

PHYSIQUE DES SOLIDES. — *Étude théorique de la polarisation induite par choc dans des matériaux polaires.* Note (*) de Miguel de Icaza Herrera, André Migault et Jean Jacquesson, présentée par M. Louis Néel.

La modélisation de la molécule d'un matériau polaire (du type polyméthacrylate de méthyle) sous forme de dipôles ancrés à la chaîne du polymère conduit à associer à chaque dipôle un hamiltonien harmonique perturbé. L'étude des fonctions d'onde de cet hamiltonien par la méthode de variation des constantes de P. A. M. Dirac (*), en se limitant au premier ordre par rapport à la perturbation, montre que la polarisation π induite par le choc est proportionnelle à l'accélération moyenne du dipôle dans le choc.

The model of a polar material molecule (of P.M.M.A. type) as a rigid chain of linked dipoles, leads each dipole to be associated to a perturbed harmonic hamiltonian. Then the P. A. M. Dirac method, restricted to the first order, gives the shock induced polarization π as proportionnal to the mean acceleration of a dipole in the shock front thickness.

1. R. J. Eichelberger et G. E. Hauver ⁽¹⁾ puis G. E. Hauver ⁽²⁾ ont décrit le phénomène de polarisation induite par onde de choc dans des matériaux polaires et F. E. Allison ⁽³⁾ a présenté une théorie phénoménologique qui permet de décrire les signaux électriques enregistrés à l'aide de trois paramètres : la polarisation π induite par le choc, le temps de relaxation τ de cette polarisation et la constante diélectrique K derrière le front de l'onde de choc.

2. Le but de ce travail est de donner une expression théorique de la polarisation π en fonction de l'accélération moyenne α subie par les molécules se trouvant à l'intérieur du front de choc.

Dans le cas des polymères, plutôt que de considérer des molécules complètes, nous travaillerons seulement avec les parties de la molécule douées d'un moment dipolaire que nous appellerons « dipôle ».

Les paramètres caractérisant le « dipôle » sont définis sur la figure. L'effet du front de choc est de mettre en vitesse le solide et avec le solide, d'induire la rotation de chaque dipôle. Le point d'ancrage X du dipôle subit dans le front une accélération \ddot{X} dont nous appellerons la valeur moyenne α . L'influence du reste de la chaîne sur le dipôle est décrite par un potentiel $V(\theta)$.

Pour un dipôle à l'intérieur du front de choc, nous proposons l'hamiltonien suivant ⁽⁶⁾ :

$$(1) \quad H = H_0 + H',$$

où H_0 est l'hamiltonien du système non perturbé et H' la perturbation due au front de choc. H_0 et H' sont donnés par :

$$(2) \quad H_0 = -\frac{\hbar^2}{2I} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\gamma}{2} (\theta - \theta_0)^2,$$

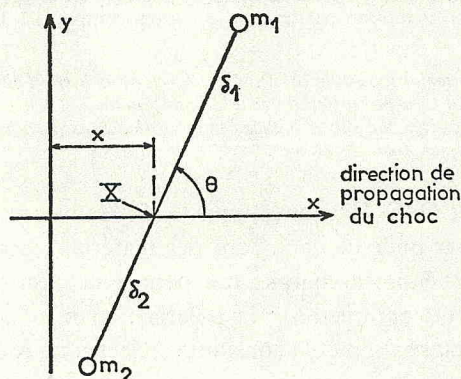
$$(3) \quad H' = -\alpha \xi \cos \theta,$$

où I est le moment d'inertie du dipôle par rapport à son point d'ancrage sur la chaîne de polymère, $\alpha \xi$ le couple qui agit sur le dipôle ($\xi = m_2 \delta_2 - m_1 \delta_1$) et θ l'angle entre le dipôle et la direction de propagation du choc. θ_0 caractérise la position d'équilibre

du dipôle en l'absence de choc. Le deuxième terme du membre de droite de (2) est le potentiel $V(\theta)$ décrivant l'influence du reste de la chaîne sur le dipôle; nous l'avons limité à sa partie harmonique, γ étant une constante.

3. Les vecteurs propres de H_0 sont ceux de l'oscillateur harmonique et on pourra utiliser la méthode de variation des constantes de P. A. M. Dirac ⁽⁴⁾ pour étudier l'évolution du système.

Si on se limite au premier ordre par rapport à la perturbation H' , on peut obtenir la fonction d'onde $\psi(\theta, \theta_0, t)$ qui décrit l'évolution temporelle du dipôle dont la position



d'équilibre est θ_0 . Dans le cas de matériaux tels que le polyméthacrylate de méthyle (P.M.M.A.) on peut montrer, par l'étude des transitions qu'elle induit, que la perturbation H' est effectivement petite. On montre également que l'on peut se limiter au premier ordre et ne considérer que les transitions induites entre états voisins ⁽⁶⁾.

Ayant obtenu cette fonction d'onde, on peut calculer la valeur moyenne du cosinus de l'angle θ pour les dipôles de position d'équilibre θ_0 par la relation :

$$(4) \quad \langle \cos; \theta_0 \rangle = \int \psi^*(\theta, \theta_0, t) \cdot \cos \theta \cdot \psi(\theta, \theta_0, t) d\theta.$$

Le résultat peut ensuite être intégré sur toutes les valeurs possibles de θ_0 si l'on connaît $\mathcal{L}(\theta_0)$, fonction de distribution des valeurs de θ_0 . Pour un solide initialement isotrope on a :

$$(5) \quad \mathcal{L}(\theta_0) = \frac{1}{2} \sin \theta_0.$$

La valeur moyenne du cosinus, $\langle \cos \theta \rangle$, pour tous les dipôles se trouvant à l'intérieur du front de choc est

$$(6) \quad \langle \cos \theta \rangle = \int \mathcal{L}(\theta_0) \langle \cos; \theta_0 \rangle d\theta_0.$$

Pour le solide initialement isotrope, c'est-à-dire non polarisé, le résultat final est le suivant ⁽⁶⁾ :

$$(7) \quad \langle \cos \theta \rangle = \frac{2}{3} \frac{\xi}{I} \frac{\alpha}{\omega^2},$$

où ω est la fréquence classique du dipôle dans le potentiel $V(\theta)$:

$$(8) \quad \omega = \sqrt{\frac{\gamma}{I}},$$

et α l'accélération moyenne du dipôle pendant son balayage par le front de choc. On peut écrire α sous la forme

$$\alpha = \langle \ddot{X} \rangle = \frac{u}{\tau},$$

u étant la vitesse particulaire finale de la matière induite par le front de choc et τ le temps de séjour du dipôle dans ce front.

On obtient ensuite la polarisation π par

$$(9) \quad \pi = N\mu \langle \cos \theta \rangle,$$

où N est le nombre de dipôles par unité de volume et μ le moment dipolaire d'un dipôle. Les relations (7) et (9) permettent d'écrire la polarisation sous la forme :

$$(10) \quad \pi = \frac{2}{3} N\mu \frac{\xi}{I\omega^2} \alpha = C\alpha = C \frac{u}{\tau},$$

où C est une constante caractéristique du matériau.

La relation (10) montre que la polarisation induite par le choc est proportionnelle à l'accélération moyenne communiquée à la matière par le choc. Elle lie cette polarisation à la vitesse induite par le choc et à l'épaisseur temporelle du front de choc.

On peut borner numériquement ξ et I et déterminer ω à l'aide du spectre d'absorption des radiations infrarouges⁽⁵⁾ et obtenir une bonne estimation de la constante C .

Dans le cas du P.M.M.A., on trouve

$$C \simeq 3,4 \cdot 10^{-19} \frac{Cs^2}{m^3}.$$

La polarisation est en coulomb par mètre carré, u en mètre par seconde et τ en seconde.

(*) Séance du 2 mai 1977.

(1) R. J. EICHELBERGER et G. E. HAUVER, *Coll. Intern. C.N.R.S. « Les Ondes de détonation »*, Paris, 1962, p. 363.

(2) G. E. HAUVER, *J. Appl. Phys.*, 36, 1965, p. 2113.

(3) F. E. ALLISON, *J. Appl. Phys.*, 36, 1965, p. 2111.

(4) P. A. M. DIRAC, *The Principles of Quantum Mechanics*, Oxford University Press, Oxford, 1954.

(5) G. W. CHANTRY et coll., in *Polymer Sciences*, 2, p. 1378, JENKINS, éd., Amsterdam, Netherlands, North Holland, 1972.

(6) M. DE ICAZA HERRERA, *Thèse de 3^e Cycle*, l'Université de Poitiers, n° 644, 23 décembre 1976.

M. I. H. :

*Instituto de Fisica,
Universidad Nacional Autonoma de Mexico,
Apartado Postal 20-364,
Mexico 20.D.F.*

A. M. et J. J. :

*Laboratoire d'Énergétique et de Détonique,
(L.A.C.N.R.S. n° 193),
Université de Poitiers,
E.N.S.M.A.-C.E.A.T.,
rue Guillaume-VII,
86034 Poitiers Cedex.*