

Proposition de Sujet de Thèse

(Année 2012)

Encadrant : Seraphin.Mefire@iecn.u-nancy.fr

Laboratoire : Institut Elie Cartan – Nancy, UMR 7502

Equipe : Equations aux Dérivées Partielles et Applications

Ecole Doctorale : IAEM

Titre du Sujet : *Analyse numérique d'un modèle ferroélectrique en milieu borné tridimensionnel*

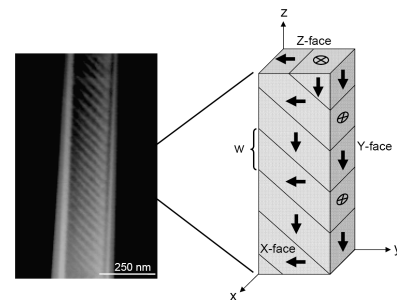
Résumé du Sujet.

L'objectif de ce sujet est d'étudier la texture de polarisation de certains matériaux ferroélectriques sous l'action d'un champ électrique. Le modèle considéré ici engage des configurations géométriques nanoscopiques ainsi qu'un couplage des équations de Maxwell et Ginzburg-Landau. Il est représenté par un système évolutif non-linéaire dont l'inconnue est le couple constitué d'un champ décrivant la polarisation électrique et d'un potentiel de courant définis dans un domaine borné tridimensionnel Ω . Ce domaine contient une région ferroélectrique F de la forme $F = \omega \times (0, l)$, où ω est une boule de \mathbb{R}^2 , de rayon r avec $r \ll l$, et l une longueur caractéristique.

Le travail envisagé se subdivise en trois parties. En considérant les conditions au bord de Ω d'application potentielle, avec lesquelles des résultats théoriques concernant le comportement de ce système ont été récemment établis, il s'agira d'abord d'élaborer un schéma numérique associé au système. La discrétisation en temps s'effectuera par différences finies et la discrétisation en espace fera usage d'éléments finis. Une analyse de ce schéma devra être ensuite menée.

Dans la deuxième partie, il s'agira d'abord de développer un code orienté-objet correspondant à ce schéma. La validation de ce code devra s'appuyer sur des comparaisons avec les résultats théoriques récemment établis, ainsi qu'avec les résultats physiques expérimentaux obtenus récemment (voir figure ci-contre) dans des configurations de nanorods, dont la propriété spécifique est la formation d'un réseau complexe de domaines ferroélectriques par actions de longues portées. Il s'agira ensuite d'étudier numériquement la texture de polarisation en fonction du rétrécissement de la région ferroélectrique F , à savoir lorsque le rayon r prend des valeurs de plus en plus petites. Une étude asymptotique devra être aussi menée numériquement dans le contexte où le rapport de permittivités dans et en dehors de F devient de plus en plus petit.

Dans la troisième partie, il s'agira d'entreprendre de telles investigations en présence de configurations de nanodots. Le code orienté-objet encaissera alors aussi des considérations géométriques où la région ferroélectrique, $F = B(r)$, est une boule de \mathbb{R}^3 , de rayon $r \ll \text{diam}(\Omega)/2$.



Mots-clés. Milieux électroactifs 3D, Ferroélectricité, Configurations nanoscopiques, Equations de Maxwell et Ginzburg-Landau, Différences Finies, Eléments Finis, Analyse de schémas, Simulations, C++, Calcul parallèle.

Compétences. MASTER-II avec un parcours orienté Modélisation/Calcul Scientifique ou Equations aux Dérivées Partielles/Applications.