilon_\parallel \partial_z \varphi|_{\Omega_f} - \varepsilon_p \partial_z \varphi|_{\Omega_p}) = P & \text{sur } S_f, \quad (6.5)\\
P(x,y,z) = P(x+2d_x, y, z) & \forall (x,y,z) \in \Gamma_x^{f,-}, \quad (6.6)\\
P(x,y,z) = P(x, y+2d_y, z) & \forall (x,y,z) \in \Gamma_y^{f,-}, \quad (6.7)\\
\partial_z P = 0 & \text{sur } S_f, \quad (6.8)\\
\varphi(x,y,z) = \varphi(x+2d_x, y, z) & \forall (x,y,z) \in \Gamma_x^{-}, \quad (6.9)\\
\varphi(x,y,z) = \varphi(x, y+2d_y, z) & \forall (x,y,z) \in \Gamma_y^{-}, \quad (6.10)\\
\varphi = \mp \phi_0 & \text{sur } S^\pm, \quad (6.11)
\end{cases}$$

où on a noté,

$$\begin{array}{lcl}
\Omega_f & = & (-d_x, d_x) \times (-d_y, d_y) \times (-a_f, a_f),\\
\Omega_p^- & = & (-d_x, d_x) \times (-d_y, d_y) \times (-d_z, -a_f),\\
\Omega_p^+ & = & (-d_x, d_x) \times (-d_y, d_y) \times (a_f, d_z),\\
\Omega_p & = & \Omega_p^- \cup \Omega_p^+,\\
\Omega & = & (-d_x, d_x) \times (-d_y, d_y) \times (-d_z, d_z),\\
S_f^\pm & = & \left\{(x,y,\pm a_f) \in \mathbf{R}^3 \ ; \ -d_x \le x \le d_x, \ -d_y \le y \le d_y\right\},\\
S_f & = & S_f^- \cup S_f^+,\\
S^\pm & = & \left\{(x,y,\pm d_z) \in \mathbf{R}^3 \ ; \ -d_x \le x \le d_x, \ -d_y \le y \le d_y\right\},\\
S & = & S^- \cup S^+,\\
\Gamma_x^- & = & \left\{(-d_x, y, z) \in \mathbf{R}^3 \ ; \ -d_y \le y \le d_y, \ -d_z < z < d_z\right\},\\
\Gamma_y^- & = & \left\{(x, -d_y, z) \in \mathbf{R}^3 \ ; \ -d_x < x < d_x, \ -d_z < z < d_z\right\},\\
\Gamma_x^{f,-} & = & \left\{(-d_x, y, z) \in \mathbf{R}^3 \ ; \ -d_y \le y \le d_y, \ -a_f < z < a_f\right\},\\
\Gamma_y^{f,-} & = & \left\{(x, -d_y, z) \in \mathbf{R}^3 \ ; \ -d_x < x < d_x, \ -a_f < z < a_f\right\}.
\end{array}$$

Dans la suite de ce manuscrit, nous appelons système de Ginzburg-Landau Electrostatique Périodique (GLE-P) le système formé par les équations (6.1)-(6.11).

La différence de ce système avec celui présenté dans le chapitre précédent tient dans les conditions appliquées à P sur Γ_x^f, Γ_y^f, et à φ sur Γ_x, Γ_y, qui sont ici périodiques alors qu'elles étaient de Neumann dans le chapitre précédent.

6.2 Méthodes numériques

De par la forme géométrique de Ω, et les conditions périodiques imposées sur P et φ, des approximations par Différences Finies du système (GLE-P) sont adaptées. Comme nous le constaterons, une hybridation des approximations par Différences Finies et Eléments Finis aura un très grand intérêt d'être aussi effectuée pour associer à (6.1)-(6.11) un autre problème discret.

6.2.1 Approximations par Différences Finies

Nous proposons, dans ce paragraphe, un problème discret associé à (GLE-P), uniquement basé sur des approximations par Différences Finies. Commençons par définir les nœuds de la grille sur laquelle les approximations vont être réalisées :

- $x_i = \dfrac{d_x}{N_f} i \in [-d_x, d_x]$, pour tout $i \in [\![-N_f, N_f]\!]$;
- $y_j = \dfrac{d_y}{N_f} j \in [-d_y, d_y]$, pour tout $j \in [\![-N_f, N_f]\!]$;
- $z_k = \dfrac{a_p}{N_p} k + \dfrac{a_p N_f - a_f N_p}{N_p} \in [-d_z, -a_f]$, pour tout $k \in [\![-N_f - N_p, -N_f]\!]$;
- $z_k = \dfrac{a_f}{N_f} k \in [-a_f, a_f]$, pour tout $k \in [\![-N_f, N_f]\!]$;
- $z_k = \dfrac{a_p}{N_p} k - \dfrac{a_p N_f - a_f N_p}{N_p} \in [a_f, d_z]$, pour tout $k \in [\![N_f, N_f + N_p]\!]$,

avec $N_f \in \mathbf{N}$, $N_p \in \mathbf{N}$, $N_f \gg d_x$, $N_f \gg d_y$, $N_f \gg a_f$, $N_p \gg a_p$. Les pas de discrétisations dans les directions (Ox) et (Oy) sont désignés par h_x et h_y, tandis que h_f est le pas dans la direction (Oz), relativement à $\overline{\Omega_f}$; de même, h_p est le pas dans la direction (Oz) relativement à $\overline{\Omega_p}$,

$$h_x = \frac{d_x}{N_f}; \quad h_y = \frac{d_y}{N_f}; \quad h_f = \frac{a_f}{N_f} \quad \text{et} \quad h_p = \frac{a_p}{N_p}.$$

Aussi, posons,

$$P_{i,j,k} \approx P(x_i, y_j, z_k) \quad \forall (i,j,k) \in [\![-N_f, N_f]\!]^3,$$

et,

$$\varphi_{i,j,k} \approx \varphi(x_i, y_j, z_k) \quad \forall (i,j,k) \in [\![-N_f, N_f]\!]^2 \times [\![-N, N]\!],$$

où,

$$N = N_f + N_p.$$

La condition (6.4) est ici automatiquement respectée. Il reste à discrétiser les autres équations du système (GLE-P).

Equation (6.1) : pour tout $(i,j,k) \in [\![-N_f, N_f - 1]\!]^2 \times [\![-N_f + 1, N_f - 1]\!]$,

$$\begin{aligned} &2a_3^\star P_{i,j,k} + 4a_{33}^\star P_{i,j,k}^3 + 2k_2 \frac{2P_{i,j,k} - P_{i+1,j,k} - P_{i-1,j,k}}{h_x^2} \\ &+2k_2 \frac{2P_{i,j,k} - P_{i,j+1,k} - P_{i,j-1,k}}{h_y^2} + 2k_2 \frac{2P_{i,j,k} - P_{i,j,k+1} - P_{i,j,k-1}}{h_f^2} \\ &+\frac{\varphi_{i,j,k+1} - \varphi_{i,j,k-1}}{2h_f} = 0. \end{aligned} \tag{6.12}$$

Equation (6.2) : pour tout $(i,j,k) \in [\![-N_f, N_f - 1]\!]^2 \times [\![-N_f + 1, N_f - 1]\!]$,

$$\begin{aligned} &\varepsilon_0 \varepsilon_\perp \frac{2\varphi_{i,j,k} - \varphi_{i+1,j,k} - \varphi_{i-1,j,k}}{h_x^2} + \varepsilon_0 \varepsilon_\perp \frac{2\varphi_{i,j,k} - \varphi_{i,j+1,k} - \varphi_{i,j-1,k}}{h_y^2} \\ &+\varepsilon_0 \varepsilon_\parallel \frac{2\varphi_{i,j,k} - \varphi_{i,j,k+1} - \varphi_{i,j,k-1}}{h_f^2} + \frac{P_{i,j,k+1} - P_{i,j,k-1}}{2h_f} = 0. \end{aligned} \tag{6.13}$$

Equation (6.3) : pour tout $(i,j,k) \in [\![-N_f, N_f-1]\!]^2 \times [\![-N+1, -N_f-1]\!]$ et tout $(i,j,k) \in [\![-N_f, N_f-1]\!]^2 \times [\![N_f+1, N-1]\!]$,

$$\begin{aligned} &\varepsilon_0\varepsilon_p \frac{2\varphi_{i,j,k} - \varphi_{i+1,j,k} - \varphi_{i-1,j,k}}{h_x^2} + \varepsilon_0\varepsilon_p \frac{2\varphi_{i,j,k} - \varphi_{i,j+1,k} - \varphi_{i,j-1,k}}{h_y^2} \\ &+\varepsilon_0\varepsilon_p \frac{2\varphi_{i,j,k} - \varphi_{i,j,k+1} - \varphi_{i,j,k-1}}{h_p^2} = 0. \end{aligned} \tag{6.14}$$

Equation (6.5) : pour tout $(i,j) \in [\![-N_f, N_f]\!]^2$,

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \varepsilon_0 \left(\varepsilon_\parallel \dfrac{\varphi_{i,j,-N_f+1} - \varphi_{i,j,-N_f}}{h_f} - \varepsilon_p \dfrac{\varphi_{i,j,-N_f} - \varphi_{i,j,-N_f-1}}{h_p} \right) & = & P_{i,j,-N_f}, \\ \varepsilon_0 \left(\varepsilon_\parallel \dfrac{\varphi_{i,j,N_f} - \varphi_{i,j,N_f-1}}{h_f} - \varepsilon_p \dfrac{\varphi_{i,j,N_f+1} - \varphi_{i,j,N_f}}{h_p} \right) & = & P_{i,j,N_f}. \end{array} \right. \tag{6.15}$$

Equation (6.6) : pour tout $(j,k) \in [\![-N_f, N_f]\!]^2$,

$$\left\{ \begin{array}{rcl} P_{N_f,j,k} & = & P_{-N_f,j,k}, \\ P_{-N_f-1,j,k} & = & P_{N_f-1,j,k}. \end{array} \right. \tag{6.16}$$

Equation (6.7) : pour tout $(i,k) \in [\![-N_f, N_f]\!]^2$,

$$\left\{ \begin{array}{rcl} P_{i,N_f,k} & = & P_{i,-N_f,k}, \\ P_{i,-N_f-1,k} & = & P_{i,N_f-1,k}. \end{array} \right. \tag{6.17}$$

Equation (6.8) : pour tout $(i,j) \in [\![-N_f, N_f]\!]^2$,

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \dfrac{P_{i,j,-N_f+1} - P_{i,j,-N_f}}{h_f} & = & 0, \\ \dfrac{P_{i,j,N_f} - P_{i,j,N_f-1}}{h_f} & = & 0, \end{array} \right.$$

i.e.,

$$\left\{ \begin{array}{rcl} P_{i,j,-N_f} & = & P_{i,j,-N_f+1}, \\ P_{i,j,N_f} & = & P_{i,j,N_f-1}. \end{array} \right. \tag{6.18}$$

Equation (6.9) : pour tout $(j,k) \in [\![-N_f, N_f]\!] \times [\![-N+1, N-1]\!]$,

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \varphi_{N_f,j,k} & = & \varphi_{-N_f,j,k}, \\ \varphi_{-N_f-1,j,k} & = & \varphi_{N_f-1,j,k}. \end{array} \right. \tag{6.19}$$

Equation (6.10) : pour tout $(i,k) \in [\![-N_f, N_f]\!] \times [\![-N+1, N-1]\!]$,

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \varphi_{i,N_f,k} & = & \varphi_{i,-N_f,k}, \\ \varphi_{i,-N_f-1,k} & = & \varphi_{i,N_f-1,k}. \end{array} \right. \tag{6.20}$$

Equation (6.11) : pour tout $(i,j) \in [\![-N_f, N_f]\!]^2$,

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \varphi_{i,j,-N} & = & \phi_0, \\ \varphi_{i,j,N} & = & -\phi_0. \end{array} \right. \tag{6.21}$$

Définissons les vecteurs qui permettent d'associer ensuite un système matriciel à (GLE-P). Soient alors,

$$\begin{cases} \mathcal{P}_{[j,k]} = (P_{i,j,k})_{i\in[\![-N_f,N_f-1]\!]}^T \in \mathbf{R}^{2N_f} & \forall (j,k) \in [\![-N_f, N_f-1]\!] \times [\![-N_f+1, N_f-1]\!], \\ \Phi_{[j,k]} = (\varphi_{i,j,k})_{i\in[\![-N_f,N_f-1]\!]}^T \in \mathbf{R}^{2N_f} & \forall (j,k) \in [\![-N_f, N_f-1]\!] \times [\![-N+1, N-1]\!], \end{cases}$$

puis,

$$\begin{cases} \mathcal{P}_{[k]} = \begin{pmatrix} \mathcal{P}_{[-N_f,k]} \\ \mathcal{P}_{[-N_f+1,k]} \\ \vdots \\ P_{[N_f-1,k]} \end{pmatrix} \in \mathbf{R}^{(2N_f)^2} \quad \forall k \in [\![-N_f+1, N_f-1]\!], \\ \\ \Phi_{[k]} = \begin{pmatrix} \Phi_{[-N_f,k]} \\ \Phi_{[-N_f+1,k]} \\ \vdots \\ \Phi_{[N_f-1,k]} \end{pmatrix} \in \mathbf{R}^{(2N_f)^2} \quad \forall k \in [\![-N+1, N-1]\!], \end{cases}$$

ainsi que,

$$\mathcal{P} = \begin{pmatrix} \mathcal{P}_{[-N_f+1]} \\ \mathcal{P}_{[-N_f+2]} \\ \vdots \\ \mathcal{P}_{[N_f-1]} \end{pmatrix} \in \mathbf{R}^{(2N_f)^2(2N_f-1)} \quad \text{et} \quad \Phi = \begin{pmatrix} \Phi_{[-N+1]} \\ \Phi_{[-N+2]} \\ \vdots \\ \Phi_{[N-1]} \end{pmatrix} \in \mathbf{R}^{(2N_f)^2(2N-1)}.$$

Les relations (6.12)-(6.21) fournissent alors :

$$\begin{pmatrix} A^{DF} & B^{DF} \\ C^{DF} & D^{DF} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{P} \\ \Phi \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} N^{DF}(\mathcal{P}) \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ F^{DF} \end{pmatrix}. \tag{6.22}$$

Il reste à expliciter chacun des blocs matriciels A^{DF}, B^{DF}, C^{DF} et D^{DF}, de même que les blocs vectoriels $N^{DF}(\mathcal{P})$ et F^{DF}.

Matrice $A^{DF} \in \mathcal{M}_{(2N_f)^2(2N_f-1)\times(2N_f)^2(2N_f-1)}(\mathbf{R})$. Nous obtenons, à partir des équations (6.12) et (6.16)-(6.18), une expression du vecteur $A^{DF}\mathcal{P}$,

$$A^{DF}\mathcal{P} = \begin{pmatrix} A_{x,y} - \frac{2k_2}{h_f^2} I & \frac{-2k_2}{h_f^2} I & & & \\ \frac{-2k_2}{h_f^2} I & A_{x,y} & \frac{-2k_2}{h_f^2} I & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \frac{-2k_2}{h_f^2} I & A_{x,y} & \frac{-2k_2}{h_f^2} I \\ & & & \frac{-2k_2}{h_f^2} I & A_{x,y} - \frac{2k_2}{h_f^2} I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{P}_{[-N_f+1]} \\ \mathcal{P}_{[-N_f+2]} \\ \vdots \\ \mathcal{P}_{[N_f-2]} \\ \mathcal{P}_{[N_f-1]} \end{pmatrix},$$

où I est la matrice identité de type $(2N_f)^2 \times (2N_f)^2$. Pour $k \in [\![-N_f+1, N_f-1]\!]$,

$$A_{x,y}\mathcal{P}_{[k]} = \begin{pmatrix} A_x & \frac{-2k_2}{h_y^2} J & & & \frac{-2k_2}{h_y^2} J \\ \frac{-2k_2}{h_y^2} J & A_x & \frac{-2k_2}{h_y^2} J & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \frac{-2k_2}{h_y^2} J & A_x & \frac{-2k_2}{h_y^2} J \\ \frac{-2k_2}{h_y^2} J & & & \frac{-2k_2}{h_y^2} J & A_x \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{P}_{[-N_f,k]} \\ \mathcal{P}_{[-N_f+1,k]} \\ \vdots \\ \mathcal{P}_{[N_f-2,k]} \\ \mathcal{P}_{[N_f-1,k]} \end{pmatrix},$$

où J est la matrice identité de type $(2N_f) \times (2N_f)$. Pour $j \in [\![-N_f, N_f - 1]\!]$,

$$A_x \mathcal{P}_{[j,k]} = \begin{pmatrix} \alpha & -\frac{2k_2}{h_x^2} & & & -\frac{2k_2}{h_x^2} \\ -\frac{2k_2}{h_x^2} & \alpha & -\frac{2k_2}{h_x^2} & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -\frac{2k_2}{h_x^2} & \alpha & -\frac{2k_2}{h_x^2} \\ -\frac{2k_2}{h_x^2} & & & -\frac{2k_2}{h_x^2} & \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_{-N_f,j,k} \\ P_{-N_f+1,j,k} \\ \vdots \\ P_{N_f-2,j,k} \\ P_{N_f-1,j,k} \end{pmatrix},$$

avec,

$$\alpha = 2a_3^\star + 2k_2 \left(\frac{2}{h_x^2} + \frac{2}{h_y^2} + \frac{2}{h_f^2} \right).$$

Matrice $B^{DF} \in \mathcal{M}_{(2N_f)^2(2N_f-1)\times(2N_f)^2(2N-1)}(\mathbf{R})$. A partir de (6.12), nous avons une expression du vecteur $B^{DF}\Phi$,

$$B^{DF}\Phi = \frac{1}{2h_f} \left(\begin{array}{cccc|ccccc|cccc} 0 & \cdots & 0 & -I & 0 & I & & & & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & -I & 0 & I & & & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & & & -I & 0 & I & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & & & & -I & 0 & I & 0 & \cdots & 0 \end{array} \right) \begin{pmatrix} \Phi_{[-N+1]} \\ \vdots \\ \Phi_{[-N_f]} \\ \hline \Phi_{[-N_f+1]} \\ \vdots \\ \Phi_{[N_f-1]} \\ \hline \Phi_{[N_f]} \\ \vdots \\ \Phi_{[N-1]} \end{pmatrix}.$$

Matrice $C^{DF} \in \mathcal{M}_{(2N_f)^2(2N-1)\times(2N_f)^2(2N_f-1)}(\mathbf{R})$. Nous obtenons, à partir des équations (6.13) et (6.18), une expression du vecteur $C^{DF}\mathcal{P}$,

$$C^{DF}\mathcal{P} = \frac{1}{2h_f} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -I & I & 0 & \cdots & 0 \\ -I & 0 & I & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -I & 0 & I \\ 0 & \cdots & 0 & -I & I \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{P}_{[-N_f+1]} \\ \vdots \\ \mathcal{P}_{[N_f-1]} \end{pmatrix}.$$

Matrice $D^{DF} \in \mathcal{M}_{(2N_f)^2(2N-1)\times(2N_f)^2(2N-1)}(\mathbf{R})$. A partir des équations (6.13)-(6.15) et (6.19)-(6.21), nous obtenons,

$$D^{DF}\Phi = \begin{pmatrix} D^{\Omega_p^-}\Phi^{\Omega_p^-} \\ D^{S_f^-}\Phi^{S_f^-} \\ D^{\Omega_f}\Phi^{\Omega_f} \\ D^{S_f^+}\Phi^{S_f^+} \\ D^{\Omega_p^+}\Phi^{\Omega_p^+} \end{pmatrix},$$

où,

$$D^{\Omega_p^-}\Phi^{\Omega_p^-} = \left(\begin{array}{ccccc|c} D_{x,y}^{(p)} & \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_p}{h_p^2}I & & & & \\ \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_p}{h_p^2}I & D_{x,y}^{(p)} & \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_p}{h_p^2}I & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_p}{h_p^2}I & D_{x,y}^{(p)} & \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_p}{h_p^2}I & \\ & & & \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_p}{h_p^2}I & D_{x,y}^{(p)} & \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_p}{h_p^2}I \end{array}\right) \left(\begin{array}{c} \Phi_{[-N+1]} \\ \vdots \\ \Phi_{[-N_f-1]} \\ \hline \Phi_{[-N_f]} \end{array}\right),$$

$$D^{S_f^-}\Phi^{S_f^-} = \varepsilon_0 \left(\begin{array}{c|c|c} \frac{\varepsilon_p}{h_p}I & \left(-\frac{\varepsilon_\parallel}{h_f} - \frac{\varepsilon_p}{h_p}\right)I & \frac{\varepsilon_\parallel}{h_f}I \end{array}\right) \left(\begin{array}{c} \Phi_{[-N_f-1]} \\ \hline \Phi_{[-N_f]} \\ \hline \Phi_{[-N_f+1]}, \end{array}\right),$$

$$D^{\Omega_f}\Phi^{\Omega_f} = \left(\begin{array}{c|ccccc|c} \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_\parallel}{h_f^2}I & D_{x,y}^{(f)} & \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_\parallel}{h_f^2}I & & & & \\ & \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_\parallel}{h_f^2}I & D_{x,y}^{(f)} & \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_\parallel}{h_f^2}I & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_\parallel}{h_f^2}I & D_{x,y}^{(f)} & \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_\parallel}{h_f^2}I & \\ & & & & \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_\parallel}{h_f^2}I & D_{x,y}^{(f)} & \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_\parallel}{h_f^2}I \end{array}\right) \left(\begin{array}{c} \Phi_{[-N_f]} \\ \hline \Phi_{[-N_f+1]} \\ \vdots \\ \Phi_{[-N_f-1]} \\ \hline \Phi_{[N_f]} \end{array}\right),$$

$$D^{S_f^+}\Phi^{S_f^+} = \varepsilon_0 \left(\begin{array}{c|c|c} -\frac{\varepsilon_\parallel}{h_f}I & \left(\frac{\varepsilon_\parallel}{h_f} + \frac{\varepsilon_p}{h_p}\right)I & -\frac{\varepsilon_p}{h_p}I \end{array}\right) \left(\begin{array}{c} \Phi_{[N_f-1]} \\ \hline \Phi_{[N_f]} \\ \hline \Phi_{[N_f+1]}, \end{array}\right),$$

$$D^{\Omega_p^+}\Phi^{\Omega_p^+} = \left(\begin{array}{c|ccccc} \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_p}{h_p^2}I & D_{x,y}^{(p)} & \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_p}{h_p^2}I & & & \\ & \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_p}{h_p^2}I & D_{x,y}^{(p)} & \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_p}{h_p^2}I & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_p}{h_p^2}I & D_{x,y}^{(p)} & \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_p}{h_p^2}I \\ & & & & \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_p}{h_p^2}I & D_{x,y}^{(p)} \end{array}\right) \left(\begin{array}{c} \Phi_{[N_f]} \\ \hline \Phi_{[N_f+1]} \\ \vdots \\ \Phi_{[N-1]} \end{array}\right).$$

Dans ces expressions, on a pour tout $k \in [\![-N+1, -N_f-1]\!]$ et tout $k \in [\![N_f+1, N-1]\!]$, que,

$$D_{x,y}^{(p)}\Phi_{[k]} = \begin{pmatrix} D_x^{(p)} & \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_p}{h_y^2}J & & & \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_p}{h_y^2}J \\ \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_p}{h_y^2}J & D_x^{(p)} & \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_p}{h_y^2}J & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_p}{h_y^2}J & D_x^{(p)} & \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_p}{h_y^2}J \\ \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_p}{h_y^2}J & & & \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_p}{h_y^2}J & D_x^{(p)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_{[-N_f,k]} \\ \Phi_{[-N_f+1,k]} \\ \vdots \\ \Phi_{[N_f-2,k]} \\ \Phi_{[N_f-1,k]} \end{pmatrix},$$

puis, pour $j \in [\![-N_f, N_f-1]\!]$,

$$D_x^{(p)}\Phi_{[j,k]} = \begin{pmatrix} \beta_p & \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_p}{h_x^2} & & & \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_p}{h_x^2} \\ \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_p}{h_x^2} & \beta_p & \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_p}{h_x^2} & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_p}{h_x^2} & \beta_p & \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_p}{h_x^2} \\ \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_p}{h_x^2} & & & \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_p}{h_x^2} & \beta_p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_{-N_f,j,k} \\ \varphi_{-N_f+1,j,k} \\ \vdots \\ \varphi_{N_f-2,j,k} \\ \varphi_{N_f-1,j,k} \end{pmatrix},$$

où,

$$\beta_p = \varepsilon_0 \varepsilon_p \left(\frac{2}{h_x^2} + \frac{2}{h_y^2} + \frac{2}{h_p^2} \right).$$

Enfin, pour $k \in [\![-N_f+1, N_f-1]\!]$,

$$D_{x,y}^{(f)} \Phi_{[k]} = \begin{pmatrix} D_x^{(f)} & \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_\perp}{h_y^2} J & & & \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_\perp}{h_y^2} J \\ \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_\perp}{h_y^2} J & D_x^{(f)} & \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_\perp}{h_y^2} J & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_\perp}{h_y^2} J & D_x^{(f)} & \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_\perp}{h_y^2} J \\ \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_\perp}{h_y^2} J & & & \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_\perp}{h_y^2} J & D_x^{(f)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_{[-N_f,k]} \\ \Phi_{[-N_f+1,k]} \\ \vdots \\ \Phi_{[N_f-2,k]} \\ \Phi_{[N_f-1,k]} \end{pmatrix},$$

puis, pour $j \in [\![-N_f, N_f-1]\!]$,

$$D_x^{(f)} \Phi_{[j,k]} = \begin{pmatrix} \beta_f & \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_\perp}{h_x^2} & & & \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_\perp}{h_x^2} \\ \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_\perp}{h_x^2} & \beta_f & \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_\perp}{h_x^2} & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_\perp}{h_x^2} & \beta_f & \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_\perp}{h_x^2} \\ \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_\perp}{h_x^2} & & & \frac{-\varepsilon_0\varepsilon_\perp}{h_x^2} & \beta_f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_{-N_f,j,k} \\ \varphi_{-N_f+1,j,k} \\ \vdots \\ \varphi_{N_f-2,j,k} \\ \varphi_{N_f-1,j,k} \end{pmatrix},$$

où,

$$\beta_f = \varepsilon_0 \left(\frac{2\varepsilon_\perp}{h_x^2} + \frac{2\varepsilon_\perp}{h_y^2} + \frac{2\varepsilon_\parallel}{h_f^2} \right).$$

Vecteur $F^{DF} \in \mathbf{R}^{(2N_f)^2(2N-1)}$. On reprend des notations similaires à celles utilisées pour ordonner $\mathcal{P}$ et Φ :

$$F^{DF} = \begin{pmatrix} F_{[-N+1]} \\ F_{[-N+2]} \\ \vdots \\ F_{[N-1]} \end{pmatrix},$$

où $F_{[k]} \in \mathbf{R}^{(2N_f)^2}$ pour tout $k \in [\![-N+1, N-1]\!]$. Il vient alors, à partir de (6.14) et (6.21), que,

$$F_{[-N+1]} = \varepsilon_0\varepsilon_p \frac{\phi_0}{h_p^2} \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}, \; F_{[N-1]} = -\varepsilon_0\varepsilon_p \frac{\phi_0}{h_p^2} \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} \text{ et } F_{[k]} = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \; \forall k \in [\![-N+2, N-2]\!].$$

Terme non-linéaire $N^{DF}(\mathcal{P}) \in \mathbf{R}^{(2N_f)^2(2N_f-1)}$. D'après (6.12), on a,

$$N^{DF}(\mathcal{P}) = 4a_{33}^\star \begin{pmatrix} N_{x,y}(\mathcal{P}_{[-N_f+1]}) \\ \vdots \\ N_{x,y}(\mathcal{P}_{[N_f-1]}) \end{pmatrix},$$

où, pour $k \in [\![-N_f+1, N_f-1]\!]$,

$$N_{x,y}(\mathcal{P}_{[k]}) = \begin{pmatrix} N_x(\mathcal{P}_{[-N_f,k]}) \\ \vdots \\ N_x(\mathcal{P}_{[N_f-1,k]}) \end{pmatrix},$$

et, pour $j \in [\![-N_f, N_f - 1]\!]$,

$$N_x(\mathcal{P}_{[j,k]}) = \begin{pmatrix} P^3_{-N_f,j,k} \\ \vdots \\ P^3_{N_f-1,j,k} \end{pmatrix}.$$

La jacobienne de G,

$$G : (\mathcal{P}, \Phi)^T \in \mathbf{R}^M \longmapsto \begin{pmatrix} A^{DF}\mathcal{P} + B^{DF}\Phi + N^{DF}(\mathcal{P}) \\ C^{DF}\mathcal{P} + D^{DF}\Phi - F^{DF} \end{pmatrix} \in \mathbf{R}^M,$$

où $M = (2N_f)^2(2N_f - 1) + (2N_f)^2(2N - 1)$, pouvant être calculée sans complication particulière, le système matriciel non-linéaire (6.22) peut être résolu à l'aide de l'Algorithme 3.4, présenté dans le Chapitre 3, au Paragraphe 3.2.2.

La récupération des valeurs approchées P et φ en tous les nœuds de la grille de Différences Finies utilisée s'effectue après avoir donc déterminé $\mathcal{P}$ et Φ depuis cette résolution de (6.22), et en faisant usage bien entendu des relations (6.16)-(6.21).

6.2.2 Hybridation des approximations Eléments Finis/Différences Finies

Nous proposons ici une autre approche de discrétisation de (GLE-P), qui se distingue en particulier de la précédente dans la prise en compte de la condition d'interface (6.5). Celle-ci consiste à approcher les équations de (GLE-P) à l'aide de Différences Finies d'ordre 2 dans les directions (Ox) et (Oy) comme au paragraphe précédent, et à utiliser la méthode des Eléments Finis dans la direction (Oz).

On reconsidère les notations, introduites au Paragraphe 6.2.1, où,

- $x_i = \dfrac{d_x}{N_f} i \in [-d_x, d_x]$, pour tout $i \in [\![-N_f, N_f]\!]$;
- $y_j = \dfrac{d_y}{N_f} j \in [-d_y, d_y]$, pour tout $j \in [\![-N_f, N_f]\!]$;
- $z_k = \dfrac{a_p}{N_p} k + \dfrac{a_p N_f - a_f N_p}{N_p} \in [-d_z, -a_f]$, pour tout $k \in [\![-N_f - N_p, -N_f]\!]$;
- $z_k = \dfrac{a_f}{N_f} k \in [-a_f, a_f]$, pour tout $k \in [\![-N_f, N_f]\!]$;
- $z_k = \dfrac{a_p}{N_p} k - \dfrac{a_p N_f - a_f N_p}{N_p} \in [a_f, d_z]$, pour tout $k \in [\![N_f, N_f + N_p]\!]$,

et,

$$h_x = \frac{d_x}{N_f}; \quad h_y = \frac{d_y}{N_f}; \quad h_f = \frac{a_f}{N_f} \quad \text{et} \quad h_p = \frac{a_p}{N_p}.$$

Considérons $w : (x, y, z) \in [-d_x, d_x] \times [-d_y, d_y] \times [-d_z, d_z] \longmapsto -\frac{\phi_0}{d_z} z \in \mathbf{R}$ et posons,

$$\begin{array}{rcll} P_{i,j}(z) & \approx & P(x_i, y_j, z) & \forall (i,j) \in [\![-N_f, N_f]\!]^2, \quad \forall z \in (-a_f, a_f), \\ \phi_{i,j}(z) & \approx & \varphi(x_i, y_j, z) & \forall (i,j) \in [\![-N_f, N_f]\!]^2, \quad \forall z \in (-d_z, d_z), \\ w_{i,j}(z) & = & w(x_i, y_j, z) & \forall (i,j) \in [\![-N_f, N_f]\!]^2, \quad \forall z \in (-d_z, d_z), \\ \varphi_{i,j}(z) & = & \phi_{i,j}(z) - w_{i,j}(z) & \forall (i,j) \in [\![-N_f, N_f]\!]^2, \quad \forall z \in (-d_z, d_z). \end{array}$$

Commençons par établir une discrétisation partielle du système relevé par w avec la méthode de Différences Finies, suivant les directions (Ox) et (Oy).

Equation (6.1) : pour tout $(i,j) \in [\![-N_f, N_f-1]\!]^2$ et tout $z \in (-a_f, a_f)$,

$$\begin{aligned} &2a_3^\star P_{i,j}(z) + 4a_{33}^\star P_{i,j}(z)^3 + 2k_2 \frac{2P_{i,j}(z) - P_{i+1,j}(z) - P_{i-1,j}(z)}{h_x^2} \\ &+2k_2 \frac{2P_{i,j}(z) - P_{i,j+1}(z) - P_{i,j-1}(z)}{h_y^2} - 2k_2 \partial_{zz}^2 P_{i,j}(z) \\ &= -\partial_z \varphi_{i,j}(z) - \partial_z w_{i,j}(z). \end{aligned} \tag{6.23}$$

Equation (6.2) : pour tout $(i,j) \in [\![-N_f, N_f-1]\!]^2$ et tout $z \in (-a_f, a_f)$,

$$\begin{aligned} &\varepsilon_0 \varepsilon_\perp \frac{2\varphi_{i,j}(z) - \varphi_{i+1,j}(z) - \varphi_{i-1,j}(z)}{h_x^2} + \varepsilon_0 \varepsilon_\perp \frac{2\varphi_{i,j}(z) - \varphi_{i,j+1}(z) - \varphi_{i,j-1}(z)}{h_y^2} \\ &-\varepsilon_0 \varepsilon_\parallel \partial_{zz}^2 \varphi_{i,j}(z) - \varepsilon_0 \varepsilon_\parallel \partial_{zz}^2 w_{i,j}(z) = -\partial_z P_{i,j}(z). \end{aligned} \tag{6.24}$$

Equation (6.3) : pour tout $(i,j) \in [\![-N_f, N_f-1]\!]^2$ et tout $z \in (-d_z, -a_f) \cup (a_f, d_z)$,

$$\begin{aligned} &\varepsilon_0 \varepsilon_p \frac{2\varphi_{i,j}(z) - \varphi_{i+1,j}(z) - \varphi_{i-1,j}(z)}{h_x^2} + \varepsilon_0 \varepsilon_p \frac{2\varphi_{i,j}(z) - \varphi_{i,j+1}(z) - \varphi_{i,j-1}(z)}{h_y^2} \\ &-\varepsilon_0 \varepsilon_p \partial_{zz}^2 \varphi_{i,j}(z) - \varepsilon_0 \varepsilon_p \partial_{zz}^2 w_{i,j}(z) = 0. \end{aligned} \tag{6.25}$$

Equation (6.4) : pour tout $(i,j) \in [\![-N_f, N_f]\!]^2$ et $z = \pm a_f$,

$$\varphi_{i,j}|_{\Omega_f}(z) = \varphi_{i,j}|_{\Omega_p}(z). \tag{6.26}$$

Equation (6.5) : pour tout $(i,j) \in [\![-N_f, N_f]\!]^2$ et $z = \pm a_f$,

$$\varepsilon_0(\varepsilon_\parallel \partial_z \varphi_{i,j}|_{\Omega_f}(z) - \varepsilon_p \partial_z \varphi_{i,j}|_{\Omega_p}(z)) + \varepsilon_0(\varepsilon_\parallel \partial_z w_{i,j}|_{\Omega_f}(z) - \varepsilon_p \partial_z w_{i,j}|_{\Omega_p}(z)) = P_{i,j}(z). \tag{6.27}$$

Equation (6.6) : pour tout $j \in [\![-N_f, N_f]\!]$ et tout $z \in (-a_f, a_f)$,

$$\left\{ \begin{array}{rcl} P_{N_f,j}(z) & = & P_{-N_f,j}(z), \\ P_{-N_f-1,j}(z) & = & P_{N_f-1,j}(z). \end{array} \right. \tag{6.28}$$

Equation (6.7) : pour tout $i \in [\![-N_f, N_f]\!]$ et tout $z \in (-a_f, a_f)$,

$$\left\{ \begin{array}{rcl} P_{i,N_f}(z) & = & P_{i,-N_f}(z), \\ P_{i,-N_f-1}(z) & = & P_{i,N_f-1}(z). \end{array} \right. \tag{6.29}$$

Equation (6.8) : pour tout $(i,j) \in [\![-N_f, N_f]\!]^2$ et $z = \pm a_f$,

$$\partial_z P_{i,j}(z) = 0. \tag{6.30}$$

Equation (6.9) : pour tout $j \in [\![-N_f, N_f]\!]$ et tout $z \in (-d_z, d_z)$,

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \varphi_{N_f,j}(z) & = & \varphi_{-N_f,j}(z), \\ \varphi_{-N_f-1,j}(z) & = & \varphi_{N_f-1,j}(z). \end{array} \right. \tag{6.31}$$

Equation (6.10) : pour tout $i \in [\![-N_f, N_f]\!]$ et tout $z \in (-d_z, d_z)$,

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \varphi_{i,N_f}(z) & = & \varphi_{i,-N_f}(z), \\ \varphi_{i,-N_f-1}(z) & = & \varphi_{i,N_f-1}(z). \end{array} \right. \tag{6.32}$$

Equation (6.11) : pour tout $(i,j) \in [\![-N_f, N_f]\!]^2$, et $z = \pm d_z$,

$$\varphi_{i,j}(z) = 0. \tag{6.33}$$

L'étape suivante consiste à fixer $(i,j) \in [\![-N_f, N_f - 1]\!]^2$, puis à établir une formulation variationnelle du système formé par (6.23)-(6.27), (6.30) et (6.33). Introduisons l'espace suivant,

$$W = H^1\left((-a_f, a_f)\right) \times H_0^1\left((-d_z, d_z)\right).$$

Soit $(P_{i,j}, \varphi_{i,j}) \in W \cap \left(H^2((-a_f, a_f)) \times H^2((-d_z, d_z))\right)$ vérifiant (6.23)-(6.27) et (6.30). Donnons-nous également $(Q_{i,j}, \psi_{i,j}) \in W$. En intégrant l'équation (6.23) contre $Q_{i,j}$, et en utilisant aussi (6.30), nous obtenons que,

$$\begin{aligned}
&\int_{-a_f}^{a_f} (2a_3^\star + 4a_{33}^\star P_{i,j}^2) P_{i,j} Q_{i,j} dz + \int_{-a_f}^{a_f} 2k_2 \frac{2P_{i,j} - P_{i+1,j} - P_{i-1,j}}{h_x^2} Q_{i,j} dz \\
&+ \int_{-a_f}^{a_f} 2k_2 \frac{2P_{i,j} - P_{i,j+1} - P_{i,j-1}}{h_y^2} Q_{i,j} dz + \int_{-a_f}^{a_f} 2k_2 (\partial_z P_{i,j})(\partial_z Q_{i,j}) dz = \\
&- \int_{-a_f}^{a_f} (\partial_z \varphi_{i,j}) Q_{i,j} dz - \int_{-a_f}^{a_f} (\partial_z w_{i,j}) Q_{i,j} dz.
\end{aligned} \tag{6.34}$$

L'intégration de l'équation (6.24) contre $\psi_{i,j}$ fournit,

$$\begin{aligned}
&\int_{-a_f}^{a_f} \varepsilon_0 \varepsilon_\perp \frac{2\varphi_{i,j} - \varphi_{i+1,j} - \varphi_{i-1,j}}{h_x^2} \psi_{i,j} dz + \int_{-a_f}^{a_f} \varepsilon_0 \varepsilon_\perp \frac{2\varphi_{i,j} - \varphi_{i,j+1} - \varphi_{i,j-1}}{h_y^2} \psi_{i,j} dz \\
&+ \int_{-a_f}^{a_f} \varepsilon_0 \varepsilon_\parallel (\partial_z \varphi_{i,j})(\partial_z \psi_{i,j}) dz - \varepsilon_0 \varepsilon_\parallel \left[\partial_z \varphi_{i,j}(a_f)\psi_{i,j}(a_f) - \partial_z \varphi_{i,j}(-a_f)\psi_{i,j}(-a_f)\right] \\
&+ \int_{-a_f}^{a_f} \varepsilon_0 \varepsilon_\parallel (\partial_z w_{i,j})(\partial_z \psi_{i,j}) dz - \varepsilon_0 \varepsilon_\parallel \left[\partial_z w_{i,j}(a_f)\psi_{i,j}(a_f) - \partial_z w_{i,j}(-a_f)\psi_{i,j}(-a_f)\right] \\
&= - \int_{-a_f}^{a_f} (\partial_z P_{i,j}) \psi_{i,j} dz,
\end{aligned}$$

tandis que l'intégration de (6.25) contre $\psi_{i,j}$ donne,

$$\begin{aligned}
&\int_{-d_z}^{-a_f} \varepsilon_0 \varepsilon_p \frac{2\varphi_{i,j} - \varphi_{i+1,j} - \varphi_{i-1,j}}{h_x^2} \psi_{i,j} dz + \int_{-d_z}^{-a_f} \varepsilon_0 \varepsilon_p \frac{2\varphi_{i,j} - \varphi_{i,j+1} - \varphi_{i,j-1}}{h_y^2} \psi_{i,j} dz \\
&+ \int_{a_f}^{d_z} \varepsilon_0 \varepsilon_p \frac{2\varphi_{i,j} - \varphi_{i+1,j} - \varphi_{i-1,j}}{h_x^2} \psi_{i,j} dz + \int_{a_f}^{d_z} \varepsilon_0 \varepsilon_p \frac{2\varphi_{i,j} - \varphi_{i,j+1} - \varphi_{i,j-1}}{h_y^2} \psi_{i,j} dz \\
&+ \int_{-d_z}^{-a_f} \varepsilon_0 \varepsilon_p (\partial_z \varphi_{i,j})(\partial_z \psi_{i,j}) dz - \varepsilon_0 \varepsilon_p \partial_z \varphi_{i,j}(-a_f)\psi_{i,j}(-a_f) \\
&+ \int_{-d_z}^{-a_f} \varepsilon_0 \varepsilon_p (\partial_z w_{i,j})(\partial_z \psi_{i,j}) dz - \varepsilon_0 \varepsilon_p \partial_z w_{i,j}(-a_f)\psi_{i,j}(-a_f) \\
&+ \int_{a_f}^{d_z} \varepsilon_0 \varepsilon_p (\partial_z \varphi_{i,j})(\partial_z \psi_{i,j}) dz + \varepsilon_0 \varepsilon_p \partial_z \varphi_{i,j}(a_f)\psi_{i,j}(a_f) \\
&+ \int_{a_f}^{d_z} \varepsilon_0 \varepsilon_p (\partial_z w_{i,j})(\partial_z \psi_{i,j}) dz + \varepsilon_0 \varepsilon_p \partial_z w_{i,j}(a_f)\psi_{i,j}(a_f) = 0.
\end{aligned}$$

La somme des deux dernières relations se simplifie avec (6.27) en,

$$\begin{aligned}
&\int_{-a_f}^{a_f} \varepsilon_0\varepsilon_\perp \frac{2\varphi_{i,j}-\varphi_{i+1,j}-\varphi_{i-1,j}}{h_x^2}\psi_{i,j}dz + \int_{-a_f}^{a_f} \varepsilon_0\varepsilon_\perp \frac{2\varphi_{i,j}-\varphi_{i,j+1}-\varphi_{i,j-1}}{h_y^2}\psi_{i,j}dz \\
&+\int_{-d_z}^{-a_f} \varepsilon_0\varepsilon_p \frac{2\varphi_{i,j}-\varphi_{i+1,j}-\varphi_{i-1,j}}{h_x^2}\psi_{i,j}dz + \int_{-d_z}^{-a_f} \varepsilon_0\varepsilon_p \frac{2\varphi_{i,j}-\varphi_{i,j+1}-\varphi_{i,j-1}}{h_y^2}\psi_{i,j}dz \\
&+\int_{a_f}^{d_z} \varepsilon_0\varepsilon_p \frac{2\varphi_{i,j}-\varphi_{i+1,j}-\varphi_{i-1,j}}{h_x^2}\psi_{i,j}dz + \int_{a_f}^{d_z} \varepsilon_0\varepsilon_p \frac{2\varphi_{i,j}-\varphi_{i,j+1}-\varphi_{i,j-1}}{h_y^2}\psi_{i,j}dz \\
&+\int_{-a_f}^{a_f} \varepsilon_0\varepsilon_\parallel (\partial_z\varphi_{i,j})(\partial_z\psi_{i,j})dz + \int_{-d_z}^{-a_f} \varepsilon_0\varepsilon_p (\partial_z\varphi_{i,j})(\partial_z\psi_{i,j})dz \\
&+\int_{a_f}^{d_z} \varepsilon_0\varepsilon_p (\partial_z\varphi_{i,j})(\partial_z\psi_{i,j})dz + \int_{-a_f}^{a_f} \varepsilon_0\varepsilon_\parallel (\partial_z w_{i,j})(\partial_z\psi_{i,j})dz \\
&+\int_{-d_z}^{-a_f} \varepsilon_0\varepsilon_p (\partial_z w_{i,j})(\partial_z\psi_{i,j})dz + \int_{a_f}^{d_z} \varepsilon_0\varepsilon_p (\partial_z w_{i,j})(\partial_z\psi_{i,j})dz \\
&-P_{i,j}(a_f)\psi_{i,j}(a_f) + P_{i,j}(-a_f)\psi_{i,j}(-a_f) + \int_{-a_f}^{a_f} (\partial_z P_{i,j})\psi_{i,j}dz = 0.
\end{aligned} \tag{6.35}$$

La formulation variationnelle de (6.23)-(6.27), (6.30) et (6.33) consiste donc à trouver $(P_{i,j}, \varphi_{i,j}) \in W$ vérifiant, pour tout $(Q_{i,j}, \psi_{i,j}) \in W$, (6.34)-(6.35).

Introduisons maintenant l'espace discret,

$$W_h = X_h \times Y_h,$$

avec,

$$X_h = \left\{ P_h \in C^0([-a_f, a_f])\ ;\ P_h|_{[z_k, z_{k+1}]} \in P^1,\ \forall k \in [\![-N_f, N_f-1]\!] \right\},$$

$$Y_h = \left\{ \varphi_h \in C^0([-d_z, d_z])\ ;\ \varphi_h|_{[z_k, z_{k+1}]} \in P^1,\ \forall k \in [\![-N, N-1]\!],\ \varphi_h(\pm d_z) = 0 \right\},$$

où P^1 est l'espace des polynômes à une variable de degré au plus 1. Le pas de maillage h, relatif à $[-d_z, d_z]$, est tel que $h = h_f$ lorsque $[z_k, z_{k+1}] \subset [-a_f, a_f]$ et $h = h_p$ quand $[z_k, z_{k+1}] \subset [-d_z, -a_f] \cup [a_f, d_z]$. La formulation discrète associée à la formulation variationnelle basée sur (6.34)-(6.35) consiste, pour $(i,j) \in [\![-N_f, N_f-1]\!]^2$, à trouver $(P_{i,j,h}, \varphi_{i,j,h}) \in W_h$ tel que, pour tout $(Q_{i,j,h}, \psi_{i,j,h}) \in W_h$ on ait,

$$\begin{aligned}
&\int_{-a_f}^{a_f} (2a_3^\star + 4a_{33}^\star P_{i,j,h}^2) P_{i,j,h} Q_{i,j,h} dz + \int_{-a_f}^{a_f} 2k_2 \frac{2P_{i,j,h} - P_{i+1,j,h} - P_{i-1,j,h}}{h_x^2} Q_{i,j,h} dz \\
&+\int_{-a_f}^{a_f} 2k_2 \frac{2P_{i,j,h} - P_{i,j+1,h} - P_{i,j-1,h}}{h_y^2} Q_{i,j,h} dz + \int_{-a_f}^{a_f} 2k_2 (\partial_z P_{i,j,h})(\partial_z Q_{i,j,h}) dz \\
&= -\int_{-a_f}^{a_f} (\partial_z \varphi_{i,j,h}) Q_{i,j,h} dz - \int_{-a_f}^{a_f} (\partial_z w_{i,j}) Q_{i,j,h} dz,
\end{aligned} \tag{6.36}$$

$$
\begin{aligned}
&\int_{-a_f}^{a_f} \varepsilon_0\varepsilon_\perp \left(\frac{2\varphi_{i,j,h} - \varphi_{i+1,j,h} - \varphi_{i-1,j,h}}{h_x^2} + \frac{2\varphi_{i,j,h} - \varphi_{i,j+1,h} - \varphi_{i,j-1,h}}{h_y^2} \right) \psi_{i,j,h} dz \\
&+ \int_{-d_z}^{-a_f} \varepsilon_0\varepsilon_p \left(\frac{2\varphi_{i,j,h} - \varphi_{i+1,j,h} - \varphi_{i-1,j,h}}{h_x^2} + \frac{2\varphi_{i,j,h} - \varphi_{i,j+1,h} - \varphi_{i,j-1,h}}{h_y^2} \right) \psi_{i,j,h} dz \\
&+ \int_{a_f}^{d_z} \varepsilon_0\varepsilon_p \left(\frac{2\varphi_{i,j,h} - \varphi_{i+1,j,h} - \varphi_{i-1,j,h}}{h_x^2} + \frac{2\varphi_{i,j,h} - \varphi_{i,j+1,h} - \varphi_{i,j-1,h}}{h_y^2} \right) \psi_{i,j,h} dz \\
&+ \int_{-a_f}^{a_f} \varepsilon_0\varepsilon_\parallel (\partial_z \varphi_{i,j,h})(\partial_z \psi_{i,j,h}) dz + \int_{-d_z}^{-a_f} \varepsilon_0\varepsilon_p (\partial_z \varphi_{i,j,h})(\partial_z \psi_{i,j,h}) dz \\
&+ \int_{a_f}^{d_z} \varepsilon_0\varepsilon_p (\partial_z \varphi_{i,j,h})(\partial_z \psi_{i,j,h}) dz + \int_{-a_f}^{a_f} \varepsilon_0\varepsilon_\parallel (\partial_z w_{i,j})(\partial_z \psi_{i,j,h}) dz \\
&+ \int_{-d_z}^{-a_f} \varepsilon_0\varepsilon_p (\partial_z w_{i,j})(\partial_z \psi_{i,j,h}) dz + \int_{a_f}^{d_z} \varepsilon_0\varepsilon_p (\partial_z w_{i,j})(\partial_z \psi_{i,j,h}) dz \\
&- P_{i,j,h}(a_f)\psi_{i,j,h}(a_f) + P_{i,j,h}(-a_f)\psi_{i,j,h}(-a_f) + \int_{-a_f}^{a_f} (\partial_z P_{i,j,h})\psi_{i,j,h} dz = 0.
\end{aligned}
\tag{6.37}
$$

Notons v_l la fonction de forme définie sur $[-d_z, d_z]$ associée à z_l, où $l \in [\![-N, N]\!]$. Alors, il existe $(P_{i,j,l})_{l\in[\![-N_f,N_f]\!]} \in \mathbf{R}^{2N_f+1}$ et $(\varphi_{i,j,l})_{l\in[\![-N+1,N-1]\!]} \in \mathbf{R}^{2N-1}$ tels que,

$$
P_{i,j,h} = \sum_{l=-N_f}^{N_f} P_{i,j,l} v_l \quad \text{et} \quad \varphi_{i,j,h} = \sum_{l=-N+1}^{N-1} \varphi_{i,j,l} v_l.
$$

La relation (6.36) devient : pour tout $k \in [\![-N_f, N_f]\!]$,

$$
\begin{aligned}
&\left(2a_3^\star + \frac{4k_2}{h_x^2} + \frac{4k_2}{h_y^2}\right) \sum_{l=-N_f}^{N_f} P_{i,j,l} \int_{-a_f}^{a_f} v_l v_k dz + 4a_{33}^\star \int_{-a_f}^{a_f} \left(\sum_{l=-N_f}^{N_f} P_{i,j,l} v_l \right)^3 v_k dz \\
&- \frac{2k_2}{h_x^2} \sum_{l=-N_f}^{N_f} P_{i+1,j,l} \int_{-a_f}^{a_f} v_l v_k dz - \frac{2k_2}{h_x^2} \sum_{l=-N_f}^{N_f} P_{i-1,j,l} \int_{-a_f}^{a_f} v_l v_k dz \\
&- \frac{2k_2}{h_y^2} \sum_{l=-N_f}^{N_f} P_{i,j+1,l} \int_{-a_f}^{a_f} v_l v_k dz - \frac{2k_2}{h_y^2} \sum_{l=-N_f}^{N_f} P_{i,j-1,l} \int_{-a_f}^{a_f} v_l v_k dz \\
&+ 2k_2 \sum_{l=-N_f}^{N_f} P_{i,j,l} \int_{-a_f}^{a_f} (\partial_z v_l)(\partial_z v_k) dz + \sum_{l=-N+1}^{N-1} \varphi_{i,j,l} \int_{-a_f}^{a_f} (\partial_z v_l) v_k dz \\
&= \int_{-a_f}^{a_f} \frac{\phi_0}{d_z} v_k dz.
\end{aligned}
\tag{6.38}
$$

La relation (6.37) se récrit, pour tout $k \in [\![-N+1, N-1]\!]$,

$$
\begin{aligned}
&\varepsilon_0\varepsilon_\perp \left(\frac{2}{h_x^2}+\frac{2}{h_y^2}\right) \sum_{l=-N+1}^{N-1} \varphi_{i,j,l} \int_{-a_f}^{a_f} v_l v_k dz \\
&+\varepsilon_0\varepsilon_p \left(\frac{2}{h_x^2}+\frac{2}{h_y^2}\right) \sum_{l=-N+1}^{N-1} \varphi_{i,j,l} \int_{a_f}^{d_z} v_l v_k dz \\
&+\varepsilon_0\varepsilon_p \left(\frac{2}{h_x^2}+\frac{2}{h_y^2}\right) \sum_{l=-N+1}^{N-1} \varphi_{i,j,l} \int_{-d_z}^{-a_f} v_l v_k dz \\
&-\frac{\varepsilon_0\varepsilon_\perp}{h_x^2} \sum_{l=-N+1}^{N-1} \varphi_{i+1,j,l} \int_{-a_f}^{a_f} v_l v_k dz - \frac{\varepsilon_0\varepsilon_\perp}{h_x^2} \sum_{l=-N+1}^{N-1} \varphi_{i-1,j,l} \int_{-a_f}^{a_f} v_l v_k dz \\
&-\frac{\varepsilon_0\varepsilon_\perp}{h_y^2} \sum_{l=-N+1}^{N-1} \varphi_{i,j+1,l} \int_{-a_f}^{a_f} v_l v_k dz - \frac{\varepsilon_0\varepsilon_\perp}{h_y^2} \sum_{l=-N+1}^{N-1} \varphi_{i,j-1,l} \int_{-a_f}^{a_f} v_l v_k dz \\
&-\frac{\varepsilon_0\varepsilon_p}{h_x^2} \sum_{l=-N+1}^{N-1} \varphi_{i+1,j,l} \int_{-d_z}^{-a_f} v_l v_k dz - \frac{\varepsilon_0\varepsilon_p}{h_x^2} \sum_{l=-N+1}^{N-1} \varphi_{i-1,j,l} \int_{-d_z}^{-a_f} v_l v_k dz \\
&-\frac{\varepsilon_0\varepsilon_p}{h_y^2} \sum_{l=-N+1}^{N-1} \varphi_{i,j+1,l} \int_{-d_z}^{-a_f} v_l v_k dz - \frac{\varepsilon_0\varepsilon_p}{h_y^2} \sum_{l=-N+1}^{N-1} \varphi_{i,j-1,l} \int_{-d_z}^{-a_f} v_l v_k dz \\
&-\frac{\varepsilon_0\varepsilon_p}{h_x^2} \sum_{l=-N+1}^{N-1} \varphi_{i+1,j,l} \int_{a_f}^{d_z} v_l v_k dz - \frac{\varepsilon_0\varepsilon_p}{h_x^2} \sum_{l=-N+1}^{N-1} \varphi_{i-1,j,l} \int_{a_f}^{d_z} v_l v_k dz \\
&-\frac{\varepsilon_0\varepsilon_p}{h_y^2} \sum_{l=-N+1}^{N-1} \varphi_{i,j+1,l} \int_{a_f}^{d_z} v_l v_k dz - \frac{\varepsilon_0\varepsilon_p}{h_y^2} \sum_{l=-N+1}^{N-1} \varphi_{i,j-1,l} \int_{a_f}^{d_z} v_l v_k dz \\
&+\varepsilon_0\varepsilon_\parallel \sum_{l=-N+1}^{N-1} \varphi_{i,j,l} \int_{-a_f}^{a_f} (\partial_z v_l)(\partial_z v_k) dz + \varepsilon_0\varepsilon_p \sum_{l=-N+1}^{N-1} \varphi_{i,j,l} \int_{-d_z}^{-a_f} (\partial_z v_l)(\partial_z v_k) dz \\
&+\varepsilon_0\varepsilon_p \sum_{l=-N+1}^{N-1} \varphi_{i,j,l} \int_{a_f}^{d_z} (\partial_z v_l)(\partial_z v_k) dz - P_{i,j,N_f} \mathbf{1}_{k=N_f} + P_{i,j,-N_f} \mathbf{1}_{k=-N_f} \\
&+ \sum_{l=-N_f}^{N_f} P_{i,j,l} \int_{-a_f}^{a_f} (\partial_z v_l) v_k dz \\
&= \varepsilon_0\varepsilon_\parallel \int_{-a_f}^{a_f} \frac{\phi_0}{d_z} (\partial_z v_k) dz + \varepsilon_0\varepsilon_p \int_{-d_z}^{-a_f} \frac{\phi_0}{d_z} (\partial_z v_k) dz + \varepsilon_0\varepsilon_p \int_{a_f}^{d_z} \frac{\phi_0}{d_z} (\partial_z v_k) dz,
\end{aligned}
\tag{6.39}
$$

où il est noté que $\mathbf{1}_{k=N_f}(k) = 1$ si $k = N_f$ et 0 si $k \neq N_f$, et de même $\mathbf{1}_{k=-N_f}$.

Les termes $\int_{-a_f}^{a_f} v_l v_k dz$, $\int_{-d_z}^{-a_f} v_l v_k dz$ et $\int_{a_f}^{d_z} v_l v_k dz$, ainsi que toutes les autres intégrales apparaissant dans (6.38)-(6.39), sont déterminés de manière exacte, en fonction de h_f, h_p.

La formulation variationnelle discrète (6.36)-(6.37) est ensuite traduite à l'aide des relations (6.38)-(6.39), pour permettre d'associer finalement au système (GLE-P) le système matriciel non-linéaire qui s'écrit comme suit,

$$
\begin{pmatrix} A^{EF/DF} & B^{EF/DF} \\ C^{EF/DF} & D^{EF/DF} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{P} \\ \Phi \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} N^{EF/DF}(\mathcal{P}) \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F_1^{EF/DF} \\ F_2^{EF/DF} \end{pmatrix}, \tag{6.40}
$$

où, en utilisant les notations du paragraphe précédent :

$$
\begin{cases}
\mathcal{P}_{[j,k]} = (P_{i,j,k})_{i\in[\![-N_f,N_f-1]\!]}^T \in \mathbf{R}^{2N_f} & \forall (j,k) \in [\![-N_f, N_f-1]\!] \times [\![-N_f, N_f]\!], \\
\Phi_{[j,k]} = (\varphi_{i,j,k})_{i\in[\![-N_f,N_f-1]\!]}^T \in \mathbf{R}^{2N_f} & \forall (j,k) \in [\![-N_f, N_f-1]\!] \times [\![-N+1, N-1]\!],
\end{cases}
$$

puis,

$$\begin{cases} \mathcal{P}_{[k]} = \begin{pmatrix} \mathcal{P}_{[-N_f,k]} \\ \mathcal{P}_{[-N_f+1,k]} \\ \vdots \\ P_{[N_f-1,k]} \end{pmatrix} \in \mathbf{R}^{(2N_f)^2} \quad \forall k \in [\![-N_f, N_f]\!], \\ \\ \Phi_{[k]} = \begin{pmatrix} \Phi_{[-N_f,k]} \\ \Phi_{[-N_f+1,k]} \\ \vdots \\ \Phi_{[N_f-1,k]} \end{pmatrix} \in \mathbf{R}^{(2N_f)^2} \quad \forall k \in [\![-N+1, N-1]\!], \end{cases}$$

ainsi que,

$$\mathcal{P} = \begin{pmatrix} \mathcal{P}_{[-N_f]} \\ \mathcal{P}_{[-N_f+1]} \\ \vdots \\ \mathcal{P}_{[N_f]} \end{pmatrix} \in \mathbf{R}^{(2N_f)^2(2N_f+1)} \quad \text{et} \quad \Phi = \begin{pmatrix} \Phi_{[-N+1]} \\ \Phi_{[-N+2]} \\ \vdots \\ \Phi_{[N-1]} \end{pmatrix} \in \mathbf{R}^{(2N_f)^2(2N-1)}.$$

Dans (6.40), on a que,

$$\begin{array}{rcl} A^{EF/DF} & \in & \mathcal{M}_{(2N_f)^2(2N_f+1)\times(2N_f)^2(2N_f+1)}(\mathbf{R}), \\ B^{EF/DF} & \in & \mathcal{M}_{(2N_f)^2(2N_f+1)\times(2N_f)^2(2N-1)}(\mathbf{R}), \\ C^{EF/DF} & \in & \mathcal{M}_{(2N_f)^2(2N-1)\times(2N_f)^2(2N_f+1)}(\mathbf{R}), \\ D^{EF/DF} & \in & \mathcal{M}_{(2N_f)^2(2N-1)\times(2N_f)^2(2N-1)}(\mathbf{R}), \end{array}$$

ainsi que, $F_1^{EF/DF} \in \mathbf{R}^{(2N_f)^2(2N_f+1)}$ et $F_2^{EF/DF} \in \mathbf{R}^{(2N_f)^2(2N-1)}$. Aussi, $N^{EF/DF}(\mathcal{P})$ est un bloc vectoriel de taille $(2N_f)^2(2N_f+1)$.

Ces blocs matriciels possèdent une structure creuse. Nous omettons volontairement la présentation des détails de la constitution de chacun de ces blocs, de par la longueur de ces détails.

La jacobienne de G,

$$G : (\mathcal{P}, \Phi)^T \in \mathbf{R}^M \longmapsto \begin{pmatrix} A^{EF/DF}\mathcal{P} + B^{EF/DF}\Phi + N^{EF/DF}(\mathcal{P}) - F_1^{EF/DF} \\ C^{EF/DF}\mathcal{P} + D^{EF/DF}\Phi - F_2^{EF/DF} \end{pmatrix} \in \mathbf{R}^M,$$

où $M = (2N_f)^2(2N_f+1) + (2N_f)^2(2N-1)$, pouvant être calculée sans complication particulière, le système matriciel non-linéaire (6.40) peut être résolu à l'aide de l'Algorithme 3.4, présenté dans le Chapitre 3, au Paragraphe 3.2.2.

6.2.3 Comparaison des approches numériques

L'objectif ici est de comparer les deux approches numériques présentées aux Paragraphes 6.2.1 et 6.2.2, en ce qui concerne la précision numérique et le temps CPU.

Afin de disposer de solutions analytiques pour effectuer cette comparaison, nous considérons le système suivant, qui généralise le système (GLE-P) au niveau de la considération des données. Il s'agit de déterminer (P, φ) de sorte que :

$$\begin{cases} 2a_3^\star P + 4a_{33}^\star P^3 - 2k_2\Delta P + \partial_z\varphi = 0 & \text{dans } \Omega_f, \quad (6.41)\\ -\varepsilon_0(\varepsilon_\perp\partial_{xx}^2 + \varepsilon_\perp\partial_{yy}^2 + \varepsilon_\parallel\partial_{zz}^2)\varphi + \partial_z P = 0 & \text{dans } \Omega_f, \quad (6.42)\\ -\varepsilon_0(\varepsilon_p\partial_{xx}^2 + \varepsilon_p\partial_{yy}^2 + \varepsilon_p\partial_{zz}^2)\varphi = g_p & \text{dans } \Omega_p, \quad (6.43)\\ \varphi|_{\Omega_p} = \varphi|_{\Omega_f} & \text{sur } S_f, \quad (6.44)\\ \varepsilon_0(\varepsilon_\parallel\partial_z\varphi|_{\Omega_f} - \varepsilon_p\partial_z\varphi|_{\Omega_p}) = P & \text{sur } S_f, \quad (6.45)\\ P(x,y,z) = P(x+2d_x,y,z) & \forall(x,y,z)\in\Gamma_x^{f,-}, \quad (6.46)\\ P(x,y,z) = P(x,y+2d_y,z) & \forall(x,y,z)\in\Gamma_y^{f,-}, \quad (6.47)\\ \partial_z P = 0 & \text{sur } S_f, \quad (6.48)\\ \varphi(x,y,z) = \varphi(x+2d_x,y,z) & \forall(x,y,z)\in\Gamma_x^{-}, \quad (6.49)\\ \varphi(x,y,z) = \varphi(x,y+2d_y,z) & \forall(x,y,z)\in\Gamma_y^{-}, \quad (6.50)\\ \varphi = g_S & \text{sur } S^\pm, \quad (6.51) \end{cases}$$

où g_p et g_S sont des fonctions données. Ce système généralise (GLE-P), puisque nous le retrouvons avec $g_p \equiv 0$ dans Ω_p et $g_S = \mp\phi_0$ sur $S^\pm$.

Les approches numériques des Paragraphes 6.2.1 et 6.2.2 s'appliquent aussi pour la résolution de ce système, puisque seule cette considération de données diffère ici.

Nous convenons, afin de ne pas favoriser l'approche hybride, d'utiliser, pour le calcul des termes du second membre du système matriciel associé, une formule de quadrature qui n'est pas d'un ordre très élevé ; notamment, la formule des trapèzes est utilisée ici. Aussi, on tâchera de conserver un même nombre de degrés de liberté, relativement à ces deux approches, dans les simulations numériques. Les valeurs numériques associées à la couche PTO et présentées depuis la Table 5.1 sont reconsidérées pour ce chapitre. On considère également ici $\varepsilon_p = 200$, $\varepsilon_\perp = 100$ et $\varepsilon_\parallel = 20$.

On détermine une première famille de solutions analytiques $(P, \varphi^{(l)})$, $l \geq 2$, où la fonction P est recherchée comme étant constante et $\varphi^{(l)}$ est encore polynomiale par morceaux, en reconsidérant les notations utilisées au Paragraphe 5.2 du chapitre précédent :

$$\varphi^{(l)}(x,y,z) = A\frac{z}{a_f} \quad \forall(x,y,z)\in\Omega_f^+,$$

et,

$$\varphi^{(l)}(x,y,z) = \frac{B}{a_f}(a_f + a_p - z) + (z - a_f)^l \quad \forall(x,y,z)\in\Omega_p^+.$$

L'équation (6.44) fournit la condition,

$$\frac{B}{a_f} = \frac{A}{a_p}. \tag{6.52}$$

D'autre part, la condition (6.45) s'écrit,

$$\varepsilon_0\varepsilon_\parallel\frac{A}{a_f} - \varepsilon_0\varepsilon_p\left(-\frac{B}{a_f}\right) = P,$$

puis, nous avons avec (6.52),

$$A = \frac{a_f}{\varepsilon_0\left(\varepsilon_\parallel + \varepsilon_p\frac{a_f}{a_p}\right)}P.$$

Nous obtenons ainsi,

$$\varphi^{(l)}(x,y,z) = \frac{z}{\varepsilon_0\left(\varepsilon_\parallel + \varepsilon_p \frac{a_f}{a_p}\right)} P \quad \forall (x,y,z) \in \Omega_f^+,$$

et,

$$\varphi^{(l)}(x,y,z) = \frac{a_f + a_p - z}{\varepsilon_0\left(\frac{a_p}{a_f}\varepsilon_\parallel + \varepsilon_p\right)} P + (z - a_f)^l \quad \forall (x,y,z) \in \Omega_p^+.$$

De la même façon, nous obtenons :

$$\varphi^{(l)}(x,y,z) = \frac{z}{\varepsilon_0\left(\varepsilon_\parallel + \varepsilon_p \frac{a_f}{a_p}\right)} P \quad \forall (x,y,z) \in \Omega_f^-,$$

et,

$$\varphi^{(l)}(x,y,z) = -\frac{a_f + a_p + z}{\varepsilon_0\left(\frac{a_p}{a_f}\varepsilon_\parallel + \varepsilon_p\right)} P + (z + a_f)^l \quad \forall (x,y,z) \in \Omega_p^-.$$

D'autre part, la relation (6.41) fournit :

$$P\left(2a_3^\star + \frac{1}{\varepsilon_0\left(\varepsilon_\parallel + \varepsilon_p \frac{a_f}{a_p}\right)} + 4a_{33}^\star P^2\right) = 0.$$

On reconnaît l'équation (5.18). Ainsi, d'après les calculs du Paragraphe 5.2, si $T \leq T_{c\phi}(u_m)$, P peut être défini par,

$$P = \pm\left(-\frac{1}{4a_{33}^\star}\left(2a_3^\star + \frac{1}{\varepsilon_0\left(\varepsilon_\parallel + \varepsilon_p \frac{a_f}{a_p}\right)}\right)\right)^{1/2}. \tag{6.53}$$

Ensuite, la relation (6.43) impose le choix de g_p dans Ω_p :

$$g_p(x,y,z) = \begin{cases} -\varepsilon_0\varepsilon_p l(l-1)(z-a_f)^{l-2} & \forall (x,y,z) \in \Omega_p^+, \\ -\varepsilon_0\varepsilon_p l(l-1)(z+a_f)^{l-2} & \forall (x,y,z) \in \Omega_p^-, \end{cases}$$

et (6.51) celui de g_S sur $(z = \pm d_z)$:

$$g_S(x,y,z) = (\pm a_p)^l \quad \forall (x,y,z) \in S^\pm.$$

Finalement, les équations (6.41)-(6.51) sont vérifiées pour $(P, \varphi^{(l)})$, où $l \geq 2$.

En procédant de la même manière, nous pouvons construire d'autres familles de solutions analytiques ; par exemple, des solutions analytiques $(P, \varphi^{(l,\sin)})$, où $\varphi^{(l,\sin)}$ n'est plus polynomiale par morceaux, peuvent être envisagées. On considère encore P comme étant une fonction constante (voir ci-dessus), et $\varphi^{(l,\sin)}$ s'écrivant comme suit,

$$\begin{cases} \varphi^{(l,\sin)}(x,y,z) = \dfrac{z}{\varepsilon_0\left(\varepsilon_\parallel + \varepsilon_p \frac{a_f}{a_p}\right)} P & \forall (x,y,z) \in \Omega_f^+, \\ \varphi^{(l,\sin)}(x,y,z) = \dfrac{a_f + a_p - z}{\varepsilon_0\left(\frac{a_p}{a_f}\varepsilon_\parallel + \varepsilon_p\right)} P + (z - a_f)^l \sin\left(\dfrac{\pi x}{d_x}\right) & \forall (x,y,z) \in \Omega_p^+, \\ \varphi^{(l,\sin)}(x,y,z) = \dfrac{z}{\varepsilon_0\left(\varepsilon_\parallel + \varepsilon_p \frac{a_f}{a_p}\right)} P & \forall (x,y,z) \in \Omega_f^-, \\ \varphi^{(l,\sin)}(x,y,z) = -\dfrac{a_f + a_p + z}{\varepsilon_0\left(\frac{a_p}{a_f}\varepsilon_\parallel + \varepsilon_p\right)} P + (z + a_f)^l \sin\left(\dfrac{\pi x}{d_x}\right) & \forall (x,y,z) \in \Omega_p^-, \end{cases}$$

en posant,

$$g_p(x,y,z) = \begin{cases} -\varepsilon_0\varepsilon_p\left(-\frac{\pi^2}{d_x^2}(z-a_f)^2 + l(l-1)\right)\sin\left(\frac{\pi x}{d_x}\right)(z-a_f)^{l-2} & \forall (x,y,z)\in\Omega_p^+, \\ -\varepsilon_0\varepsilon_p\left(-\frac{\pi^2}{d_x^2}(z+a_f)^2 + l(l-1)\right)\sin\left(\frac{\pi x}{d_x}\right)(z+a_f)^{l-2} & \forall (x,y,z)\in\Omega_p^-, \end{cases}$$

et,

$$g_S(x,y,z) = \sin\left(\frac{\pi x}{d_x}\right)(\pm a_p)^l \quad \forall (x,y,z)\in S^{\pm}.$$

Effectuons maintenant différentes considérations numériques pour les pas de discrétisation h_f et h_p, puis posons ici $h = \max(h_f, h_p)$; les valeurs correspondant alors au pas h relativement à $\overline{\Omega}$, figurent sur la Table 6.1. Pour chacune de ces valeurs de h, $h = h_r$, $r = 1,2,3,4,5$, on définit les erreurs relatives suivantes :

$$err_{P,r}^{DF} = \frac{\max\limits_{-N_f\le i,j,k\le N_f} |P_{ex}(x_i,y_j,z_k) - P_{i,j,k}^{DF,r}|}{\max\limits_{-N_f\le i,j,k\le N_f} |P_{ex}(x_i,y_j,z_k)|},$$

$$err_{\varphi,r}^{DF} = \frac{\max\limits_{-N_f\le i,j\le N_f,-N\le k\le N} |\varphi_{ex}(x_i,y_j,z_k) - \varphi_{i,j,k}^{DF,r}|}{\max\limits_{-N_f\le i,j\le N_f,-N\le k\le N} |\varphi_{ex}(x_i,y_j,z_k)|},$$

$$err_{P,r}^{EF/DF} = \frac{\max\limits_{-N_f\le i,j,k\le N_f} |P_{ex}(x_i,y_j,z_k) - P_{i,j,k}^{EF/DF,r}|}{\max\limits_{-N_f\le i,j,k\le N_f} |P_{ex}(x_i,y_j,z_k)|},$$

$$err_{\varphi,r}^{EF/DF} = \frac{\max\limits_{-N_f\le i,j\le N_f,-N\le k\le N} |\varphi_{ex}(x_i,y_j,z_k) - \varphi_{i,j,k}^{EF/DF,r}|}{\max\limits_{-N_f\le i,j\le N_f,-N\le k\le N} |\varphi_{ex}(x_i,y_j,z_k)|},$$

avec $P_{i,j,k}^{DF,r}$ et $\varphi_{i,j,k}^{DF,r}$ les valeurs numériques approximatives de la polarisation P_{ex} et du potentiel φ_{ex} obtenues aux nœuds (x_i,y_j,z_k), avec le pas $h = h_r$, et depuis l'approche numérique du Paragraphe 6.2.1 qu'on désigne ici par (DF).

De même, $P_{i,j,k}^{EF/DF,r}$ et $\varphi_{i,j,k}^{EF/DF,r}$ sont les valeurs numériques approximatives de la polarisation P_{ex} et du potentiel φ_{ex} obtenues aux nœuds (x_i,y_j,z_k), avec le pas $h = h_r$, et à l'aide de l'approche numérique du Paragraphe 6.2.2 qu'on désigne ici par (EF/DF).

Enfin, on définit :

$$\alpha_{r+1}^{DF} = \frac{\ln\left(\dfrac{err_{\varphi,r+1}^{DF}}{err_{\varphi,r}^{DF}}\right)}{\ln\left(\dfrac{h_{r+1}}{h_r}\right)} \quad \text{et} \quad \alpha_{r+1}^{EF/DF} = \frac{\ln\left(\dfrac{err_{\varphi,r+1}^{EF/DF}}{err_{\varphi,r}^{EF/DF}}\right)}{\ln\left(\dfrac{h_{r+1}}{h_r}\right)}.$$

Certains de nos résultats numériques sont reportés sur la Table 6.1, après avoir considéré $a_f = a_p = d_x = d_y = 3$, $T = 0$. La polarisation est encore calculée de manière très précise lorsqu'on s'intéresse à la solution analytique $(P, \varphi^{(2)})$, mais l'erreur commise sur l'approximation du potentiel est perceptible. La comparaison entre les deux approches montre dans ce cas que (EF/DF) est plus précise. De plus, on obtient que $\alpha_r^{DF} \approx 1$ (voir également Figure 6.1), ce qui peut formellement se comprendre en se rappelant que la discrétisation de (6.5) et (6.8), comme de (6.45) et (6.48), a été réalisée avec des Différences

φ_{ex}	h_r	$err_{P,r}^{DF}$	$err_{\varphi,r}^{DF}$	α_r^{DF}	$err_{P,r}^{EF/DF}$	$err_{\varphi,r}^{EF/DF}$	$\alpha_r^{EF/DF}$
$\varphi^{(2)}$	0.500	$1.85.10^{-8}$	$1.40.10^{-1}$		$1.85.10^{-8}$	$6.33.10^{-2}$	
$\varphi^{(2)}$	0.333	$1.85.10^{-8}$	$9.37.10^{-2}$	1.00	$1.85.10^{-8}$	$2.75.10^{-2}$	2.00
$\varphi^{(2)}$	0.200	$1.85.10^{-8}$	$5.62.10^{-2}$	1.00	$1.85.10^{-8}$	$1.01.10^{-2}$	2.00
$\varphi^{(2)}$	0.100	$1.85.10^{-8}$	$2.81.10^{-2}$	1.00	$1.85.10^{-8}$	$2.53.10^{-3}$	2.00
$\varphi^{(2)}$	0.075	$1.84.10^{-8}$	$2.10.10^{-2}$	1.00	$1.85.10^{-8}$	$1.42.10^{-3}$	2.00
$\varphi^{(2,\sin)}$	0.500	$4.25.10^{-2}$	$3.74.10^{-2}$		$2.86.10^{-2}$	$3.27.10^{-2}$	
$\varphi^{(2,\sin)}$	0.333	$2.75.10^{-2}$	$2.18.10^{-2}$	1.33	$1.24.10^{-2}$	$1.42.10^{-2}$	2.00
$\varphi^{(2,\sin)}$	0.200	$1.66.10^{-2}$	$1.20.10^{-2}$	1.17	$4.58.10^{-3}$	$5.23.10^{-3}$	2.00
$\varphi^{(2,\sin)}$	0.100	$8.38.10^{-3}$	$5.59.10^{-3}$	1.10	$1.14.10^{-3}$	$1.30.10^{-3}$	2.00
$\varphi^{(2,\sin)}$	0.075	$6.30.10^{-3}$	$4.11.10^{-3}$	1.07	$6.44.10^{-4}$	$7.35.10^{-4}$	2.00
$\varphi^{(3,\sin)}$	0.500	$3.76.10^{-1}$	$4.73.10^{-1}$		$1.52.10^{-1}$	$2.12.10^{-1}$	
$\varphi^{(3,\sin)}$	0.333	$2.47.10^{-1}$	$3.11.10^{-1}$	1.01	$6.59.10^{-2}$	$9.21.10^{-2}$	2.01
$\varphi^{(3,\sin)}$	0.200	$1.50.10^{-1}$	$1.89.10^{-1}$	0.99	$2.43.10^{-2}$	$3.40.10^{-2}$	1.99
$\varphi^{(3,\sin)}$	0.100	$7.51.10^{-2}$	$9.43.10^{-2}$	1.00	$6.06.10^{-3}$	$8.47.10^{-3}$	2.01
$\varphi^{(3,\sin)}$	0.075	$5.68.10^{-2}$	$7.14.10^{-2}$	0.97	$3.44.10^{-3}$	$4.81.10^{-3}$	1.97

TABLE 6.1 – Erreurs générées par (DF) et (EF/DF) relativement aux solutions exactes $(P, \varphi^{(2)})$, $(P, \varphi^{(2,\sin)})$ et $(P, \varphi^{(3,\sin)})$, où P est une fonction constante strictement positive fournie par (6.53), lorsque $a_f = a_p = d_x = d_y = 3$, $T = 0$.

Pas (h)	*Nombre d'inconnues*	*Temps calcul (DF)*	*Temps calcul (EF/DF)*
0.333	$\approx$ 17 000	<1mn	<1mn
0.200	$\approx$ 79 000	$\approx$ 3mn	$\approx$ 3mn
0.100	$\approx$ 640 000	$\approx$ 1h20mn	$\approx$ 1h
0.075	$\approx$ 1 523 000	$\approx$ 4h30mn	$\approx$ 3h30mn

TABLE 6.2 – Comparaison des temps de calculs entre les méthodes (DF) et (EF/DF).

Finies d'ordre 1. Concernant la méthode (EF/DF), où la prise en compte des conditions (6.5) et (6.8), comme de (6.45) et (6.48), est faite de manière implicite, on obtient que $\alpha_r^{EF/DF} \approx 2$. Ces taux de convergence sont confirmés par les autres comparaisons effectuées avec les potentiels exacts $\varphi_{ex} = \varphi^{(2,\sin)}$ et $\varphi_{ex}^{(3,\sin)}$. Les taux ont été présentés sur la Table 6.1 seulement sur le potentiel ; ils sont également valables pour la polarisation, comme cela est visible sur la Figure 6.1.

Les temps CPU pour obtenir ces solutions sont reportés sur la Table 6.2. On y constate que la méthode (EF/DF) est sensiblement plus rapide. Notons que ces calculs ont été menés pour une valeur d_x ($d_x = d_y$) fixée, et qu'en général il faut réaliser de nombreuses simulations afin de déterminer les valeurs de d_x, d_y, qui permettent de minimiser l'énergie libre (*cf.*, *e.g.*, Paragraphe 5.4.1 au chapitre précédent). Ainsi, comme lorsque $h = 0.1$, la différence de 20mn entre les deux méthodes numériques est très importante.

Finalement la méthode hybride (EF/DF) est la plus performante, à la fois en terme de rapidité et de précision. Nous utiliserons cette approche dans toute la suite.

6.3 Etude numérique de la permittivité effective

L'objectif de ce paragraphe est d'investiguer le comportement de la permittivité effective en fonction de la température, et de comparer les solutions du système (GLE-P) avec celles de (GLE-N). Nous nous plaçons d'abord dans le même contexte que le chapitre précédent, en supposant que la permittivité de l'environnement paraélectrique est constante $\varepsilon_p = 200$. Nous nous rapprochons ensuite de l'expérimentation physique conduite dans [72] dans le sens où la couche PTO, représentée par Ω_f, est considérée entre deux couches STO, représentées par Ω_p^+ et Ω_p^- ; la permittivité associée à Ω_p^+ et Ω_p^- dépend alors de la température.

Fixons le pas de température pour toute l'étude qui va suivre à $\delta T = 10$. Il est à noter que nous ne sommes plus concernés ici par une génération systématique de maillages d'éléments finis de $\overline{\Omega}$, comme dans le chapitre précédent, pour la détermination des valeurs des paramètres d_x et d_y qui rendent minimale l'énergie libre associée au système. Les expérimentations numériques sont menées ici de manière beaucoup moins fastidieuse, puisque la génération de grilles de nœuds $(x_i, y_j, z_k)_{-N_f \leq i,j \leq N_f, -N \leq k \leq N}$, de $\overline{\Omega}$, est gérée en interne par notre code de calculs (aucun maillage d'éléments finis de $\overline{\Omega}$ n'est sollicité ici dans cette détermination). Celle-ci s'effectue à travers un procédé ajustant les affectations de valeurs à N_f, N_p, pour chaque considération itérative de d_x et d_y. Dans le cas du présent modèle (GLE-P), les valeurs de d_x et d_y qui en résulteront seront appelées ici demi-périodes rendant minimale l'énergie libre. Nous mènerons l'investigation numérique de la permittivité

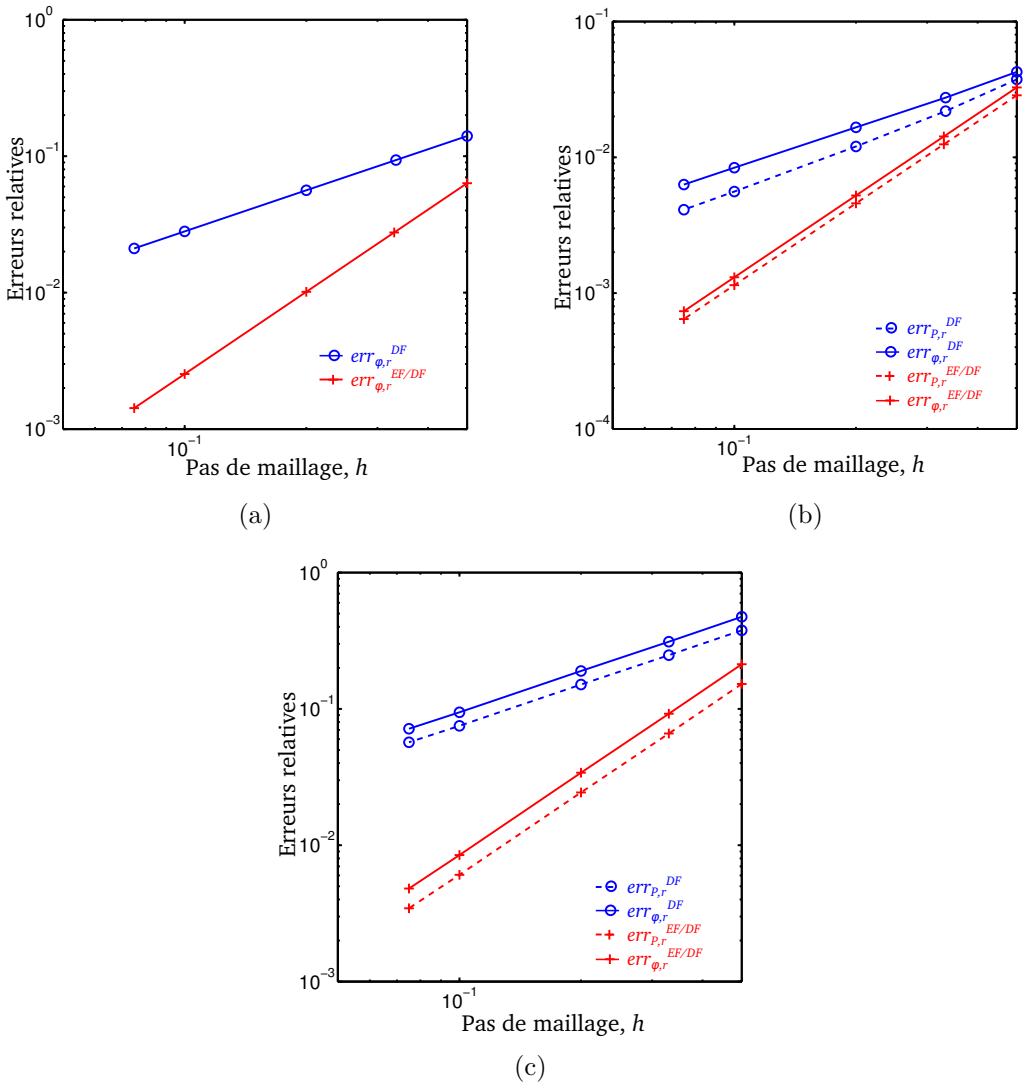


FIGURE 6.1 – Erreurs relatives commises avec les méthodes (DF) et (EF/DF) (représentations en échelle logarithmique), lorsque $\varphi_{ex} = \varphi^{(2)}$ (a), $\varphi_{ex} = \varphi^{(2,\sin)}$ (b) et $\varphi_{ex} = \varphi^{(3,\sin)}$ (c) ; les erreurs relatives par rapport à P_{ex}, qui est la fonction constante strictement positive fournie par (6.53) (courbes en traits interrompus) et à φ_{ex} (courbes en trait continu) sont représentées ; $a_f = a_p = d_x = d_y = 3$, $T = 0$.

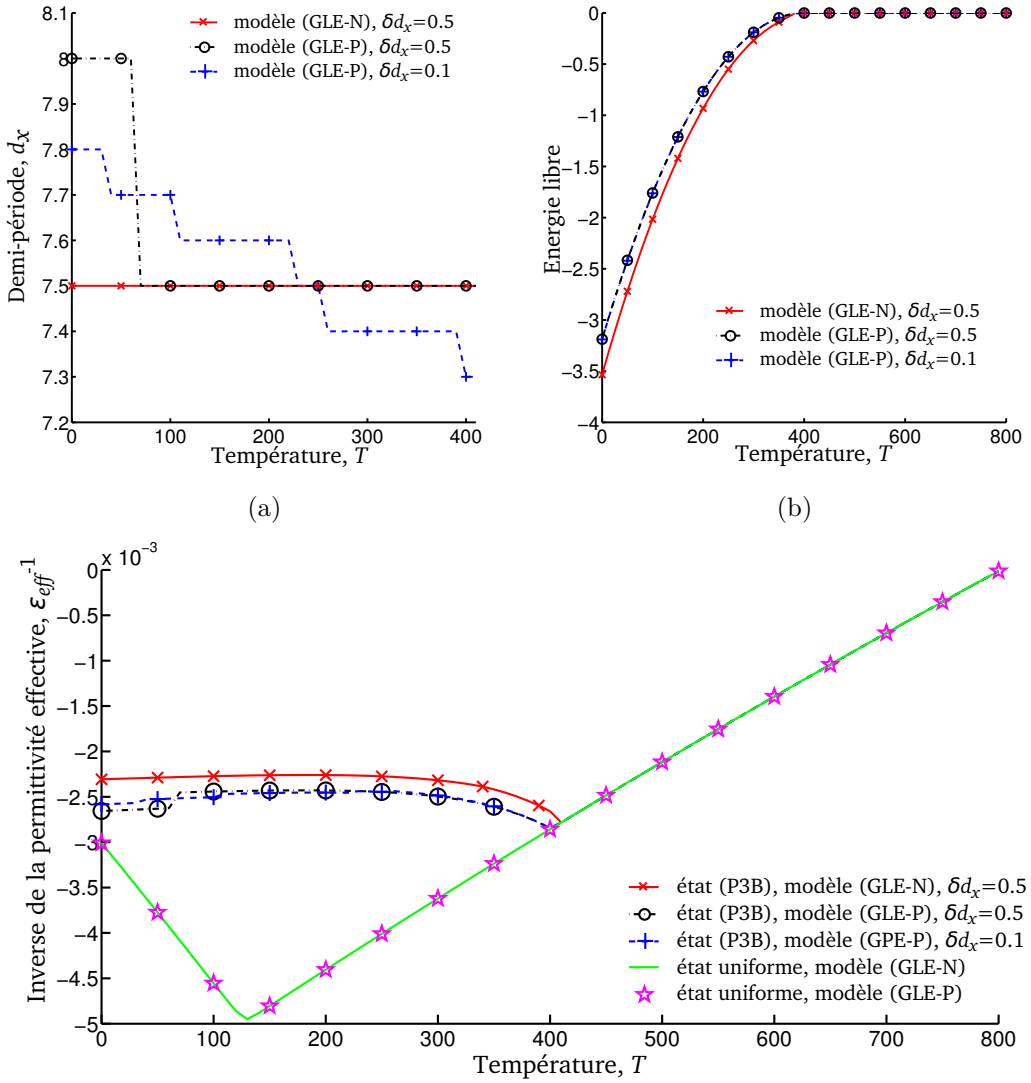
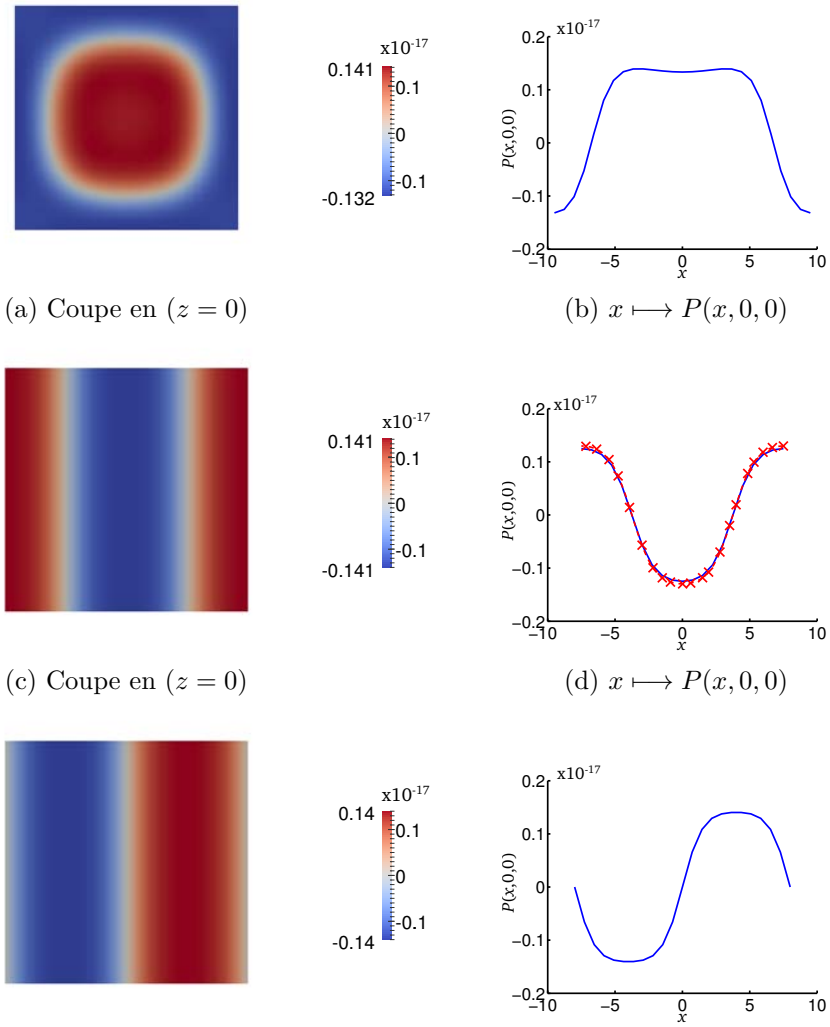


FIGURE 6.2 – Etude en fonction de la température avec $\phi_0 = 0$, $a_p = a_f = 5$ depuis le modèle (GLE-N) ($\delta d_x = 0.5$) et le modèle (GLE-P) ($\delta d_x \in \{0.5, 0.1\}$) ; (a) évolution des valeurs de d_x minimisant l'énergie libre associée à l'état (P3B) ; (b) énergie libre associée à l'état (P3B) ; (c) inverses des permittivités effectives relativement à l'état (P3B) et à l'état uniforme, s'appliquant en $\phi_0 = 0$ et $\phi_0 = 0.25.10^{16}$.



(a) Coupe en $(z = 0)$ (b) $x \longmapsto P(x, 0, 0)$

(c) Coupe en $(z = 0)$ (d) $x \longmapsto P(x, 0, 0)$

(e) Coupe en $(z = 0)$ (f) $x \longmapsto P(x, 0, 0)$

FIGURE 6.3 – Représentation des états obtenus ; (PC) (a)-(b), (P3B) (c)-(d) et (P2B) (e)-(f), pour $T = 100$, $\phi_0 = 0$; toutes les courbes concernent la polarisation obtenue depuis (GLE-P) hormis la courbe marquée par des croix qui porte sur la polarisation vérifiant (GLE-N).

effective relativement aux potentiels appliqués $\phi_0 = 0$ et $\phi_0 = 0.25.10^{16}$.

Nous nous plaçons dans la configuration où $a_f = a_p = 5$, $\varepsilon_\perp = 100$ et $\varepsilon_\parallel = 20$. Nous considérons des grilles de nœuds, où le pas h_f, relatif à $\overline{\Omega_f}$, est tel que $h_f \approx 0.27$ et le pas h_p, relatif à $\overline{\Omega_p}$, est tel que $h_p \approx 0.35$, afin de nous situer dans un contexte similaire aux simulations du chapitre précédent.

Commençons par rechercher les périodes minimisant l'énergie de l'état (P3B), présenté depuis la Figure 5.2(b) au Chapitre 5, et qui est retrouvé dans nos simulations ici. Posons $d_x = d_y$ dans cette caractérisation de période. Lorsque le pas δd_x, dans le procédé itératif associé, est tel que $\delta d_x = 0.5$, peu de variations des périodes optimales associées à l'état (P3B) sont observées : on a $d_x = 8$ lorsque $T \leq 70$ et $d_x = 7.5$ pour les autres températures (voir Figure 6.2(a)). Ce changement de la valeur de d_x n'est pas en réalité aussi brutal qu'il apparaît. Par exemple, si nous considérons une précision $\delta d_x = 0.1$, nous obtenons une décroissance plus régulière de d_x en fonction de la température, de $d_x = 7.8$ en $T = 0$ jusque $d_x = 7.3$ en $T = 410$, qui est la température de transition de l'état (P3B) ainsi que la température critique du nanofilm. Enfin, notons certaines similarités avec les résultats associés au système (GLE-N), où l'on avait $d_x = 7.5$ pour $\delta d_x = 0.5$ et pour toute température, relativement à cet état.

L'énergie libre associée au système semble peu impactée par les variations de δd_x. Sur la Figure 6.2(b), nous observons en effet que les valeurs de l'énergie obtenues avec les pas $\delta d_x = 0.5$ et $\delta d_x = 0.1$ sont presque les mêmes. Plus précisément, l'erreur entre les énergies calculées pour $\delta d_x = 0.1$ et $\delta d_x = 0.5$, relativement à l'énergie obtenue avec $\delta d_x = 0.1$, augmente pour $T \leq 70$ puis diminue jusqu'à s'annuler en $T = 230$ et croît à nouveau, tout en restant inférieure à $1.8.10^{-3}$. Ces fluctuations s'expliquent par les éloignements et rapprochements de valeurs de d_x entre les cas où $\delta d_x = 0.1$ et $\delta d_x = 0.5$ lorsque la température augmente (*cf.* Figure 6.2(a)).

Les valeurs de l'énergie libre obtenues depuis le modèle (GLE-N) ne sont par contre pas les mêmes (l'erreur entre ces valeurs et celles correspondant à (GLE-P), évaluées relativement à ces dernières, atteint 60%), ce qui suggère que les états obtenus depuis (GLE-N) et (GLE-P), bien qu'ayant chacun trois domaines disposés en bandes, diffèrent quantitativement. Les évolutions de l'énergie libre en température sont toutefois similaires.

L'effet de la variation de la période est plus visible sur le comportement de la permittivité effective en fonction de la température, et se traduit par des discontinuités lorsque la valeur de d_x change (voir Figure 6.2(c)). L'allure de l'inverse de la permittivité effective associée à l'état (P3B) est néanmoins identique pour $\delta d_x = 0.1$ et $\delta d_x = 0.5$, particulièrement au voisinage de la température de transition de l'état (P3B). On retrouve les résultats obtenus depuis le modèle (GLE-N), puisque $T \longmapsto \varepsilon_{eff}^{-1}(T)$ prend des valeurs négatives, est presque affine pour de petites températures, puis décroît avant la température de transition vers l'état uniforme. Enfin, les états uniformes sont quantitativement les mêmes pour les modèles (GLE-N) et (GLE-P), ce qui explique pourquoi nous retrouvons les mêmes permittivités effectives, relativement à ces états.

Notons que des investigations similaires ont aussi été menées pour $a_p = a_f = 3$, et nous retrouvons qualitativement les mêmes résultats, avec une température de transition de l'état (P3B) vers l'état uniforme moins élevée.

L'état (P3B) n'est pas le seul à avoir été obtenu. L'état (PC) existe également pour $a_p = a_f = 5$, et le choix $d_x = d_y = 9.5$ minimise l'énergie libre associée (voir Figure 6.3(a)). Notons qu'un état constitué de deux domaines, agencés en bandes, a également été obtenu (*cf.* Figure 6.3(e)). L'étude de $x \in (-7.5, 7.5) \longmapsto P(x, 0, 0) \in \mathbf{R}$ (voir Figures 6.3(d) et (f)), semble toutefois indiquer, depuis une répétition périodique dans les directions (Ox)

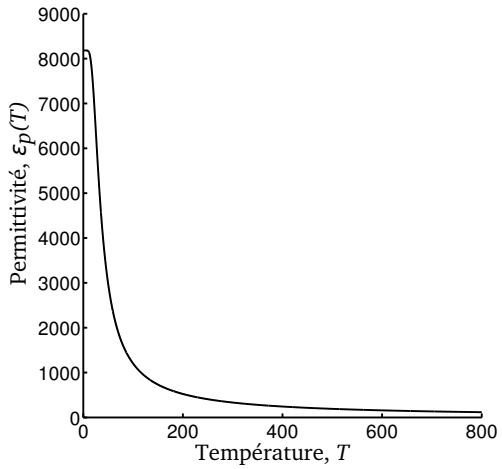


FIGURE 6.4 – Evolution de la permittivité ε_p lorsque celle-ci dépend de la température, conformément à la formule (6.54).

et (Oy) des profils indiqués sur les Figures 6.3(c) et (e), qu'il s'agit qualitativement de mêmes états. Enfin, notons que les états (P3B) obtenus de (GLE-N) et (GLE-P) ont des textures de polarisation très similaires (*cf.* Figure 6.3(d)), avec des valeurs numériques de la polarisation toutefois assez différentes, ce qui confirme le constat émis lorsque nous avons inspecté l'énergie libre associée à chacun de ces états. L'erreur en norme infinie entre la fonction discrète qui représente la polarisation associée à l'état (P3B) depuis (GLE-N) et la fonction discrète représentée par la polarisation définissant l'état (P3B) depuis (GLE-P), relativement à cette dernière, est de l'ordre de $9.3.10^{-2}$, dans ce cas où $a_f = a_p = 5$ et $T = 0$.

Cette étude peut être étendue au contexte plus concret qui est celui de la dépendance de la permittivité du milieu paraélectrique en fonction de la température (*cf.* [72]) :

$$\varepsilon_p(T) = \frac{9.10^4}{42\text{cotanh}\left(\dfrac{84}{2T}\right) - 31}. \tag{6.54}$$

Nous obtenons dans ce contexte des permittivités effectives positives et négatives, associées à un état uniforme non trivial. Ce dernier point rejoint ce qui a été déterminé expérimentalement dans [72], même si le présent modèle, (GLE-P), ne prend pas en compte une interaction non-linéaire entre toutes les composantes du champ vectoriel de polarisation et celles du champ électrique. Par ailleurs, nous retrouvons le comportement rencontré avant, où ε_{eff}^{-1} pour l'état (P3B) est presque affine pour les températures les plus faibles puis s'incline avant la température de transition vers l'état uniforme (*cf.* Figure 6.5(c)-(d)). Nous avons fixé ici $\delta d_x = 0.5$, en considérant $a_f = a_p = 5$. Les fortes variations de d_x (*cf.* Figure 6.5(a)) se répercutent sur la permittivité effective, surtout près de la température critique $T \approx 410$.

Les très grandes valeurs prises par $\varepsilon_p(T)$ lorsque $T \approx 0$ (voir Figure 6.4) provoquent un ralentissement conséquent de notre code de calculs pour de faibles températures ; les périodes optimales divergent en effet en $T < 200$ (*cf.* Figure 6.5(a)) et l'énergie diminue d'autant plus (*cf.* Figure 6.5(b)). Nous n'avons donc pu investiguer la permittivité effective

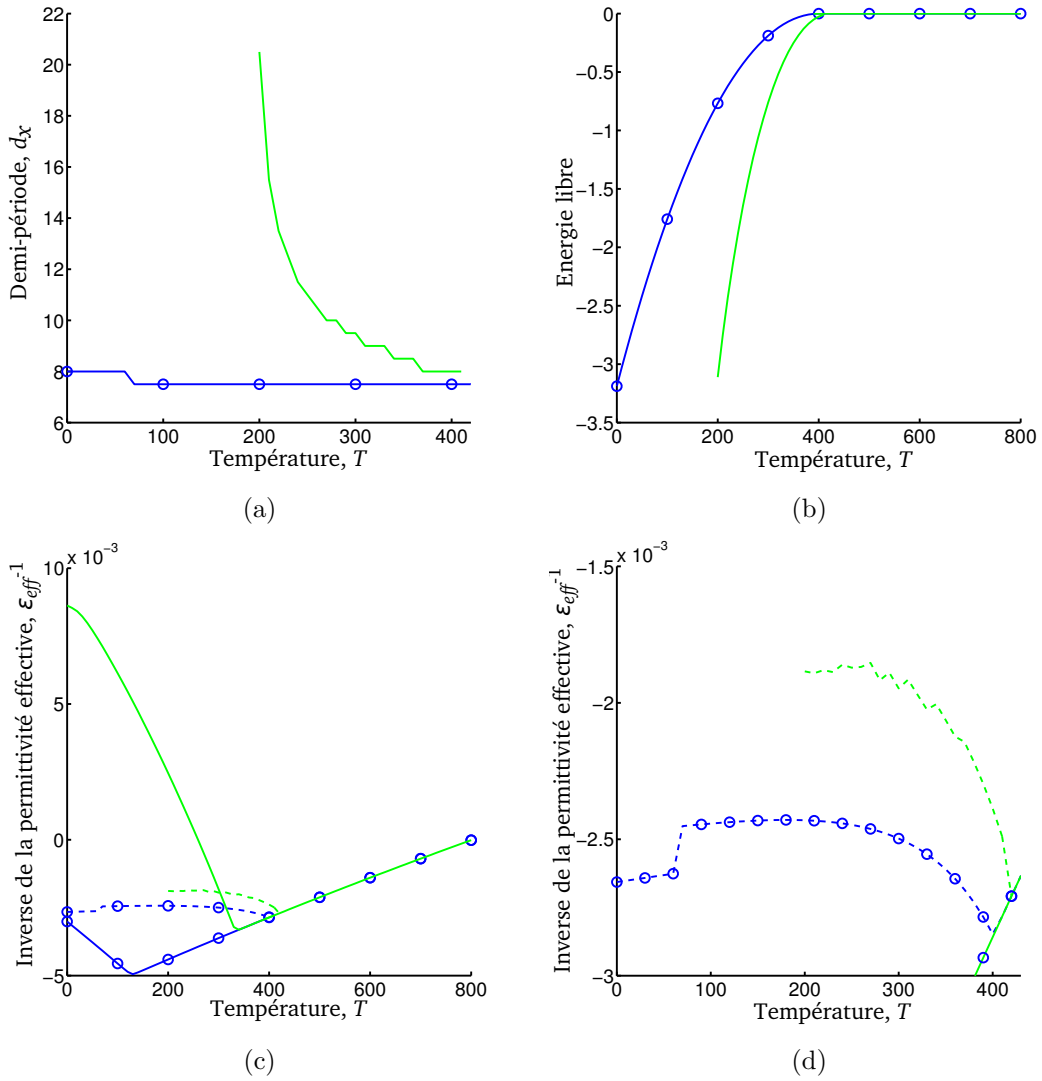


FIGURE 6.5 – Etude en fonction de la température, avec $\phi_0 = 0$, $a_p = a_f = 5$, $\delta d_x = 0.5$, et dans un environnement paraélectrique de permittivité $\varepsilon_p = 200$ (courbes marquées par des cercles « ∘ ») ou dépendant de la température (courbes sans marques) ; (a) évolution des valeurs de d_x minimisant l'énergie libre associée à l'état (P3B) ; (b) énergie de l'état (P3B) ; (c),(d) inverses des permittivités effectives associées aux états (P3B) (courbes en traits pointillés) et uniformes (courbes en traits continus).

associée à l'état (P3B) que pour $T \geq 200$, les calculs devenant trop consommateurs en temps pour des températures inférieures.

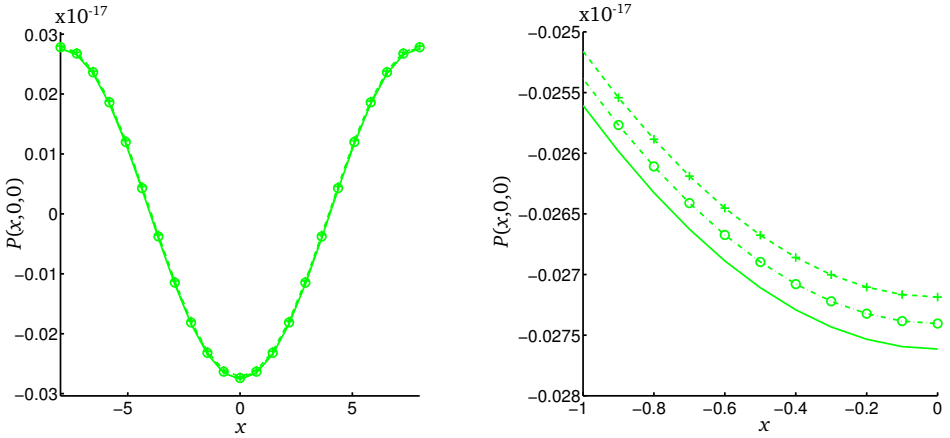
Nous pourrions nous attendre, pour $T < 200$, à une divergence de ε_{eff}^{-1}, qui pourrait par exemple se traduire par une transition abrupte de l'état (P3B) vers l'état uniforme.

Pour les températures légèrement encore supérieures à 200, plusieurs phénomènes sont à remarquer concernant les domaines de polarisation. D'une part les murs de domaines sont très marqués et sont très mobiles sous l'influence du champ électrique appliqué. Plus précisément pour $T \approx 200$ et lorsque ϕ_0 augmente (voir Figure 6.6), la taille du domaine orienté vers le bas diminue mais la norme de la polarisation est plus élevée au centre de chacun des domaines. Pour conforter ce dernier constat relatif aux centres de domaines, nous évaluons la moyenne de polarisation au voisinage du centre de la couche ferroélectrique, lorsqu'un potentiel ϕ_0 est appliqué :

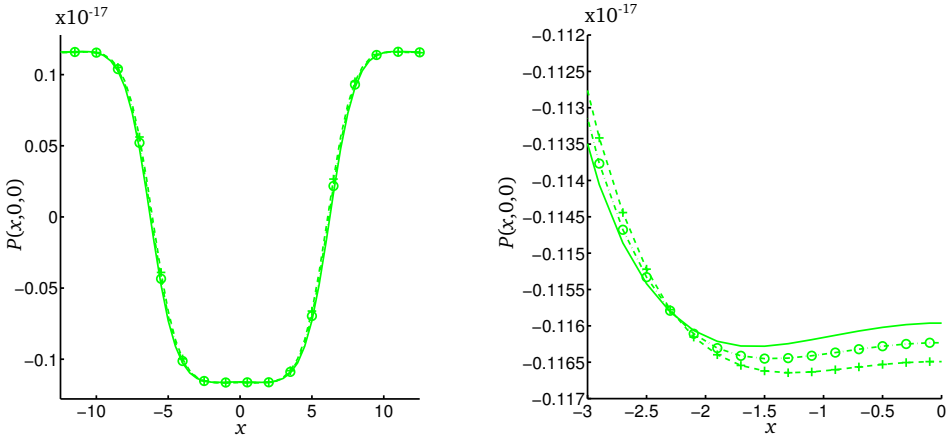
$$\overline{P}_\eta(\phi_0) = \frac{1}{8\eta d_y a_f} \int_{[-\eta,\eta]\times[-d_y,d_y]\times[-a_f,a_f]} P(\mathrm{x})d\mathrm{x}.$$

Il en résulte par exemple $\overline{P}_1(0) \approx -1.081.10^{-18}$, $\overline{P}_1(0.25.10^{16}) \approx -1.105.10^{-18}$ ainsi que $\overline{P}_1(0.5.10^{16}) \approx -1.118.10^{-18}$, ce qui semble indiquer que $\phi_0 \longmapsto \overline{P}_1(\phi_0)$ est décroissante et relate que la polarisation est plus intense dans ce domaine lorsque la tension appliquée est plus forte.

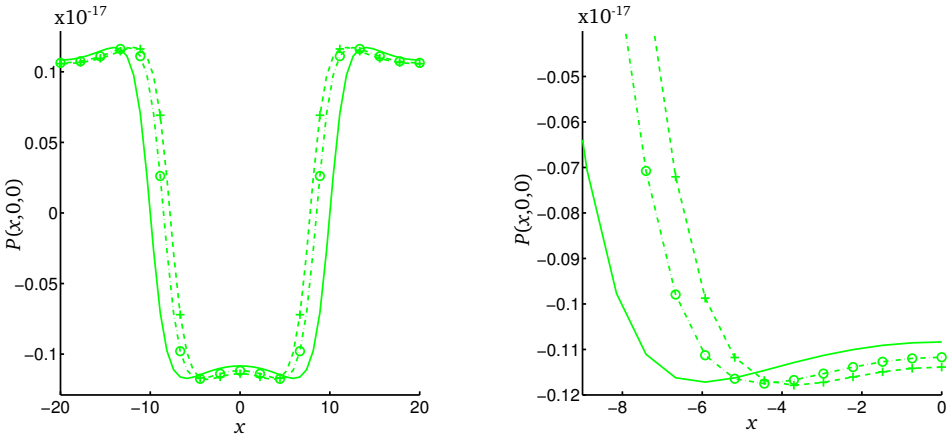
Près de la température critique du système, les mouvements des parois de domaines sous l'influence du champ électrique appliqué sont encore visibles, quoique bien moins marqués. Par contre, les parois ainsi que les domaines qu'elles délimitent sont plus difficiles à cerner. L'entremêlement de ces effets semble annuler ce constat effectué au voisinage du centre de la couche ferroélectrique ($\phi_0 \longmapsto \overline{P}_1(\phi_0)$ n'est plus décroissante, par exemple).



(a) $T = 400$



(b) $T = 230$



(c) $T = 200$

FIGURE 6.6 – Etude de $x \longmapsto P(x, 0, 0)$ pour différentes températures lorsque ε_p est définie par (6.54), pour différents potentiels de courant appliqués ; $\phi_0 = 0$ (sans marque), $\phi_0 = 0.25.10^{16}$ (marque « ∘ »), $\phi_0 = 0.5.10^{16}$ (marque « + »).

Conclusions et Perspectives

Tout au long de ce manuscrit, nous nous sommes intéressés à la formation de domaines, pour deux classes de nanostructures ferroélectriques tridimensionnelles, qui ont chacune fait l'objet d'une des parties du manuscrit.

Les nanostructures, dans la première partie, sont constituées d'une couche ferroélectrique entièrement enclavée dans un environnement paraélectrique, et soumises à l'action de champs électriques. Le modèle (GLE) que nous avons proposé pour étudier la formation de domaines dans ces nanostructures est basé sur un couplage d'équations de Ginzburg-Landau et d'Electrostatique. Comme seules y sont en interaction non-linéaire les troisièmes composantes du champ vectoriel de polarisation et du champ électrique, le modèle est alors particulièrement dédié au contexte de matériaux ferroélectriques dits uniaxiaux. Après avoir établi l'existence de solutions variationnelles du système non-linéaire représenté par (GLE), nous avons élaboré une méthode numérique pour sa résolution, à l'aide d'approximations par Eléments Finis et d'un algorithme de quasi-Newton inexact. Nous avons également établi des protocoles d'expérimentation numérique afin, par exemple, de déterminer la température critique associée au système, ou d'investiguer l'existence de cycles d'hystérésis. Ces protocoles se sont montrés efficaces pour plusieurs considérations de paramètres physiques ou géométriques.

Le contexte concret que nous avons étudié est celui où la couche ferroélectrique est constituée de Nitrite de Sodium. Dans un premier temps, la configuration cylindrique est considérée pour une telle couche. Divers états critiques sont obtenus ; certains ayant été observés dans des expérimentations physiques, pour d'autres types de matériaux. La formation de domaines ferroélectriques est alors investiguée ici, en particulier dans le contexte de nanodots. Un résultat important de cette partie est que l'on peut naviguer entre 5 états, en faisant varier l'intensité du champ électrique appliqué ainsi que la température. Une telle commutation entre ces 5 états permet d'envisager un stockage d'informations sur 5 bits (un bit étant associé ici à un état). Cette étude vient donc contribuer aux activités de recherche dont l'enjeu est celui de la conception de nouvelles unités de mémoire haute-capacité de tailles nanoscopiques à partir de composants ferroélectriques. Ce résultat a fait l'objet d'une publication (*cf.* [42]).

Nos investigations numériques portant sur l'influence de certains paramètres du système, comme la permittivité de l'environnement paraélectrique ou la taille de la couche ferroélectrique, ont mis en exergue l'existence de transitions d'états pouvant être lisses et réversibles, sinon abruptes et irréversibles. Ceci nous a conduit à l'idée d'un « dopage » de la couche ferroélectrique : on peut par exemple imiter le comportement d'une nanostructure où la couche ferroélectrique est de taille différente, en influant sur la permittivité de l'environnement paraélectrique.

En considérant dans un second temps une configuration parallélépipédique pour la couche ferroélectrique, nous obtenons des résultats très proches de ceux du contexte cylindrique. La

formation de domaines est similaire, et il est également possible de naviguer entre 5 états, par variation de l'intensité du champ électrique appliqué ainsi que de la température. Aussi, le dopage de la couche ferroélectrique reste possible ici.

Les nanostructures sont, dans la seconde partie du manuscrit, représentées par une superposition de trois couches : la couche centrale, ferroélectrique, est partiellement enclavée entre deux couches paraélectriques. Deux modèles sont proposés, à partir d'une variante du couplage d'équations de Ginzburg-Landau et d'Electrostatique effectué précédemment, et diffèrent dans la prescription des conditions aux limites. Ceux-ci sont également dédiés en particulier au contexte de matériaux ferroélectriques dits uniaxiaux. Cependant, dans les investigations numériques, nous considérons aussi des valeurs de paramètres physiques où la couche ferroélectrique est représentée par le Titanate de Plomb, tout en envisageant aussi que les autres couches sont représentées par le Titanate de Strontium.

Une méthode numérique, basée sur des approximations par Eléments Finis et sur l'algorithme de quasi-Newton inexact présenté précédemment, est élaborée pour étudier le modèle (GLE-N), qui fait intervenir des conditions aux limites de type Neumann. L'étude de la formation de domaines est ensuite menée. Aussi, comme dans [72], où est réalisée une récente étude expérimentale physique, accompagnée de calculs *ab initio*, sur la permittivité dite effective, nos investigations numériques concernant ce paramètre conduisent au résultat qu'il peut être de signe négatif.

Nous élaborons aussi une méthode numérique pour étudier le second modèle (GLE-P), où interviennent des conditions aux limites périodiques, en nous appuyant à la fois sur des approximations par Différences Finies et par Eléments Finis. Des résultats numériques établissant que la permittivité effective peut prendre un signe négatif sont à nouveau obtenus, à la fois dans le cas où la permittivité de l'environnement paraélectrique est constante, mais également lorsque celle-ci dépend de la température.

Une comparaison de ces deux modèles est effectuée et il en résulte que (GLE-P) est plus approprié à une compréhension plus étendue de la formation de domaines dans de telles nanostructures.

Plusieurs perspectives de ce travail peuvent être envisagées. En particulier, trois perspectives nous paraissent comme étant les plus immédiates.

D'abord, il s'agira de considérer dans le cadre instationnaire le modèle (GLE), afin d'étudier la dynamique, en temps court et en temps intermédiaire, de formation de domaines ferroélectriques. L'élaboration de la méthode numérique pour mener cette étude s'inspirera alors de notre travail et utilisera plusieurs modules du code de calculs que nous avons conçu pour l'investigation numérique du modèle (GLE).

Aussi, il s'agira de considérer l'extension du modèle (GLE-P), où alors toutes les composantes du champ vectoriel de polarisation sont en interaction non-linéaire avec celles du champ électrique. L'élaboration de la méthode numérique pour mener l'étude de formation de domaines ici s'inspirera aussi de notre travail, en utilisant directement plusieurs modules de notre code de calculs conçu pour l'investigation numérique du modèle (GLE-P). Il sera très intéressant en particulier ici d'investiguer l'existence de cycles d'hystérésis sous application de champs électriques.

Enfin, la troisième perspective est celle portant sur l'étude de cette extension du modèle (GLE-P) évoquée précédemment, qui serait considérée ici dans un cadre instationnaire. A

savoir, en plus de leurs interactions non-linéaires, toutes les composantes du champ vectoriel de polarisation et du champ électrique seront évolutives en temps. Il s'agira, en particulier, d'étudier la dynamique en temps court et en temps intermédiaire de la formation de domaines pour cette classe de nanostructures où les couches ferroélectriques et paraélectriques sont en superposition.

Bibliographie

[1] R.A. Adams : *Sobolev Spaces*. Academic Press, New-York, 1975

[2] A. Aharoni : *Introduction of the theory of ferromagnetism*. Oxford University Press, 2000

[3] G. Birkhoff and S. Mac Lane : *A survey of modern algebra*. Macmillan Publishing Co., Inc. New York, 4th edition, 1977

[4] A.M. Bratkovsky and A.P. Levanyuk : Depolarizing field and "real" hysteresis loops in nanometer-scale ferroelectric films. *App. Phys. Lett.*, 89:253108, 2006.

[5] S.C. Brenner and L.R. Scott : *The Mathematical Theory of Finite Element Methods*. Springer-Verlag, New York, 2nd edition, 2002.

[6] L. Brisson : *Ion*. Editions Gallimard, Paris, 2006.

[7] H. Brézis : *Analyse fonctionnelle : théorie et applications*. Dunod, Paris, 1999.

[8] A. Brugère : *Cinétique de formation et stabilité des domaines ferroélectriques créés par un Microscope à Force Atomique : Étude de films minces monocristallins de $LiTaO_3$ en vue d'applications mémoires*. Thèse de doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 2011.

[9] L.A. Bursill and P.J. Lin : Electron-microscopic studies of ferroelectric-crystals. *Ferroelectrics*, 70:191, 1986.

[10] L.-Q. Chen : Phase-Field Method of Phase Transitions/Domain Structures in Ferroelectric Thin Films : A Review. *J. Am. Ceram. Soc.*, 91(6):1835-1844, 2008.

[11] E.V. Chenskii and V.V. Tarasenko : Theory of phase transitions into inhomogeneous state in organic ferroelectrics in an external electric field. *Zh. Eksp Teor. Fiz*, 83:1089-1099, 1982.

[12] P.G. Ciarlet : *Finite Element Methods (Part 1)*, volume 2 of *Handbook of Numerical Analysis*. Elsevier Science Publishers B.V., North-Holland, 1991.

[13] A.R. Conn, N.I.M. Gould and P.L. Toint : *Trust-region methods*, SIAM, Philadelphia, 2000.

[14] B. Dacorogna : *Introduction to the calculus of variations*. Imperial College Press, 2009.

[15] R. Dautray et J.-L. Lions : *Analyse mathématique et calcul numérique pour les sciences et techniques. Modèles physiques*, volume 1. Masson, Paris, 1987.

[16] R. Dautray et J.-L. Lions : *Analyse mathématique et calcul numérique pour les sciences et techniques. L'opérateur de Laplace*, volume 2. Masson, Paris, 1987.

[17] R. Dautray et J.-L. Lions : *Analyse mathématique et calcul numérique pour les sciences et techniques. Equations intégrales et méthodes numériques*, volume 4. Masson, Paris, 1987.

[18] R.S. Dembo, S.C. Eisenstat and T. Steihaug : Inexact Newton Methods. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 19(2):400-408, 1982.

[19] J.E. Dennis and R.B. Schnabel : *Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations*. SIAM, 1983.

[20] J. Dréo, A. Pétrowski, P. Siarry et E. Taillard : *Métaheuristique pour l'optimisation difficile*. Eyrolles, 2003.

[21] J. Droniou : *Degrés topologiques et applications*. `http://www-gm3.univ-mrs.fr/polys/gm3-06/gm3-06.pdf`, 2006.

[22] L.C. Evans : *Partial Differential Equations*. American Mathematical Society, 2010.

[23] G.B. Folland : *Real analysis*. John Wiley & Sons, Inc., New York, 2nd edition, 1999.

[24] C. Geuzaine and J.-F. Remacle : Gmsh : A 3-D finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 79(11):1309-1331, 2009.

[25] C. Geuzaine and J.-F. Remacle :*Gmsh reference manual*, 2014.

[26] D. Gilbarg and N.S. Trudinger : *Elliptic Partial Differential Equations of Second Order*. Grundlehren der mathematischen Wissenschaften. Springer, 2nd edition, 1998.

[27] V.L. Ginzburg : *Zh. Eksp. Teor. Fiz*, 15:739, 1945.

[28] P. Grisvard : *Elliptic problems in nonsmooth domains*. Pitman Advanced Pub. Program Boston, 1985.

[29] A. Henderson : *Paraview Guide, A Parallel Visualization Application*. Kitware Inc., 2007.

[30] H. Ishiwara : Current status and prospects of FET-type ferroelectric memories. *Future Electron Devices*, 11:27, 2000.

[31] A.I. Khan, D. Bhowmik, P. Yu, S.J. Kim, X. Pan, R. Ramesh and S. Salahuddin : Experimental evidence of ferroelectric negative capacitance in nanoscale heterostructures. *Applied Physics Letters*, 99:113501, 2011.

[32] C. Kittel : *Introduction to Solid State Physics*. Wiley, 2004.

[33] C. Kittel : Theory of the Structure of Ferromagnetic Domains in Films and Small Particles, *Phys. Rev.*, 70:965, 1946.

[34] I. Kornev, H. Fu and L. Bellaiche : Films of Ferroelectric Solid Solutions under a Residual Depolarizing Field. *Phys. Rev. Lett*, 93:196104, 2004.

[35] C.M. Krowne, S.W. Kirchoefer, W. Chang, J.M. Pond and L.M.B. Alldredge : Examination of the possibility of negative capacitance using in ferroelectric materials in solid state electronic devices. *Nano. Lett*, 11:988-992, 2001.

[36] L.D. Landau and E.M. Lifshitz : *Course of theoretical physics - Electrodynamics of continuous media*, volume 8. Elsevier, New-York, 1985.

[37] L.D. Landau and E.M. Lifshitz : On the theory of the dispersion of magnetic permeability in ferromagnetic bodies. *Phys. Z. Sowjet.*, 8:153, 1935.

[38] I.A. Luk'yanchuk, L. Lahoche and A. Sené : Universal Properties of Ferroelectric Domains. *Phys. Rev. Lett.*, 102, 2009.

[39] Y. Luo, I. Szafraniak, N.D. Zakharov, V. Nagarajan, M. Steinhart, R.B. Wehrspohn, J.H. Wendorff, R. Ramesh and M. Alexe : Nanoshell tubes of ferroelectric lead zirconate titanate and barium titanate. *Applied Physics Letters*, 83:440-442, 2003.

[40] P.-W. Martelli and S.M. Mefire : Numerical modeling and simulations of the formation of the domains in 3D ferroelectric nanostructures. En cours de rédaction.

[41] P.-W. Martelli and S.M. Mefire : Numerical study of domains in ferroelectric/paraelectric superlattices. En cours de rédaction.

[42] P.-W. Martelli, S.M. Mefire and I.A. Luk'yanchuk : Multidomain switching in the ferroelectric nanodots. *EPL (Europhysics Letters)*, 111(5):50001, 2015.

[43] N. Menou : *Technologie FeRAM : fiabilité et mécanisme de défaillance de condensateurs ferroélectriques élémentaires et intégrés.* Thèse de doctorat, Université du Sud Toulon - Var, 2004.

[44] W.J. Merz : Double hysteresis loop of $BaTiO_3$. *Phys. Rev.*, 91(3):513-517, 1953.

[45] J.J. Moré and D.C. Sorensen : Computing a trust region step. *SIAM J. Scientific and Statistical Computing*, 4:553-572, 1983.

[46] V.N. Nechaev and A.V. Viskovatykh : On the change in the mechanism of the phase transition in a ferroelectric inclusion of a ferroelectric-dielectric nanocomposite as a function of its size. *Phys. Solid State*, 57:722, 2015.

[47] J. Nocedal and S.J. Wright : *Numerical Optimization.* Springer, New York, 2nd edition, 2006.

[48] A. Quarteroni, R. Sacco and F. Saleri : *Numerical Mathematics.* Springer, 2000.

[49] K. Rabe, C.H. Ahn and J.-M. Triscone : *Physics of Ferroelectrics, a modern perspective*, volume 105 of *Topics in Applied Physics.* Springer-Verlag, Berlin, 2007.

[50] P.A. Raviart et J.M. Thomas : *Introduction à l'analyse numérique des équations aux dérivées partielles.* Collection Mathématiques Appliquées pour la maîtrise. Masson, 1983.

[51] H.L. Royden and P.M. Fitzpatrick : *Real analysis.* Prentice Hall, 4th edition, 2010.

[52] Y. Saad : *Iterative methods for sparse linear systems.* SIAM, 2000.

[53] Y. Saad and M.H. Schultz : GMRES : A Generalized Minimal Residual Algorithm for Solving Nonsymmetric Linear Systems. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 7(3):856-869, 1986.

[54] S. Salahuddin and S. Dattat : Use of negative capacitance to provide voltage amplification for low power nanoscale devices. *Nano. Lett.*, 8:405-410, 2008.

[55] B. Satish, W.D. Gropp, L.C. McInees and B.F. Smith : Efficient Management of Parallelism in Object Oriented Numerical Software Libraries. *In* E. Arge, A.M. Bruaset and H.P. Langtangen : *Modern Sofware Tools in Scientific Computing*, pages 163-202. Birkhäuser Press, 1997.

[56] N. Sato and W.F. Tinney : Techniques for Exploiting the Sparsity on the network admittance matrix. *IEEE Trans. Power Apparatus and Systems*, 82(69):944-950, 1963.

[57] J.F. Scott : *Ferroelectric Memories.* Advanced microelectronics. Springer, 2000.

[58] A. Sené : *Théorie des domaines et des textures non uniformes dans les ferroélectriques.* Thèse de doctorat, Université de Picardie, 2010.

[59] M. Sepliarsky and R.E. Cohen : First-principles based atomistic modeling of phase stability in PMN–xPT. *Journal of Physics : Condensed Matter*, 23(43), 2011.

[60] Y. Shiozaki, E. Nakamura and T. Mitsui : *Ferroelectrics and Related Substances. Oxides Part 1: Perovskite-type Oxides and $LiNbO_3$ Family.* Springer-Verlag, 1981.

[61] R.C. Smith : *Smart material systems*. SIAM, Philadelphia, 2005.

[62] V.A. Stephanovich, I.A. Luk'yanchuk and M.G. Karkut : Domain-Enhanced Interlayer Coupling in Ferroelectric/Paraelectric Superlattices. *Phys. Rev. Lett*, 94:047601, 2005.

[63] J.A. Stratton : *Electromagnetic Theory*. International series in physics. McGraw-Hill, 1st edition, 1941.

[64] S.K. Streiffer, J.A. Eastman, D.D. Fong, C. Thompson, A. Munkholm, M.V. Ramana Murty, O. Auciello, G.R. Bai and G.B. Stephenson : Observation of Nanoscale 180° Stripe Domains in Ferroelectric PbTiO3 Thin Films. *Phys. Rev. Lett.*, 89:067601, 2002.

[65] A.H. Stroud : Fifth Degree Integration Formula for the n-simplex. *SIAM J. Numer Anal.*, 6:90-98, 1969.

[66] B.A. Strukov and A.P. Levanyuk : *Ferroelectric phenomena in crystals : physical foundations*. Springer Science and Business Media, 2012.

[67] J.-C. Tolédano and P. Tolédano : *The Landau theory of phase transition*. Singapore : World Scientific, 1987.

[68] J. Valasek : Piezo-Electric and Allied Phenomena in Rochelle Salt. *Phys. Rev.*, 17:475-481, 1921.

[69] P. Wolfe : Convergence conditions for ascent methods. *SIAM Review*, 11:226-235, 1969.

[70] P. Wolfe : Convergence conditions for ascent methods II : somes corrections. *SIAM Review*, 13:185-188, 1971.

[71] G. Zoutendijk : *Integer and nonlinear programming*. North-Holland publishing Company - Amsterdam-London, 1970.

[72] P. Zubko, J. C. Wojdeł, M. Hadjimichael, S. Fernandez-Pena, A. Sené, I. Luk'yanchuk, J.-M. Triscone and J. Íñiguez : Negative capacitance in multidomain ferroelectric superlattices. *Nature*, 534:524-528, 2016.

Résumé

Dans cette thèse, nous étudions la formation de domaines ferroélectriques dans des nanostructures, à partir d'une modélisation faisant intervenir les équations de Ginzburg-Landau et d'Electrostatique, ainsi que des conditions aux limites d'application potentielle. Dans la première partie de la thèse, les nanostructures sont constituées d'une couche ferroélectrique entièrement enclavée dans un environnement paraélectrique. Nous introduisons un modèle depuis un couplage de ces équations et élaborons ensuite, pour son investigation, un schéma numérique faisant usage d'Eléments Finis. Des simulations numériques montrent l'efficacité de ce schéma, qui permet d'établir, par exemple, l'existence de cycles d'hystérésis sous l'influence de paramètres aussi bien physiques que géométriques. Dans la seconde partie, les nanostructures sont constituées d'une couche ferroélectrique partiellement enclavée qui s'intercale entre deux couches paraélectriques. Deux modèles sont proposés à partir d'une variante du couplage réalisé dans la première partie, et se distinguent dans la prescription des conditions aux limites. Des conditions de type Neumann interviennent dans le premier modèle, pour lequel un schéma numérique aussi basé sur des approximations par Eléments Finis est introduit. Dans le second modèle, des conditions périodiques sont prises en considération ; un schéma numérique s'appuyant ici sur une hybridation des méthodes de Différences Finies et d'Eléments Finis est présenté. Les simulations numériques basées sur ces deux schémas permettent, par exemple, de renseigner sur les permittivités dites *effectives*, des nanostructures, ou encore sur la constitution des parois de domaines ferroélectriques.

Mots-clefs : Nanostructures 3D, Ferroélectricité, Equations de Ginzburg-Landau et d'Electrostatique, Eléments Finis, Différences Finies, Simulations Numériques.

Abstract

In this thesis, we study the formation of ferroelectric domains in nanostructures by modeling based on the Ginzburg-Landau and Electrostatics equations, together with boundary conditions that are suitable for real applications. In the first part of the thesis, the nanostructures are made up of a ferroelectric layer, fully enclosed in a paraelectric environment. We introduce a model based on the coupled system of equations and then develop, for its investigation, a numerical scheme using Finite Elements. Numerical simulations show the efficiency of this scheme, which allows us to establish, for instance, the existence of hysteresis cycles under the influence of physical or geometric parameters. In the second part, the nanostructures are made up of a partially enclosed ferroelectric layer that lies between two paraelectric layers. Two models are introduced from a variant of the coupling performed in the first part, and differ in the prescription of the boundary conditions. Neumann type conditions are prescribed in the first model, for which a numerical scheme also based on Finite Element approximations is developed. In the second model, periodic conditions are taken into account ; a numerical scheme based on a combination of Finite Difference and Finite Element methods is presented. Numerical simulations from these schemes allow us, for instance, to investigate the so-called *effective permittivities*, of the nanostructures, or the formation of ferroelectric domain walls.

Keywords : 3D Nanostructures, Ferroelectricity, Ginzburg-Landau and Electrostatics equations, Finite Elements, Finite Differences, Numerical Simulations.