PROPAGATION D'EXCITATIONS ACOUSTIQUES NON LINÉAIRES DANS DES MATÉRIAUX DOTÉS DE MICROSTRUCTURES

M. Sayadi, Jean Pouget

► To cite this version:

M. Sayadi, Jean Pouget. PROPAGATION D'EXCITATIONS ACOUSTIQUES NON LINÉAIRES DANS DES MATÉRIAUX DOTÉS DE MICROSTRUCTURES. Journal de Physique Colloques, 1990, 51 (C3), pp.C3-219-C3-230. 10.1051/jphyscol:1990323 . jpa-00230751

HAL Id: jpa-00230751

<https://hal.science/jpa-00230751>

Submitted on 1 Jan 1990

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.

PROPAGATION D'EXCITATIONS ACOUSTIQUES NON LINÉAIRES DANS DES MATÉRIAUX DOTÉS DE MICROSTRUCTURES

M.K. SAYADI et J. POUGET

Laboratoire de Modélisation en Mécanique, associé au CNRS,
Université Pierre et Marie Curie, Tour 66, 4, place Jussieu, F-75252
Paris Cedex 05, France

Résumé

Le problème d'ondes non linéaires couplées rotation-déplacement est présenté dans le cadre d'un modèle de réseau cristallin présentant des degrés internes en rotation (par exemple cristaux avec groupes moléculaires). Sur la base du modèle microscopique et de son approximation aux milieux continus, nous montrons l'existence d'ondes acoustiques non linéaires engendrées, via le couplage, par des ondes solitaires en rotation. L'important problème d'un champ sinusoïdal appliqué est étudié et montre une adaptation du système au champ extérieur. Les résultats sont illustrés par des simulations numériques.

Abstract

The nonlinear wave propagation in crystal involving coupled motions in displacement and rotation is presented. The crystal is modelled by a one-dimensional monoatomic chain equipped with rotatory microstructures (for instance, crystal with molecular groups). On the basis of the microscopic model and its continuum approximation, the propagation of nonlinear acoustic waves generated by solitary waves in rotation is examined for two simple configurations. The influence of an applied sinusoidal field upon the nonlinear waves is examined and a transient motion of the rotation-deformation is placed in evidence. The relevant results are illustrated by means of numerical simulations.

1. INTRODUCTION

Nous nous proposons dans ce travail d'examiner le problème de la propagation d'excitations acoustiques non linéaires dans des cristaux dotés de microstructures. En effet, certains matériaux présentent, outre leur déformation usuelle, des degrés de liberté internes que seule une description cinématique suffisamment fine permet de mettre en évidence. C'est le cas des cristaux moléculaires pour lesquels les particules en interaction au sein du milieu ne peuvent pas être réduites à un point doté d'une masse; mais en chaque point un groupe moléculaire effectue des mouvements de rotation de corps rigide de sorte qu'un moment cinétique peut être défini. Les mouvements de micro-rotation et de déformation du cristal sont bien évidemment couplés et il en découle donc la propagation d'ondes couplées en rotation-déformation.

Toutefois, le cristal est assujéti à des interactions interatomiques qui dépendent de la micro-physique du système, mais permettent des mouvements de rotation de larges amplitudes des groupes moléculaires (mouvement de renversement des molécules). De tels comportements se rencontrent dans les cristaux liquides [1], les longues chaînes de macromolécules (par exemple l'ADN) [2, 3] ou les cristaux moléculaires ferroélectriques [4, 5]. Pour ces derniers, le nitrite de sodium en est un bon exemple et dans ce cas le mouvement de rotation des groupes moléculaires décrit la migration d'une paroi séparant deux domaines ferroélectriques à 180° [2].

Il découle donc que le comportement non linéaire lié aux mouvements de micro-rotation engendre, par couplage, des ondes acoustiques non linéaires dont les caractéristiques, vitesses par exemple, sont fonctions de l'excitation non linéaire en rotation. Dans ce but, nous construisons un modèle de réseau cristallin unidimensionnel incluant des interactions dipôle-dipôle

entre groupes moléculaires. Une telle approche est certainement très appropriée pour modéliser les mouvements relatifs aux degrés de liberté internes et leurs couplages avec la déformation du cristal. Cependant le système d'équations ainsi obtenu est difficilement exploitable, aussi devons-nous requérir à l'approximation des milieux continus. Ceci conduit à un système d'équations aux dérivées partielles couplées dont nous pouvons trouver certaines classes de solutions du type onde localisée en rotation-déformation que nous décrivons par des solitons [6]. Les différents résultats sont illustrés par des simulations numériques et le problème de l'influence d'un champ appliqué est également traité.

Le travail est organisé de la manière suivante : le paragraphe 2 est consacré à la construction d'un modèle de réseau doté de microstructures. Le cas d'une configuration est examiné au paragraphe 3; nous donnons les équations du système, des solutions d'ondes solitaires en rotation-déformation sont examinées analytiquement et numériquement. Une seconde configuration est étudiée au paragraphe 4 montrant également des ondes solitaires en rotation-déformation. Le paragraphe 5 concerne plus particulièrement le problème de l'influence d'un champ extérieur sinusoïdal sur le mouvement des ondes non linéaires. Finalement des conclusions et extensions du modèle sont données au paragraphe 6.

2. DESCRIPTION DU MODELE

Nous considérons une chaîne monoatomique unidimensionnelle, constituée de N cellules cristallines dotées chacune d'un moment d'inertie et d'un dipôle électrique microscopique de module constant, indiquant l'orientation de chaque groupe moléculaire. A titre d'exemple, nous pouvons citer le cristal ferro-électrique nitrite de sodium NaNO_2 [7]. Nous supposons que N est suffisamment grand afin de négliger les effets de bord et que ces cellules restent dans le plan xOy , ce que montre la figure 1; nous distinguerons alors trois types de mouvements au sein de chaque noeud n de la chaîne atomique : (i) les déplacements longitudinaux du centre de masse de la cellule cristalline, notés u_n , (ii) les déplacements transversaux de ce même point, notés v_n et (iii) les mouvements de rotation de corps rigide du groupe moléculaire ou du dipôle électrique, repéré par les angles θ_n et φ_n .

Ces mouvements résultent des forces interatomiques agissant sur le réseau cristallin, soient : (i) les interactions atomiques entre les premiers voisins (interactions de courte et longue portées), (ii) les interactions mutuelles entre les dipôles électriques microscopiques, du type électrostatique et (iii) L'interaction électrostatique due au champ externe E .

Si de plus nous supposons que les déplacements demeurent infinitésimaux, alors que les rotations peuvent avoir de grandes amplitudes, nous écrirons l'Hamiltonien du système comme suit [7] :

$$(1) \quad H = K + W_{\text{Lat}} + W_{\text{Dip}} + W_{\text{Int}} + W_{\text{Ext}},$$

où nous avons posé :

$$(2.a) \quad K = \frac{1}{2} \sum \left[M(\dot{u}_n^2 + \dot{v}_n^2) + I \dot{\theta}_n^2 + J \dot{\varphi}_n^2 \right],$$

$$(2.b) \quad W_{\text{Lat}} = \frac{1}{2} \sum \left[K_L (u_{n+1} - u_n)^2 + K_T (v_{n+1} - v_n)^2 \right],$$

$$(2.c) \quad W_{\text{Dip}} = \sum \left[\epsilon (p_n \cdot p_{n+1} - 3 p_n^x p_{n+1}^x) + \eta p_n^x p_{n+1}^x + \nu p_n^y p_{n+1}^y \right],$$

$$(2.d) \quad W_{\text{Int}} = \frac{-3\epsilon}{a} \sum \left[(p_n \cdot p_{n+1} - 3 p_n^x p_{n+1}^x) (u_{n+1} - u_n) + (p_n^x p_{n+1}^x + p_n^y p_{n+1}^y) (v_{n+1} - v_n) \right],$$

$$(2.e) \quad W_{\text{Ext}} = P_0 \sum p_n \cdot E.$$

L'expression (2.a) représente l'énergie cinétique, où M est la masse de la cellule cristalline, I et J les moments d'inertie du groupe moléculaire,

correspondant respectivement aux rotations θ_n et φ_n . L'énergie de déformation élastique est donnée par (2.b) dans laquelle K_L et K_T sont les constantes de rigidité longitudinale et transversale. L'expression (2.c) donne l'interaction entre les dipôles à laquelle s'ajoutent des termes d'anisotropie suivant les axes Ox et Oy, ces termes étant caractérisés respectivement par les coefficients ν et η . Nous notons :

$$(3.a) \quad \mathbf{P}_n = P_0 \mathbf{p}_n, \quad p_n^x = p_n \cdot x, \quad p_n^y = p_n \cdot y \text{ et } P_0^2 = 4\pi\epsilon_0 a^3.$$

où a est le paramètre du réseau et

$$(3.b) \quad \mathbf{p}_n^T = (\cos\theta_n \cos\varphi_n, \sin\theta_n \cos\varphi_n, \sin\varphi_n),$$

L'équation (2.d) définit les interactions entre dipôles et déplacements, cette interaction est du type électrostrictif. Enfin, l'énergie due au champ électrique extérieur est exprimée par (2.e).

Fig. 1 - Chaîne monoatomique équipée de dipôles électriques microscopiques

A ce stade, nous allons examiner deux configurations particulières; ce sont les cas où $\varphi_n = 0$, configuration A (les dipôles tournent autour de l'axe Oz), et où $\theta_n = \pi/2$, configuration B (la rotation des dipôles se fait autour de l'axe Ox).

3. ETUDE DE LA CONFIGURATION A

3.1. Equations discrètes du mouvement

Les équations adimensionnalisées du mouvement de la chaîne monoatomique sont obtenues à partir de la relation (1) de l'Hamiltonien et s'écrivent :

$$(4) \quad \begin{cases} \ddot{U}_n - C_L^2 (U_{n+1} - 2U_n + U_{n-1}) = \frac{1}{2}\alpha [\cos\Theta_{n+1} - \cos\Theta_{n-1}], \\ \ddot{V}_n - C_T^2 (V_{n+1} - 2V_n + V_{n-1}) = -\frac{1}{2}\beta [\sin\Theta_{n+1} - \sin\Theta_{n-1}], \\ \ddot{\Theta}_n - 2 \left[\sin\left(\frac{\Theta_{n+1} - \Theta_n}{2}\right) - \sin\left(\frac{\Theta_n - \Theta_{n-1}}{2}\right) \right] = \frac{1}{2}\chi \left[\sin\left(\frac{\Theta_{n+1} + \Theta_n}{2}\right) + \sin\left(\frac{\Theta_n + \Theta_{n-1}}{2}\right) \right] \\ \quad + \frac{1}{2}\alpha (U_{n+1} - U_{n-1}) \sin\Theta_n + \frac{1}{2}\beta (V_{n+1} - V_{n-1}) \cos\Theta_n - F \cos(\Theta_n/2), \end{cases}$$

où nous avons posé :

$$(5.a) \quad \langle U_n, V_n \rangle = 2 \langle u_n, v_n \rangle \sqrt{\frac{M}{I}}, \quad \Theta_n = 2\theta_n, \quad \tau = t \sqrt{\frac{\epsilon - \eta - \nu}{2I}},$$

et où :

$$(5.b) \quad \begin{cases} \chi = -4 \frac{3\varepsilon - \eta + \nu}{\varepsilon - \eta - \nu}, & \alpha = \frac{3}{2\beta} = \frac{18\varepsilon}{a(\varepsilon - \eta - \nu)} \sqrt{\frac{T}{M}}, \\ F = 4 \frac{P_0 E}{\varepsilon - \eta - \nu}, & (C_L^2, C_T^2) = \frac{2I}{M(\varepsilon - \eta - \nu)} (K_L, K_T). \end{cases}$$

Ici nous avons supposé que $\varepsilon - \eta - \nu > 0$ et en plus que $\Theta_{n+1} - \Theta_n = O(0)$.

Il est clair que ces équations sont non linéaires; de plus, en raison de la présence des termes de couplages, leur résolution analytique s'avère très complexe, voire impossible. Néanmoins, elle peut se faire numériquement en considérant des conditions initiales et aux limites appropriées. Le modèle continu s'impose alors pour mieux comprendre la dynamique d'un tel système.

3.2. Equations du modèle continu

Supposons maintenant que le paramètre du réseau a est très faible devant la longueur caractéristique des processus dynamiques (longueur d'onde ou épaisseur de la paroi de domaine); ceci nous permet de développer toutes les quantités discrètes en termes de séries de Taylor autour de la position $X = n = x/a$. Nous déduisons au premier ordre, en l'absence du champ électrique extérieur et dans l'hypothèse $\chi \ll 1$, le système d'équations aux dérivées partielles suivant :

$$(6) \quad \begin{cases} U_{\tau\tau} - C_L^2 U_{xx} = \alpha (\cos \Theta)_x, \\ V_{\tau\tau} - C_T^2 V_{xx} = -\beta (\sin \Theta)_x, \\ \Theta_{\tau\tau} - \Theta_{xx} = \chi \sin \Theta + \alpha U_x \sin \Theta + \beta V_x \cos \Theta. \end{cases}$$

La structure de ces équations présente un grand intérêt, car les deux premières sont celles de propagation d'ondes acoustiques linéaires, modifiées par la présence des dipôles et la dernière est une équation non linéaire du type *sine-Gordon* couplée avec les déplacements. Le présent modèle peut être comparé à celui d'un milieu continu orienté et non linéaire [8], aussi bien qu'à celui des cristaux micropolaires élastiques [9].

Nous nous proposons maintenant de chercher des solutions sous forme d'ondes propagatives, pour lesquelles U , V et Θ sont fonctions de la seule variable de phase $\xi = X - X_0 - C\tau$, où C est la vitesse de phase et X_0 la position initiale de l'onde. Ainsi les déformations U_ξ et V_ξ peuvent être obtenues en fonction de l'angle Θ :

$$(7) \quad U_\xi = -\frac{\alpha \cos \Theta}{C_L^2 - C^2} + A, \quad V_\xi = \frac{\beta \sin \Theta}{C_T^2 - C^2}.$$

où l'on a supposé que C^2 diffère de C_L^2 et C_T^2 et où A est une constante d'intégration arbitraire. Si nous reportons maintenant les expressions (7) dans l'équation gouvernant le mouvement de Θ , il vient que :

$$(8.a) \quad (C^2 - 1)\Theta_{\xi\xi} = \tilde{\chi}(\sin \Theta - \frac{\delta}{2}\sin 2\Theta),$$

$$(8.b) \quad \tilde{\chi} = \chi + \alpha A, \quad \tilde{\chi}\delta(C) = \frac{\alpha^2}{C_L^2 - C^2} - \frac{\beta^2}{C_T^2 - C^2}.$$

Nous constatons alors que le problème d'ondes solitaires du système (6) se ramène simplement à la résolution de l'équation (8.a), qui est une équation différentielle ordinaire, non linéaire. L'existence de ces ondes localisées dépend des paramètres $\tilde{\chi}$, δ et C ; nous nous limitons ici au cas où $\tilde{\chi} > 0$, $\delta \leq 1$ et $|C| < 1$, et nous écrivons la solution comme suit :

$$(9.a) \quad \Theta^{\pm} = \pm 2 \operatorname{Arc} \operatorname{tg} \left[\lambda \operatorname{sh}(\xi/\ell) \right],$$

où

$$(9.b) \quad \ell = \lambda \ell_0, \quad \lambda^2 = \frac{1}{1 - \delta}, \quad \ell_0^2 = \frac{1 - C^2}{\lambda^2}.$$

Notons ici que ℓ_0 est une longueur caractéristique proportionnelle à l'épaisseur de la paroi de domaine et que la solution (9.a) satisfait les conditions de stabilité [10].

L'état mécanique du cristal est alors donné par les déformations en elongation et en cisaillement qui s'écrivent :

$$(10) \quad U_{\xi}^{\pm} = U_{0\xi}^{\pm} + \frac{2\alpha}{C_L^2 - C^2} \left[1 - \frac{1}{\lambda^2 \operatorname{sh}^2(\xi/\ell) + 1} \right], \quad V_{\xi}^{\pm} = \pm \frac{2\beta\lambda}{C_T^2 - C^2} \frac{\operatorname{sh}(\xi/\ell)}{\lambda^2 \operatorname{sh}^2(\xi/\ell) + 1}.$$

où la constante d'intégration A est remplacée par la déformation $U_{0\xi} = U_{\xi}(0)$. Nous remarquons que la déformation U_{ξ} demeure constante quand $\xi \rightarrow \pm\infty$.

Il convient d'ajouter qu'ayant un milieu mécaniquement linéaire, il est possible d'engendrer, par couplage électromécanique, une onde solitaire de contrainte et de déformation par le biais du mouvement de paroi entre deux domaines ferroélectriques. L'épaisseur de la paroi s'étend sur une dizaine de particules, ce qui correspond à quelques centièmes de μm dans le cas du nitrite de sodium observé à l'aide d'un microscope électronique [11].

Fig. 2 - Configuration A, (a) soliton en rotation, (b) soliton en elongation et (c) soliton en cisaillement.

3.3. Simulations numériques

Le schéma numérique utilisé est directement donné par les équations discrètes (4) pour lesquelles les solutions définies précédemment sont considérées comme conditions initiales. La figure 2.a donne le mouvement de rotation des dipôles (mouvement d'une paroi de domaine à 180°) : c'est une onde solitaire en forme de "front", qui représente la transition de l'état $\Theta^- = \pi$ quand $X \rightarrow -\infty$, à l'état $\Theta^- = -\pi$ quand $X \rightarrow +\infty$. Le couplage non linéaire permet ainsi d'engendrer des ondes acoustiques en compression-extension et en cisaillement accompagnant le mouvement de renversement des dipôles électriques, respectivement représentées en figures 2.b et 2.c.

4. ETUDE DE LA CONFIGURATION B

4.2. Equations discrètes du mouvement

En faisant $\theta = \pi/2$ dans l'expression (1) de l'Hamiltonien, et en considérant le changement de variable suivant :

$$(11.a) \quad U_n = 2u_n \sqrt{\frac{M}{J}}, \quad \tau = t \sqrt{-\frac{2\varepsilon + \nu}{2J}}, \quad \text{avec} \quad 2\varepsilon + \nu < 0.$$

où nous définissons :

$$(11.b) \quad \begin{cases} \mu = -\frac{\nu}{2\varepsilon + \nu}, & \kappa = \frac{\delta\varepsilon}{a(2\varepsilon + \nu)} \sqrt{\frac{J}{M}}, \\ f = -\frac{2P_0 E}{2\varepsilon + \nu}, & \hat{C}_L^2 = \frac{-2J}{M(2\varepsilon + \nu)} K_L. \end{cases}$$

nous écrivons les équations du mouvement sous la forme suivante :

$$(12) \quad \begin{cases} \ddot{U}_n - \hat{C}_L^2 (U_{n+1} - 2U_n + U_{n-1}) = -2\kappa \sin\left(\frac{\varphi_{n+1} - \varphi_{n-1}}{2}\right) \sin\left(\frac{\varphi_{n+1} - 2\varphi_n + \varphi_{n-1}}{2}\right), \\ \ddot{\varphi}_n - \left[\sin(\varphi_{n+1} - \varphi_n) - \sin(\varphi_n - \varphi_{n-1})\right] = \mu \left[\sin(\varphi_{n+1} + \varphi_n) + \sin(\varphi_n + \varphi_{n-1})\right] \\ \quad - \kappa \left[(U_{n+1} - U_n) \sin(\varphi_{n+1} - \varphi_n) - (U_n - U_{n-1}) \sin(\varphi_n - \varphi_{n-1})\right] + f \cos \varphi_n. \end{cases}$$

L'équation gouvernant les déplacements transversaux n'est pas prise en compte puisqu'elle ne joue aucun rôle dans cette situation. Remarquons aussi que les termes de couplage présents dans le système (12) diffèrent de ceux du système (4) de la configuration A.

4.3. Equations du modèle continu

En procédant d'une manière analogue à la première configuration, l'approximation continue du système d'équations aux différences finies est obtenue pour des processus dynamiques lentement variables en espace. Les équations ainsi déduites s'écrivent :

$$(13) \quad \begin{cases} \ddot{\tilde{U}}_{\tau\tau} - \hat{C}_L^2 \tilde{U}_{xx} = -\frac{1}{2} \alpha (\phi_x)^2_x, \\ \ddot{\phi}_{\tau\tau} - \phi_{xx} = \chi \sin \phi - \alpha (\tilde{U}_x \phi_x)_x, \end{cases}$$

où :

$$(14) \quad \tilde{U} = 2U, \quad \phi = 2\varphi, \quad \alpha = \frac{\kappa}{2} \quad \text{et} \quad \chi = 4\mu \ll 1.$$

En négligeant le couplage, nous retrouvons l'équation d'ondes acoustiques pour le déplacement longitudinal, et celle de sine-Gordon pour la rotation; à cause de ce couplage, la structure de ces équations devient très complexe et leur résolution fort délicate.

Les solutions d'ondes solitaires peuvent être également obtenues sous forme d'ondes propagatives, fonctions de la variable de phase ξ . Nous pouvons alors substituer la déformation $\tilde{U}_\xi$ dans l'équation régissant le mouvement de ϕ , et nous obtenons :

$$(15.a) \quad \tilde{U}_\xi = \frac{1}{2} \frac{\alpha}{\hat{C}_L^2 - C^2} \left[\phi_\xi \right]^2 + A,$$

et par suite :

$$(15.b) \quad \frac{3}{2} \frac{\alpha^2}{\hat{C}_L^2 - C^2} \left[\phi_\xi \right]^2 \phi_{\xi\xi} - (1 - C^2 - \alpha A) \phi_{\xi\xi} - \chi \sin \phi = 0.$$

Nous supposons que le coefficient de couplage α est non nul; dans ces conditions, l'équation (15.b) admet une intégrale première qui s'écrit :

$$(16.a) \quad \left[\phi_\xi \right]^4 - 2pa \left[\phi_\xi \right]^2 + b + p \cos \phi = 0,$$

où nous avons posé :

$$(16.b) \quad \begin{cases} \xi = \xi^4 \sqrt{\frac{\chi}{\gamma}}, & a = \frac{1 - C^2 - \alpha A}{4\chi} \sqrt{\frac{\chi}{\gamma}}, \\ p = \text{sign} \left(\frac{\chi}{\gamma} \right), & \text{avec } \gamma = \frac{3}{8} \frac{\alpha^2}{\hat{C}_L^2 - C^2}, \end{cases}$$

Dans ce qui précède, C^2 diffère de $\hat{C}_L^2$, A et b sont des constantes d'intégration arbitraires.

Dans le cas le plus général, les solutions de l'équation (16.a) s'expriment à l'aide des intégrales elliptiques de première et troisième espèce. Nous allons donc examiner un cas simple conduisant à une onde solitaire pour laquelle nous avons $a = \sqrt{2}$ et $b = p = 1$, soit :

$$(17) \quad \left[\phi_\xi \right]^2 = \sqrt{2} \left[1 - |\sin(\phi/2)| \right],$$

par conséquent :

$$(18.a) \quad \phi^\pm = \pm 4 \text{ sign}(\xi) \left[\text{Arc tg} \left(\exp(|\xi|/\ell + \Delta) \right) - \frac{3\pi}{8} \right],$$

et

$$(18.b) \quad U_\xi^\pm = \frac{1 - C^2}{\alpha} + \frac{32\gamma}{3\pi\ell^2} \left[2 \text{sech}^2 \left(|\xi|/\ell + \Delta \right) - 3 \right],$$

$$(18.c) \quad \ell = 2 \sqrt{\frac{2\gamma}{\chi}} = \sqrt{\frac{1 - C^2 - \alpha A}{\chi}} \quad \text{et} \quad \Delta = \text{Arg sh } 1.$$

Nous remarquons qu'une telle solution existe si $|C| < \inf(1 - \alpha A, \hat{C}_L)$, $\chi > 0$ et $\alpha \neq 0$, ce qui conduit, en l'absence des termes de couplages, à l'équation usuelle de sine-Gordon. La constante d'intégration A , figurant dans l'expression (18.b) de la déformation, a été éliminée en utilisant la relation (18.c); dans cette dernière ℓ est une longueur caractéristique liée à l'épaisseur de la paroi par $\ell = \pi l$.

La solution (18.a) est telle que $\phi^\pm$ transite de $\mp\pi/2$ quand $\xi \rightarrow -\infty$, à $\pm\pi/2$ quand $\xi \rightarrow +\infty$; nous retrouvons donc une situation assez similaire à celle d'une chaîne compressible de dipôles [12], ou bien à celle d'un modèle d'Heisenberg pour les chaînes de spins [13].

4.4. Résultats numériques

Afin de vérifier la stabilité de ces ondes localisées aussi bien que l'approximation continue, nous avons considéré une simulation numérique au

moyen des équations discrètes (12). les résultats sont représentés sur la figure 3.a pour la rotation et sur la figure 3.b pour la déformation; cette dernière est accompagnée de radiations de *phonon* et d'une perte d'amplitude, leur influence sur la rotation est moindre. En fait, ces effets sont dus à l'approximation continue qui induit un manque d'information par rapport au modèle discret. Cette simulation est la meilleure pour des vitesses de phase avoisinant l'unité ce qui est confirmé par l'expression (18.b) de la déformation; en effet, cela respecte les hypothèses de faibles variations spatiales. Aussi cette vitesse peut être inférieure ou supérieure à 1.

5. INFLUENCE D'UN CHAMP EXTERIEUR SUR LE MOUVEMENT DES EXCITATIONS NON LINEAIRES

5.1. EQUATIONS

Le problème que nous nous proposons d'examiner maintenant est le mouvement transitoire de l'onde localisée, initialement au repos, quand un champ électrique non nul est soudainement appliqué à l'instant $\tau = \tau_0$. Nous déterminerons alors les états électriques et mécaniques de la paroi sous l'influence du champ. Physiquement, la présence de ce champ favorise la croissance d'un domaine au détriment de l'autre, ce qui est un moyen de ramener une structure à deux domaines à une autre n'en comportant qu'un seul. En supposant que le mouvement de la paroi a lieu dans le plan xOy , seule l'équation en Θ est modifiée et s'écrit :

$$(19) \quad \Theta_{\tau\tau} - \Theta_{xx} + \gamma\Theta_{\tau} = \chi\sin\Theta + \alpha U_x \sin\Theta + \beta V_x \cos\Theta - F(\tau)\cos(\Theta/2).$$

Nous avons introduit dans cette équation un processus dissipatif et un champ appliqué dépendant de la rotation elle-même. En revanche, nous n'avons pas inclus de processus de dissipation lié à la déformation élastique de la chaîne, bien que la viscosité soit le modèle le plus appropriée, celle-ci est difficile à introduire correctement sur le plan microscopique.

Les termes supplémentaires de l'équation (19) sont considérés comme de petites perturbations agissant sur le système couplé et ont pour effet de moduler la position de l'onde solitaire (translation), d'altérer son épaisseur et de changer sa forme par la présence des radiations de *phonon*. Ainsi la paroi initialement au repos dépend maintenant du temps. Désormais et par souci de simplification, ces radiations seront ignorées.

Fig. 3 - Configuration B, (a) soliton en rotation et (b) soliton en elongation.

Un schéma de perturbation a été développé en conséquence; il est basé sur l'hypothèse de la *variation adiabatique du temps* [7, 14], qui consiste à remplacer la variable de phase précédente par $\xi = X - w(\tau)$, où $w(\tau)$ est la position de l'onde perturbée et $C(\tau) = w(\tau)$ sa célérité.

Grâce à une considération énergétique simple, il est possible de définir ces grandeurs en fonction du temps; en effet, la méthode repose sur le fait que les solutions (9.a) et (10) sont fonctions des variables $(X, w(\tau), \tau)$ et sont contraintes à satisfaire un principe variationnel associé au Lagrangien du système. Ce principe est vérifié pour tout mouvement virtuel de déplacement et de rotation, soient δU , δV et $\delta \Theta$. Ces mouvements sont dus à la position virtuelle de l'onde, qui elle-même est provoquée par les travaux virtuels du champ extérieur et de la dissipation. La position w peut être alors traitée comme une nouvelle variable dynamique; ce qui conduit à l'équation du mouvement suivante :

$$(20) \quad \frac{d}{d\tau} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{C}} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w} = Q_F + Q_D,$$

où $\mathcal{L}$ est le Lagrangien défini à partir de la solution non perturbée (U, V, Θ) , Q_F la force généralisée des efforts extérieurs et Q_D celle de la dissipation, ces grandeurs s'écrivent comme suit :

$$(21.a) \quad \mathcal{L}(\tau) = -8\sqrt{\hat{\chi}(1 - C^2(\tau))},$$

$$(21.b) \quad Q_F(\tau) = \pm 4 F(\tau), \text{ (selon } \Theta^\pm),$$

$$(21.c) \quad Q_D(\tau) = -8\gamma(1 + \varepsilon)C(\tau) \sqrt{\frac{\hat{\chi}}{1 - C^2}}.$$

Dans les équations (21) nous avons supposé que $\delta(C) = \delta(0) \ll 1$ et nous avons posé :

$$(22) \quad \hat{\chi} = \tilde{\chi} \left[1 - \frac{\delta}{3} - 2\varepsilon \right], \quad 2\varepsilon\tilde{\chi} = \alpha A.$$

En utilisant les expressions (21.a-c), l'équation pour la position $w(\tau)$ devient :

$$(23.a) \quad \frac{d}{d\tau} \left[\frac{C}{\sqrt{1 - C^2}} \right] + \hat{\gamma} \frac{C}{\sqrt{1 - C^2}} = \hat{F}(\tau),$$

$$(23.b) \quad \hat{\gamma} = \gamma(1 + \varepsilon), \quad \hat{F}(\tau) = \pm \frac{F(\tau)}{2\sqrt{\hat{\chi}}}$$

Nous avons bien évidemment une équation relativiste pouvant être aisément résolue. En particulier, si γ est nul et F constant dans le temps, nous retrouvons l'équation de mouvement d'une particule relativiste de masse unité au repos, uniformément accélérée par F [15].

5.2. Solutions numériques

La simulation numérique de ce problème est illustrée par la figure 4, qui donne les solutions des états de déformations en élongation et en cisaillement (figures 4.a et 4.b) et celle en rotation (figure 4.c). L'onde est initialement au repos ($\tau < \tau_0$) et amorce un mouvement progressif quand F est appliquée à τ_0 ; elle acquiert donc une vitesse périodique dépendant à la fois de F et de γ . La figure 5 donne la position et la vitesse de l'onde localisée en fonction du temps, ainsi que la trajectoire dans le plan des phases. De plus, ajoutons que les radiations de *phonon* dues aux termes perturbateurs sont difficilement perceptibles; en revanche les effets de la discrétisation sont apparents au niveau de la vitesse. Ces résultats confirment la validité de

notre méthode de perturbation aussi bien que l'approximation continue.

6. CONCLUSION

Nous avons construit dans ce présent travail un modèle de réseau anharmonique, incluant des degrés de liberté supplémentaires inhérents à la rotation de dipôles. Le système microscopique ainsi obtenu est alors à la fois non linéaire (rotation de grandes amplitudes) et aussi dispersif (hétérogénéité en espace des dipôles), il engendre en conséquence des excitations acoustiques électromécaniques du type ondes solitaires; celles-ci sont intimement liées au mouvement de la paroi séparant deux domaines ferroélectriques et sont obtenues au moyen d'une approximation continue. Néanmoins, cette dernière s'accompagne dans certains cas d'une perte d'information par rapport au modèle discret correspondant, et conduit à des perturbations; une analyse de la stabilité peut être menée pour mieux cerner la dynamique du réseau. De telles ondes non linéaires, dans la mesure où leur stabilité est assurée, peuvent être appliquées dans des dispositifs de traitement du signal (par exemple, produit de convolution, diffraction d'ondes, compression d'impulsions etc ...).

Par ailleurs, le modèle peut être étendu au cas où les deux configurations A et B sont présentes et nous pouvons, par exemple, examiner la stabilité d'une configuration relativement à l'autre. D'autre part, Le caractère discret du système engendre des phénomènes non linéaires particulièrement intéressants à étudier et qui n'existent pas dans le cas continu, tels que l'hystérésis ou la transition vers le chaos, quand nous appliquons un champ électrique dépendant du temps. Finalement, nous pouvons envisager l'extension de ce modèle à un système bi-dimensionnel qui conduit à de nouvelles structures non linéaires et à de nouveaux problèmes de stabilité.

Fig. 4 - Influence d'un champ appliqué sur les ondes solitaires. (a) soliton en rotation, (b) soliton en élongation et (c) soliton en cisaillement.

Fig. 5 - Paramètres de l'onde solitaire en fonction du temps, (a) position de l'onde, (b) vitesse de l'onde et (c) trajectoire dans le plan des phases.

REFERENCES

- [1] E. MAGYARI - The inertia mode of the mechanically generated solitons in nematic liquid crystals. *Z. Phys. B-Condensed Matter* 56, 1-3 (1984).
- [2] H.D. VEY-AHARON, T.J.SLUCKIN, P.L. TAYLOR & A.J. HOPFINGER - Kink propagation as a model for poling in a poly (vinylidene fluoride). *Phys. Rev. B* 21, 3700-3707 (1980).
- [3] S. YOMOSA - Soliton excitations in dioxynucleic acid (DNA) double helices. *Phys. Rev. A* 27, 2120-2125 (1983).
- [4] W. KINASE, W. MAKINO & K. TAKAHASHI - Theory of the domain wall in NaNbO_3 and the relation with the incommensurate structure. *Ferroelectrics* 64, 173-180 (1985).
- [5] A. ASKAR - A model for coupled rotation-displacement mode of certain molecular crystals, illustration for KNO_3 . *J. Phys. Solids* 34, 1901-1907 (1973).
- [6] A.C. NEWELL - The history of the soliton. *Transaction of the ASME, J. of Appl. Mech.* 50, 1127-1138 (1983).
- [7] J. POUGET - Nonlinear dynamics of lattice models for elastic media. in NATO-ASI series, Vol. 225 "Physical Properties and Thermodynamic Behaviour of Minerals", ed. by E.K.H. Salje, p 359 (D. Reidel Dordrecht, 1988).
- [8] J. POUGET & G.A. MAUGIN - Nonlinear dynamics of oriented elastic solids I and II. *J. of Elasticity* 22, 135 and 157 (1989).

- [9] G.A. MAUGIN & A. MILED - *Solitary waves in micropolar elastic crystals*. Int. J. Eng. Sci. 24, 1477-1499 (1986).
- [10] A.J. CALLEGAR & E.L. REISS - *Nonlinear stability problem for the sine-Gordon equation*. J. Math. Phys. 14, 267-276 (1973).
- [11] S. SUZUKI & M. TAKAGI - *Topographic study in ferroelectric NaNbO_3 crystals I. Structure of 180° domain wall*. J. Phys. Soc. Jpn. 30, 188-202 (1971).
- [12] M. REMOISSENET - *Nonlinear excitations in a compressible chain of dipoles*. J. Phys. C : Solid state Physics 14, L335-L338 (1981).
- [13] F. FIVEZ - *On the continuum limit of a classical compressible Heisenberg chain*. J. Phys. C : Solid state Physics 15, L641-L643 (1982).
- [14] J. POUGET - *Transient motion of a solitary wave in elastic ferroelectric*. In Lecture Notes in Physics 249 "Trends in Applications of Pure Mathematics to Mechanics", ed. by E. Kroner and K. Kirchgassner, 156-153 (Springer-Verlag, Berlin, 1985).
- [15] J. POUGET & G.A. MAUGIN - *Influence of an external field on the motion of a ferroelectric domain wall*. Phys. Lett. 109 A, 389-392 (1985).