



HAL
open science

**Université Moulay Ismail Ecole Nationale Supérieure
d'Arts et Métiers, Meknès Centre d'études doctorales
Recherche et innovation pour les sciences de l'ingénieur**

**Titre: Exact Study of the Statistical Mechanics of
Biological Materials by the Transfer Matrix Method**

R El Kinani

► **To cite this version:**

R El Kinani. Université Moulay Ismail Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers, Meknès Centre d'études doctorales Recherche et innovation pour les sciences de l'ingénieur Titre : Exact Study of the Statistical Mechanics of Biological Materials by the Transfer Matrix Method. Sciences de l'ingénieur [physics]. Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers, Meknès, Centre d'études doctorales Recherche et innovation pour les sciences de l'ingénieur, 2016. Français. NNT : . tel-02558916

HAL Id: tel-02558916

<https://hal.science/tel-02558916>

Submitted on 30 Apr 2020

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 Moulay Ismail
Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers, Meknès
Centre d'études doctorales
Recherche et innovation pour les sciences de l'ingénieur

THESE

Présentée pour l'obtention du Diplôme de

DOCTORAT

Discipline : **Sciences de l'ingénieur**

Spécialité : **Matériaux Avancés**

Par :

EL KINANI Radouane

Titre :

**Étude Exacte de la Mécanique Statistique des Matériaux Biologiques par la
Méthode de la Matrice de Transfert**

Soutenue le **05 Novembre 2016** devant le jury composé des professeurs :

Youssef EL AMRAOUI	Directeur de l'ENSAM, Meknès	Président
Abdelali RAHMANI	PES, Fac.Sc, Meknès	Rapporteur
Hamid RIDOUANE	PES, Fac.Sc. Ben M'sik Casablanca	Rapporteur
Abdelali DEROUCHE	PES, Fac.Sc. Ben M'sik Casablanca	Rapporteur
Hamid ARHCHOUI	PES, Fac.Sc. Ben M'sik Casablanca	Examineur
Mabrouk BENHAMOU	PES, ENSAM Meknès	Directeur de Thèse
Hamid KAIDI	PA, CRMEF, Fès-Meknès	Invité

Remerciements

Le travail de recherche présenté dans cette thèse a été effectué au sein du *centre d'études doctorales de l'ENSAM Meknès: Recherche et Innovation pour les Sciences de l'Ingénieur*, sous la direction de Professeur Mabrouk BENHAMOU.

Tout d'abord je remercie très particulièrement mon directeur de thèse le Professeur Mabrouk BENHAMOU, pour m'avoir accueilli dans son équipe de recherche et pour avoir dirigé ce travail, avec beaucoup de bonne bien veillance, sans ménager ni son temps ni ses efforts. J'ai pu bénéficier tout au long de cette période de son soutien et de ses conseils éclairés. Je le remercie également, pour sa disponibilité et de ses qualités humaines remarquables. Je suis spécialement heureux de lui exprimer ici tout ma reconnaissance.

Je tiens à adresser mes remerciement les plus sincères à Monsieur Y. EL AMRAOUI, Directeur de *l'ENSAM Meknès*, pour l'honneur qu'il m'a fait en acceptant de présider le jury de cette thèse.

J'exprime ma profonde gratitude à Monsieur, El Hassan EL KINANI, Directeur du *centre d'études doctorales de l'ENSAM Meknès: Recherche et Innovation pour les Sciences de l'Ingénieur*. Je le remercie également pour sa disponibilité et de ses conseils pertinents.

J'exprime mes sincères remerciements à Messieurs A. RAHMANI, Professeur à la Faculté des Sciences Meknés, H. RIDOUANE et A. DEROUICHE, Professeurs à la Faculté des Sciences Ben M'sik de Casablanca, pour l'intérêt qu'ils ont porté à ce travail, en acceptant de le juger et, de surcroît, en être rapporteurs.

J'adresse mes vifs remerciements à Monsieur H. ARHCHOUI, Professeur à la Faculté des Sciences Meknés, d'avoir accepté de sieger parmi les membres du jury.

Je tiens également à remercier chaleureusement Monsieur H. KAIDI, Professeur à CRMEF, Fès-Meknès pour ses conseils pertinents et d'avoir accepté de sieger parmi les membres du jury.

Je tiens à remercier spécialement tous les membres du *centre d'études doctorales de l'ENSAM Meknès: Recherche et Innovation pour les Sciences de l'Ingénieur*, pour l'ambiance scientifique et amicale.

Enfin, j'adresse mes sincères remerciements à ma famille, et à tous mes amis qui m'ont soutenu et supporté tout au long de cette période.

Résumé

Nous étudions, par les méthodes de Mécanique Statistique, les propriétés thermiques en relation avec la transition dite de déliaison entre paires de cordes ou de biomembranes (manifolds). Les quantités d'intérêt sont la probabilité de contact, la séparation moyenne et la densité d'énergie libre de la paire de manifolds. Pour mener des calculs exacts, nous utilisons d'abord la Méthode de la Matrice de Transfert, avec un potentiel de Morse standard. Nous démontrons aussi l'universalité des exposants critiques liés à la transition de déliaison, pour n'importe quel potentiel d'interaction, pourvu qu'il soit suffisamment profond et de très courte portée. Cette démonstration est testée sur les potentiels de Morse standard et généralisé. Nous étendons ensuite l'étude à un potentiel de Morse plus général que nous introduisons pour la première fois, et qui dépend d'un paramètre réel q . Les potentiels précédents sont retrouvés, respectivement, pour les valeurs particulières $q = 0$ et $q = -1$. Enfin, nous proposons un potentiel de Morse double pour l'étude de la Mécanique Statistique des manifolds confinés entre deux parois planes interagissantes.

Mots-clés: Biomembranes, Cordes, Mécanique Statistique, Transition de déliaison, Probabilité de contact, Séparation moyenne, Densité d'énergie libre.

Abstract

In this thesis, we study using Statistical Mechanics methods the thermal properties of the unbinding transition between pairs of strings or biomembranes (manifolds). The main quantities to consider contact probability, the mean-separation and the free energy density of a pair of manifolds. We first use the Transfer Matrix Method, with a standard Morse potential. Also we demonstrate, for any interaction potential, provided that it is sufficiently deep and of very short-range, the universality of critical exponents associated with the unbinding transition. This proof is tested on the standard and generalized Morse potentials. Secondly, we extend the study to the most general Morse potential, we introduce, for the first time, which depends on a real parameter q . For $q = 0$ and $q = -1$, we recover the previous potentials. Finally, we propose a double Morse potential for the study of Statistical Mechanics of manifolds confined between two interacting plane walls.

Keywords: Biological membranes, Strings, Statistical Mechanics, Unbinding transition, Contact probability, Average separation, Free energy density.

Table de matière

Résumé

Abstract

Introduction

1 Mécanique Statistique des biomembranes	20
1.1 Description moléculaire des biomembranes	21
1.1.1 Aspect microscopique	21
1.1.2 Energie élastique des biomembranes	22
1.1.3 Hamiltonien de Canham-Helfrich	25
1.2 Fluctuations thermiques	29
1.2.1 Spectre de fluctuations	29
1.2.2 Longueur de persistance	32
1.3 Conclusion	34

2	Etude de la transition de déliaison des biomembranes et des cordes	
	à l'aide d'un potentiel de Morse	38
2.1	Introduction	39
2.2	Modèle de cordes	42
2.2.1	Définition et description	42
2.3	Étude exacte de la transition de déliaison	46
2.3.1	Fonction énergie potentielle	46
2.3.2	Résolution de l'équation de Schrödinger	47
2.3.3	Densité de probabilité	51
2.3.4	Séparation moyenne	52
2.3.5	Rugosité des cordes	53
2.3.6	Discussion et lois d'échelle	53
2.4	Conclusion	59
3	Etude de la transition de déliaison des cordes et biomembranes à	
	l'aide des potentiels de courte portée: Preuve de l'universalité	65
3.1	Introduction	67
3.2	Lois d'échelle	68
3.3	Preuve de l'universalité	70
3.3.1	Premier exemple: Le potentiel de Morse standard	70
3.3.2	Deuxième exemple: Le potentiel de Morse généralisé	75
3.3.3	Démonstration de l'universalité	78

3.4	Conclusion	82
4	Mécanique Statistique et interactions des cordes par l'approche de l'équation de Schrödinger: Résultats exacts	87
4.1	Introduction	88
4.2	Modèle de cordes	90
4.3	Probabilité de contact	92
4.4	Conclusion	96
5	Mécanique Statistique des matériaux biologiques confinés	101
5.1	Introduction	102
5.2	Description du modèle	104
5.2.1	Formulation théorique	104
5.2.2	Potentiel de Morse double	106
5.3	Etude thermodynamique	108
5.3.1	Equation de Schrödinger	108
5.3.2	Etats liés du PMD	111
5.3.3	Densité d'énergie libre et chaleur spécifique	111
5.4	Conclusion	112

Conclusion générale

Annexes: Articles publiés

Résumé

Nous étudions, par les méthodes de Mécanique Statistique, les propriétés thermiques en relation avec la transition dite de déliaison entre paires de cordes ou de biomembranes (*manifolds*). Les quantités d'intérêt sont la probabilité de contact, la séparation moyenne et la densité d'énergie libre de la paire de manifolds.

Pour mener des calculs exacts, nous utilisons d'abord la *Méthode de la Matrice de Transfert*, avec un potentiel de Morse standard.

Nous démontrons aussi l'universalité des exposants critiques liés à la transition de déliaison, pour n'importe quel potentiel d'interaction, pourvu qu'il soit suffisamment profond et de très courte portée. Cette démonstration est testée sur les potentiels de Morse standard et généralisé.

Nous étendons ensuite l'étude à un potentiel de Morse plus général que nous introduisons pour la première fois, et qui dépend d'un paramètre réel q . Les potentiels précédents sont retrouvés, respectivement, pour les valeurs particulières $q = 0$ et $q = -1$.

Enfin, nous proposons un potentiel de Morse *double* pour l'étude de la Mécanique

Statistique des manifolds confinés entre deux parois planes interagissantes.

Mots-clés: Biomembranes, Cordes, Mécanique Statistique, Transition de déliaison, Probabilité de contact, Séparation moyenne, Densité d'énergie libre.

Abstract

In this thesis, we study using Statistical Mechanics methods the thermal properties of the unbinding transition between pairs of strings or biomembranes (*manifolds*). The main quantities to consider contact probability, the mean-separation and the free energy density of a pair of manifolds.

We first use the *Transfer Matrix Method*, with a standard Morse potential. Also we demonstrate, for any interaction potential, provided that it is sufficiently deep and of very short-range, the universality of critical exponents associated with the unbinding transition. This proof is tested on the standard and generalized Morse potentials.

Secondly, we extend the study to the most general Morse potential, we introduce, for the first time, which depends on a real parameter q . For $q = 0$ and $q = -1$, we recover the previous potentials

Finally, we propose a *double* Morse potential for the study of Statistical Mechanics of manifolds confined between two interacting plane walls.

Keywords: Biological membranes, Strings, Statistical Mechanics, Unbinding transition, Contact probability, Average separation, Free energy density.

Introduction

Au cours des dernières décennies, les matériaux biologiques (biomembranes, ADN, ARN, etc.) ont reçu une attention particulière de la part des physiciens, mais aussi des chimistes et des biologistes. Les physiciens ont, en particulier, mis à la disposition de ces matériaux, d'importants outils théoriques, à savoir la Mécanique Statistique et la Théorie de Champ qui sont deux méthodes assez bien adaptées aux systèmes constitués d'un grand nombre de molécules. Aussi, les méthodes de simulation (essentiellement, les méthodes de Monte Carlo et de Dynamique Moléculaire) ont été utilisées d'une manière très satisfaisante.

Pour les biomembranes, leurs grandes variétés de formes et de topologies peuvent être expliquées par l'énergie de courbure [1 – 4]. Aussi, les simulations numériques ont permis de visualiser certains aspects de l'évolution de ces systèmes [5]. En parallèle, la visualisation optique, en temps réel, s'est révélée un outil essentiel. En effet, cette visualisation permet de présenter le système sous différents aspects (zoom, angles d'observation, éclairage, marquages fluorescents...).

La membrane cellulaire est l'un des systèmes les plus étudiés par les physiciens.

ochimistes de la matière molle, du fait que c'est un élément déterminant qui entre dans la composition des éléments de la cellule. De plus, les outils théoriques de la Physique Statistique se mettent bien à l'étude des objets de ce type. Parmi ces études faites sur les biomembranes, l'on peut citer la *transition de déliaison*, à laquelle nous nous sommes intéressés dans cette thèse.

La déliaison (ou *unbinding*) est un phénomène inhérent aux objets élastiques souples que nous qualifions de *manifolds*, tels que les cordes et les membranes biologiques [6, 7]. Ainsi les règles des mécanismes d'adhésion et de déliaison des membranes sont analogues à celui régissant le mouillage interfaciale [8], et la transitions d'adsorption et de désorption de polymères [9]. La caractéristique commune de ces phénomènes d'interface est qu'ils ont un comportement similaire à celui des lignes unidimensionnelles ou des cordes de tension finie [10], comme des bords sur des surfaces cristallines, des polymères étirés (ou dirigés) ou des lignes de vortex dans les supraconducteurs.

Les calculs par la technique du *Groupe de Renormalisation* prédit que les membranes fluides possèdent des propriétés d'échelle similaires à celle des cordes, au voisinage du minimum du potentiel [11]. Une telle propriété sera la clé de notre étude des propriétés thermiques et leur relation avec la transition de déliaison des matériaux biologiques.

La transition de déliaison des cordes et des membranes biologiques est souvent dictée par la forme stérique des fluctuations [12], dont l'amplitude augmente avec

la température. Ces ondulations obligent non seulement de rendre les bicouches lipidiques dans la phase L_{α} , mais aussi à prévenir la coagulation des vésicules et de stabiliser les émulsions [13]. Pour une bicouche membranaire, les interactions induites par les fluctuations sont équilibrées, à courte distance, par les forces répulsives d'hydratation [14] et des forces attractives de van der Waals [15]. Le potentiel d'hydratation (par unité de surface) agit aux petites séparations, de l'ordre de 1nm. Son amplitude et sa portée sont respectivement, $\lambda_h \simeq 0,3\text{nm}$ et $P_h \simeq 0.2\text{J/m}^2$. Alors que le potentiel attractif de van der Waals provient des polarisabilités électrique des lipides et des molécules d'eau. L'amplitude associée (*constante d'Hamaker*), notée W , est de l'ordre de $10^{-22} - 10^{-21}\text{J}$, et l'épaisseur de la bicouche est d'environ $\delta \simeq 4\text{nm}$. Le potentiel d'interaction total est alors la somme de ces trois interactions. La membrane reste stable pour un minimum du potentiel, à condition que la profondeur de ce dernier soit comparable à l'énergie thermique. Cette profondeur dépend en particulier de la valeur de l'amplitude W de l'énergie directe du van der Waals. En effet, cette amplitude peut être modifiée en changeant la polarisabilité du milieu aqueux.

Dans ce contexte, deux chercheurs, Lipowsky et Leibler [16], ont montré qu'il existe un certain seuil au-delà duquel les interactions attractives de van der Waals sont suffisantes pour lier les biomembranes ensemble. En dessous de cette amplitude caractéristique, les ondulations membranaires dominent les forces d'attraction, puis, les membranes se séparent complètement. Il a été constaté [7, 16], en particulier,

que lorsque la température de déliaison, T_c , est approchée par le bas, la séparation moyenne entre les deux membranes, $\langle l \rangle$, ainsi que leur rugosité, ξ_\perp , divergent comme: $\langle l \rangle \sim \xi_\perp \sim (T_c - T)^{-\psi}$, où l'*exposant de rugosité* ψ est proche de 1.

Ensuite, les résultats ont été étendus aux biomembranes chargées [16], où la transition de déliaison est entièrement contrôlée par la concentration ionique du milieu aqueux. Bien sûr, celui-ci dépend de la nature du système de lipides. Les prédictions théoriques pour les membranes chargées ont été testées expérimentalement sur le DPPC dans la solutions CaCl_2 [17]. Enfin, dans tous les cas, à coté de ψ , on définit d'autres exposants critiques [11], comme l'*exposants de contact*.

Un outil alternatif également intéressant est la *Méthode de la Matrice de Transfert* (MMT) habituellement rencontrée en Mécanique Quantique [18 – 20] et en Phénomènes Critiques [21, 22]. Une telle approche a été appliquée avec succès à des membranes biologiques [23, 24]. Très récemment, la MMT a été appliquée à la transition de déliaison, en utilisant des potentiels avec des puits simples ou doubles [19].

Les travaux de recherches menés dans cette thèse s'inscrivent précisément dans le cadre de l'étude de la transition de déliaison [29, 30], subie par des paires de manifolds, et ceci par application de la MMT à un certain type de potentiel, en l'occurrence le *potentiel de Morse* (PM) [25] qui reproduit bien les caractéristiques de l'interaction réelle. Ce dernier a été introduit pour décrire les vibrations des molécules diatomiques, de très faibles interactions [26, 27]. L'avantage du PM est

qu'il n'est pas singulier et il se présente simplement comme une différence de deux queues exponentielles.

Nous rappelons que le PM a été appliqué récemment à l'étude de la transition de déliaison des biomembranes [28], en utilisant la *Méthode Variationnelle* traditionnelle. Cette utilisation peut être motivée par le fait que ce même potentiel reflète les deux caractéristiques essentielles décrites ci-dessus, à savoir une répulsion à courte distance, et une attraction à des distances intermédiaires. Il est caractérisé par trois paramètres, qui sont: sa profondeur (*énergie de dissociation*), D , sa portée, α^{-1} , et la position de son minimum, l_m . Une autre raison du choix de ce potentiel est que son spectre d'énergie est discret, et que toutes les fonctions propres associées sont des états liés. L'existence de ces états fait que le PM est un bon candidat pour l'étude de la transition de déliaison des cordes et des membranes. Les paramètres ajustables D , α_0^{-1} et l_m peuvent être liés à ceux du potentiel réel. Plus précisément, nous avons des relations fonctionnelles de types: $x = g_x(W, \delta, \kappa, P_h, \lambda_h)$, avec $x = D, \alpha, l_m$, où κ est le module de rigidité des biomembranes en interaction. En outre, les paramètres du PM dépendent de la température.

Ainsi, nous avons adopté des potentiels qui généralisent le PM standard [31], pour l'étude des propriétés thermiques des manifolds, au voisinage de la température de déliaison. En utilisant la MMT, avec ces potentiels, nous avons obtenu des résultats exacts (lois d'échelle et exposants critiques).

Cette thèse s'organise comme suit:

Le premier chapitre, introductif, est destiné à un rappel succinct des propriétés physico-chimiques des membranes fluides, à l'équilibre thermodynamique. Nous rappellons, également, quelques outils de la Physique Statistique qui permettent de décrire la physique des biomembranes. Ensuite, nous indiquons les conséquences des fluctuations thermiques des membranes, ainsi que leur influence sur ses propriétés d'élasticité.

Au deuxième chapitre, nous présentons une étude exacte de la transition de déliaison des cordes et des biomembranes, en utilisant le PM standard. L'objectif est de déterminer, d'une manière exacte, l'expression de la température de déliaison des cordes, ainsi que la probabilité de contact. Nous utilisons ensuite cette probabilité pour extraire diverses longueurs d'échelle, qui sont la séparation moyenne et la rugosité des cordes.

Au troisième chapitre, nous réexaminons l'étude de la transition de déliaison des cordes et des biomembranes, en utilisant la MMT qui est basée sur la résolution d'une équation de type Schrödinger. Nous démontrons l'universalité des exposants critiques associés, pour n'importe quelle forme du potentiel d'interaction, pourvu que ce dernier soit suffisamment profond et de très courte portée. Cette démonstration générale est testée sur les PM standard et généralisé. Ensuite, nous montrons l'universalité des exposants critiques.

Dans le quatrième chapitre, nous considérons une paire de cordes en interaction pouvant fluctuer thermiquement autour d'une ligne de référence. Nous supposons

que les deux cordes interagissent via un q -PM, où q est un nombre réel paramétrisant le potentiel. Par exemple, la valeur $q = 0$ définit le PM standard et la valeur $q = -1$ définit un PM généralisé qui a été introduit par Deng et Fan [32], dans le contexte de la Mécanique Quantique. La raison du choix de ce potentiel est que son spectre d'énergie est discret, et ensuite, l'ensemble de fonctions propres associées sont des états liés. L'existence de ces états, fait de ce potentiel un bon candidat pour l'étude des propriétés statistiques des cordes adjacentes. Le but est de déterminer les états liés, afin d'établir d'une manière exacte l'expression de la distribution de probabilité. A partir de cette dernière, nous déterminons la séparation moyenne, ainsi que la rugosité des cordes.

Au dernier chapitre, nous proposons un nouveau modèle [33] pour étudier la Mécanique Statistique d'une biomembrane confinée qui fluctue entre deux substrats plans interactifs. Nous supposons que la biomembrane interagit avec les substrats via un PM double qui reproduit bien les caractéristiques de l'interaction réelle.

Enfin, nous terminons cette thèse par une conclusion et un annexe présentant les travaux publiés.

Bibliographie

- [1] H. Wolfgang, *Elastic properties of lipid bilayers: Theory and possible experiments*, Zeitschrift für Naturforschung C **28**, 693 (1973).
- [2] U. Seifert, *Configurations of fluid membranes and vesicles*, Advances in Physics **46**, 13 (1997).
- [3] A. Iglic, *A possible mechanism determining the stability of spiculated red blood cells*, Journal of Biomechanics **30**, 35 (1997).
- [4] S.A. Safran, *Statistical Mechanics of Surfaces, Interfaces, and Membranes*, Frontier in Physics, 1994.
- [5] D. Nelson, T. Piran, *Statistical Mechanics of Membranes and Surfaces*, World Scientific, 2004.
- [6] M. Lässig, R. Lipowsky, *Universal Aspects of Interacting Lines and Surfaces*, Fundamental Problems in Statistical Mechanics VIII, 1994.

- [7] E. Sackmann. dans, *Structure and Dynamics of Membranes: I. From Cells to Vesicles/II*, Generic and Specific Interactions. Elsevier, 1995.
- [8] S. Dietrich, dans *Phase Transitions and Critical Phenomena*. édités par C. Domb et J. Lebowitz, Academic Press **12**, 1988.
- [9] E. Eisenriegler, *Polymers Near Surfaces: Conformation Properties and Relation to Critical Phenomena*, World Scientific, 1993.
- [10] M.E. Fisher, J. Chem, *Interface wandering in adsorbed and bulk phases, pure and impure*, Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions 2: Molecular and Chemical Physics **82**, 1569 (1986).
- [11] R. Lipowsky, *Europhys*, *Lines of renormalization group fixed points for fluid and crystalline membranes*, EPL (Europhysics Letters) **7**, 255 (1988).
- [12] W. Helfrich, Z. Natureforsch, *Elastic properties of lipid bilayers: theory and possible experiments*, Zeitschrift für Naturforschung C **28**, 693 (1973).
- [13] C.R. Safinya, *Rigid and fluctuating surfaces: a series of synchrotron x-ray scattering studies of interacting stacked membranes*, dans : Phase transitions in Soft Condensed Matter. Springer US, 249-270 (1989).
- [14] R.P. Rand, V.A. Parsegian, *Hydration forces between phospholipid bilayers*, Biochimica et Biophysica Acta (BBA)-Reviews on Biomembranes **988**, 351 (1989).

- [15] J.N. Israelachvili, *Intermolecular and Surface Forces*, 2nd edition, Academic Press, London, 1991.
- [16] R. Lipowsky, S. Leibler, *Unbinding transitions of interacting membranes*, Physical Review Letters **56**, 2541 (1986).
- [17] L.J. Lis, W.T. Parsegian, *Adsorption of divalent cations to a variety of phosphatidylcholine bilayers*, Biochemistry **20**, 1771 (1981).
- [18] F. Wiegels, *Introduction to Path-Integral Methods in Physics and Polymer Science*, World Scientific, Philadelphia, 1986.
- [19] L.S. Schulman, *Techniques and Applications of Path Integration*, Dover, 2005.
- [20] H. Kleinert, *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics, and Financial Markets*, 5th edition, World Scientific, London, 2009.
- [21] C. Itzykson and J.-M. Drouffe, *Statistical Field Theory : 1 and 2*, Cambridge University Press, 1989.
- [22] J. Zinn-Justin, *Quantum Field Theory and Critical Phenomena*, Clarendon Press, Oxford, 1989.
- [23] R. Lipowsky, *Typical and exceptional shape fluctuations of interacting strings*, EPL (Europhysics Letters) **15**, 703 (1991).

- [24] M. Asfaw, *Unbinding transitions of membranes and strings from single and double-well potential*, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* **387**, 3526 (2008).
- [25] P.M. Morse, *Diatomic molecules according to the wave mechanics. II. Vibrational levels*, *Physical Review* **34**, 57 (1929).
- [26] G. Herzberg, *Molecular Spectra and Molecular Structure I. Spectra of Diatomic Molecules*, Van Nostrand-Reinhold, New York, 1950.
- [27] CHO, Sung-sil, SUN, Ho-Sung, *Rotational State Distributions of I 2 (B) From Vibrational Predissociation of I 2 (B)-Ne*, *Bulletin of the Korean Chemical Society* **25**, 1397 (2004).
- [28] M. Manghi, N. Destainville, *Statistical mechanics and dynamics of two supported stacked lipid bilayers*, *Langmuir* **26**, 4057 (2009).
- [29] M. Benhamou, R. El Kinani, H. Kaïdi, *Rigorous Study of the Unbinding transition of biomembranes and strings from Morse potentials. Conference Papers in Mathematics*, Hindawi Publishing, **2013**, ID 320718, 7 pages 2013.
- [30] R. El Kinani, M. Benhamou, and H. Kaïdi, *Unbinding transition of strings and biomembranes from short-range potentials : Proof of universality*, *International Journal of Academic Research* **7**, 337 (2015).

- [31] R. El Kinani, M. Benhamou, H. Kaïdi, *Schrödinger equation approach to Statistical Mechanics of interacting stings: Exact results*, International Journal of Multidisciplinary and Current Research **3**, 732 (2015).
- [32] Z. H. Deng, Y. P. Fan, *A potential function of diatomic molecules*, Shandong University Journal, Natural Science **1**, 162 (1957).
- [33] R. El Kinani, M. Benhamou, H. Kaïdi, *Statistical Mechanics of confined biological materials*, IOP Conference on Materials Science and Engineering 2015 à apparaître.

Chapitre 1

Mécanique Statistique des biomembranes

Dans ce chapitre, à caractère *bibliographique*, nous donnons un aperçu sur les propriétés physico-chimiques des biomembranes qui sont à l'équilibre thermodynamique. Nous rappelons également quelques outils de la Physique Statistique permettant la description des biomembranes, en tant que systèmes comportant un nombre considérable de constituants (molécules et macromolécules). Enfin, nous rappelons les conséquences des fluctuations thermiques, ainsi que leur influence sur les propriétés d'élasticité des biomembranes.

1.1 Description moléculaire des biomembranes

1.1.1 Aspect microscopique

Du point de vue microscopique, une biomembrane peut être décrite comme étant un fluide bidimensionnel isotrope, dont la distance intermoléculaire est de l'ordre de $a \simeq 0.5\text{nm}$. Les molécules de lipides de la biomembrane effectuent des mouvements, par diffusion latérale, diffusion rotationnelle, ou par passage d'un feuillet à l'autre (*flip-flop*). Le schéma représenté sur la FIG. 1.1 illustre trois types de mouvements des lipides dans la bicouche membranaire. Ces lipides peuvent diffuser librement dans la bicouche. Le coefficient de diffusion associé a été mesuré par diverses techniques (en particulier par *Fluorescence Recovery After Photobleaching*), et sa valeur est de l'ordre de $D = 10^{-12}\text{m}^2/\text{s}$, c'est-à-dire qu'un lipide parcourt environ $1\mu\text{m}$ en 1s [1]. Pratiquement, lorsqu'on baisse la température, une transition de phase du premier ordre se produit vers une phase ordonnée de type cristal-liquide. Ce coefficient de diffusion chute à une valeur typique de l'ordre de $D = 10^{-15}\text{m}^2/\text{s}$ [2]. On a aussi observé que les molécules de lipides effectuent une rotation autour d'elles-mêmes, avec un coefficient de diffusion (*rotationnel*) mesuré, de l'ordre de $D = 10^{-8}\text{m}^2/\text{s}$. D'un autre côté, un autre type de mouvement des lipides est possible, qui est traduit par l'immigration des lipides d'une bicouche à une autre, mais restant toujours à la direction perpendiculaire de la biomembrane. Il s'agit d'un phénomène lent, car il est très défavorable de faire passer la tête polaire des lipides à l'intérieur de la zone

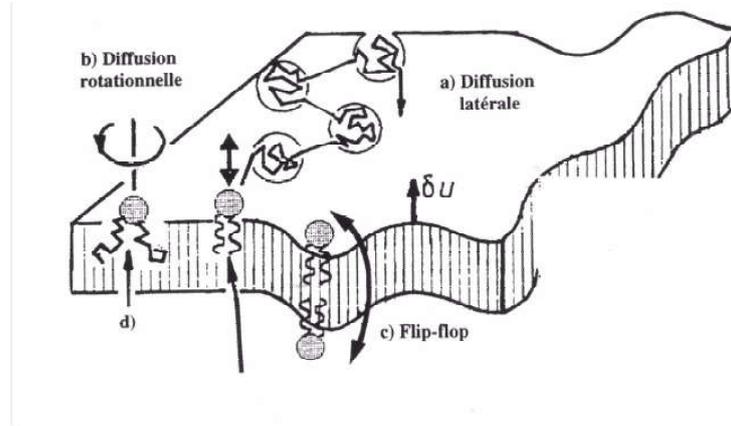


FIG. 1.1: *Différents mouvements des lipides dans une biomembranes.*

hydrophobe des lipides. Le coefficient de diffusion associé à ce type de mouvement est de l'ordre de $D_f = 10^{-8} \text{m}^2/\text{s}$ [3]. Il est à noter que ce passage d'un feuillet à l'autre a bien eu lieu dans les biomembranes; en effet, des enzymes des flipases sont capables de favoriser fortement ce mouvement [3].

1.1.2 Energie élastique des biomembranes

Si l'on se place à l'échelle macroscopique, c'est-à-dire à des échelles de longueurs grandes devant la taille des molécules, les propriétés des biomembranes lipidiques sont, en général, caractérisées par trois modes de déformation élastique. Les theories d'élasticité des membranes fluides ont été proposées indépendamment par Canham [4] et par Helfrich [5]. Sur la FIG. 1.2, nous illustrons les différentes déformations, en précisant ci-dessous les énergies associées.

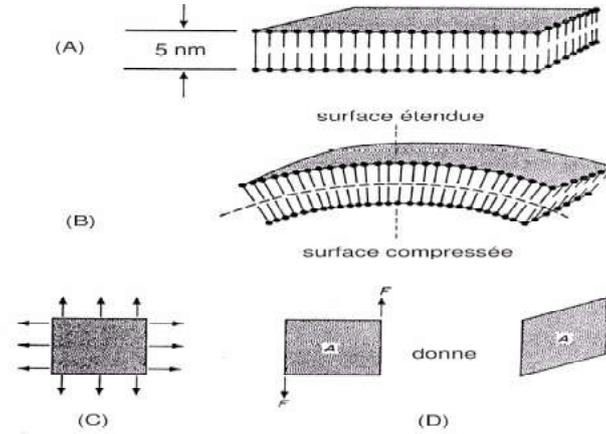


FIG. 1.2: (A) Vue schématique d'une membrane en bicouche, (B) Courbure de la biomembrane, (C) Extension-Compression de la membrane, (D) Cisaillement.

(i) La première déformation est une élongation des bicouches à faible déformation d'aire [6], c'est-à-dire moins de 5% de l'aire totale. Au-delà de cette déformation correspondant à la tension, critique appelée *tension de Lyse* $\tau_c \simeq 10^{-3} \text{J/m}^2$, des pores hydrophiles prennent naissance dans la membrane jusqu'à sa destruction totale, dont l'énergie d'extention-compression (par unite de surface de membrane), peut être mise sous la forme:

$$H_{ext} = \frac{K_a}{2} \left(\frac{\Delta A}{A} \right)^2. \quad (1.1)$$

Cette énergie dépend quadratiquement de l'augmentation ou de la diminution relative d'aire, $\Delta A/A$. Ici, K_a est le module de compressibilité, de l'ordre de 10^{-5}J/m^2 , pour les globules rouges [7], et 0.2J/m^2 , pour des vésicules lipidiques [8].

(ii) La deuxième déformation est le cisaillement pur, qui est présente dans le cas

où la biomembrane n'est pas en phase liquide, mais plutôt en phase cristal-liquide ou polymérisée. L'énergie due au cisaillement prend la forme:

$$H_{cis} = \frac{1}{2}\mu \left(\tilde{\lambda}^2 + \tilde{\lambda}^{-2} - 2 \right) , \quad (1.2)$$

où $\tilde{\lambda} = (L_0 + \Delta L) / L_0$ représente le taux d'extension latérale, et μ est le module de cisaillement. A titre indicatif, pour les globules rouges [9], le module de cisaillement est faible, c'est-à-dire de l'ordre de $\mu = 6 \times 10^{-6} \text{J/m}^2$. En conséquence, les molécules d'une membrane fluide ne représentent aucune résistance au cisaillement, et l'on peut donc négliger l'énergie de cisaillement précédente.

(iii) La troisième déformation élastique est une déformation perpendiculaire au plan de la biomembrane, due aussi à la courbure de cette dernière. Selon Canham et Helfrich, la description des propriétés mécaniques et thermodynamiques des membranes en bicouche (cellules, vésicules, ...) peut se faire en terme d'énergie de courbure, dont la forme est la suivante [10, 11]:

$$H_{courb} = \frac{\kappa}{2} (H - H_0)^2 + \bar{\kappa}K , \quad (1.3)$$

où $H = c_1 + c_2$ est la courbure moyenne de la membrane, $c_1 = 1/R_1$, $c_2 = 1/R_2$ représentent les deux courbures principales, et $K = c_1c_2$ est la courbure Gaussienne. Plus loin, nous rappellerons les définitions mathématiques de ces quantités. Dans l'égalité (1.3), H_0 est la courbure spontanée qui traduit la symétrie de la membrane fluide. L'origine physique de cette quantité peut être attribuée à une différence de compositions chimiques entre les deux feuillets de la bicouche. Donc, H_0 rend

compte de la structure microscopique [12]. La quantité κ représente la constante de rigidité de courbure (exprimée en Joule) et contrôle l'amplitude des fluctuations (ou ondulations) thermiques de la biomembrane, du fait qu'elle contient tous les détails microscopiques de la bicouche, à savoir la rigidité et la longueur des queues lipidiques, la nature des interactions entre têtes polaires, etc. D'ailleurs, les valeurs typiques de ce module varient de quelques $k_B T$, pour les membranes les plus souples, à quelques dizaines de $k_B T$, pour les membranes les plus rigides. La valeur de ce module dépend naturellement de la nature des molécules lipides formant la bicouche. L'autre quantité $\bar{\kappa}$ est la constante de rigidité de Gauss qui peut être vue comme un potentiel chimique fixant la topologie de la membrane. Il n'intervient que pour des déformations qui changent la topologie de la membrane .

Enfin, notons que les grandeurs κ et H_0 peuvent être mesurées, en étudiant le spectre de fluctuations de la membrane fluide [13].

1.1.3 Hamiltonien de Canham-Helfrich

Afin d'étudier les propriétés physiques de la biomembrane, le point de départ est l'écriture d'un Hamiltonien avec les formes d'énergie pertinentes pour ce système, où la courbure constitue la contribution dominante pour une membrane fluide et libre. Le premier modèle physique complet des membranes lipidiques a été élaboré par Helfrich, en 1973. Dans la littérature, il est appelé soit le modèle d'Helfrich ou le modèle de Canham-Helfrich, mais dès l'année 1970, l'on a vu émerger l'idée

selon laquelle les propriétés des membranes fluides sont gouvernées par l'énergie de courbure.

Avant d'écrire le Hamiltonien du système, nous soulignons que l'épaisseur d'une bicouche de lipides est d'environ 50 Angströms, alors que les vésicules peuvent atteindre plusieurs dizaines de microns. Cette faible valeur d'épaisseur et sa fluidité permettent de voir une membrane biologique comme une surface fluide bidimensionnelle, plongée dans l'espace euclidien à trois dimensions \mathbf{R}^3 (*solvant*). Donc, ses propriétés géométriques (courbure et autres) peuvent s'étudier dans le cadre de la *Théorie des Surfaces*. Il faut également noter qu'une membrane biologique passe par un nombre important de configurations par rapport au plan d'équilibre. Cela est essentiellement dû aux fluctuations thermiques. Il en ressort que l'étude de tel système est un problème qui relève de la Mécanique Statistique. Pour simplifier l'étude, nous ne considérons que les membranes presque planes, c'est-à-dire celles pour lesquelles la hauteur fluctue autour d'une position moyenne. Un point situé sur la membrane peut être décrit à l'aide du vecteur-position $\mathbf{r} = (x, y, z) \in \mathbf{R}^3$. Nous adopterons ici la représentation de Monge qui consiste à représenter la surface fluctuante par l'équation algébrique: $z = h(x, y)$, où (x, y) représentent les coordonnées de la projection sur le plan de référence, et $h(x, y)$ est la fonction-hauteur.

En un point donné de la membrane, de vecteur position $\mathbf{r} = (x, y, z)$, les deux

vecteurs tangents \mathbf{e}_x et \mathbf{e}_y sont comme suit

$$\mathbf{e}_x = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial x} = (1, 0, h_x) , \quad \mathbf{e}_y = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial y} = (0, 1, h_y) , \quad (1.4)$$

avec les dérivées partielles $h_x = \partial h / \partial x$ et $h_y = \partial h / \partial y$. Ces mêmes vecteurs tangents définissent la métrique

$$g_{ij} = \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j , \quad (1.5)$$

avec les indices $i, j = x, y$. Ces coefficients de la métrique définissent la *première forme fondamentale* qui est caractérisée par la matrice carrée d'ordre 2 (généralement non diagonale) suivante

$$\mathcal{G} = [g_{ij}] = \begin{bmatrix} 1 + h_x^2 & h_x h_y \\ h_x h_y & 1 + h_y^2 \end{bmatrix} . \quad (1.6)$$

Le déterminant de la métrique est

$$\det \mathcal{G} = 1 + h_x^2 + h_y^2 . \quad (1.7)$$

Il vient que la courbure moyenne, H , s'écrit comme

$$H = \frac{h_{xx}(1 + h_y^2) + h_{yy}(1 + h_x^2) - 2h_{xy}h_x h_y}{2(1 + h_x^2 + h_y^2)^{3/2}} \simeq \Delta h . \quad (1.8)$$

Mais, si l'on exerce sur la membrane une force extérieure, son aire totale varie de dA , et l'énergie libre de la membrane varie de $dW = \sigma dA$. Donc, la tension interfaciale contribue à l'énergie par

$$\begin{aligned}
\sigma \int_{\text{Membrane}} dA &= \sigma \int d^2 \boldsymbol{\rho} \sqrt{\det \mathcal{G}} = \sigma \int d^2 \boldsymbol{\rho} \sqrt{1 + h_x^2 + h_y^2} \\
&= \sigma \int d^2 \boldsymbol{\rho} \sqrt{1 + (\nabla h)^2} \simeq \frac{\sigma}{2} \int d^2 \boldsymbol{\rho} (\nabla h)^2 , \quad (1.9)
\end{aligned}$$

où $\boldsymbol{\rho} = (x, y)$ est le vecteur transverse.

Pour construire le Hamiltonien de Canham-Helfrich, on part des hypothèses suivantes:

- (i) La membrane étudiée est en phase fluide, donc le cisaillement est nul.
- (ii) On supposera que les molécules sont de forme symétrique, donc la courbure spontanée H_0 ne joue aucun rôle.
- (iii) On ne considère aucun changement de topologie, et alors le terme Gaussien n'intervient pas.

A l'aide de ces considérations, le Hamiltonien de Canham-Helfrich prend la forme suivante

$$\mathcal{H}[h] = \frac{1}{2} \int d^2 \boldsymbol{\rho} \left[\kappa (\nabla^2 h)^2 + \sigma (\nabla h)^2 \right] , \quad (1.10)$$

avec $\nabla = (\partial_x, \partial_y)$ l'opérateur différentiel dans le plan des variables (x, y) .

1.2 Fluctuations thermiques

La bicouche lipidique est de faible épaisseur ($e \simeq 5 - 7\text{nm}$), et donc très déformable, même sous une faible contrainte mécanique, et les molécules d'eau planent en créant des ondulations de la surface. Au cours du temps, la position d'un point donné sur la membrane fluctue autour de sa position moyenne, un tel phénomène a été observé sur les globules rouges, par le biologiste E. Browicz qui remarqua que l'intensité lumineuse que diffusent ces cellules variait de manière irrégulière d'un point à l'autre de la membrane. Toutefois, l'origine de tels mouvements est restée incomprise jusqu'en 1975, date à laquelle F. Brochard et J.-F. Lennon ont montré qu'il s'agissait du mouvement dû à l'agitation thermique et qui ne nécessite aucune activité biologique spécifique [14]. Donc, l'énergie transférée à la membrane par le mouvement brownien des molécules d'eau est de l'ordre de $k_B T$, où k_B désigne la constante de Boltzmann et T est la température absolue. Cette énergie thermique est alors l'origine des fluctuations observées, d'où le nom de *fluctuations thermiques*. Ces fluctuations répulsives peuvent s'opposer aux forces de van der Waals entre vésicules et un substrat solide [15].

1.2.1 Spectre de fluctuations

Nous considérons une membrane plane fluctuante, d'une aire microscopique A fixée. Nous désignons par $A_p = L \times L$, l'aire du plan de projection, où L désigne la taille

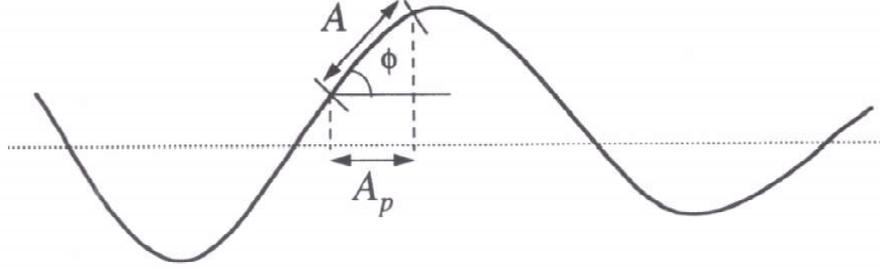


FIG. 1.3: Schéma indiquant l'aire réelle d'une membrane fluide et l'aire projetée.

linéaire de la membrane. Du fait des fluctuations thermiques, l'aire réelle de la membrane A est plus grande que l'aire projetée A_p (FIG. 1.3). Dans ce régime fluctuant, l'aire A reste fixe, car elle est définie par le nombre de lipides dans la membrane qu'on considère incompressible. La différence $\Delta A = A - A_p$ est appelée excès d'aire provoqué par les fluctuations thermiques de la membrane.

Pour dériver l'expression du spectre de fluctuations d'une membrane fluide, de module de courbure κ est de tension σ , nous allons réécrire le Hamiltonien de Canham-Helfrich en passant par une transformée de Fourier,

$$f_q = \int d^2\rho e^{-i\mathbf{q}\cdot\rho} f(\rho) , \quad (1.11)$$

$$\nabla f(\rho) = i \int \frac{d^2\mathbf{q}}{(2\pi)^2} \mathbf{q} h(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\cdot\rho} , \quad (1.11a)$$

$$\Delta f(\rho) = - \int \frac{d^2 \mathbf{q}}{(2\pi)^2} q^2 h(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\cdot\rho} . \quad (1.11b)$$

Dans l'espace réciproque, le Hamiltonien de Canham-Helfrich devient

$$\mathcal{H}[h] = \frac{1}{2} \int \frac{d^2 \mathbf{q}}{(2\pi)^2} (\kappa q^4 + \sigma q^2) |h_q|^2 = \frac{1}{2} \int \frac{d^2 \mathbf{q}}{(2\pi)^2} E_0(q) |h_q|^2 , \quad (1.12)$$

avec $E_0(q) = \kappa q^4 + \sigma q^2$, qui est l'énergie du mode \mathbf{q} , où $q = |\mathbf{q}|$ est le module du vecteur d'onde \mathbf{q} . D'après le théorème d'équipartition d'énergie, chaque mode contribue par une énergie égale à $k_B T/2$. La fonction de corrélation statique entre les amplitudes des modes de Fourier est directement proportionnelle à l'inverse du noyau, $E_0(q)$, c'est-à-dire

$$\langle h_q h_{q'}^* \rangle = \frac{k_B T}{\kappa q^4 + \sigma q^2} \delta_2(\mathbf{q} - \mathbf{q}') , \quad (1.13)$$

où $\langle \dots \rangle$ désigne la moyenne statistique, calculée avec le poids de Boltzmann, $\exp\{-\beta \mathcal{H}\}$.

Comme il se doit, la fonction de corrélation dépend des constantes de la membrane κ et σ . La relation précédente suggère que son application aux expériences d'analyse en temps réel, permet la mesure du module de courbure κ . Plus précisément, les techniques de mesure permettent de détecter le contour d'une vésicule fluctuante au cours du temps, en utilisant la *Vidéo-Microscopie en Contraste de Phase*, afin d'obtenir le spectre de fluctuations, et d'évaluer ainsi les modules élastiques [16].

Pour le calcul de l'amplitude des fluctuations, il suffit d'intégrer sur les vecteurs d'onde compris entre $2\pi/L$ et $+\infty$, où L est une *coupure* macroscopique. Nous avons

ainsi le résultat:

$$\langle |h|^2 \rangle = \int \frac{d^2 \mathbf{q}}{(2\pi)^2} \frac{k_B T}{\kappa q^4 + \sigma q^2} = \frac{k_B T}{4\pi\sigma} \ln \left(1 + \frac{\sigma L^2}{\kappa 4\pi^2} \right). \quad (1.14)$$

Cette relation appelle les remarques suivantes:

Premièrement, cette relation fait apparaître une longueur caractéristique, $\sqrt{\kappa/\sigma}$, qui varie du nanomètre, pour des tensions proches du seuil critique, τ_c , au micromètre, pour des membranes faiblement tendues ($\sigma \simeq 10^{-7} \text{N/m}$).

Deuxièmement, l'amplitude de fluctuations, correspondant à $\bar{h} = \sqrt{\langle |h|^2 \rangle}$, est très sensible à la coupure macroscopique, comme le montrent les deux régimes [16]:

(i) Régime de *faible tension interfaciale* ($\sigma \ll \sigma^* = \kappa (2\pi)^2 / L^2$): Dans ce régime, les échelles de longueur caractéristiques sont alors dominées par la rigidité de courbure, et l'on a: $\bar{h} = \sqrt{k_B T / 16\pi^3 \kappa L}$.

(ii) Régime de *forte tension interfaciale* ($\sigma \gg \sigma^*$). Dans ce régime, les longueurs sont dominées plutôt par la tension, et l'on a: $\bar{h} = \sqrt{(k_B T / 4\pi\sigma) \ln(\sigma/\sigma^*)}$.

1.2.2 Longueur de persistance

La notion de froissement a été introduite, pour la première fois, par de Gennes et Taupin, en terme de longueur de persistance, ξ_p [17]. Cette longueur est définie comme étant la distance au-delà de laquelle la membrane perd son ordre orientational, c'est-à-dire que les fluctuations d'orientation du vecteur normal à la membrane ne sont plus corrélées. A des échelles petites devant ξ_p , la membrane apparaît

rigide, alors qu'elle apparaît plus flexible et froissée à des échelles plus grande que ξ_p . Pour déterminer une telle longueur, il suffit de calculer la fonction de corrélation du vecteur normal \mathbf{n} , soit

$$\langle \mathbf{n}(0) \cdot \mathbf{n}(\boldsymbol{\rho}) \rangle \sim \exp \{ -\rho/\xi_p \} , \quad (1.15)$$

avec la longueur de persistance

$$\xi_p = a_0 \exp \{ 2\pi\kappa/k_B T \} , \quad (1.16)$$

où a_0 représente la taille typique des lipides. La relation précédente montre que la longueur de persistance est d'autant plus importante que la rigidité de courbure est forte. Aussi, cette même échelle de longueur est sensible à la température, et elle se déplace vers ces faibles valeurs, au fur et à mesure que la température augmente. La formule (1.15) suggère que pour des échelles inférieures à ξ_p , la membrane est plane, et ses orientations sont alors *corrélées*. En revanche, au-delà de ξ_p , la membrane est plutôt *froissée*, et ses orientations sont *décorrélées* [18]. Nous soulignons, de passage, qu'au-delà de ξ_p , la description d'une membrane quasi-plane, gouvernée par le Hamiltonien de Canham-Helfrich, n'a plus de sens.

La définition (1.16) révèle que la longueur de persistance ξ_p dépend du rapport $\kappa/k_B T$, et ceci d'une manière exponentielle. Une petite variation de κ entraîne donc une grande variation de ξ_p .

1.3 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté un aperçu succinct sur la Physique Statistique des membranes fluides, à l'équilibre thermodynamique. Nous avons d'abord introduit le Hamiltonien de courbure de Canham-Helfrich. Celui-ci a permis la détermination des propriétés thermiques des biomembranes, ainsi que leurs fluctuations thermiques. Nous avons aussi évoqué la notion de longueur de persistance, au-delà de laquelle une biomembrane n'est plus fluide (plutôt rigide).

Bibliographie

- [1] B. Alberts, D. Bray, J. Lewis, M. Raff, K. Roberts, J. Watson, *Molecular Biology of the Cell*, Second edition, Garland Publishing Inc., New York, 1989.
- [2] P.B. Canham, *The Minimum Energy of Bending as a Possible Explanation of the Biconcave Shape of the Human Red Blood cell*, Journal of Theoretical Biology **26**, 61 (1970).
- [3] W. Helfrich, *Elastic Properties of Lipid Bilayers: Theory and Possible Experiments*, Zeitschrift für Naturforschung C **28**, 693 (1973).
- [4] E. Evans, W. Rawicz, *Entropy-driven Tension and Bending Elasticity in Condensed-fluid Membranes*, Phys. Rev. Lett. **64**, 2094 (1990).
- [5] H.G. Döbereiner *et al.*, *Mapping Vesicle Shapes into the Phase Diagram: A comparison of Experiment and Theory*, Phys. Rev. E **55**, 4458 (1997).

- [6] P.B. Canham, J. Theoret, *The Minimum Energy of Bending as a Possible Explanation of the Biconcave Shape of the Human Red Blood Cell*, Journal of Theoretical Biology **26**, 61 (1970).
- [7] W. Helfrich, Z. Naturforsch, *Elastic Properties of Lipid Bilayers: Theory and Possible Experiments*, Zeitschrift für Naturforschung C **28**, 693 (1973).
- [8] E. Evans, *Bending Resistance and Chemically Induced Moments in Membrane Bilayers*, Biophysical Journal **14**, 923 (1974).
- [9] N. Mohandas, E. Evans, *Mechanical Properties of the Red Cell Membrane in Relation to Molecular Structure and Genetic Defects*, Annual Review of Biophysics and Biomolecular Structure **23**, 787 (1994).
- [10] W. Helfrich, Z. Naturforsch, *Elastic Properties of Lipid Bilayers: Theory and Possible Experiments*, Zeitschrift für Naturforschung C **28**, 693 (1973).
- [11] T. Bickel, *Interactions Polymères-Membranes: Une Approche Locale*, Thèse de Doctorat, Université Louis Pasteur-Strasbourg I, 2001.
- [12] A. Nicolas, *Thèse de Doctorat*, Université Joseph Fourier, Grenoble I, 2002.
- [13] H.G. Döbereiner, E. Evans, M. Kraus, U. Seifert, M. Wortis, *Mapping Vesicle Shapes into the Phase Diagram: A Comparison of Experiment and Theory*, Phys. Rev. E **55**, 4458 (1997).

- [14] F. Brochard, J.-F. Lennon, *Frequency Spectrum of the Flicker Phenomenon in Erythrocytes*, Journal de Physique **36**, 1035 (1975).
- [15] J. Rädler *et al.*, *Fluctuation Analysis of Tension-controlled Undulation Forces Between Giant Vesicles and Solid Substrates*, Phys. Rev. E **51**, 4526 (1995).
- [16] P. Girard, *Membranes Hors d'Equilibre: Echanges et Transport Actif*, Thèse de Doctorat, Université Paris VII, 2004.
- [17] P.-G. de Gennes, C. Taupin, *Microemulsions and the Flexibility of Oil/Water Interfaces*, The Journal of Physical Chemistry **86**, 2294 (1982).
- [18] D. Nelson, T. Piran, S. Weinberg, *Statistical Mechanics of Membranes and Surfaces*, World Scientific, Cambridge Massachusetts, 1988.

Chapitre 2

Etude de la transition de déliaison des biomembranes et des cordes à l'aide d'un potentiel de Morse

Dans ce chapitre, qui constitue notre *première contribution originale* [1], nous présentons une étude *exacte* de la transition de déliaison des cordes et des biomembranes, en utilisant le potentiel de Morse standard. L'objectif est de déterminer d'une manière exacte l'expression de la température de déliaison, ainsi que la probabilité de contact. Nous utilisons ensuite cette probabilité pour extraire diverses longueurs d'échelle divergentes qui sont la séparation moyenne et la rugosité. Les exposants de contact et de rugosité sont exactement déduits, et les valeurs obtenues sont très proches de celles obtenues dans le cadre de la Théorie du Groupe de Renormalisa-

tion. Pour plus de détails, nous renvoyons le lecteur à la Réf. [1].

2.1 Introduction

La déliaison (*unbinding*) est un phénomène qui se produit dans les *manifolds* flexibles, telles que les cordes et les bicouches membranaires [2 – 4]. Le mécanisme qui régit l'adhésion la déliaison des membranes est analogue à celle qui gouverne la transition de mouillage interfaciale [5] et d'adsorption-désorption des polymères [6]. La caractéristique commune de ces phénomènes d'interface est qu'ils ont un comportement similaire à celui des lignes unidimensionnelles ou des cordes de tension finie [7], comme les bords des surfaces cristallines, les polymères étirés (ou dirigés) et des lignes de vortex dans les supraconducteurs.

Le résultat important est que les calculs par le Groupe de Renormalisation (GR) prédisent que les membranes fluides possèdent des propriétés d'échelle similaires à des cordes, au voisinage de la profondeur critique du potentiel [8]. De telles propriétés seront la clé de l'étude de la transition de déliaison dans les bicouches membranaires.

Dans un article pionnier, Lipowsky et Leibler [9] ont démontré qu'il existe un certain seuil au-delà duquel les interactions attractives de van der Waals sont suffisantes pour lier les membranes ensemble, et en dessous de cette amplitude caractéristique, les ondulations membranaires dominent les forces attractives, puis les membranes

se séparent complètement. En particulier, il a été prouvé [3, 4, 9] que, lorsque la température de déliaison, T_c , est approchée inférieurement, la séparation moyenne entre les deux membranes, $\langle l \rangle$, et leur rugosité ξ_\perp divergent toutes les deux selon : $\langle l \rangle \sim \xi_\perp \sim (T_c - T)^{-\psi}$, où l'*exposant de rugosité* ψ est proche de 1. Par la suite, ces résultats ont été étendus à des membranes chargées [9], où la déliaison est entièrement contrôlée par la concentration ionique du milieu aqueux. Celui-ci dépend bien sûr de la nature des lipides du système. Les prédictions théoriques pour les membranes en bicouche chargées ont été testées dans une expérience avec le DPPC (*Dipalmitoyl-phos-phatidyl-choline*) dans des solutions du CaCl_2 [10]. Enfin, dans tous les cas, à côté de ψ , l'on définit d'autres exposants [2], tels que les *exposants de contact*.

Un outil alternatif intéressant pour l'études de la transition de déliaison des cordes et des biomembranes est la Méthode de la Matrice de Transfert (MMT) habituellement rencontrée en Mécanique Quantique [11 – 13] et en Phénomènes Critiques [14, 15]. Une telle approche a été appliquée avec succès à des membranes en bicouche [16, 17]. Tout récemment, la MMT a été appliquée à la transition de déliaison avec des puits de potentiel carré simples et doubles [17].

Dans ce chapitre, l'objectif est l'application de la MMT à un certain potentiel connu, qui est le potentiel de Morse (PM) [18]. Ce dernier a été introduit pour décrire les vibrations de molécules diatomiques covalentes dans le contexte de la Physique Atomique [19, 20]. L'avantage est qu'il n'est pas singulier et se présente

comme une différence de deux queues exponentielles.

Nous rappelons que le PM a été appliqué récemment pour l'étude de la transition du déliaison des membranes [21], en utilisant la méthode variationnelle traditionnelle. Cette utilisation peut être motivée par le fait que ce potentiel reflète les deux caractéristiques essentielles décrites ci-dessus, à savoir, une répulsion à courte distance et une attraction à une distance intermédiaire. Ce même potentiel est caractérisé par trois paramètres, qui sont sa profondeur (l'équivalent de l'énergie de dissociation), D , sa portée α^{-1} , et la position de son point minimum, l_m . Une autre vertu de ce potentiel est que le spectre d'énergie associée est discret, d'une part, et toutes les fonctions propres correspondantes sont des états liés, d'autre part. L'existence de ces états fait que de tel potentiel constitue un bon candidat pour l'étude de la transition de déliaison des cordes et des biomembranes. Les paramètres ajustés D , α^{-1} et l_m peuvent être liés à ceux du potentiel réel.

La méthode variationnelle est une théorie de champ moyen qui sous-estime les fortes fluctuations au voisinage du point critique. Cependant, dans ce chapitre, nous présentons une étude exacte de la transition de déliaison avec le PM, en utilisant la MMT. Nous calculons, en particulier, la température exacte de déliaison, la probabilité de contact, dont nous extrairons les propriétés critiques, à savoir la séparation moyenne et la rugosité moyenne. Par conséquent, les exposants de déliaison sont exactement connus. L'idée consiste à déterminer tous les comportements critiques pour les cordes avec un PM. Ensuite, les résultats sont étendus à des membranes

fluides, car les deux systèmes sont régis par les mêmes lois d'échelle.

Ce chapitre est organisé comme suit. Au paragraphe 2, nous présentons le modèle général des cordes. Tandis que le paragraphe 3 est destiné à une étude rigoureuse de la transition de déliaison. Enfin, nous donnons quelques remarques au dernier paragraphe.

2.2 Modèle de cordes

2.2.1 Définition et description

Les cordes sont généralement définies comme des lignes à une dimension, dont la forme des fluctuations est régie par une tension finie [16]. Considérons deux cordes en interaction qui se déplacent dans un espace à deux dimensions. Nous supposons qu'en moyenne, elles fluctuent autour d'une ligne droite de référence, l'axe des x , par exemple, et en plus, leurs élongations restent perpendiculaires à ce même axe. La conformation des cordes peut-être décrite par le champ de séparation local, $l(x) > 0$, qui est perpendiculaire à la ligne de référence. La Mécanique Statistique des cordes est basée sur le Hamiltonien suivant

$$H[l] = \int_0^L dx \left[\frac{\sigma}{2} \left(\frac{dl}{dx} \right)^2 + V(l) \right], \quad (2.1)$$

où L désigne la longueur commune des cordes, σ est leur tension effective et $V(l)$ représente le potentiel d'interaction, dont la forme sera précisée plus loin.

Dans la limite thermodynamique, donnée par $L \rightarrow \infty$, les propriétés statistiques, dans le cadre de ce modèle, peuvent être étudiées en utilisant la MMT qui est basée sur de la résolution d'une équation de type Schrödinger [11 – 13],

$$-\frac{(k_B T)}{2\sigma} \frac{d^2 \varphi_n}{dl^2} + V(l) \varphi_n = E_n \varphi_n, \quad (2.2)$$

où T est la température absolue. Dans l'équation différentielle ci-dessus, les paramètres $\{E_n, n \geq 0\}$ et $\{\varphi_n, n \geq 0\}$ désignent, respectivement, les ensembles des valeurs propres et des fonctions d'onde associées. Les valeurs propres $\{E_n, n \geq 0\}$ sont rangées de telle manière que $E_0 \leq E_1 \leq E_2 \dots$, et l'énergie fondamentale, E_0 , définit la densité d'énergie libre, f , c'est-à-dire: $E_0 = f$, tandis que la fonction propre correspondant, $\varphi_0(l)$, détermine la distribution de probabilité, $P(l)$. En fait, $P(l) dl$ représente la probabilité de trouver deux cordes à une séparation entre l et $l + dl$. La probabilité de contact est donnée par

$$P(l) = \frac{|\varphi_0(l)|^2}{\int |\varphi_0(l)|^2 dl}. \quad (2.3)$$

A l'aide de cette distribution, on peut calculer, par exemple, son premier et son deuxième moments qui sont donnés par

$$\langle l \rangle = \int l P(l) dl, \quad \langle l^2 \rangle = \int l^2 P(l) dl. \quad (2.3a)$$

La rugosité de la corde est donnée par

$$\xi_{\perp} = |\langle l \rangle^2 - \langle l^2 \rangle|^{1/2}. \quad (2.3b)$$

Avant d'étudier leur transition de déliaison, il sera commode de rappeler certains rudiments concernant les propriétés statistiques générales d'une paire de cordes.

Tout d'abord, nous rappelons la définition de l'exposant de rugosité. Considérons un manifold fluctuant (corde ou biomembrane) et notons que ce dernier effectue de grands déplacements transversaux, sur une certaine échelle, ξ_{\parallel} , appelée *longueur de corrélation* dans le plan. La taille de ces fluctuations perpendiculaires, ξ_{\perp} , augmente avec sa taille latérale, ξ_{\parallel} . Il est admis que les deux longueurs obéissent à une même relation d'échelle, à savoir [2 – 4] :

$$\xi_{\perp} \sim \xi_{\parallel}^{\zeta}. \quad (2.4)$$

Cette relation définit alors *l'exposant de rugosité* ζ . Celui-ci dépend essentiellement du nature de la manifold considéré. Par exemple, pour les cordes, on a la valeur $\zeta = 1/2$, et $\zeta = 1$, pour les membranes fluides presque planes. Le second exposant d'intérêt est l'exposant de déliaison. Pour le définir, nous considérerons deux manifolds en interaction, qui sont séparés par une distance moyenne $\langle l \rangle$. Quand ils présentent une transition de déliaison, cette séparation moyenne diverge selon la loi :

$$\langle l \rangle \sim \left(\frac{T_c - T}{T_c} \right)^{-\psi}. \quad (2.5)$$

Ce comportement définit *l'exposant de déliaison* ψ , où T_c est la température critique de transition. En outre, cet exposant dépend généralement de la nature du potentiel d'interaction senti par les manifolds. Lorsque la transition de déliaison est entraînée

par les fluctuations thermiques, on a $\langle l \rangle \sim \xi_{\perp}$. Dans ce cas, l'exposant de déliaison ψ coïncide avec l'exposant de rugosité ν_{\perp} [2].

Le dernier exposant d'intérêt est l'exposant de contact qui caractérise le comportement singulier de la probabilité de contact de deux manifolds adjacents, lorsque la température de déliaison est approchée. On a les dernières relations d'échelles suivantes [2]

$$P = \xi_{\parallel}^{-\zeta_0} \sim \xi_{\perp}^{-\zeta_0/\zeta} . \quad (2.6)$$

Au voisinage du point critique, cette relation d'échelle définit l'exposant de contact, ζ_0 . En outre, la valeur de cet exposant dépend principalement de la nature du potentiel d'interaction entre les manifolds.

D'autre part, nous pouvons mettre la distribution de probabilité sous une forme de loi d'échelle :

$$P(l) = \xi_{\perp}^{-1} \Omega\left(\frac{l}{\xi_{\perp}}\right) . \quad (2.7)$$

Ici, le facteur explicite ξ_{\perp}^{-1} provient de la normalisation à 1 de cette probabilité. Pour retrouver la relation (2.6), la fonction d'échelle $\Omega(s)$ doit se comporter comme

$$\Omega(s) \sim s^{-1+\zeta_0/\zeta} , \quad \text{pour les petites valeurs de } s \text{ (avec } \zeta_0 > 0) . \quad (2.8)$$

Ce comportement d'échelle reste valable tant que la séparation moyenne est telle que: $\langle l \rangle \sim \xi_{\perp}$.

Dans la section suivante, nous déterminerons l'ensemble des propriétés essentielles, en relation avec la transition de déliaison, d'une manière exacte, en utilisant le PM.

2.3 Étude exacte de la transition de déliaison

2.3.1 Fonction énergie potentielle

Nous rappelons tout d'abord, l'expression unidimensionnelle du PM, choisie pour cette étude [17 – 19]

$$V(l) = D [e^{-2\alpha(l-l_m)} - 2e^{-\alpha(l-l_m)}] , \quad (2.9)$$

où D , α et l_m sont des paramètres positifs ajustables. Le potentiel de Morse a une valeur minimale valant $-D$, à $l = l_m$, et tend vers 0, à $l = \infty$. La particularité de ce potentiel est qu'à $l = 0$, $V(0)$ a une valeur finie égale à $D(e^{-2\alpha l_m} - 2e^{-\alpha l_m})$, qui est positive, si et seulement si $\alpha l_m > \ln 2$.

Nous rappelons que le PM est souvent utilisé pour décrire le mouvement de vibration des molécules diatomiques. Dans ce cas, D est l'énergie de dissociation (la profondeur du potentiel est $-D$), et l_m représente la distance d'équilibre inter-nucléaire des molécules diatomiques. Le premier paramètre, D , est de l'ordre de 10^{-2}J/m^2 (pour les membranes fluides), et le second, α , est d'environ 10nm . La valeur $V(0)$ est toujours positive pour les molécules diatomiques covalentes [18].

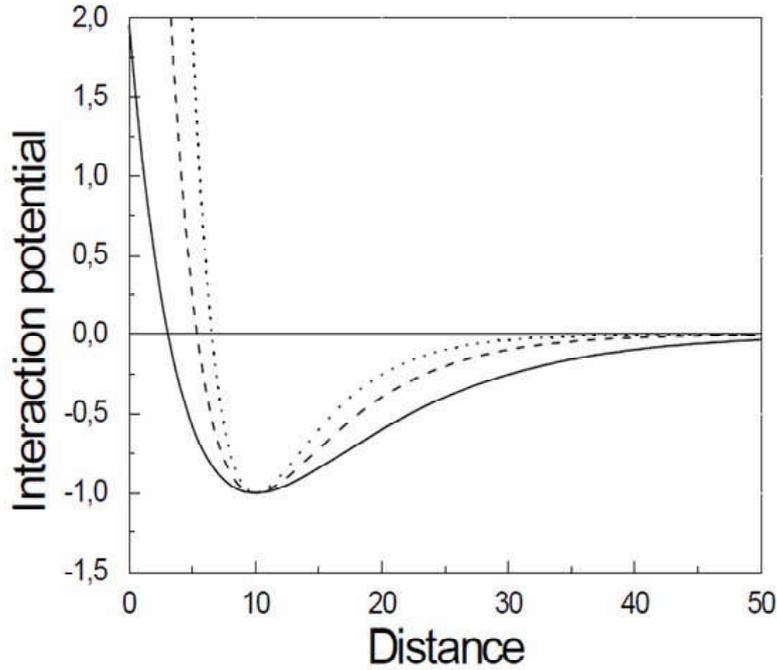


FIG. 2.1: *Potentiel de Morse réduit, $V(l)/D$, en fonction de la distance, au minimum fixé ($l_m = 10\text{nm}$), pour trois valeurs du paramètre α : 0.1 (trait plein), 0.15 (ligne en tirets), 0.2 (ligne en pointillé).*

Dans la FIG. 2.1, nous représentons la variation du PM, en fonction de la distance, pour différentes valeurs des paramètres (D, l_m, α)

2.3.2 Résolution de l'équation de Schrödinger

Avant de présenter les étapes de sa résolution, il est instructif de rappeler d'abord le théorème mathématique utile de Kathos [22]

Si le potentiel $V(x)$ de l'opérateur de Schrödinger $H = -\Delta + V(x)$ est borné inférieurement, et que

$$\lim_{x \rightarrow \infty} V(x) = 0, \quad (2.10)$$

alors H n'a pas de valeurs propres positives, c'est-à-dire si $H\varphi = E\varphi$, où $E > 0$, et $\varphi \in L^2(\mathbb{R}^n)$, alors $\varphi = 0$.

Par conséquent, toutes les fonctions propres de l'équation de Schrödinger sont des *états liés*, de valeurs propres *négligatives*. Le spectre des valeurs propres est alors *discret*.

Comme il est remarqué dans la Ref [22], le point $E = 0$ peut-être une valeur propre de l'opérateur $H = -\Delta + V(x)$, même quand $V(x) \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$.

Le PM considéré satisfait effectivement les conditions du théorème ci-dessus, et il est borné inférieurement, car $V(l) < V(0)$, pour $l < l_0$, et $|V(l)| < D$, pour $l > l_0$, où $l_0 = l_m - \alpha^{-1} \ln 2$ est le zéro positif unique de ce potentiel. En second lieu, la limite (2.10) est également remplie, en raison de la présence des queues exponentielles dans l'expression (2.9) du potentiel. En outre, selon la remarque ci-dessus, ce potentiel peut avoir un état fondamental, car il est infiniment différentiable. Ainsi, le système peut subir une transition de déliaison qui a lieu quand un état apparaît. La conclusion est que l'équation de Schrödinger avec un potentiel de Morse n'a que des états liés, comme solutions, et a un spectre discret.

Maintenant, pour résoudre l'équation différentielle (2.2), nous notons d'abord

que celle-ci est très similaire à l'équation de Schrödinger traditionnelle

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 \varphi_n}{dl^2} + V(l) \varphi_n = E_n \varphi_n , \quad (2.11)$$

où μ est la masse réduite et \hbar est la constante de Planck renormalisée, avec la substitution suivante,

$$\frac{(k_B T)^2}{\sigma} \rightarrow \frac{\hbar^2}{\mu} . \quad (2.11a)$$

L'équation de Schrödinger a été exactement résolue [23], et il conviendra de rappeler brièvement les étapes essentielles de sa résolution.

La première étape consiste à la réécrire cette équation en terme d'une nouvelle variable r ,

$$-\frac{d^2 \varphi_n}{dr^2} + V(l) \varphi_n = \varepsilon_n \varphi_n , \quad (2.12)$$

avec les grandeurs sans dimensions

$$r = \alpha l , \quad r_e = \alpha l_m , \quad (2.12a)$$

$$\lambda = \frac{\sqrt{2\mu D}}{\alpha \hbar} , \quad \varepsilon_n = \frac{2\mu}{\alpha^2 \hbar^2} E_n . \quad (2.12b)$$

Donc, le PM redimensionné s'écrit

$$V(r) = \lambda^2 [e^{-2(r-r_e)} - 2e^{-(r-r_e)}] . \quad (2.12c)$$

La valeur minimale de $V(r)$ est $-\lambda^2$. Elle est atteinte pour $r = r_e$. Les énergies réduites $\{\varepsilon_n, n \geq 0\}$ (ou les $\{E_n, n \geq 0\}$) sont négatives, pour les états liés.

Dans la seconde étape, on introduit la variable suivante

$$z = 2\lambda e^{-(r-r_e)}, \quad (2.13)$$

Il a été constaté [23] que les fonctions d'onde (états liés) orthonormées, $\{\varphi_n(r), n \geq 0\}$, sont données par

$$\varphi_n(r) = A_n z^{\lambda-n-1/2} e^{-z/2} L_n^{2\lambda-2n-1}(z), \quad (2.14)$$

avec la constante de normalisation

$$A_n = [\Gamma(n+1) \Gamma(2\lambda-n)]^{-1/2}, \quad (2.14a)$$

où $\Gamma(n)$ désigne la *fonction Gamma* d'Euler

$$\Gamma(n) = \int_0^{+\infty} t^{n-1} e^{-t} dt, \quad (2.14b)$$

et L_n^γ est le *polynôme orthogonal de Laguerre* dont l'expression est

$$L_n^\gamma = z^{-\gamma} e^z \frac{d^n}{dz^n} (z^{n+\gamma} e^{-z}). \quad (2.14c)$$

Les énergies propres associées sont

$$\varepsilon_n = - \left(\lambda - n - \frac{1}{2} \right)^2. \quad (2.15)$$

Ces énergies ont été obtenues en utilisant la MMT [23]. L'existence de solutions de l'équation de Schrödinger exige que le *nombre quantique* n doit être inférieure à λ .

Par conséquent, le nombre quantique de vibration n est tel que

$$n = 0, 1, 2, \dots, n_{\max}, \quad (2.15a)$$

où n_{\max} est le plus grand entier inférieur à λ .

En termes de variables d'origine et en utilisant la substitution (2.11a), nous constatons que les énergies $\{E_n, n \geq 0\}$ (par unité de longueur) s'écrivent comme

$$E_n = -\frac{D}{\lambda^2} \left(\lambda - n - \frac{1}{2} \right)^2, \quad n \geq 0, \quad (2.16)$$

avec la notation

$$\lambda = \frac{\sqrt{2D\sigma}}{\alpha k_B T}. \quad (2.16a)$$

2.3.3 Densité de probabilité

L'application de la formule générale (2.14) à la valeur particulière $n = 0$ et en utilisant le fait que $L_0\gamma(z) = 1$, quelles que soient les valeurs de l'indice γ et l'argument z , nous constatons que l'état fondamental est exactement donné par

$$\varphi_0(r) = A_0 e^{-\alpha(\lambda-1/2)(l-l_m) - \lambda e^{-\alpha(l-l_m)}}. \quad (2.17)$$

Cela donne la densité de probabilité

$$P(l) = K_0 e^{-\alpha(2\lambda-1)(l-l_m) - 2\lambda e^{-\alpha(l-l_m)}}, \quad (2.18)$$

avec la constante de normalisation

$$K_0 = \frac{\alpha}{(2\lambda)^{1-2\lambda} \gamma(2\lambda-1, 2\lambda e^{\alpha l_m})}, \quad (2.18a)$$

avec la condition $\lambda > 1/2$.

Nous avons utilisé la formule établie suivante

$$\int_0^c y^{\nu-1} e^{-\mu y} (\ln y)^m dy = \frac{d^m}{d\nu^m} [\mu^{-\nu} \gamma(\nu, c\mu)] \quad , \quad m = 0, 1, \dots, \quad \text{Re}(\mu) > 0, \quad \text{Re} \nu > 0 \quad , \quad (2.18b)$$

où $\gamma(\nu, x)$ est l'expression de la *fonction Gamma Incomplète* [24], et $\text{Re}(\nu)$ désigne la partie réelle de ν .

A l'aide de la probabilité déterminée, on calcule les quantités d'intérêt, comme $\langle l \rangle$ et $\xi_{\perp} = [\langle l \rangle^2 - \langle l^2 \rangle]^{1/2}$.

2.3.4 Séparation moyenne

Pour le calcul de cette quantité, nous partons de la définition suivante de la séparation moyenne

$$\langle l \rangle = \int_0^{\infty} l P(l) dl = l_m + \langle l - l_m \rangle \quad , \quad (2.19)$$

avec

$$\langle l - l_m \rangle = K_0 \int_{-l_m}^0 x e^{-\alpha(2\lambda-1)x - 2\lambda e^{-\alpha x}} dx \quad . \quad (2.19a)$$

Pour calculer cette intégrale, nous introduisons la nouvelle variable $y = e^{-\alpha x}$. Nous avons alors

$$\langle l - l_m \rangle = K_0 \int_0^{e^{\alpha l_m}} y^{2\lambda-2} \ln y e^{-2\lambda y} dy \quad . \quad (2.19b)$$

En utilisant la formule générale (2.18b), l'on obtient

$$\langle l \rangle = l_m - \frac{1}{\alpha (2\lambda)^{1-2\lambda} \gamma(2\lambda - 1, 2\lambda e^{\alpha l_m})} \times \frac{d}{d\nu} [\mu^{-\nu} \gamma(\nu, \mu e^{\alpha l_m})] \Big|_{\mu=2\lambda, \nu=2\lambda-1}. \quad (2.20)$$

L'expression exacte ci-dessus n'a un sens mathématique que si $\lambda > 1/2$.

2.3.5 Rugosité des cordes

Notre point de départ, pour calculer la rugosité de la corde, est sa définition

$$\xi_{\perp}^2 = \int_0^{\infty} l^2 P(l) dl - \left(\int_0^{\infty} l P(l) dl \right)^2. \quad (2.21)$$

En utilisant les mêmes techniques qu'avant nous trouvons l'expression désirée de la rugosité de la corde,

$$\xi_{\perp}^2 = \frac{1}{\alpha^2 (2\lambda)^{1-2\lambda} \gamma(2\lambda - 1, 2\lambda e^{\alpha l_m})} \times \frac{d^2}{d\nu^2} [\mu^{-\nu} \gamma(\nu, \mu e^{\alpha l_m})] \Big|_{\mu=2\lambda, \nu=2\lambda-1} - \left(\frac{1}{\alpha (2\lambda)^{1-2\lambda} \gamma(2\lambda - 1, 2\lambda e^{\alpha l_m})} \times \frac{d}{d\nu} [\mu^{-\nu} \gamma(\nu, \mu e^{\alpha l_m})] \Big|_{\mu=2\lambda, \nu=2\lambda-1} \right)^2. \quad (2.22)$$

Cette expression exacte n'a de sens mathématique que si $\lambda > 1/2$.

2.3.6 Discussion et lois d'échelle

Notons d'abord que le système subit une transition de déliaison si l'énergie de l'état fondamental, $E_0 = -(D/\lambda^2)(\lambda - 1/2)^2$, s'annule. Cela se produit pour la valeur

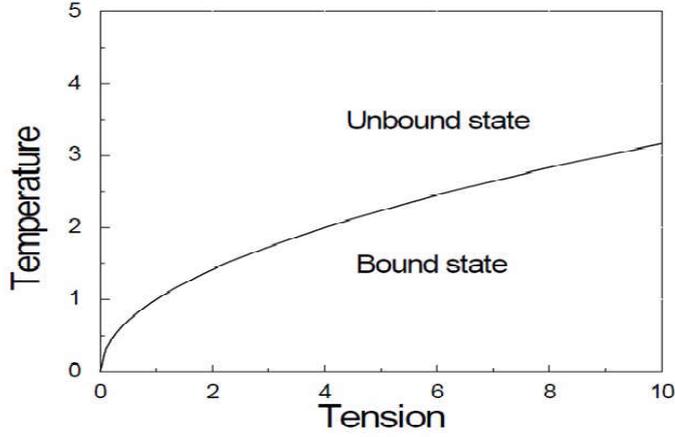


FIG. 2.2: *Ligne critique de transition dans le plan $\sigma - T$, où les paramètres D et σ sont fixés à certaines valeurs.*

typique $\lambda_c = 1/2$. Cette valeur définit alors la température de déliaison

$$T_c = \frac{2\sqrt{2D\sigma}}{k_B\alpha} . \quad (2.23)$$

Cette température dépend naturellement des paramètres du problème, qui sont D , α et σ . A cette température, le système présente une transition de l'état lié ($T < T_c$ ou $D > D_c$) à un autre état non lié ($T > T_c$ ou $D < D_c$). L'expression ci-dessus définit alors une ligne critique dans le plan des variables T et σ (FIG. 2.2), aux paramètres du potentiel fixé, qui sépare les domaines des états non liés et des états liés.

L'expression précédente définit également une amplitude du potentiel critique,

D_c , à température fixée,

$$D_c = \frac{\alpha^2 (k_B T)}{8\sigma} . \quad (2.24)$$

Cette expression indique, en particulier, que la transition de déliaison est plus accentuée, pour les cordes de haute tension interfaciale (ou les membranes fluides à haut module de rigidité).

Revenons, maintenant, à l'expression de distribution de probabilité de contact (2.18), et notons que la discussion dépend des valeurs du paramètre λ (à paramètre α fixé). Tout d'abord, la condition selon laquelle cette probabilité doit être nulle à l'infini ($l \rightarrow \infty$), nécessite que $\lambda > 1/2$. Deuxièmement, cette probabilité atteint sa valeur maximale pour la distance particulière

$$l_{\max} = l_m + \frac{1}{\alpha} \ln \left(\frac{2\lambda}{2\lambda - 1} \right) . \quad (2.25)$$

Le fait que $l_{\max} > l_m$ exprime la tendance de séparation des deux cordes. Mais lorsque la température de transition est approchée supérieurement ($T \rightarrow T_c^-$ ou $\lambda \rightarrow \lambda_c^+$), le point maximum est décalé vers ses valeurs les plus élevées, et la distribution de probabilité devient alors de plus en plus large, d'où l'augmentation de la position moyenne des cordes et leur rugosité. À la température de transition, la probabilité de contact tend vers 0, en accord avec le comportement (2.6), dans la limite $\xi_{\perp} \rightarrow \infty$.

Dans la FIG. 2.3, nous représentons la distribution de probabilité, en fonction de la distance, pour certaines valeurs de λ proches de la valeur critique $\lambda_c = 1/2$.

Considérons, maintenant, la séparation moyenne définie par la relation (2.20)

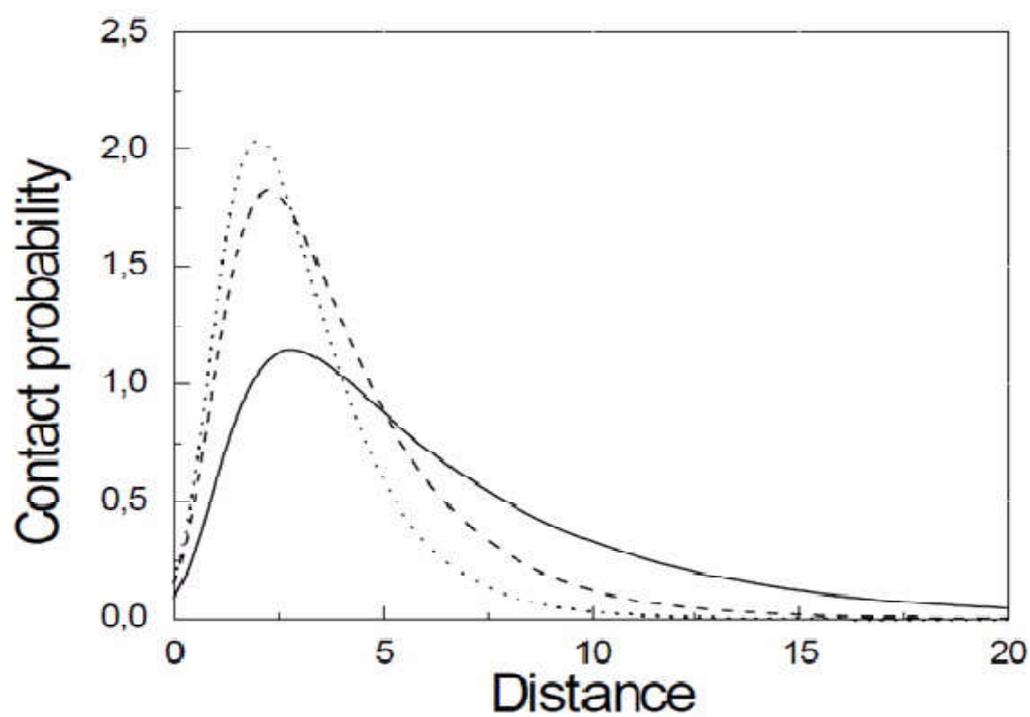


FIG. 2.3: Probabilité de contact, en fonction de la distance renormalisée αl , pour certaines valeurs de λ : 0.6 (ligne plein) 0.7 (ligne en tirets) 0.8 (ligne en pointillés). Ces courbes sont tracées pour: $\alpha = 0.1\text{nm}^{-1}$ et $l_m = 10\text{nm}$.

et utilisons la limite $\gamma(\nu, x) \sim \nu^{-1}x^\nu$ ($\nu = 2\lambda - 1 \rightarrow 0$) [24]. L'on constate qu'au voisinage de la température de transition, la valeur de la position moyenne des cordes est donnée par :

$$\langle l \rangle = \frac{1}{\alpha} \frac{1}{2\lambda - 1} = \frac{1}{\alpha} \left(\frac{T_c - T}{T_c} \right)^{-1}, \quad T \rightarrow T_c^- . \quad (2.26)$$

Par conséquent, l'exposant de déliaison ψ prend la valeur *exacte*

$$\psi = 1. \quad (2.26a)$$

Cette valeur est très proche de celle calculée par la méthode du GR [9].

D'autre part, d'après la relation (2.22), nous constatons que la rugosité de la corde est donnée par

$$\xi_\perp = \frac{1}{\alpha} \frac{1}{2\lambda - 1} = \frac{1}{\alpha} \left(\frac{T_c - T}{T_c} \right)^{-1}, \quad T \rightarrow T_c^- . \quad (2.27)$$

Par conséquent, asymptotiquement, nous avons l'égalité exacte $\langle l \rangle = \xi_\perp$.

Nous montrons aussi, que la distribution de probabilité obéit à la loi d'échelle exacte suivante

$$P(l) = \frac{1}{\xi_\perp} \Omega \left(\frac{l - l_m}{\xi_\perp} \right), \quad (2.28)$$

avec la fonction d'échelle

$$\Omega(s) = e^{-s - e^{-\alpha \xi_\perp s}} . \quad (2.28a)$$

Son comportement à $s \rightarrow 0$ est $\Omega(s) = e^{-1}$. Ainsi, l'exposant de contact associé est

$$\zeta_0 = \zeta . \quad (2.28b)$$

Rappelons que $\zeta_0 = 1/2$, pour les cordes, et $\zeta_0 = 1$, pour les membranes fluides. Incidemment, l'égalité ci-dessus est identique à celle relative aux interfaces, caractérisées par une distribution de probabilité Gaussienne $\xi_{\perp}^{-1} \exp(-l^2/2\xi_{\perp}^2)$, pour le champ fluctuant l .

Dans le domaine critique, le point maximum de la distribution de probabilité est

$$l_{\max} = l_m - \frac{1}{\alpha} \ln \left(\frac{T_c - T}{T_c} \right) , \quad T \rightarrow T_c^- . \quad (2.28c)$$

Ainsi, l'écart $l_{\max} - l_m$ diverge logarithmiquement lorsqu'on s'approche de la température de déliaison. Par ailleurs, ce comportement joue un rôle important dans le phénomène de mouillage.

Enfin, nous montrons que la densité d'énergie libre se comporte comme suit

$$f = -\frac{D}{\alpha^2} \frac{1}{\xi_{\perp}^2} = -D \left(\frac{T_c - T}{T_c} \right)^2 , \quad T \rightarrow T_c^- . \quad (2.29)$$

La pression de disjonction correspondante, Π , peut être obtenue à partir de la définition standard: $\Pi = \partial f / \partial \xi_{\perp}$. Nous trouvons

$$\Pi = 2 (D/\alpha^2) \xi_{\perp}^{-3} . \quad (2.30)$$

Cette dernière peut être interprétée comme la pression pour maintenir les deux cordes à la distance moyenne $\langle l \rangle = \xi_{\perp}$. Bien entendu, cette pression est directement

proportionnelle à l'amplitude du potentiel D . Ce résultat montre que le phénomène de déliaison est entièrement gouverné par les fluctuations thermiques des cordes et des bicouches membranaires.

2.4 Conclusion

Nous rappelons que l'objectif de ce chapitre est une étude analytique de la transition de déliaison subie par les cordes ou des bicouches membranaires, avec un potentiel de type Morse. Pour cela, nous avons fait usage de la Méthode de la Matrice de Transfert qui est basée sur la résolution d'une équation de Schrödinger, dont les solutions sont des états liés, indispensables pour assurer que les manifolds interagissants restent à une distance finie l'une de l'autre. A partir de l'expression exacte de l'état fondamental déterminé, nous avons extrait la probabilité de contact. A l'aide de cette dernière, nous étions en mesure de déduire deux quantités très importantes, à savoir la séparation moyenne entre les deux manifolds et leur rugosité.

L'annulation de l'énergie de l'état fondamental donne la température où a lieu la transition de déliaison. Il a été trouvé que les échelles de longueurs divergent à la transition, avec un même exposant de rugosité critique exact.

Nous avons aussi déduit l'expression exacte de la densité d'énergie libre qui s'identifie avec l'énergie de l'état fondamental. De cette expression, nous avons déduit la valeur de la pression de disjonction, qui est la pression nécessaire pour

maintenir les deux manifolds adjacents à une distance moyenne.

La conclusion principale est que notre étude analytique révèle que le potentiel de Morse est un bon candidat, pour la description du phénomène de déliaison des manifolds (cordes et membranes). Ce choix du potentiel surmonte la difficulté liée à la singularité du potentiel réel à l'origine.

Bibliographie

- [1] M. Benhamou, R. El Kinani, H. Kaïdi, *Rigorous Study of the Unbinding Transition of Biomembranes and Strings From Morse Potentials*, *Conference Papers in Mathematics*, Hindawi Publishing, Vol 2013, ID 320718, (2013).
- [2] M. Lässig, R. Lipowsky, *Universal Aspects of Interacting Lines and Surfaces*, *Fundamental Problems in Statistical Mechanics VIII*, 169, 1994.
- [3] E. Sackmann, *The Structure and Dynamics of Membranes*, in *The Structure and Dynamics of Membranes*, R. Lipowsky, E. Sackmann, Eds., Amsterdam, The Netherlands, Elsevier, pp-213-204, 1995.
- [4] P.F.F. Almeida, W.L.C. Winchil, *Lateral Diffusion in Membranes*, *Handbook of Biological Physics* **1**, 305, 1995.
- [5] S. Dietrich, *Wetting Phenomena*, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, C. Domb, J. Lebowitz, Eds., Academic Press, London, UK **12**, 1, (1988).

- [6] E. Eisenriegler, *Polymers Near Surfaces: Conformation Properties and Relation to Critical Phenomena*, World Scientific, Singapore, 1993.
- [7] M. E. Fisher, *Interface Wandering in Adsorbed and Bulk Phases, Pure and Impure*, Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions 2: Molecular and Chemical Physics **82**, 1569 (1986).
- [8] R. Lipowsky, *Lines of Renormalization Group Fixed Points for Fluid and Crystalline Membranes*, Europhysics Letters **7**, 255 (1988).
- [9] R. Lipowsky, S. Leibler, *Unbinding Transitions of Interacting Membranes*, Phys. Rev. Lett **56**, 2541 (1986).
- [10] L.J. Lis, W.T. Lis, V.A. Parsegian, R.P. Rand, *Adsorption of Divalent Cations to a Variety of Phosphatidylcholine Bilayers*, Biochemistry **20**, 1771 (1981).
- [11] F. Wiegels, *Introduction to Path-Integral Methods in Physics and Polymer Science*, World Scientific, Philadelphia, Pa, USA, 1986.
- [12] L.S. Schulman, *Techniques and Applications of Path Integration*, Dover, 2005.
- [13] H. Kleinert, *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics, and Financial Markets*, World Scientific, London, UK, 5th edition, 2009.
- [14] C. Itzykson, J.M. Drouffe, *Statistical Field Theory: 1 and 2*, Cambridge University Press, Cambridge, Mass, USA, 1989.

- [15] J. Zinn-Justin, *Quantum Field Theory and Critical Phenomena*, Clarendon Press, Oxford, UK, 1989.
- [16] R. Lipowsky, *Typical and Exceptional Shape Fluctuations of Interacting Strings*, Europhysics Letters **17**, 703 (1991).
- [17] M. Asfaw, *Unbinding Transitions of Membranes and Strings from Single and Double-Well Potential*, Physica A **387**, 3526 (2008).
- [18] P. M. Morse, *Diatomic Molecules According to the Wave Mechanics. II. Vibrational levels*, Phys. Rev. **34**, 57 (1929).
- [19] G. Herzberg. *Molecular Spectra and Molecular Structure I. Spectra of Diatomic Molecules*, Van Nostrand-Reinhold, New-York, NY, USA 1950.
- [20] S. Cho, H. Sun, *Rotational State Distributions of $I^2(B)$ from Vibrational Predissociation of $I^2(B)-Ne$* , Bulletin of the Korean Chemical Society **25**, 1397 (2004).
- [21] M. Manghi, N. Destainville, *Statistical Mechanics and Dynamics of Two Supported Stacked Lipid Bilayers*, Langmuir **26**, 4057 (2010).
- [22] F.A. Berezin, M.A. Shubin, *The Schrödinger Equation*, Kluwer Academic Publishers, 1991.
- [23] H. Sun, *The Morse Potential Eigenenergy by the Analytical Transfer Matrix Method*, Physics Letters A **338**, 309 (2005).

- [24] I.S. Gradshteyn, I. M. Ryzik. *Table of Integrals, Series and Products*, Academic Press, New-York, NY, USA, 1980.

Chapitre 3

Etude de la transition de déliaison des cordes et biomembranes à l'aide des potentiels de courte portée: Preuve de l'universalité

Dans ce chapitre, qui constitue notre *deuxième contribution originale* [1], nous menons une étude détaillée de la transition de déliaison des cordes et biomembranes, en utilisant la Méthode de la Matrice de Transfert (MMT) qui est une approche théorique basée sur la résolution d'une l'équation de type Schrödinger. Mathématiquement parlant, une transition de déliaison se produit par l'apparition

d'un état lié. Une telle transition, de second ordre, peut être correctement décrite en supposant que le potentiel d'interaction entre les *manifolds* (cordes ou biomembranes) est de courte portée. Les deux potentiels de Morse standard (PMS) et généralisé (PMG), constituent de bons exemples. En utilisant une théorie précise de la diffusion quantique, nous démontrons que le problème est équivalent à ignorer les détails du potentiel d'interaction paraissant dans l'équation de Schrödinger, à condition d'imposer une condition aux limites mixtes de type Dirichlet-Neumann aux fonctions d'onde, pourvu que ce même potentiel soit de très courte portée. L'énergie de l'état fondamental détermine toute les lois d'échelle, en relation avec le phénomène de déliaison. Dans cette condition limite, apparaît une constante de couplage qui peut être interprétée comme l'inverse d'une longueur d'extrapolation analogue à celle rencontrée en Phénomènes Critiques.

Premièrement, nous déterminons *exactement* l'état fondamental, à partir duquel nous extrayons la probabilité de contact qui nous a conduit à déterminer la séparation moyenne ainsi que la rugosité des cordes.

Deuxièmement, nous *calculons* exactement la densité d'énergie libre qui s'identifie à l'énergie de l'état fondamental. La principale conclusion est que tous les exposants critiques sont *universels*, indépendamment de la forme particulière du potentiel d'interaction choisi. Ce caractère universel est vérifié pour les deux potentiels de Morse (standard et généralisé).

Pour plus de détails, nous renvoyons le lecteur à la référence [1].

3.1 Introduction

Dans certaines conditions physiques, deux manifolds élastiques (cordes et biomembranes) peuvent subir une transition de déliaison [2, 3]. L'adhésion et la déliaison des biomembranes sont similaires à d'autres phénomènes d'interface, tels que le mouillage [4, 5] et les transitions d'adsorption-désorption de polymères [6]. La caractéristique commune de ces phénomènes de surface est qu'ils ont un comportement similaire à celui des lignes unidimensionnelles ou des cordes de tension finie [7], comme par exemple les bords des surfaces cristallines, et les lignes de vortex dans les supraconducteurs.

Dans ce chapitre, nous considérons deux manifolds adjacents susceptibles de subir une transition de déliaison. Il est entendu qu'ils interagissent par l'intermédiaire d'un certain potentiel d'expression inconnue. Les seules informations disponibles sur ce type de potentiel est qu'il est attractif, à courte distance, et répulsif, à une distance intermédiaire, et il présente un seul point minimum, à courte distance. En outre, il est supposé assez profond pour qu'un état lié apparaisse. C'est une signature d'une transition de déliaison. En utilisant la MMT, nous montrons que tous les potentiels de ce type donnent lieu aux mêmes exposants critiques (universalité), en relation avec la transition de déliaison. Comme test, cette preuve d'universalité est vérifiée dans les cas des PMS et PMG.

Ce chapitre est organisé comme suit :

Au paragraphe 2, nous décrivons le modèle des cordes et les lois d'échelle. La

preuve de l'universalité est le but du troisième paragraphe. Enfin, quelques remarques concluantes sont retracées dans le dernier paragraphe.

3.2 Lois d'échelle

Dans ce paragraphe, nous rappelons les principales lois d'échelle concernant les propriétés statistiques générales des manifolds (cordes ou biomembranes).

Tout d'abord, nous rappelons la définition de l'exposant de rugosité. Considérons un manifold fluctuant, et notons que cette dernière effectue de grands déplacements transversaux, sur une certaine échelle de distance, ξ_{\parallel} , appelée *longueur de corrélation* dans le plan. La taille de ces fluctuations perpendiculaires, ξ_{\perp} , augmente avec sa taille latérale, ξ_{\parallel} . Il est admis que les deux longueurs obéissent à la relation d'échelle suivante [3 – 5]

$$\xi_{\perp} \sim \xi_{\parallel}^{\zeta}. \quad (3.1)$$

Cette relation définit alors l'*exposant de rugosité*, ζ . Celui-ci dépend essentiellement de la nature du manifold considéré. Par exemple, pour les cordes, on a la valeur $\zeta = 1/2$, et la valeur $\zeta = 1$, pour les membranes fluides presque planes.

Le second exposant d'intérêt est l'exposant de déliaison. Pour le définir, nous considérons deux manifolds en interaction, qui sont séparés par une distance moyenne $\langle l \rangle$. Quand ils présentent une transition de déliaison, cette séparation moyenne

diverge, selon le comportement

$$\langle l \rangle \sim \left(\frac{T_c - T}{T_c} \right)^{-\psi}, \quad T \rightarrow T_c^{-1}. \quad (3.2)$$

Ce comportement définit l'*exposant de déliaison* ψ , où T_c est la température de transition. En outre, cet exposant dépend généralement de la nature du potentiel d'interaction senti par les manifolds. Lorsque la transition de déliaison est entraînée par les fluctuations thermiques, l'on a: $\langle l \rangle \sim \xi_{\perp}$. Dans ce cas, l'exposant de déliaison ψ coïncide avec l'*exposant de rugosité* ν_{\perp} [3].

Le dernier exposant d'intérêt est l'*exposant de contact*. Cet exposant caractérise le comportement singulier de la probabilité de contact de deux manifolds adjacents, lorsqu'on s'approche de la température de déliaison. On obtient les dernières relations d'échelle suivantes [3]

$$P \sim \xi_{\parallel}^{-\zeta_0} \sim \xi_{\perp}^{-\zeta_0/\zeta}. \quad (3.3)$$

Au voisinage du point critique, cette relation d'échelle définit l'*exposant de contact*, ζ_0 . En outre, la valeur de cet exposant dépend principalement de la nature du potentiel d'interaction entre les manifolds.

D'autre part, nous pouvons mettre la distribution de probabilité sous la forme d'échelle suivante

$$P(l) = \xi_{\perp}^{-1} \Omega \left(\frac{l}{\xi_{\perp}} \right). \quad (3.4)$$

Ici, le facteur explicite, ξ_{\perp}^{-1} provient de la normalisation. Pour retrouver la relation (3.4), la fonction d'échelle $\Omega(s)$ doit se comporter comme

$$\Omega(s) \sim s^{-1+\zeta_0/\zeta}, \quad \text{pour les petites valeurs } s \text{ (avec } \zeta_0 > 0 \text{)}. \quad (3.5)$$

Ce comportement d'échelle reste valable, tant que la séparation moyenne est telle que $\langle l \rangle \sim \xi_{\perp}$.

Dans la section suivante, nous déterminerons l'ensemble des propriétés essentielles, en relation avec la transition de déliaison, d'une manière exacte, avec tous les potentiels présentant un minimum et de courte portée.

3.3 Preuve de l'universalité

Avant d'étudier le cas général, il sera commode de rappeler les deux exemples pour lesquels la transition de déliaison a été exactement étudiée [10]. Il s'agit des PMS et PMG.

3.3.1 Premier exemple: Le potentiel de Morse standard

L'expression de ce potentiel, de courte portée, est donnée comme suit

$$V(l) = D [e^{-2\alpha(l-l_m)} - 2e^{-\alpha(l-l_m)}], \quad 0 \leq l < \infty. \quad (3.6)$$

Il a été démontré dans la Réf. [10] que toutes les fonctions propres de l'équation de Schrödinger, avec ce potentiel, sont des états liés, avec des valeurs propres

négatives, et que le spectre d'énergie est discret. Nous avons montré que le système subit une transition de déliaison lorsqu'un état lié apparaît.

Il a été constaté [10], également, que l'état fondamental est donné par

$$\varphi_0(r) = A_0 e^{-\alpha(\lambda-1/2)(l-l_m) - \lambda e^{-\alpha(l-l_m)}} . \quad (3.7)$$

avec la constante de normalisation

$$A_0 = \frac{1}{\sqrt{\Gamma(2\lambda)}} . \quad (3.8)$$

L'énergie fondamentale associée est donné par

$$E_0 = \frac{-D}{\lambda^2} \left(\lambda - \frac{1}{2} \right)^2 , \quad (3.9)$$

avec la notation

$$\lambda = \frac{\sqrt{2D\sigma}}{\alpha k_B T} . \quad (3.10)$$

Cela donne la probabilité de contact,

$$P(l) = K_0 e^{-\alpha(2\lambda-1)(l-l_m) - 2\lambda e^{-\alpha(l-l_m)}} , \quad (3.11)$$

avec la constante de normalisation

$$K_0 = \frac{\alpha}{(2\lambda)^{1-2\lambda} \gamma(2\lambda - 1, 2\lambda e^{\alpha l_m})}, \quad (3.12)$$

pourvu que la condition $\lambda > 1/2$ soit satisfaite. Ici, $\gamma(\nu, x)$ désigne la *Fonction Gamma Incomplète* [11].

Premièrement, notons que le système subit une transition de déliaison si la valeur de l'énergie de l'état fondamental, $E_0 = -(D/\lambda^2)(\lambda - 1/2)^2$, s'annule. Cela se produit pour la valeur typique $\lambda_c = 1/2$. Cette valeur définit alors la température de déliaison,

$$T_c = \frac{2\sqrt{2D\sigma}}{k_B\alpha}. \quad (3.13)$$

Cette température dépend naturellement des paramètres du problème, qui sont σ , D et α . A cette température, le système présente une transition de l'état lié ($T < T_c$ ou $D > D_c$) à un autre état non lié ($T > T_c$ ou $D < D_c$). L'expression ci-dessus définit alors une *ligne critique* qui sépare les domaines des états non liés et des états liés. L'expression (3.13) définit également une amplitude du potentiel critique, D_c , à température fixe,

$$D_c = \frac{\alpha^2(k_B T)}{8\sigma}. \quad (3.14)$$

Cette expression indique, en particulier, que la transition de déliaison est plus accentuée pour les cordes de haute tension de surface (ou les membranes fluides à haut

module de rigidité).

Deuxièmement, il a été démontré [10] que, près de la zone critique, la séparation moyenne et la rugosité de la corde ce comportent exactement comme

$$\langle l \rangle \sim \xi_{\perp} \sim \alpha^{-1} \left(\frac{T_c - T}{T_c} \right)^{-1}, \quad T - T_c^{-1}. \quad (3.15)$$

Par conséquent, l'exposant de déliaison ψ a la valeur exacte suivante

$$\psi = 1. \quad (3.15a)$$

Cette valeur est très proche de celle trouvée par la méthode du GR [8].

D'autre part, il a été démontré [10] que la distribution de probabilité obéit à la loi d'échelle exacte suivante

$$P(l) = \frac{1}{\xi_{\perp}} \Omega_1 \left(\frac{l}{\xi_{\perp}} \right), \quad (3.16)$$

avec la fonction d'échelle

$$\Omega_1(y) = A e^{-y - B e^{-y}}, \quad (3.16a)$$

où A et B sont des constantes connues. Son comportement à $y \rightarrow 0$ est

$\Omega_1(y) = Ae^{-B}$. Ainsi, l'exposant de contact associé est

$$\zeta_0 = \zeta . \quad (3.16b)$$

L'exposant de contact a alors la valeur $\zeta_0 = 1/2$, pour les cordes, et $\zeta_0 = 1$, pour les membranes fluides. Comme avant, l'égalité ci-dessus est celle qu'on a trouvé pour les interfaces, caractérisées par une distribution de probabilité Gaussienne: $\xi_{\perp}^{-1} \exp(-l^2/2\xi_{\perp}^2)$, pour le champ de fluctuation l .

Finalement, la densité d'énergie libre se comporte comme suit [10]:

$$f \sim \left(\frac{T_c - T}{T_c} \right)^{\theta} , \quad T - T_c^{-1} , \quad (3.17)$$

avec l'exposant critique exacte

$$\theta = 2 . \quad (3.17a)$$

Remarque: *Nous montrons facilement la formule intéressante suivante, dans la limite où la portée du potentiel, α^{-1} , est très faible,*

$$\left[\frac{d\varphi_0}{dl} \right]_{l=0} = c\varphi_0(0) , \quad (3.18)$$

avec la notation

$$c = \alpha^{-1} \frac{T_c - T}{T_c} < 0, \quad T - T_c^{-1} . \quad (3.18a)$$

La constante $|c|^{-1}$ peut être interprétée comme une longueur d'extrapolation qu'on rencontre habituellement en Phénomènes Critiques de Surface [4, 5]. Par conséquent, $|c|^{-1}$ se comporte comme ξ_{\perp} , au voisinage de la température critique.

3.3.2 Deuxième exemple: Le potentiel de Morse généralisé

Le PMG a été introduit par Deng et Fan [12], et est lié au potentiel de Manning-Rosen [13, 14], également appelé "potentiel d'Ecart" par certains auteurs [15, 16]. Il est défini par

$$V(l) = D \left[\left(1 - \frac{b}{e^{al} - 1} \right)^2 - 1 \right], \quad 0 \leq l < \infty, \quad (3.19)$$

avec la notation $b = e^{al_m} - 1 > 0$, où l_m est le point minimum du potentiel. Le paramètre $D > 0$ définit la profondeur du potentiel et a^{-1} est sa portée. La spécificité du PMG est qu'il se comporte comme un potentiel de sphère dure à l'origine ($l = 0$).

Il a été démontré [17] que l'équation de Schrödinger avec ce potentiel est exactement soluble, où les fonctions d'ondes sont des états liés et les valeurs propres associées sont négatives. L'état fondamental est défini comme suit

$$\varphi_0(l) = N_0 (e^{al} - 1)^{\beta_0 - \alpha_0} e^{-a\beta_0 l}, \quad (3.20)$$

avec la constante de normalisation

$$N_0 = a \left(\frac{\alpha_0 + r}{r} \right) \frac{1}{B(2\alpha_0, 2r)} , \quad (3.21)$$

où $B(x, y)$ est la *Fonction Bêta* [11], qui est un type *d'Intégrale d'Euler*, définie pour tous nombres complexes x et y de parties réelles strictement positives,

$$B(x, y) = \int_0^1 t^{x-1} (1-t)^{y-1} dt . \quad (3.21a)$$

Cette fonction est liée à *la Fonction Gamma* par la relation :

$$B(x, y) = \frac{\Gamma(x) \Gamma(y)}{\Gamma(x+y)} . \quad (3.21b)$$

Dans la relation (3.20), les constantes α_0 et β_0 sont données pas les relations suivantes :

$$\alpha_0 = \frac{1}{2} [kb(b+2) - r] , \quad \beta_0 = \frac{1}{2} [kb(b+2) + r] , \quad (3.22)$$

avec la notation

$$r = \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 + 4kb^2} \right) . \quad (3.22a)$$

L'énergie de l'état fondamental est exactement obtenue

$$E_0 = -\frac{a^2 (k_B T)^2}{8\sigma} \left[r - \frac{b(b+2)}{r} \right]^2 . \quad (3.23)$$

Le système subit alors une transition de déliaison, si l'énergie de l'état fondamental, E_0 , s'annule, cette condition définit la température de déliaison,

$$T_c = \frac{2}{ak_B} \sqrt{\frac{b}{b+2}} \sqrt{2D\sigma} . \quad (3.24)$$

Bien entendu, cette température caractéristique dépend naturellement des paramètres du potentiel (b, D) et de la tension de la corde σ .

L'état fondamental ci-dessus donne la probabilité de contact,

$$P(l) = N_0^2 (e^{al} - 1)^{2(\beta_0 - \alpha_0)} e^{-2a\beta_0 l}, \quad K_0 = N_0^2 . \quad (3.25)$$

A l'aide de cette probabilité, nous avons calculé la séparation moyenne et la rugosité de la corde. Nous avons le résultat

$$\langle l \rangle \sim \xi_{\perp} \sim a^{-1} \left(\frac{T_c - T}{T_c} \right)^{-\psi}, \quad \psi = 1 . \quad (3.26)$$

Nous constatons, également, que la probabilité de contact obéit à la loi d'échelle suivante

$$P(l) = \frac{1}{\xi_{\perp}} \Omega_2 \left(\frac{l}{\xi_{\perp}} \right), \quad (3.27)$$

où la fonction d'échelle $\Omega_2(y)$ est donné par

$$\Omega_2(y) \sim e^{-y}. \quad (3.27a)$$

Dans des distances petites par rapport à la rugosité de la corde ξ_{\perp} , c'est-à-dire $l \ll \xi_{\perp}$, la probabilité de contact se comporte comme ξ_{\perp}^{-1} . Par conséquent, l'exposant de contact associé est: $\zeta_0 = \zeta$.

Il est facile de montrer que la densité d'énergie libre, f , a un comportement similaire à celle définie par la l'équation (3.17), avec le même exposant critique $\theta = 2$.

Notons que la propriété (3.18) reste valable pour le PMG, en y remplaçant a par α .

Enfin, les exposants critiques ψ et θ , ainsi que l'exposant de contact ζ_0 , sont les mêmes pour les PMS et PMG. Mais les températures de déliaison sont différentes .

3.3.3 Démonstration de l'universalité

Considérons, maintenant, deux manifolds interagissants, qui sont susceptibles de présenter une transition de déliaison, à une certaine température critique. Théorique-

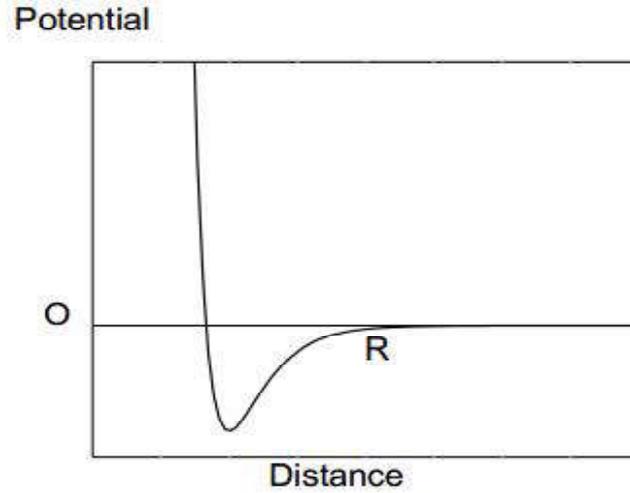


FIG. 3.1: *Forme typique des potentiels de courte portée.*

ment, les potentiels d'interaction typiques pouvant assurer une telle transition, doivent avoir les caractéristiques essentielles suivantes:

- (i) *de courte portée,*
- (ii) *attractifs, à grande distance* (cette condition est nécessaire pour la liaison des deux manifolds),
- (iii) *répulsifs, à courte distance,*
- (iv) *présentant un seul point minimum dans la région attractive.*

Une forme typique de ces potentiels est celle représentée sur la FIG. 3.1..

Pour approcher la solution de l'équation de Schrödinger, nous utiliserons des théorèmes énoncés dans un travail pionnier par Roger G. Newton [18], portant sur la théorie de la diffusion. Selon l'auteur, si le potentiel est de très courte portée

et suffisamment profond pour qu'un état lié apparaisse, la fonction d'onde de l'état fondamental, φ_0 , satisfait une équation de Schrödinger libre, à condition qu'elle satisfasse une condition au limite à séparation nulle ($l = 0$),

$$\left[\frac{d\varphi_0}{dl} \right]_{l=0} = g\varphi_0(0) . \quad (3.28)$$

Les solutions avec les PMS et PMG remplissent précisément cette condition (en remplaçant c par g). La constante de couplage $g < 0$ résume toutes nos connaissances sur la structure du potentiel d'interaction. L'on suppose que cette constante de couplage dépend de la température T et de la température de transition de déliaison, T_c , selon la loi suivante

$$g = g_0(T - T_c) < 0 , \quad (3.29)$$

où le coefficient g_0 a les dimensions de l'inverse d'une distance. Alors, l'état fondamental s'écrit alors

$$\varphi_0(l) = \sqrt{-2g}e^{gl} . \quad (3.30)$$

L'énergie fondamentale associée est donnée par la l'expression

$$E_0 = -\frac{(k_B T)^2}{8\sigma} g^2 \sim -k_B T_c \left(\frac{T_c - T}{T_c} \right)^2 . \quad (3.31)$$

Nous notons, à ce stade, que cette expression est conforme à celle obtenue dans le cas des PMS et PMG. La probabilité de contact est alors

$$P(l) = -2ge^{2gl} . \quad (3.32)$$

Cela donne la séparation moyenne et la rugosité des manifolds

$$\langle l \rangle = \xi_{\perp} \sim -\frac{1}{2g_0} \left(\frac{T_c - T}{T_c} \right)^{-\psi} , \quad T \rightarrow T_c^{-1} , \quad (3.33)$$

avec l'exposant de déliaison $\psi = 1$. La probabilité de contact obéit à la loi d'échelle exacte suivante

$$P(l) = \xi_{\perp}^{-1} e^{-l/\xi_{\perp}} . \quad (3.34)$$

Nous constatons que l'exposant de contact correspondant est $\zeta_0 = \zeta$. Nous montrons aisément que le moment de séparation d'ordre n est donné par

$$\langle l^n \rangle = \frac{n!}{(-2g)^n} = n! \langle l \rangle^n . \quad (3.35)$$

Remarquons que le rapport entre $\langle l^n \rangle$ et $\langle l \rangle^n$ est universel.

La densité d'énergie libre, f , s'identifie avec l'énergie fondamentale, E_0 , et nous avons

$$f \sim -\frac{(k_B T)^2}{8\sigma} g^2 \sim -\left(\frac{T_c - T}{T_c}\right)^\theta, \quad (3.36)$$

avec l'exposant critique $\theta = 2$.

La conclusion est que tous les exposants critiques, en relation avec la transition déliaison, sont universels, indépendamment de la forme particulière du potentiel d'interaction choisi, à condition qu'il soit de courte portée et assez profond pour qu'un état lié apparaisse. Ceci est une exigence de la transition déliaison.

3.4 Conclusion

Ce chapitre porte sur l'étude de la transition de déliaison d'une paire de manifolds, en utilisant la MMT. Plus précisément, nous avons supposé que cette transition peut être décrite correctement à l'aide des potentiels d'interaction, de courte portée et suffisamment profonds pour qu'un état lié prenne naissance.

En utilisant la théorie de la diffusion quantique, nous avons démontré que le problème est équivalent à ignorer le potentiel d'interaction dans l'équation de Schrödinger, et d'imposer une condition mixte de type Dirichlet-Neumann (dans la limite de séparation nulle) sur l'état fondamental. Dans cette condition limite, apparaît une constante de couplage qui disparaît dans le domaine critique, et peut être interprétée comme l'inverse d'une distance.

Le résultat principal est que tous les exposants critiques sont universels, indépen-

damment de la forme particulière du potentiel choisi. Les techniques utilisées ont été testées dans les cas des potentiels de Morse standard et généralisé.

Notons, enfin, que cette condition aux limites peut être omise, à condition que le potentiel d'interaction, $V(l)$, soit remplacé par $g\delta(l)$, où $\delta(l)$ est la distribution de Dirac unidimensionnelle.

Bibliographie

- [1] R. El Kinani, M. Benhamou, H. Kaïdi, *Unbinding Transition of Strings and Biomembranes from Short-Range Potentials : Proof of Universality*, International Journal of Academic Reserch **7**, 337 (2015).
- [2] M. Lässig, R. Lipowsky, *Universal aspects of Interacting Lines and Surfaces*, dans *Fundamental Problems in Statistical Mechanics VIII*, pp. 169-206, 1994.
- [3] E. Sackmann, *The Structure and Dynamics of Membranes*, in *The Structure and Dynamics of Membranes*, R. Lipowsky, E. Sackmann, Eds., Amsterdam, The Netherlands, Elsevier, pp. 213–304, 1995.
- [4] K. Binder, *in Phase Transitions and Critical Phenomena*, Vol. 8, C. Domb, J. Lebowitz, Eds., Academic Press, 1983.
- [5] S. Dietrich, *Wetting Phenomena*, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, C. Domb, J. Lebowitz, Eds., Academic Press, London, UK, Vol. 12, pp. 1–218, 1988.

- [6] E. Eisenriegler, *Polymers Near Surfaces: Conformation Properties and Relation to Critical Phenomena*, World Scientific, Singapore, 1993.
- [7] M.E. Fisher, *Interface wandering in adsorbed and bulk phases, pure and impure*, Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions 2: Molecular and Chemical Physics **82**, 1603 (1986).
- [8] L.S. Schulman, *Techniques and Applications of Path Integration*, Dover, 2005.
- [9] M. Manghi, N. Destainville, *Statistical Mechanics and dynamics of two supported stacked lipid bilayers*, Langmuir **26**, 4057 (2010).
- [10] M. Benhamou, R. El Kinani, H. Kaïdi, *Rigorous study of the unbinding transition of biomembranes and strings from Morse potentials, conference papers in Mathematics*, Hindawi Publishing, Vol. 2013, ID 320718, (2013).
- [11] I.S. Gradshteyn and I.M. Ryzik, *Table of Integrals, Series and Products*, Academic Press, New York, (1980).
- [12] Z.H. Deng, Y.P. Fan, *A Potential Function of Diatomic Molecules*, Journal of Shandong University (Natural Science) **1**, 11 (1957).
- [13] L. Infeld, T.E. Hull, *The factorization method*, Reviews of Modern Physics **23**, 21 (1951).
- [14] M.F. Manning, N. Rosen, *A Potential Function for the Vibrations of Diatomic Molecules*, Phys. Rev. **44**, 953 (1933).

- [15] J.W. Dabrowska , *Explicit wavefunctions for shape-invariant potentials by operator techniques*, Journal of Physics A: Mathematical and General **21**, 195 (1988).
- [16] F. Cooper, A. Khare, and U.Sukhatme, *Supersymmetry and quantum mechanics*, Physics Reports **251**, 267 (1995).
- [17] A. Del Sol Mesa, C. Quesne, Christian, Yu F. Smirnov, *Generalized Morse potential*, Journal of Physics A **31**, 321 (1998).
- [18] Roger G. Newton, *Analytic properties of radial wave functions*, Journal of Mathematical Physics **1**, 319 (1960).

Chapitre 4

Mécanique Statistique et interactions des cordes par l'approche de l'équation de Schrödinger: Résultats exacts

Dans ce chapitre, qui constitue notre *troisième contribution originale* [1], nous considérons une paire de cordes en interaction qui peuvent fluctuer thermiquement autour d'une ligne de référence. Nous supposons que les deux cordes interagissent via un potentiel de Morse dépendant d'un paramètre réel q , qui reproduit bien les caractéristiques de l'interaction réelle. En utilisant la *Méthode de la Matrice de*

Transfert (MMT) qui est basée sur la résolution d'une équation de type Schrödinger, nous déterminons les états liés, afin d'établir d'une manière exacte l'expression de la distribution de probabilité. A partir de cette dernière, nous avons déterminé la séparation moyenne ainsi que la rugosité des cordes. Pour plus de détails, le lecteur peut être renvoyé à [1].

4.1 Introduction

Les cordes sont des objets unidimensionnels qui possèdent des propriétés statistiques riches, en raison de leur morphologie souple et flexible. Par exemple, la molécule de l'ADN est formée par deux chaînes de polymères flexibles connectées qui sont organisées en une configuration à double hélice. En particulier, une paire de chaînes peut présenter une transition de déliaison (transition de dénaturation pour l'ADN) [2]. Nous insistons sur le fait que ce mécanisme ou bien ce phénomène est analogue à celui régissant le mouillage interfacial [3] ou les transitions d'adsorption-désorption des polymères [4]. La caractéristique commune de ces phénomènes d'interface est qu'ils ont un comportement similaire à celui des lignes ou des cordes unidimensionnelles de tension finie [5], comme les bords des surfaces des cristaux, des polymères étirés ou des lignes de vortex dans les supraconducteurs.

Nous notons que la transition de déliaison des cordes et des bicouches membranaires est souvent dictée par la forme stériques des fluctuations [6], dont l'ampli-

tude augmente avec la température. Ces forces entropiques répulsives sont équilibrées avec celles de van der Waals attractives. Il existe une certaine valeur de la constant d'Hamaker (*seuil*) au-delà de laquelle les interactions attractives de van der Waals sont suffisantes pour lier les cordes ensemble. En dessous de cette amplitude caractéristique, les ondulations membranaires dominent les forces d'attraction, et les cordes se séparent alors complètement.

Un autre outil intéressant pour une étude quantitative des propriétés statistiques d'une paire de cordes est la MMT, habituellement rencontrée en Mécanique Quantique [7 – 9] et en Phénomènes Critiques [10, 11]. La MMT a été appliquée très récemment, pour extraire les propriétés statistiques des cordes adjacentes à l'aide du potentiel de Morse généralisé [12].

Dans ce chapitre, nous appliquons la MMT, à un nouveau potentiel que nous introduisons pour la première fois, appelé *q-Morse*. Ce nouveau potentiel est le potentiel de Morse le plus complet, la valeur $q = 0$ définit le potentiel de Morse standard utilisé en Physique Atomique pour étudier les vibrations des atomes dans les molécules [13]. En outre, ce même potentiel a récemment été utilisé pour l'étude du problème de dénaturation de l'ADN [14, 15]. Tandis que la valeur $q = -1$ définit un potentiel de Morse généralisé qui a été introduit par Deng et Fan [16], dans le contexte de la Mécanique Quantique.

Le choix de ce nouveau potentiel peut être motivé par le fait qu'il reproduit les caractéristiques du potentiel d'interaction réel (répulsif, à courte distance, attractif,

à grande distance, et présentant un puits de potentiel). Une autre raison de ce choix est que le spectre d'énergie associée est discret, et ses fonctions propres sont des états liés. L'existence de ces états fait de ce potentiel un bon candidat pour l'étude des propriétés statistiques des paires de cordes.

Ce chapitre est organisé comme suit. Au paragraphe 2, nous présentons le modèle de cordes utilisé et rappelons l'expression analytique du q -Morse potentiel. Au paragraphe 3, nous résolvons exactement l'équation de Schrödinger associée, pour obtenir la forme exacte de la probabilité de contact. Des conclusions sont retracées dans le dernier paragraphe.

4.2 Modèle de cordes

Considérons deux cordes en interaction qui se déplacent dans un espace à deux dimensions. Nous supposons qu'en moyenne, elles fluctuent autour d'une ligne de référence, disons l'axe- x , et en plus, leurs elongations restent perpendiculaires à cet axe. La conformation des cordes peut être décrite par le champ de séparation locale [17], $l(x) > 0$, qui est perpendiculaire à la ligne de référence. La Mécanique Statistique des chaînes est basée sur le Hamiltonien

$$H[l] = \int_0^L dx \left[\frac{\sigma}{2} \left(\frac{dl}{dx} \right)^2 + V_q(x) \right], \quad (4.1)$$

où L désigne la longueur commune des cordes, et σ est leur tension effective. $V_q(x)$ représente le potentiel d'interaction, dont la forme est la suivante

$$V_q(l) = D \left[\left(1 - \frac{b}{e^{\alpha l} + q} \right)^2 - 1 \right], \quad 0 \leq l \leq \infty, \quad (4.2)$$

avec la notation

$$b = e^{\alpha l_m} + q, \quad (4.3)$$

où l_m désigne le point minimum de ce potentiel.

Nous supposons que le paramètre q est tel que $q > 0$ ou $-1 \leq q < 0$. En effet, ce paramètre q agit comme un paramètre de déformation. Ici D est la profondeur du potentiel, et $\alpha > 0$ définit la portée du potentiel. Comme il est exigé physiquement, le potentiel $V_q(l)$ tend vers 0^- , à l'infini, c'est-à-dire pour $l \rightarrow \infty$.

Notons que le potentiel proposé est un potentiel à 4 paramètres de type exponentiel [18], et il peut se réduire à des potentiels entre molécules les plus connues, en choisissant des valeurs appropriées des paramètres (D, b, α, q) . Par conséquent, le potentiel $V_q(l)$ est le plus général et peut être un bon candidat pour l'étude d'une grande classe d'interactions dans les systèmes moléculaires.

Le potentiel $V_q(l)$ possède un zéro unique qui est le suivant

$$l_0 = \alpha^{-1} \ln \left(\frac{b}{2} - q \right), \quad (4.4)$$

pourvu que l'inégalité $b > 2(q + 1)$ soit satisfaite. Cette inégalité est toujours vraie, car $q \geq -1$.

Nous montrons que le point minimum unique de ce potentiel, l_m , est au-dessus du zéro l_0 , et il est donné, en termes de paramètres (b, q) , par

$$l_m = \alpha^{-1} \ln(b - q) . \quad (4.5)$$

Il est facile de voir que ce potentiel d'interaction ne présente aucune asymptote d'abscisse positif non nul, pour $-1 < q < 0$ ou $q > 0$. Mais, il la présente quand $q = -1$, où il devient infini à l'origine $l = 0$.

Dans la FIG. 4.1, nous représentons le q -Morse, en fonction de la distance, pour différentes valeurs du paramètre q , tout en gardant les autres paramètres (D, b, α) fixés. En particulier, cette figure montre que le minimum du potentiel tend vers ses petites valeurs, quand le paramètre q croît.

4.3 Probabilité de contact

Dans le cadre de la MMT, la probabilité de contact d'avoir deux cordes à une certaine distance est donnée par la connaissance de l'état lié, solution de l'équation de Schrödinger décrite ci-dessous.

Pour résoudre cette équation, nous utilisons le *théorème de Kathos* [19], comme au second chapitre, du fait que le $V_q(l)$ satisfait effectivement les conditions de ce théorème.

Maintenant, nous notons que, dans la limite thermodynamique ($L \rightarrow \infty$), les propriétés statistiques du système peuvent être étudiées en utilisant la MMT [7 – 9],

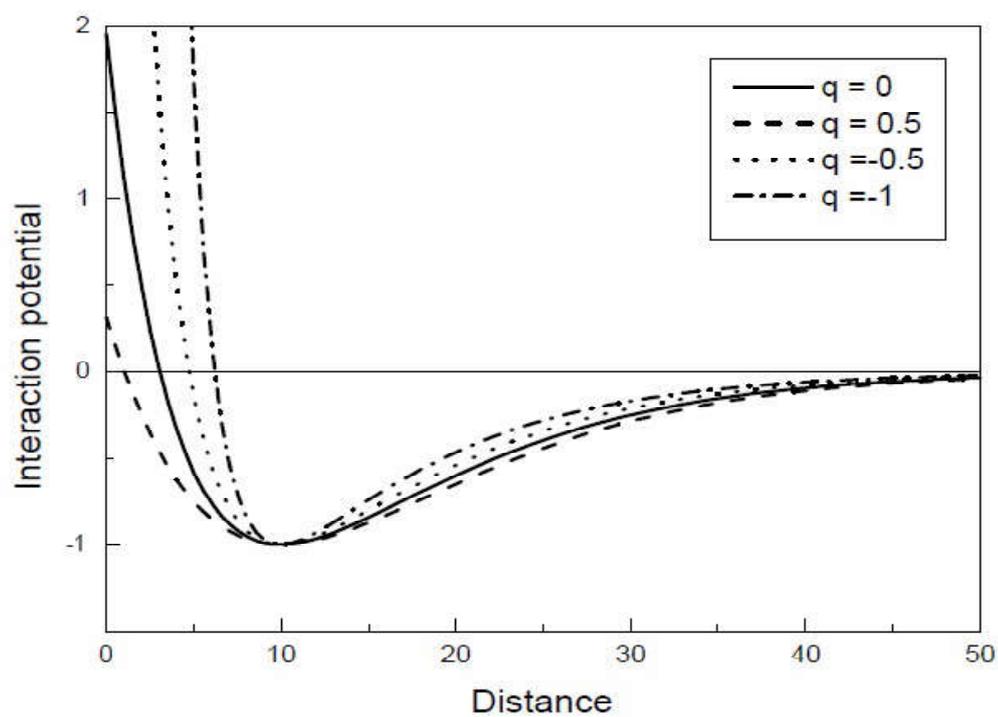


FIG. 4.1: Variation du potentiel de Morse réduit $V_q(x)$, en fonction de la distance, pour différentes valeurs du paramètre q .

et l'équation de Schrödinger est la suivante

$$\frac{(k_B T)^2}{2\sigma} \frac{d^2 \varphi_n}{dl^2} + V_q(l) \varphi_n = E_n \varphi_n , \quad (4.7)$$

où T est la température absolue. Les paramètres E_n et φ_n désignent, respectivement, l'ensemble des valeurs propres et des fonctions d'onde.

Nous notons, tout d'abord, qu'elle est similaire à l'équation de Schrödinger traditionnelle,

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 \varphi_n}{dl^2} + V_q(l) \varphi_n = E_n \varphi_n , \quad (4.8)$$

où μ est la masse réduite et \hbar est la constante de Planck renormalisée, en faisant la substitution suivante

$$\frac{(k_B T)^2}{2\sigma} \rightarrow \frac{\hbar^2}{2\mu} . \quad (4.9)$$

Il convient de rappeler brièvement les étapes essentielles de sa résolution, en particulier, pour l'état lié, φ_0 .

Pour déterminer l'état fondamental, nous l'écrivons d'abord comme

$$\varphi_0(l) = N \exp \left\{ -\frac{\sqrt{2\sigma}}{k_B T} \int W(l) dl \right\} , \quad (4.10)$$

où N est la constante de normalisation et $W(l)$ est le *super-potentiel*, en langage de supersymétrie. Ce dernier satisfait une équation différentielle non linéaire de type Riccati,

$$W^2(l) - \frac{k_B T}{\sqrt{2\sigma}} \frac{dW}{dl} = V_q(l) - E_0 , \quad (4.11)$$

où E_0 est l'énergie de l'état fondamental. L'équation ci-dessus présente une solution exacte donnée par [18]

$$W(l) = -\frac{k_B T}{\sqrt{2\sigma}} \left[Q_1 + \frac{Q_2}{e^{\alpha l} - q} \right], \quad (4.12)$$

avec

$$Q_2 = \frac{1}{2} \left[-\alpha q + \sqrt{1 + \frac{8\sigma}{(k_B T)^2} \frac{Dq^2}{\alpha^2 q^2}} \right], \quad (4.13a)$$

$$Q_1 = \frac{\sigma D b}{(k_B T)^2} \left(\frac{b - 2q}{q} \right) \frac{1}{Q_2} - \frac{Q_2}{q}, \quad (4.13b)$$

$$E_0 = \frac{-(k_B T)^2}{2\sigma} Q_1^2. \quad (4.13c)$$

Il est facile de voir que $Q_1 < 0$.

Maintenant, en combinant les équations (4.10) et (4.12), nous obtenons la forme *exacte* de l'état fondamental

$$\varphi_0(l) = N_0 e^{Q_1 l} \left(\frac{e^{\alpha l}}{e^{\alpha l} + q} \right)^{Q_2/\alpha q}. \quad (4.14)$$

La constante de normalisation N_0 est exactement connue. Cet état fondamental donne la probabilité de contact,

$$P(l) = \varphi_0^2(l) = K_0 e^{2Q_1 l} \left(\frac{e^{\alpha l}}{e^{\alpha l} + q} \right)^{2Q_2/\alpha q}, \quad (4.15)$$

avec la constante de normalisation K_0 qui est aussi connue.

De la formule exacte ci-dessus, nous pouvons calculer tous les moments de la séparation entre les cordes adjacentes.

La formule ci-dessus montre clairement que la probabilité de contact a une (petite) valeur finie à l'origine qui est

$$P(0) = K_0 (1 + q)^{-2Q_2/\alpha q} . \quad (4.16a)$$

Mais à l'infini, cette probabilité s'annule avec la séparation comme

$$P(l) \sim K_0 e^{2Q_1 l} , \quad l \rightarrow \infty . \quad (4.16b)$$

Il est facile de voir que la probabilité de contact obéit à la forme d'échelle suivante

$$P(l) = \frac{1}{\xi_\perp} \Omega \left(\frac{l}{\xi_\perp} \right) , \quad (4.17)$$

avec la fonction d'échelle

$$\Omega(s) = K_0 e^{-s} \left(\frac{e^{s\alpha\xi_\perp}}{e^{s\alpha\xi_\perp} + q} \right)^{2Q_2/\alpha q} . \quad (4.18)$$

Ainsi, l'exposant de contact associé vaut exactement

$$\zeta_0 = \zeta = \frac{1}{2} . \quad (4.19)$$

4.4 Conclusion

Nous rappelons que le but de ce chapitre est l'étude analytique des propriétés statistiques d'une paire de cordes, à partir d'un potentiel de Morse le plus général dépendant

dant d'un paramètre réel q , en utilisant la méthode de l'équation de Schrödinger. Cette étude a montré que ses solutions sont des états liés.

De l'expression exacte de l'état fondamental, nous avons calculé la probabilité de contact qui est définie comme la probabilité de trouver les deux cordes interagissantes à une distance (finie) l'une de l'autre. Cette probabilité donne toutes les longueurs d'échelle, qui sont la séparation moyenne et la rugosité.

La conclusion principale est que nos études analytiques révèlent que le potentiel de Morse q -potentiel de Morse est un bon candidat pour la description des propriétés statistiques des cordes en interaction.

Bibliographie

- [1] R. El Kinani, M. Benhamou, H. Kaïdi, *Schrödinger equation approach to Statistical Mechanics of interacting stings: Exact results*, International Journal of Multidisciplinary and Current Research **3**, 732 (2015).
- [2] M. Lässig, R. Lipowsky, *Universal Aspects of Interacting lines and Surfaces*, dans *Fundamental Problems in Statistical Mechanics VIII*, Elsevier Science B.V, pp. 169-206, 1994.
- [3] S. Dietrich, *Wetting Phenomena*, dans *Phase Transitions and Critical Phenomena*, C. Domb, J. Lebowitz, (ed.), Academic Press, London, UK, Vol. 12, pp. 1-218, 1988.
- [4] E. Eisenriegler, *Polymers Near Surfaces*, World Scientific, 1993.
- [5] R. Lipowsky, *Lines of Renormalization Group Fixed Points for Fluid and Crystalline Membranes*, Europhysics Letters **7**, 255 (1988).

- [6] W. Helfrich, *Elastic Properties of Lipid Bilayers-Theory and Possible Experiments*, Zeitschrift fur Naturforschung C **28**, 693 (1973).
- [7] F. Wiegels, *Introduction to Path-Integral Methods in Physics and Polymer Science*, World Scientific, Philadelphia, Pa, USA, 1986.
- [8] L.S. Schulman, *Techniques and Applications of Path Integration*, Dover, 2005.
- [9] H. Kleinert, *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics, and Financial Markets*, 5th edition, World Scientific, London, 2009.
- [10] C. Itzykson, J.-M. Drouffe, *Statistical Field Theory: 1 and 2*, Cambridge University Press, 1989.
- [11] J. Zinn-Justin, *Quantum Field Theory and Critical Phenomena*, Clarendon Press, Oxford, UK, 1989.
- [12] M. Benhamou, R. El Kinani, H. Kaidi, *Rigorous study of the unbinding transition of biomembranes and strings from Morse potentials*, *Conference Papers in Mathematics, Hindawi Publishing* , Vol. 2013, ID 320718, (2013).
- [13] P.M. Morse, *Diatomic Molecules According to the Wave Mechanics. II. Vibrational Levels*, *Phys. Rev.* **34**, 57 (1929).
- [14] M. Peyrard, A.R. Bishop, *Statistical Mechanics of a Nonlinear Model for DNA Denaturation*, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2755 (1989).

- [15] T. Dauxois, P. Bishop, A.R. Bishop, *Dynamics and Thermodynamics of a Non-linear Model for DNA Denaturation*, Phys. Rev. E **47**, 684 (1993).
- [16] Z.H. Deng, Y.P. Fan, *A Potential Function of Diatomic Molecules*, Shandong University Journal, Natural Science **1**, 162 (1957).
- [17] R. Lipowsky, *Typical and Exceptional Shape Fluctuations of Interacting Strings*, Europhysics Letters **15**, 703 (1991).
- [18] J.I.A. Chun-Sheng, Zhang Ying, Zeng Xiang-Lin, Sun Liang-Tian, *T-Identity for the Exponential-type Molecule Potentials and the Supersymmetry Shape Invariance*, Commun. Theor. Phys. (Beijing, China) **36**, 641 (2001).
- [19] F.A. Berezin, M.A. Shubin, *The Schrödinger Equation*, Springer Netherlands, Kluwer Academic Publishers, 1991.
- [20] R. Lipowsky, E. Sackmann, (ed.), *Structure and Dynamics of Membranes: I. From Cells to Vesicles/II. Generic and Specific Interactions*, Elsevier, 1995.

Chapitre 5

Mécanique Statistique des matériaux biologiques confinés

Dans ce chapitre, qui constitue notre *quatrième contribution originale* [1], nous proposons un modèle pour étudier la Mécanique Statistique d'une biomembrane confinée qui fluctue entre deux substrats plans interactifs. Nous désignerons par $2L$, la distance qui sépare les deux plaques, et l'on suppose que cette dernière est beaucoup plus petite que la rugosité membranaire, afin d'assurer le confinement de cette membrane. Du point de vue lois d'échelle, les biomembranes et les cordes sont très similaires. Donc, il est suffisant de considérer uniquement le problème d'une corde. Nous supposons que la biomembrane interagit avec les substrats via un *potentiel de Morse double* qui reproduit bien les caractéristiques de l'interaction réelle. Nous montrons que la Mécanique Statistique de la corde peut être convenablement

décrite par l'approche de l'équation de Schrödinger que nous résolvons exactement, par la méthode de Bethe. Enfin, à partir de la valeur exacte de l'énergie de l'état fondamental, nous extrayons l'expression de la densité d'énergie libre, ainsi que celle de la chaleur spécifique. Pour plus de détails, nous renvoyons le lecteur à la Réf. [1].

5.1 Introduction

Les membranes cellulaires ont une importance cruciale dans la vie, car elles séparent la cellule de son environnement, et agissent ainsi comme une barrière sélective de la matière. Les détails descriptifs de l'organisation structurale et des fonctions de base des biomembranes peuvent être trouvés dans les Réfs. [2 – 8]. Les bicouches de phospholipides ont fait, depuis leur découverte, l'objet de très nombreuses études [2 – 8]. Elles constituent, en effet, des systèmes modèles à deux dimensions, et sont, à ce titre, particulièrement intéressantes, d'un point de vue fondamental. Les fluctuations, transitions de phase ou de forme, fusion membranaire ou vésiculation sont autant de phénomènes complexes passionnants pour les physiciens [9 – 11]. D'autre part, la « bicouche lipidique » est la base de construction élémentaire de tous les organismes vivants, puisqu'elle constitue la trame de la paroi des cellules. Les membranes cellulaires sont formées par une bicouche de phospholipide combinée avec une variété de protéines et de cholestérol. Ces derniers assurent, particulièrement, la fluidité des bicouches. Un phospholipide est une molécule amphiphile qui possède

une tête polaire hydrophile qui est toujours en contact avec le milieu aqueux, et deux chaînes carboniques hydrophobes qui sont protégées de ce milieu.

Les phospholipides se déplacent librement dans la bicouche membranaire, dont l'épaisseur est de l'ordre de 50 Angströms. En fait, ces deux propriétés permettent de considérer la biomembrane comme un fluide à deux dimensions. La biomembrane peut avoir une variété de formes et de topologies [9], qui ont été expliquées en terme de l'énergie de courbure [10, 11].

A ce titre, elles suscitent l'intérêt des biologistes et des biophysiciens. Cela s'explique, en grande partie, par l'attention croissante dont elles ont été l'objet, ces dernières décennies. Avec la molécule d'ADN, on peut même considérer qu'elles sont à l'origine de l'essor de la « biophysique ». Aujourd'hui, les physiciens sont de plus en plus sollicités pour aider à la compréhension du vivant. Dans cette perspective, les chercheurs essaient de travailler sur des systèmes modèles ayant des propriétés les plus proches possibles des membranes réelles. Que ce soit dans le cadre d'études fondamentales ou biomimétiques, trois types de systèmes sont principalement utilisés: les phases lamellaires, les vésicules et les bicouches uniques supportées sur un substrat solide.

Très souvent, les membranes biologiques se trouvent confinées dans des domaines avec des bords géométriques. Alors, comme première conséquence, ces bords interagissent avec la biomembrane confinée et modifient ses propriétés thermodynamiques. Dans ce travail, nous étudions précisément ces propriétés thermody-

namiques, en utilisant l'approche de l'équation de Schrödinger.

Ce chapitre est organisé comme suit. Au paragraphe 2, nous présentons le modèle d'une corde confinée. Au paragraphe 3, nous présentons une étude thermodynamique. Les conclusions sont retracées dans le dernier paragraphe.

5.2 Description du modèle

5.2.1 Formulation théorique

Dans les situations réelles, les biomembranes ne sont pas confinées dans les liquides à extension infinie, mais elle sont plutôt confinées dans des domaines avec des frontières géométriques, tels que les globules blancs et rouges ou des liposomes, comme vecteurs de transport de médicaments dans les vaisseaux sanguins [11 – 14]. Pour la simplicité, nous considérons la situation où la biomembrane considérée est confinée dans un domaine qui est fini dans une direction spatiale donnée; plus précisément, nous examinerons une biomembrane confinée entre deux substrats parallèles interactifs. Nous désignons par L , la séparation entre les deux plaques parallèles (taille géométrique), qui doit être naturellement comparée à la rugosité, ξ_{\perp} , de la biomembrane mesurant la taille typique de ses fluctuations thermiques. Ces fluctuations dépendent de la nature des molécules de lipide formant la bicouche. Notons que la biomembrane est confinée seulement quand la taille géométrique de ce domaine est beaucoup plus petite devant la rugosité. Cette condition est semblable à celle

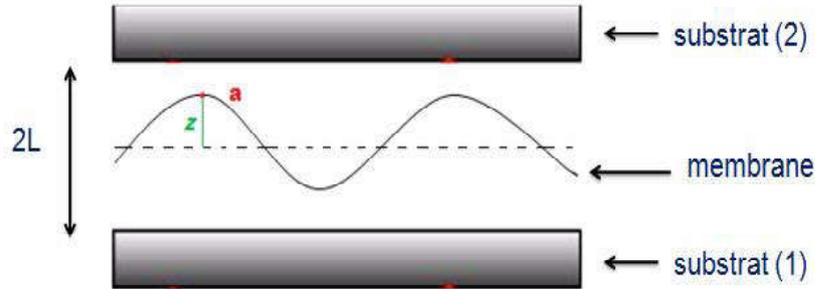


FIG. 5.1: *Confinement d'une corde entre deux substrats.*

habituellement rencontrée dans le contexte de la physique des polymères confinés [15].

Puisque les biomembranes et les cordes sont régies par des lois d'échelle similaires, il suffira de considérer uniquement le problème d'une corde confinée (FIG. 5.1), dans la même géométrie. Le point (a) sur la corde est situé à une distance z du substrat (1), et à une distance $L - z$ du substrat (2). Ici, z et $L - z$ sont les positions du point (a), par rapport aux deux substrats dans la direction perpendiculaire. Pour la simplicité, nous supposons que les deux surfaces sont physiquement identiques. Nous remarquons que l'interaction sentie par le point (a) sur la corde confinée est similaire à l'interaction sentie par l'atome d'hydrogène dans la molécule HO_2 faisant partie de l'acide chromique (CrO_2H) [16]. Alors, nous désignons par $V(z)$, le potentiel d'interaction exercé par un substrat sur la corde, en l'absence de l'autre. Habituellement, $V(z)$ est la somme de deux potentiels, l'un est répulsif et l'autre

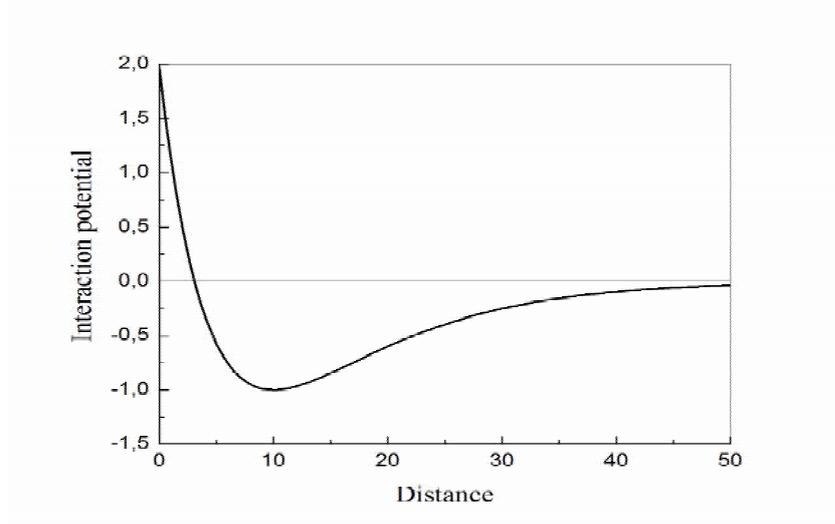


FIG. 5.2: *Potentiel de Morse standard, en fonction de la distance.*

est attractif. Un exemple typique est fourni par le potentiel de Morse.

Rappelons, tout d'abord, l'expression unidimensionnelle du Potentiel de Morse (PM) standard (FIG. 5.2), choisi pour cette étude [17 – 19], pour une biomembrane fluctuante au voisinage d'un substrat. Nous notons que le PM est souvent utilisé pour décrire le mouvement de vibration des molécules diatomiques, dont l'expression est donnée par l'équation (2.9) du Chapitre 2.

5.2.2 Potentiel de Morse double

Dans le cas d'une biomembrane confinée, le potentiel choisi est un *potentiel de Morse double* (PMD) (FIG. 5.3), qui est une combinaison de deux PM standard exercés séparément par les deux plaques,

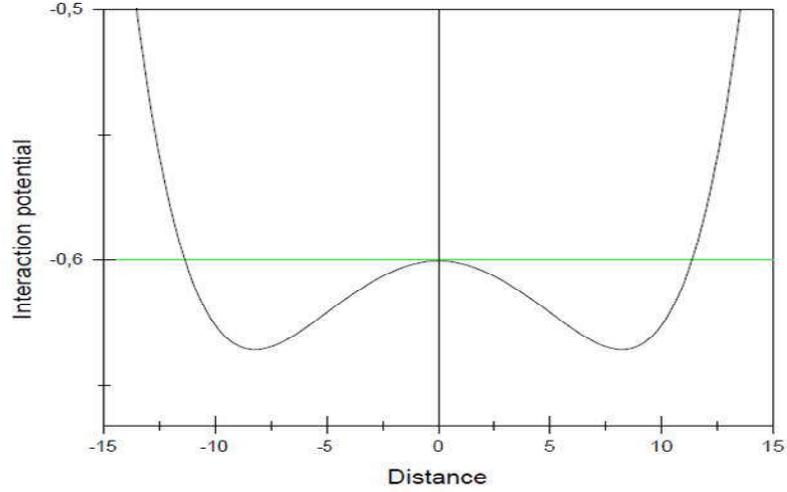


FIG. 5.3: Variation du potentiel de Morse Double en fonction de la distance.

$$U(z) = D \left[\frac{A^2}{2} \cosh [2\alpha (L - z)] - 2A \cosh [\alpha (L - z)] \right], \quad (5.1)$$

avec $A = 2e^{-\alpha(L-z_m)}$. Ici, D et α sont les paramètres usuels du PM. z_m est la coordonnée du point minimum de ce dernier, et z représente le déplacement d'un point sur la corde entre les deux substrats. Nous remarquons que le potentiel $U(z)$ admet un maximum pour $z = L$ et deux minima si est seulement si $A < 1$. Ces minima sont localisés aux valeurs suivantes

$$z_{\pm} = L - \alpha^{-1} \ln \zeta, \quad (5.2)$$

avec

$$\zeta = \frac{1 \pm \sqrt{1 - A^2}}{A} . \quad (5.3)$$

Ces deux minima existent, si et seulement si $A < 1$. La condition $\ln \zeta > 0$ est alors assurée. L'égalité $A = 1$ définit une valeur critique, L_c , de la séparation L , à savoir

$$L_c = z_m + \alpha^{-1} \ln 2 . \quad (5.4)$$

Donc, ces minima existent, si et seulement si $L > L_c$. Mais pour $L < L_c$, ils disparaissent et l'on a uniquement un *seul* extrémum qui est un minimum situé à $z = L/2$ (milieu du film). Pour $L > L_c$, l'on a un *seul* minimum à $z = L_c/2$, qui est aussi un *point d'inflexion* du potentiel d'interaction.

La FIG. 5.4 représente la variation du PMD, pour les trois cas possible de la distance critique L_c .

5.3 Etude thermodynamique

5.3.1 Equation de Schrödinger

Nous montrons que l'équation de Schrödinger unidimensionnelle décrivant le système, est donnée comme suit

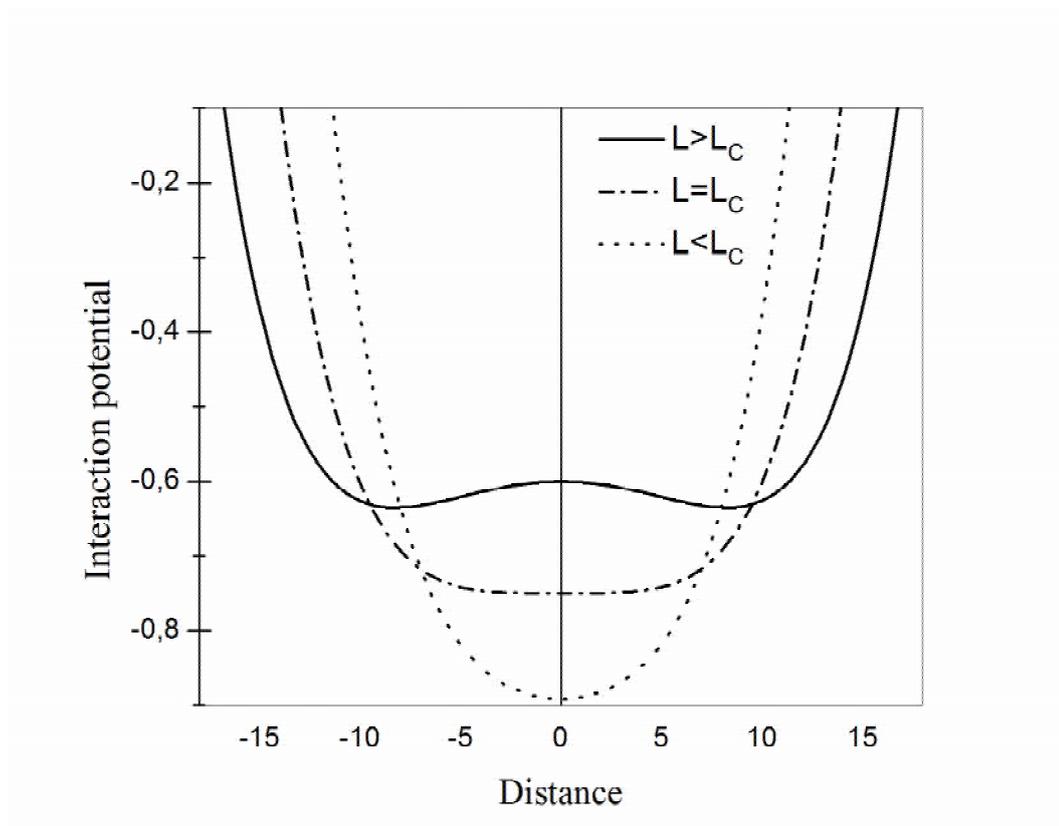


FIG. 5.4: Allure du PMD réduit, $U(z)/2D$, en fonction de la distance, pour différentes valeurs de la longueur L .

$$\varphi''(z) + \frac{2\sigma}{(k_B T)^2} \left[E - D \left(\frac{A^2}{2} \cosh(2\alpha z) - 2A \cosh(\alpha z) \right) \right] \varphi(z) = 0, \quad (5.5)$$

avec $z \in]-\infty, +\infty[$.

Ici, σ est la tension de la corde et T est la température absolue. Dans cette équation, E est l'énergie et $\varphi(z)$ est la fonction d'onde correspondante qui satisfait la condition aux limites

$$\varphi(\pm\infty) = 0. \quad (5.6)$$

Mettons la solution de cette équation sous la forme

$$\varphi(u) = e^{-Au\sqrt{\gamma}} \phi(u), \quad u = \cosh(\alpha z). \quad (5.7)$$

En substituant la forme (5.7) dans l'Eq. (5.5), l'on obtient

$$\begin{aligned} & (u^2 - 1) \phi''(u) + (-2A\sqrt{\gamma}u^2 + u + 2A\sqrt{\gamma}) \phi'(u) + Au(2\gamma - \sqrt{\gamma}) \phi(u) \\ &= \left(\frac{\gamma A^2}{2} - \zeta \right) \phi(u), \end{aligned} \quad (5.1)$$

avec les notations

$$\gamma = \frac{2\sigma D}{\alpha^2 (k_B T)^2}, \quad \zeta = \frac{2\sigma E}{\alpha^2 (k_B T)^2}. \quad (5.9)$$

5.3.2 Etats liés du PMD

Nous montrons que l'équation différentielle (5.8) est quasi-exactement soluble, avec

$$\phi(u) = \prod_{i=1}^n (u - u_i) , \quad (5.10)$$

où les u_i ($1 \leq i \leq n$) sont des racines de certains polynômes connus. Alors, les valeurs exactes des énergies associées sont données par

$$\zeta_n = 2A\sqrt{\gamma} \sum_{i=1}^n u_i + \frac{\gamma A^2}{2} - n^2 , \quad (5.11)$$

où les fonctions d'ondes correspondantes s'écrivent

$$\varphi_n(u) = e^{-Au\sqrt{\gamma}} \prod_{i=1}^n (u - u_i) , \quad u = \cosh(\alpha z) . \quad (5.12)$$

avec la contrainte $\sqrt{\gamma} = (n + 1/2)$.

La valeur $n = 0$ correspond à l'état fondamental,

$$E_0 = \frac{(k_B T)^2 \alpha^2 A^2 \gamma}{4\sigma} , \quad \varphi_0(u) = N e^{-Au\sqrt{\gamma}} . \quad (5.13)$$

Ici N est une constante de normalisation.

5.3.3 Densité d'énergie libre et chaleur spécifique

La densité d'énergie libre est donnée par l'expression :

$$f = E_0 = \frac{(k_B T)^2 \alpha^2 A \gamma}{4\sigma} . \quad (5.14)$$

De cette énergie, nous extrayons la valeur de la chaleur spécifique de la corde qui s'obtient en dérivant deux fois cette énergie par rapport à la température, soit

$$C = -T \frac{\partial^2 f}{\partial T^2} = \frac{2}{\sigma} \left(\frac{k_B \alpha A}{4} \right)^2 T . \quad (5.15)$$

La chaleur spécifique varie alors *linéairement* en fonction de la température.

5.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons proposé un modèle qui nous a permis de déterminer la thermodynamique d'une biomembrane confinée, en utilisant l'approche de l'équation de Schrödinger, et en adoptant un potentiel de Morse double. La résolution exacte de cette équation nous a donné l'énergie libre, par la suite nous avons extrait la chaleur spécifique du système.

Bibliographie

- [1] R. El Kinani, M. Benhamou, H. Kaïdi, *Statistical Mechanics of Confined Biological Materials*, à apparaître dans *IOP Conference on Materials Science and Engineering*, 2016.
- [2] M.S. Bretscher, S. Munro, *Cholesterol and the Golgi Apparatus*, *Science* **261**, 1280 (1993).
- [3] J. DAI, M.P. Sheetz, *Cell Membrane Mechanics*, *Methods in Cell Biology* **55**, 157 (1998).
- [4] M. Edidin, *Lipid Microdomains in Cell Surface Membranes*, *Current Opinion in Structural Biology* **7**, 528 (1997).
- [5] C.R. Hackenbrock, *Lateral Diffusion and Electron Transfer in the Mitochondrial Inner Membrane*, *Trends in Biochemical Sciences* **6**, 151 (1981).
- [6] C. Stanford, *The Hydrophobic Effect*, Second edition, Wiley, 1980.

- [7] D.E. Vance, J. Vance, (ed.), *Biochemistry of Lipids, Lipoproteins, and Membranes*, Elsevier, 1996.
- [8] F. Zhang, G.M. Lee, K. Jacobson, *Protein Lateral Mobility as a Reflection of Membrane Microstructure*, *Bioessays* **15**, 579 (1993).
- [9] S. Safran, *Statistical Thermodynamics of Surfaces, Interfaces and Membranes*, Addison-Wesley, Reading, MA, 1994.
- [10] W. Helfrich, *Elastic Properties of Lipid Bilayers: Theory and Possible Experiments*, *Zeitschrift für Naturforschung C* **28**, 693 (1973).
- [11] U. Seifert, *Configurations of Fluid Membranes and Vesicles*, *Advances in Physics* **46**, 13 (1997).
- [12] H. Ringsdorf, B. Schmidt, *How to Bridge the Gap Between Membrane Biology and Polymer Science, Synthetic Membranes: Science, Engineering and Applications*, Springer, Netherlands, pp. 701-712, (1986).
- [13] D. Lasic, *Liposomes*, *American Scientist* **80**, 20 (1992).
- [14] V.P. Torchilin, *Effect of Polymers Attached to the Lipid Head Groups on Properties of Liposomes*, *Handbook of Nonmedical Applications of Liposomes*, Vol. 1, 1996.
- [15] R. Joannic, L. Auvray, D.D. Lasic, *Monodisperse Vesicles Stabilized by Grafted Polymers*, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 3402 (1997).

- [16] A. Christensen, P. Hansen, M. S. Lehmann, *Isotope Effects in the Bonds of $3b2\text{-CrOOH}$ and $3b2\text{-CrOOD}$* , Journal of Solid State Chemistry **19**, 299 (1976).
- [17] M. Asfaw, *Unbinding Transitions of Membranes and Strings from Single and Double-Well Potential*, Physica A **387**, 3526 (2008).
- [18] P.M. Morse, *Diatomic Molecules According to the Wave Mechanics. II. Vibrational levels*, Phys. Rev. **34**, 57 (1929).
- [19] G. Herzberg, *Molecular Spectra and Molecular Structure I. Spectra of Diatomic Molecules*, Van Nostrand-Reinhold, New-York, 1950.

Conclusion générale

Dans cette thèse, nous avons fixé comme objectif l'étude de la Mécanique Statistique des matériaux biologiques. Plus exactement, nous étions intéressés par des études étendues du phénomène du déliaison des membranes biologiques en équilibre, qui les amène d'un état où elles sont très proches l'une de l'autre à un état complètement séparé. Généralement, une telle transition est induite par les fluctuations thermiques des deux membranes, induisant ainsi une force répulsive (dite force stérique d'Helfrich). Cette force est dominante à haute température. Par contre à basse température, c'est plutôt la force de van der Waals qui prend le dessus.

La transition de déliaison a été largement étudiée dans la littérature, aussi bien du point de vue théorique qu'expérimental. Au niveau théorique, cette transition a récemment été approchée par le Groupe de Renormalisation et par la méthode variationnelle.

Les études menées dans cette thèse ont été réalisées en adoptant une approche empruntée à la Mécanique Quantique, qui est la *Méthode de la Matrice de Transfert* (MMT).

Le but était de faire une étude analytique de la transition de déliaison subie par les manifolds (cordes ou biomembranes), avec des potentiels dits de Morse. Pour cela, nous avons fait usage de la MMT, qui est basée sur la résolution d'une équation de Schrödinger, dont les solutions sont des états liés, indispensables pour assurer que les manifolds interagissants restent à une distance finie l'un de l'autre.

Nous avons d'abord considéré le potentiel de Morse standard. Dans ce cas, nous avons déterminé exactement l'expression de l'état fondamental et l'énergie correspondante, à partir duquel, nous avons extrait la probabilité de contact. A l'aide de cette dernière, nous étions en mesure de déduire deux quantités fondamentales très importantes, à savoir la séparation moyenne entre les deux manifolds ainsi que leur rugosité.

L'annulation de l'énergie de l'état fondamental donne la température où a lieu la transition de déliaison. Il a été trouvé que les deux échelles de longueur divergent à la transition, avec un exposant de rugosité critique *exact*. Aussi, nous avons déduit l'expression exacte de la densité d'énergie libre, qui s'identifie avec l'énergie de l'état fondamental. De cette expression, nous avons déduit la valeur de la pression de disjonction, qui est la pression nécessaire pour maintenir les deux manifolds adjacents à une certaine distance moyenne. La variation de cette pression, en fonction de la température, décrit l'équation d'état.

Nous avons, ensuite, mené une étude exacte de la thermodynamique de la transition de déliaison, avec cette fois-ci un potentiel de Morse généralisé, qui dépend

également de trois paramètres ajustables. Ce dernier semble être plus adéquat que le potentiel de Morse standard, du fait qu'il devient infini à l'origine. Aussi, pour ce potentiel, nous avons identifié d'abord la température de déliaison, et calculé exactement la séparation moyenne et la rugosité des manifolds, ainsi que la densité d'énergie libre. Le résultat fondamental est que les exposants critiques sont universels, indépendamment de la forme du potentiel de Morse choisi c'est l'universalité.

La troisième contribution est une extension naturelle des premier et deuxième travaux, dans laquelle nous avons considéré une paire de cordes en interaction pouvant fluctuer thermiquement autour d'une ligne de référence. Nous avons supposé que les deux cordes interagissent via un potentiel de Morse q -déformé qui reproduit bien les caractéristiques de l'interaction réelle.

Comme quatrième contribution, nous avons proposé un modèle pour étudier la Mécanique Statistique d'une biomembrane confinée qui fluctue entre deux substrats plans interactifs. Du point de vue lois d'échelle, les biomembranes et les cordes sont assez proches. Il est donc suffisant de considérer uniquement le problème d'une corde. Nous avons supposé que la biomembrane interagit avec les substrats via un *potentiel de Morse double*. Nous avons montré, également, que la Mécanique Statistique de la corde peut être convenablement décrite par l'approche de l'équation de Schrödinger que nous avons résolu exactement par la méthode de Bethe. Ensuite, à partir de la valeur exacte de l'énergie de l'état fondamental, nous avons extrait

l'expression de la densité d'énergie libre, ainsi que celle de la chaleur spécifique de la corde.

Enfin la conclusion principale est que ces études analytiques que nous avons menées, révèlent que les potentiels de Morse constituent des bons candidats, pour la description du phénomène du déliaison des cordes et des biomembranes.

D'autres questions en relation avec le sujet sont en cours de considération, comme, par exemple, l'influence de la présence d'une biomembrane sur la température de dénaturation des molécules d'ADN.

Annexe: Articles publiés