ESPCI Deuxième année Année 2005-2006
Méthodes Mathématiques
Cyrille Barreteau
cyrille.barreteau@cea.fr
http ://www-drecam.cea.fr/Phocea/Membres/Cours/index.php

Tutorat no 5
Equation de sine-Gordon, solitons et dislocations [1]

Résumé

Vous connaissez depuis longtemps l'équation des ondes classique $\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0$ qui est une équation linéaire dont les solutions générales sont du type $f(x - vt) + g(x + vt)$. Nous abordons dans ce tutorat l'équation de sine-Gordon qui est une équation d'onde non-linéaire aux applications multiples en physique. Dans une première partie nous étudions un système modèle dont le comportement physique est décrit par l'équation de sine-Gordon. Dans une deuxième partie nous décrirons un certain type de solutions de cette équation appelé soliton. Enfin dans une dernière partie nous abordons le problème des dislocations dans les cristaux dont la solution est de type "soliton".

1 Equation de Sine-Gordon

1.1 La chaîne de pendules couplés

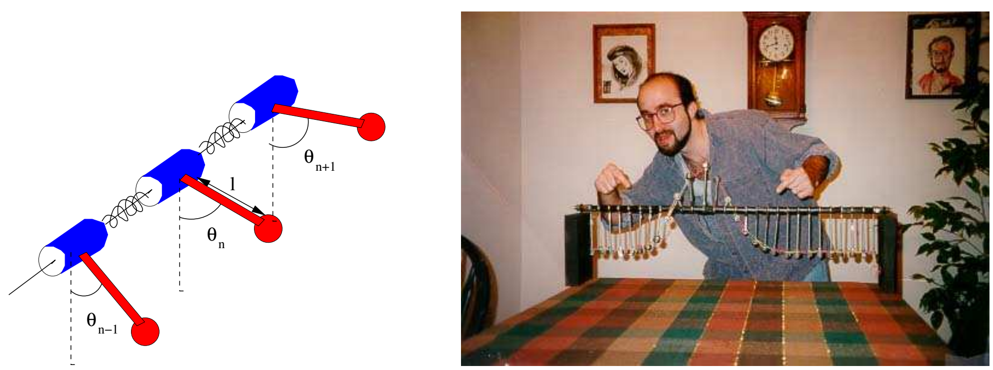

FIG. 1 – *Représentation schématique d'une chaîne de pendules couplés par des ressorts de torsion et son modèle réel fabriqué par Alex Kasman http ://math.cofc.edu/faculty/kasman/SOLITONPICS/hmsol.html*

On considère une chaîne de pendules couplés comme sur la figure 1. On note θ_n l'écart angulaire du pendule n par rapport à sa position d'équilibre verticale. Le Hamiltonien H du système s'écrit :

$$H = \sum_n \frac{I}{2} \left(\frac{d\theta_n}{dt} \right)^2 + \sum_n \frac{C}{2} (\theta_n - \theta_{n-1})^2 + \sum_n mgl(1 - \cos\theta_n)$$

Le premier terme correspond à l'énergie cinétique de rotation des pendules, où I est le moment d'inertie du pendule autour de son axe. Le deuxième terme représente l'énergie de couplage élastique entre deux pendules

[1] Tutorat fortement inspiré du livre de Michel Peyrard et Thierry Dauxois "La physique des solitons" et du polycopié (Ecole Polytechnique) de Denis Gratias "Introduction à la physique des matériaux".

voisins assuré par les ressorts de torsion de constante de raideur C. Enfin le dernier terme décrit l'énergie potentielle de pesanteur du pendule, en notant l la distance à l'axe de son centre de gravité, m sa masse et g l'accélération de la pesanteur.

1.2 Equations du mouvement

On introduit le moment conjugué de $p_n = I\dot{\theta}_n$. Les équations du mouvement se déduisent des équations de Hamilton :

$$\frac{d\theta_n}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_n} \quad , \quad \frac{dp_n}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \theta_n}$$

Montrez que les équations de Hamilton sont bien équivalentes aux équations de Euler Largrange et conduisent aux équations différentielles non linéaires couplées :

$$I\frac{d^2\theta_n}{dt^2} - C(\theta_{n+1} + \theta_{n-1} - 2\theta_n) + mgl\sin\theta_n = 0$$

1.3 Passage au continu : équation de sine-Gordon

On note a la distance entre deux pendules consécutifs. On remplace les variables discrètes $\theta_n(t)$ par la fonction des deux variables continues $\theta(x,t)$, où $\theta_n(t) = \theta(x = na, t)$. Montrez qu'un développement de Taylor de $\theta_{n\pm1}$ conduit à l'équation aux dérivés partielles du second ordre suivante :

$$\frac{\partial^2\theta}{\partial t^2} - c_0^2\frac{\partial^2\theta}{\partial x^2} + \omega_0^2\sin\theta = 0$$

Où l'on a introduit les variables suivantes :

$$\omega_0^2 = \frac{mgl}{I} \quad , \quad c_0^2 = \frac{Ca^2}{I}$$

Cette équation est appelée équation de sine-Gordon par analogie avec l'équation de Klein-Gordon en mécanique quantique. Il s'agit d'une équation non linéaire du fait du terme en $\sin\theta$.

2 Les solutions de l'équation de sine-Gordon

2.1 Les solutions de faible amplitude

On considère le situation des oscillations de faible amplitude $\theta << 2\pi$. En prenant la limite linéaire du terme sinusoïdal on aboutit à l'équation aux dérivées partielles suivante :

$$\frac{\partial^2\theta}{\partial t^2} - c_0^2\frac{\partial^2\theta}{\partial x^2} + \omega_0^2\theta = 0$$

Montrez que les ondes planes $\theta = \theta_0 e^{i(qx-\omega t)} + cc$ (cc : complexe conjugué) sont solutions à condition que ω et q soient reliés par une relation de dispersion $\omega = f(q)$. Tracez la courbe $f(q)$. Montrez que la vitesse de phase $v_\phi = \omega/q$ tend vers la constante c_0 dans la limite des grands vecteurs d'ondes q. Montrez également que les pulsations $\omega < \omega_0$ correspondent à des vecteurs d'ondes q imaginaires, non-physiques pour une chaine infinie.

2.2 Les solutions soliton

On cherche des solutions à profil constant se déplaçant à vitesse constante v, c'est à dire ne dépendant que de la variable $z = x - vt$. Montrer que pour les solutions de cette forme l'équation de sine-Gordon s'écrit :

$$v^2 \frac{d^2\theta}{dz^2} - c_0^2 \frac{d^2\theta}{dz^2} + \omega_0^2 \sin\theta = 0$$

Montrez après une intégration par rapport à z que cette équation peut être mise sous la forme :

$$\frac{1}{2}\left(\frac{d\theta}{dz}\right)^2 = -\frac{\omega_0^2}{c_0^2 - v^2}\cos\theta + C_1$$

C_1 étant une constante d'integration. On cherche une solution dite soliton, c'est à dire localisée spatialement telle que $\theta(z) \longrightarrow 0 (\mathrm{mod}\ 2\pi)$ pour $|z| \longrightarrow \infty$. En déduire que :

$$\frac{1}{2}\left(\frac{d\theta}{dz}\right)^2 - \frac{\omega_0^2}{c_0^2 - v^2}(1 - \cos\theta) = 0$$

Cette équation montre une analogie avec le mouvement d'une particule "fictive" vis-à-vis du "pseudo-temps" z. La solution cherchée $\theta(z)$ décrit le mouvement à énergie totale nulle de cette particule dans le potentiel :

$$V(\theta) = -\frac{\omega_0^2}{c_0^2 - v^2}(1 - \cos\theta)$$

Montrer que les solitons ne peuvent se propager qu'à des vitesses inférieures à c_0, et que lorsque $v^2 < c_0^2$ il existe une solution pour un "mouvement" entre $\theta = 0$ et $\theta = 2\pi$ (ou $\theta = -2\pi$). Intégrez l'équation précdente[2] et en déduire que :

$$\theta(z) = 4 \arctan \exp\left[\pm \frac{\omega_0}{c_0} \frac{z - z_0}{\sqrt{1 - v^2/c_0^2}}\right] \quad \text{avec} \quad z = x - vt$$

z_0 étant une constante d'intégration qui détermine la position du soliton à $t = 0$. Les solutions "soliton" correspondent au signe $+$ tandisque la solution "anti-soliton" correspond au signe $-$ que l'on a représenté sur la figures 2

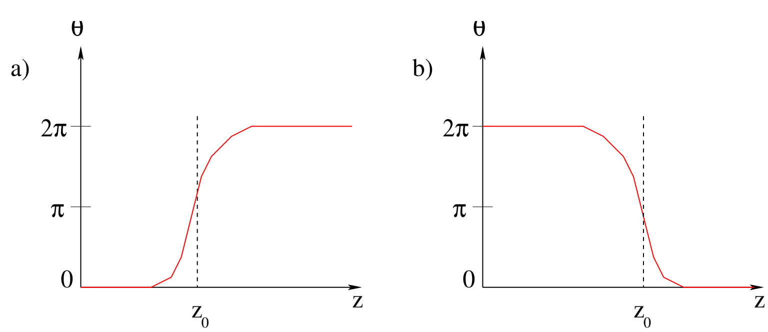

FIG. 2 – *Solutions soliton (a) et antisoliton (b) de l'équation de sine-Gordon.*

[2] On rappelle la formule d'intégration $\int \frac{dx}{\sin x} = \ln\tan|\frac{x}{2}|$

On peut donc écrire les solutions sous la forme :

$$\theta(z) = 4\arctan\exp\left[\pm\frac{x-x_0-vt}{L}\right] \quad \text{avec} \quad L = \frac{c_0}{\omega_0}\sqrt{1-v^2/c_0^2}$$

Discutez de la largeur du soliton en fonction de la vitesse v et de l'analogie avec la relativité restreinte. Discutez de l'approximation du milieu continu et montrez qu'elle n'est valable que si $C >> mg$.

2.3 Energie du soliton

Dans l'approximation des milieux continus montrez que l'Hamiltonien par unité de longueur s'écrit :

$$\mathcal{H}(x,t) = \frac{1}{a}\left[\frac{I}{2}\left(\frac{\partial\theta}{\partial t}\right)^2 + \frac{Ca^2}{2}\left(\frac{\partial\theta}{\partial x}\right)^2 + mgl(1-\cos\theta)\right]$$

Si l'on s'intéresse uniquement à l'expression de $\mathcal{H}$ pour un soliton il est judicieux d'utiliser la variable $z = x - vt$, telle que $\theta(x,t) = \theta(z)$. Montrez alors que $\mathcal{H}(z)$ s'écrit :

$$\mathcal{H}(z) = \frac{1}{a}\left[\frac{Iv^2}{2}\left(\frac{d\theta}{dz}\right)^2 + \frac{Ca^2}{2}\left(\frac{d\theta}{dz}\right)^2 + mgl(1-\cos\theta)\right]$$

En utilisant les résultat de la section précédente démontrez que[3] :

$$\mathcal{H}(z) = \frac{Ic_0^2}{a}\left(\frac{d\theta}{dz}\right)^2 = \frac{4I\omega_0^2}{a(1-v^2/c_0^2)}\mathrm{sech}^2\left[\frac{\omega_0(z-z_0)}{\sqrt{c_0^2-v^2}}\right]$$

Représentez graphiquement $\mathcal{H}(z)$ et vérifiez que cela correspon bien à une densité d'énergie localisée autour du centre du soliton. Par intégration en déduire que l'énergie du soliton est égale à :

$$E = \int_{-\infty}^{+\infty}\mathcal{H}(x,t)dx = \frac{8I\omega_0 c_0}{a\sqrt{1-v^2/c_0^2}}$$

Vérifiez que l'énergie du soliton est celle d'une quasi-particule relativiste de vitesse v et de masse au repos $m_0 = 8I\omega_0/(ac_0)$, où c_0 joue le rôle de la vitesse de la lumière.

3 Dislocation dans les cristaux

3.1 Modèle d'interaction atomique unidimensionnel

On considère deux rangées parallèles voisines d'atomes. La rangée inférieure est une rangée rigide d'atomes équidistants d'une distance inter-atomique a et qui engendre un potentiel périodique fixe de la forme :

$$V(x) = A(1-\cos(2\pi x/a))$$

La rangée supérieure est une chaîne linéaire d'atomes munis d'une interaction harmonique entre premiers voisins, de constante de force C formant au repos une chaîne périodique de même période a que le substrat. L'énergie totale de la chaîne isolée est donnée par :

[3] On rappelle que $\mathrm{sech}(z) = 1/\cosh z$

$$W = \frac{C}{2}\sum_n (x_n - x_{n-1} - a)$$

Où x_n est la position de l'atome n. L'énergie totale de la chaîne plongée dans le potentiel $V(x)$ vaut (voir figure 3) :

$$E = A\sum_n (1-\cos(2\pi x_n/a)) + \frac{C}{2}\sum_n (x_n - x_{n-1} - a)^2$$

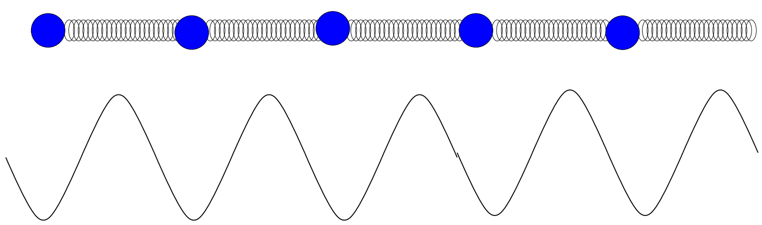

FIG. 3 – *Représentation schématique d'une chaîne d'atome couplés harmoniquement et plongée dans un potentiel periodique.*

Il est clair que l'état de plus basse énergie, $E = 0$, est obtenu lorsque les atomes de la chaîne harmonique se localisent à l'aplomb exact des atomes du substrats, soit $x_n = na$. Supposons maintenant que la chaîne harmonique subisse une pertubation locale (au voisinage de x_0) qui s'estompe à l'infini. On pose alors :

$$x_n = (n + u_n)a$$

Où u_n est un nombre sans dimension compris entre 0 et 1. La condition d'équilibre pour le n-ième atome est $\partial E/\partial u_n = 0$ soit :

$$Ca^2(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) = 2\pi A\sin(2\pi u_n)$$

3.2 Passage au continu et profil des déplacements

L'équation aux différences n'a pas de solutions analytiques connues mais est soluble dans la limite du continu. On remplace les u_n par une fonction continue $u(x)$ où $u_n = u(x = na)$. Montrez que :

$$Ca^2\frac{d^2u}{dx^2} = 2\pi A\sin(2\pi u)$$

On cherche une solution telle que $u \to 0$ pour $x \to -\infty$ et $u \to 1$ pour $x \to +\infty$ (déplacement nul à l'infini à un vecteur du réseau près). Montrez alors que :

$$\frac{Ca^2}{2}\left(\frac{du}{dx}\right)^2 = A(1-\cos(2\pi u))$$

En déduire le profil des déplacements :

$$u(x) = \frac{2}{\pi}\arctan\exp\left[\frac{2\pi}{a}\sqrt{\frac{A}{C}}x\right]$$

Montrer que la largeur L du "soliton" c'est à dire la distance sur laquelle les atomes sont déplacés de façon notable est donné par :

$$L = \frac{a}{2}\sqrt{\frac{C}{A}}$$

Cette grandeur L mesure la taille du coeur du défaut topologique appelé dislocation. Discutez de la largeur L en fonction des paramètres du modèle : raideur des ressorts et amplitude du potentiel.

3.3 Energie de la dislocation

Montrez que dans la limite du continu l'énergie par unité de longueur s'écrit :

$$E(x) = \frac{1}{a}\left[A\big(1-\cos(2\pi u(x))\big) + \frac{Ca^2}{2}\left(\frac{du}{dx}\right)^2\right]$$

En utilisant les résultats de la section précédente montrez que ;

$$E(x) = Ca\left(\frac{du}{dx}\right)^2$$

En déduire par intégration que l'énergie de la dislocation est égale à :

$$E = \int_{-\infty}^{+\infty} E(x)dx = \frac{4}{\pi}\sqrt{AC}$$