

Transition de phase entropique dans un système de bâtonnets

Yvan Velenik

en collaboration avec D. Ioffe et M. Zahradník

<http://www.cmi.univ-mrs.fr/~velenik>

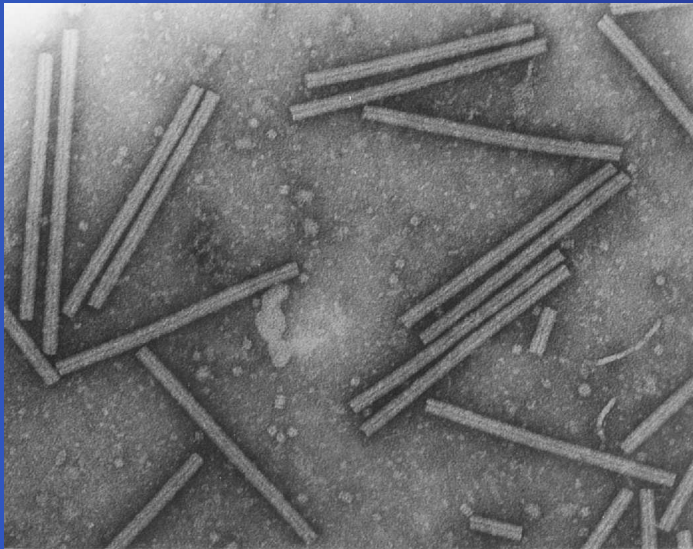
velenik@cmi.univ-mrs.fr

C.N.R.S. et Université de Provence

Phase nématique des cristaux liquides

Système de longues molécules rigides.

Exemple: Virus de la mosaïque du tabac



Taille typique:
 $300\text{nm} \times 18\text{nm}$

Phase nématique: ordre orientationnel (cristal), mais désordre translationnel (liquide)

Phase nématique des cristaux liquides

Onsager (1949): la transition isotrope/nématique est due à un effet purement stérique

- Très longues (et fines) molécules avec coeur dur.
- La perte d'entropie orientationnelle est plus que compensée par le gain d'entropie positionnelle.
- \implies la phase ordonnée a une plus grande entropie que la phase désordonnée (“ordre par le désordre”).

Transition de phase entropique.

Résultats mathématiques antérieurs

Bricmont, Kuroda, Lebowitz (1984):

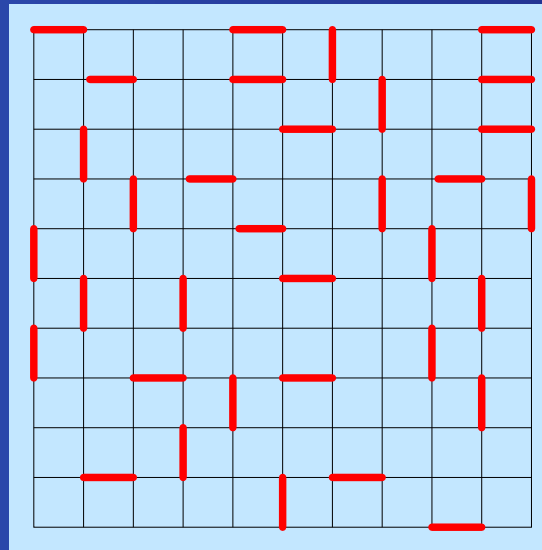
Existence d'une transition isotrope/nématique pour un système de segments unidimensionnels de longueur 1, horizontaux ou verticaux, dans le plan (équivalent à Widom-Rowlinson).

L'approche ne marche plus pour des bâtonnets d'épaisseur non-nulle.

Résultats mathématiques antérieurs

Heilmann, Lieb (1972):

Modèle de monomères-dimères.

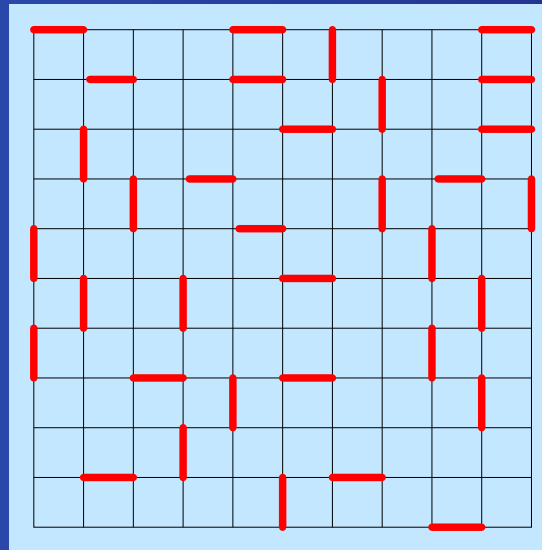


Poids d'une configuration ω dans $V \subseteq \mathbb{Z}^2$: $w(\omega) \propto z^{N_2(\omega)}$
 $z \in \mathbb{R}^+$, $N_2(\omega)$ = nombre de dimères dans ω .

Résultats mathématiques antérieurs

Heilmann, Lieb (1972):

Modèle de monomères-dimères.



Théorème: Pas de transition de phase.

Résultats mathématiques antérieurs

J. van den Berg (1999):

Preuve élémentaire du résultat d'Heilmann et Lieb (via “disagreement percolation”). Montre le caractère très spécial de ce modèle.

Obtient aussi des résultats plus forts (analyticité complète au sens de Dobrushin et Warstat).

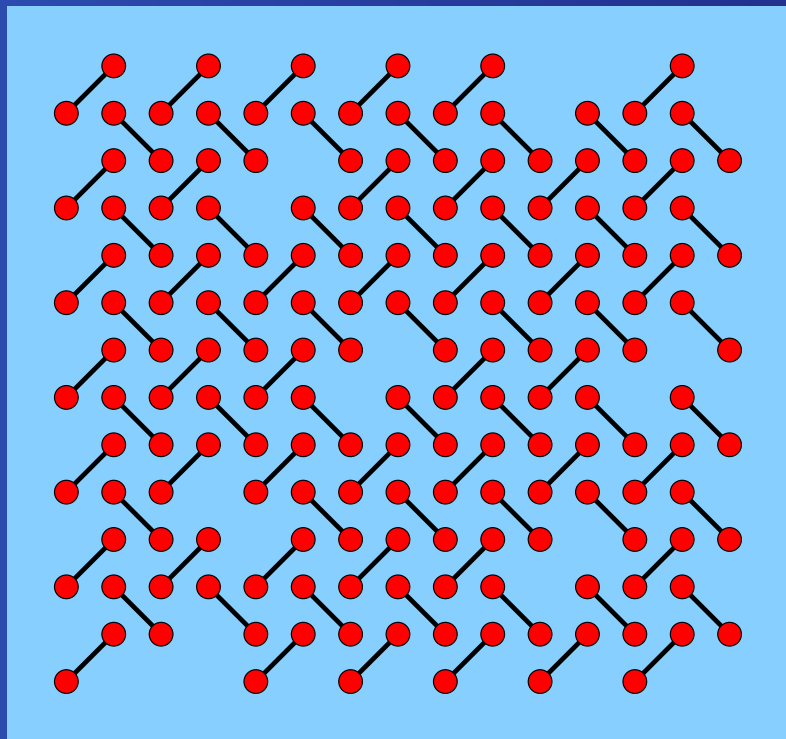
Résultats mathématiques antérieurs

Lebowitz, Gallavotti (1971), Heilmann (1972),
Huckaby (1977),:

Existence d'une phase ordonnée dans une variété de modèles avec coeur dur sur réseau. A chaque fois, l'ordre orientationnel s'accompagne d'un ordre translationnel: ce ne sont pas des cristaux liquides.

Résultats mathématiques antérieurs

Lebowitz, Gallavotti (1971), Heilmann (1972),
Huckaby (1977),:



Résultats mathématiques antérieurs

Heilmann, Lieb (1979):

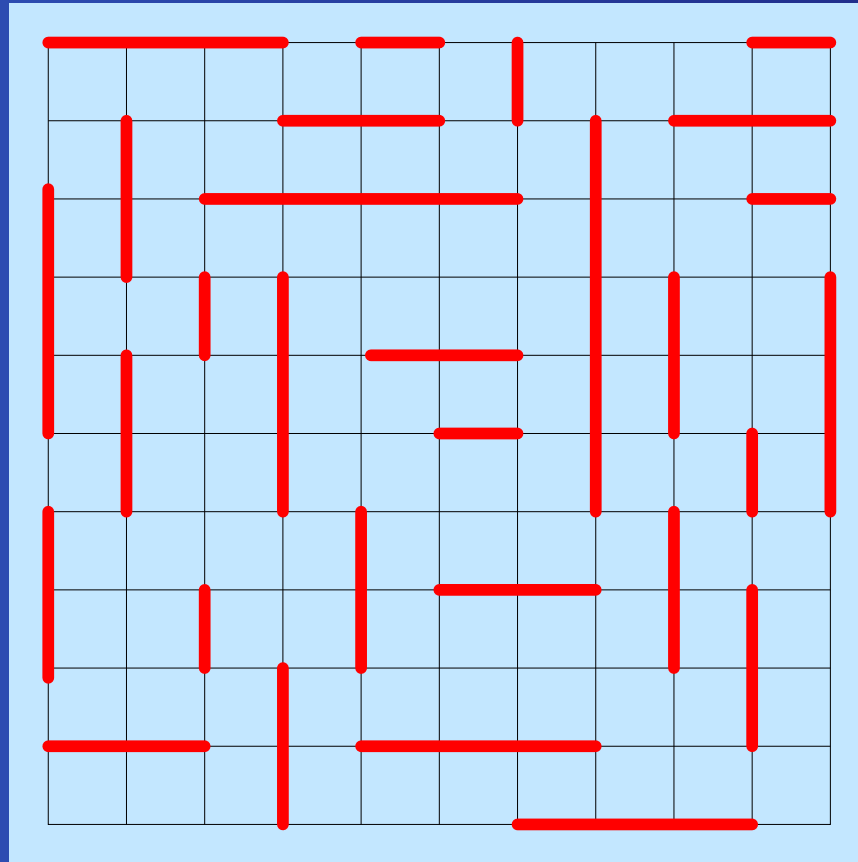
Variantes du modèle de monomères-dimères, avec un terme énergétique favorisant l'alignement. Existence d'une phase avec ordre orientationnel. Arguments heuristiques en faveur du désordre translationnel.

“[it is] doubtful [...] whether hard rods on a cubic lattice without any additional interaction do indeed undergo a phase transition”.

Notre modèle

- Bâtonnet: ensemble de k , $k \in \mathbb{N}$, sites p.p.v. alignés de \mathbb{Z}^2 .
- k -bâtonnet: bâtonnet de longueur k .
- Les 1-bâtonnets représentent les sites inoccupés.
- Configuration ω dans $V \subseteq \mathbb{Z}^2$: partition de V en bâtonnets disjoints.
- $N_k(\omega)$: Nombre de k -bâtonnets.

Notre modèle



Notre modèle

Poids d'une configuration ω :

$$w(\omega) \propto (2q)^{N_1(\omega)} q^{\sum_{k \geq 2} N_k(\omega)} 1_{\{N_k(\omega)=0 \ \forall k > M\}}$$

- $q \in \mathbb{R}^+$: fugacité.
- $M \geq 2$: taille maximale des bâtonnets.

Notre modèle

Poids d'une configuration ω :

$$w(\omega) \propto (2q)^{N_1(\omega)} q^{\sum_{k \geq 2} N_k(\omega)} 1_{\{N_k(\omega)=0 \ \forall k > M\}}$$

- $q \in \mathbb{R}^+$: fugacité.
- $M \geq 2$: taille maximale des bâtonnets.

Remarque: On peut éliminer la fugacité des trous en associant aux bâtonnets de longueur $k \geq 2$ une fugacité $q (2q)^{-k}$ au lieu de q .

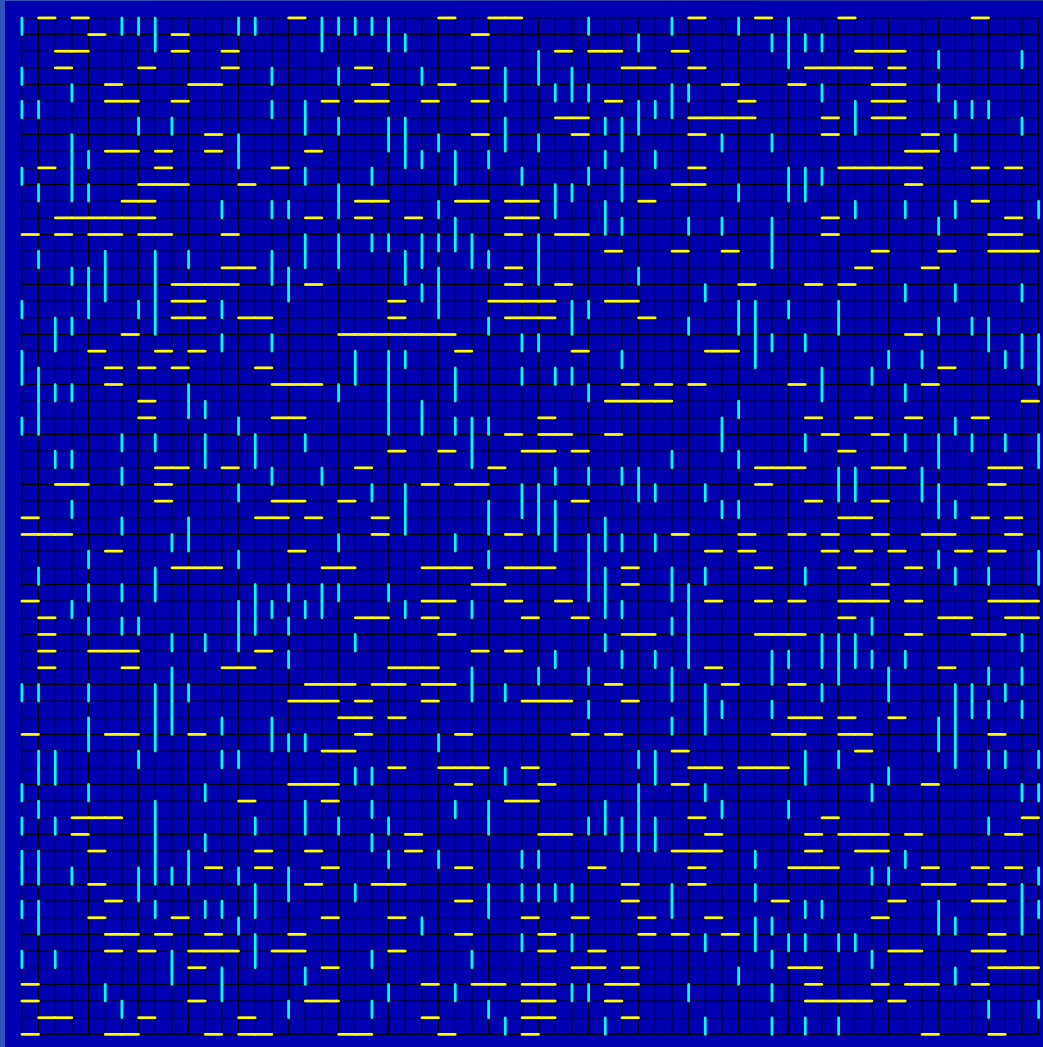
Résultats

$$M = \infty$$

Soit $q_c = 1/(2 + 2\sqrt{2}) \simeq 0,207$.

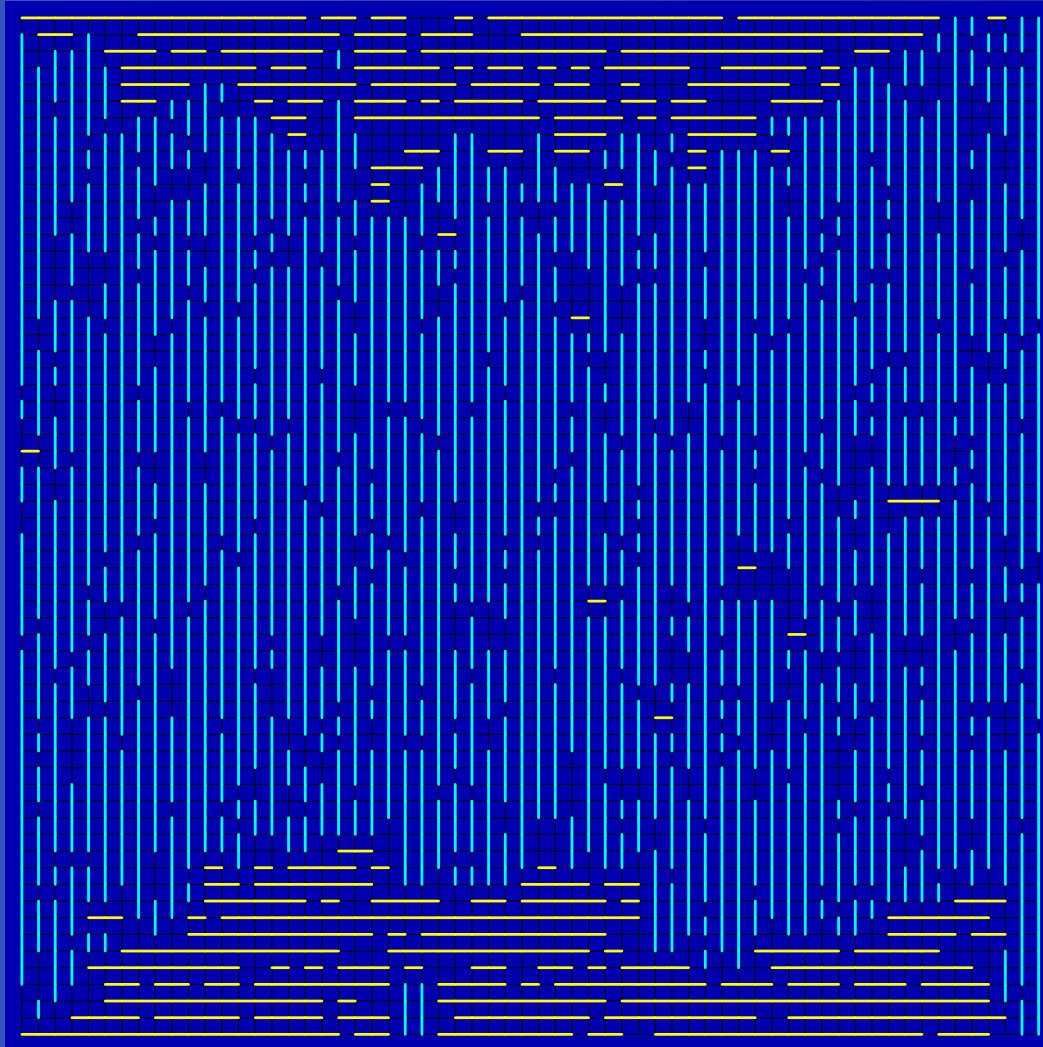
- Pour tout $q \geq q_c$, il y a un unique état de Gibbs (forcément isotrope).
- Pour tout $q < q_c$, il y a exactement 2 états de Gibbs extrémaux, avec ordre orientationnel, mais pas translationnel.

Résultats



$$q > q_c$$

Résultats



$$q < q_c$$

Résultats

$$2 \leq M < \infty$$

Il existe $0 < q_0 < \infty$ tel que:

- Pour tout $M \geq 2$ et $q \geq q_1(M)$, il y a un unique état de Gibbs (forcément isotrope).
- Pour tout $q < q_0$ et $M \geq M_0(q)$, il y a exactement 2 états de Gibbs extrémaux, avec ordre orientationnel, mais pas translationnel.

Preuve ($M = \infty$): les trous

Étape 1. Coloriage des trous en 2 espèces, horizontaux et verticaux. A chaque configuration ω d'origine, on associe $2^{N_1(\omega)}$ nouvelles configurations $\tilde{\omega}_i$, $i = 1, \dots, 2^{N_1(\omega)}$. Le poids de ces nouvelles configurations est

$$w(\tilde{\omega}_i) = 2^{-N_1(\omega)} w(\omega) = q^{N(\tilde{\omega}_i)}$$

$N(\tilde{\omega})$ = nombre de bâtonnets dans $\tilde{\omega}$.

Preuve ($M = \infty$): partition

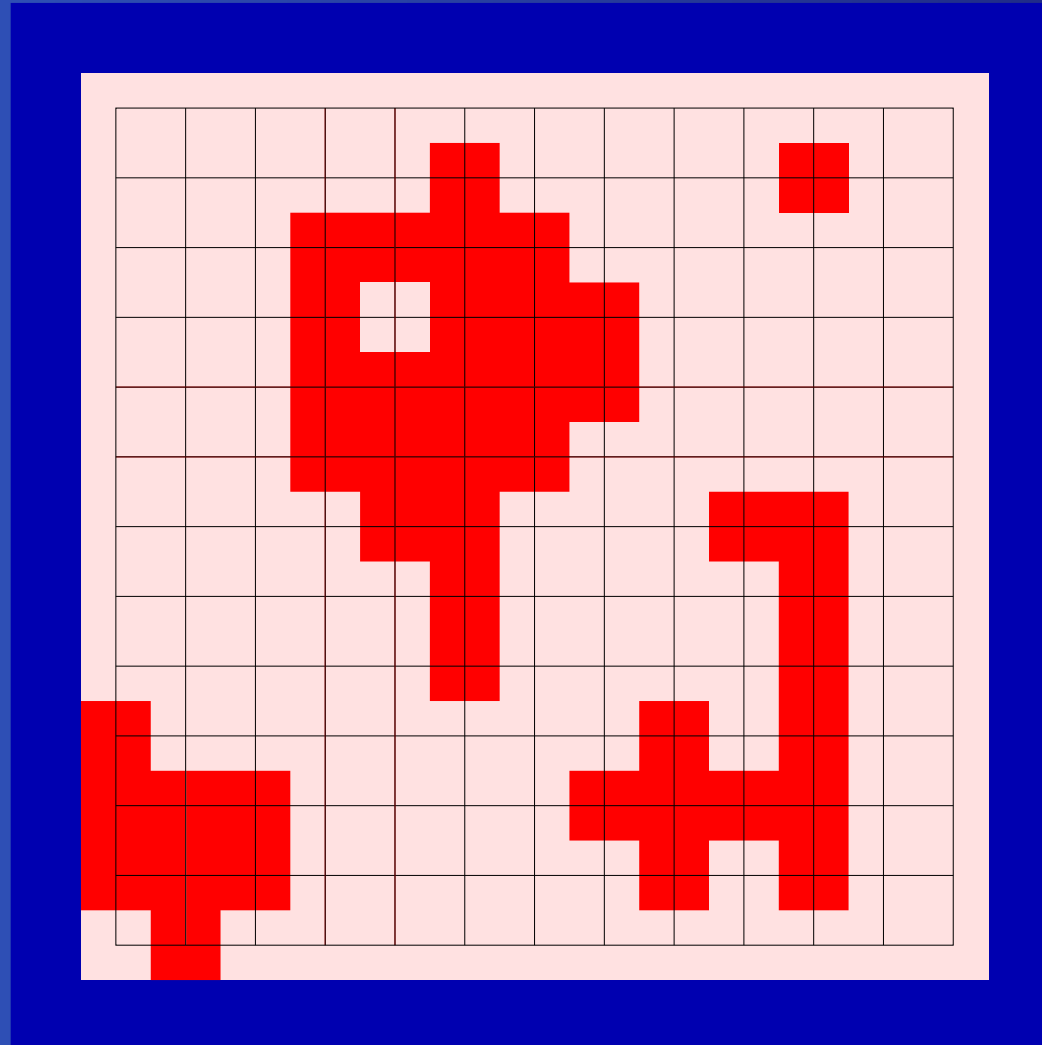
Étape 2. On partitionne la boîte $V \in \mathbb{Z}^2$,

$$V = V_h \vee V_v$$

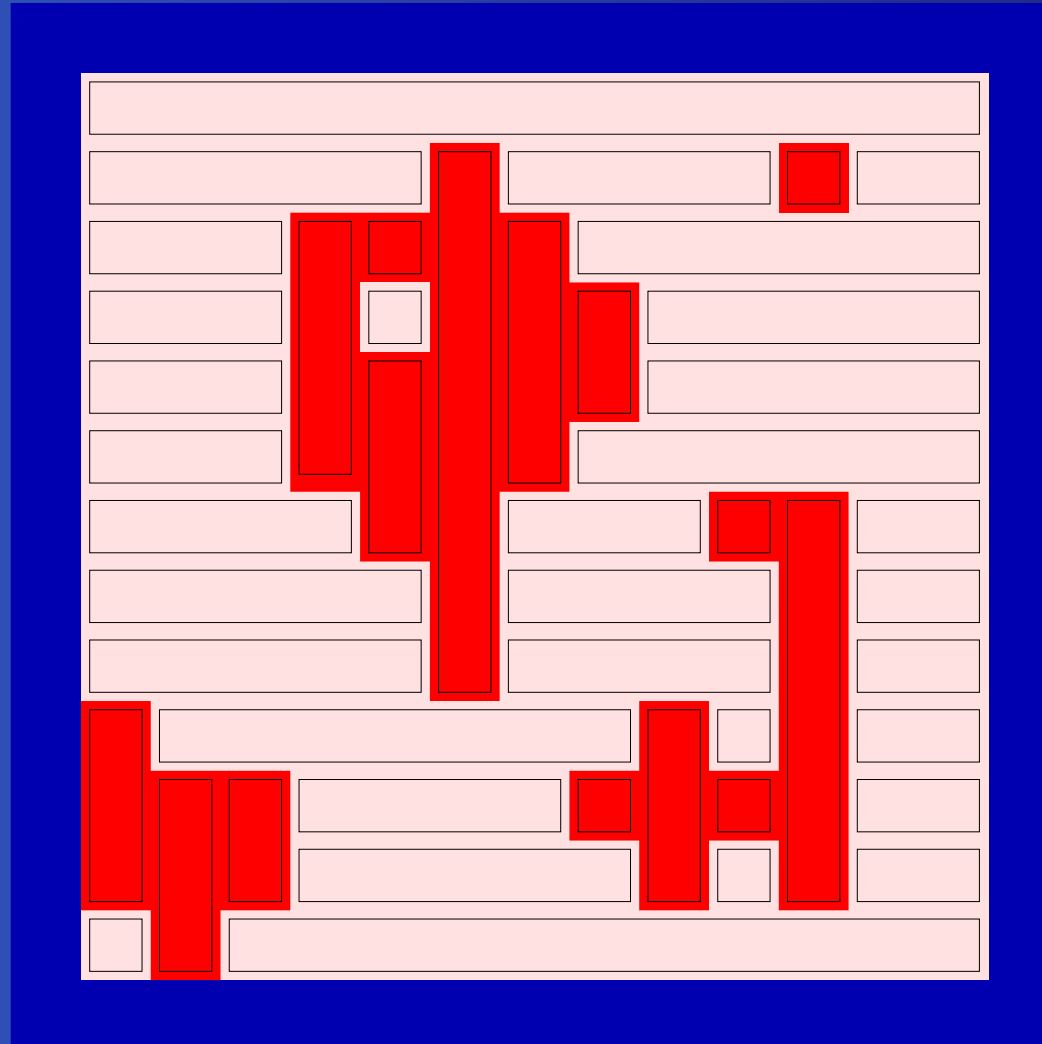
V_h = ensemble des sites appartenant à un bâtonnet horizontal

V_v = ensemble des sites appartenant à un bâtonnet vertical

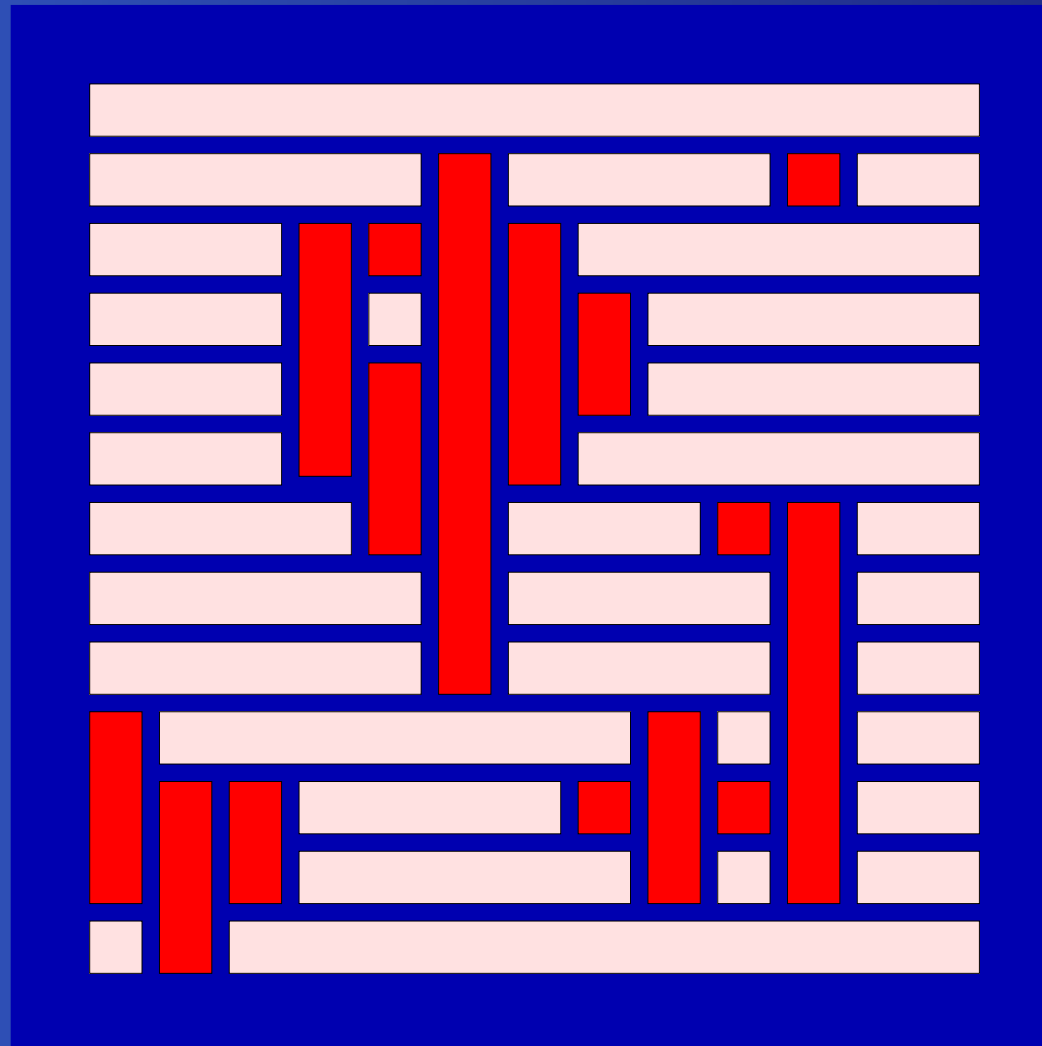
Preuve: ($M = \infty$): réduction



Preuve: ($M = \infty$): réduction



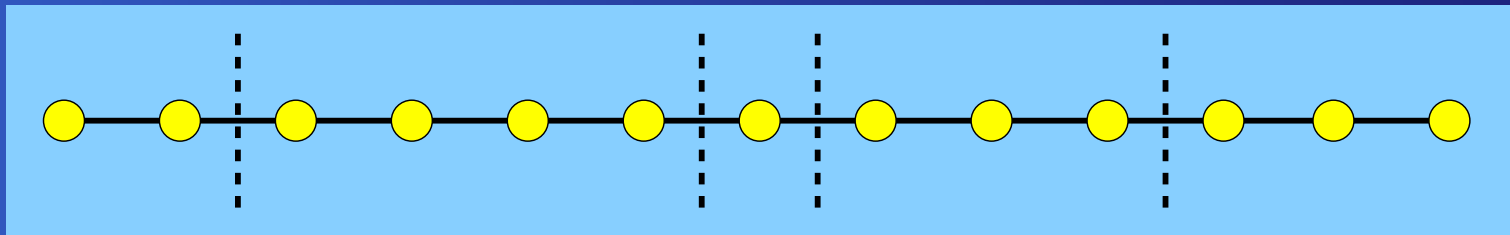
Preuve: ($M = \infty$): réduction



Preuve ($M = \infty$): problème 1D

On est conduit à étudier un problème unidimensionnel. La fonction de partition unidimensionnelle dans la boîte de longueur $n \geq 1$ est facile à calculer:

$$Z_n^{1D} = \sum_{k=0}^{n-1} \binom{n-1}{k} q^{k+1} = \frac{q}{1+q} (1+q)^n$$



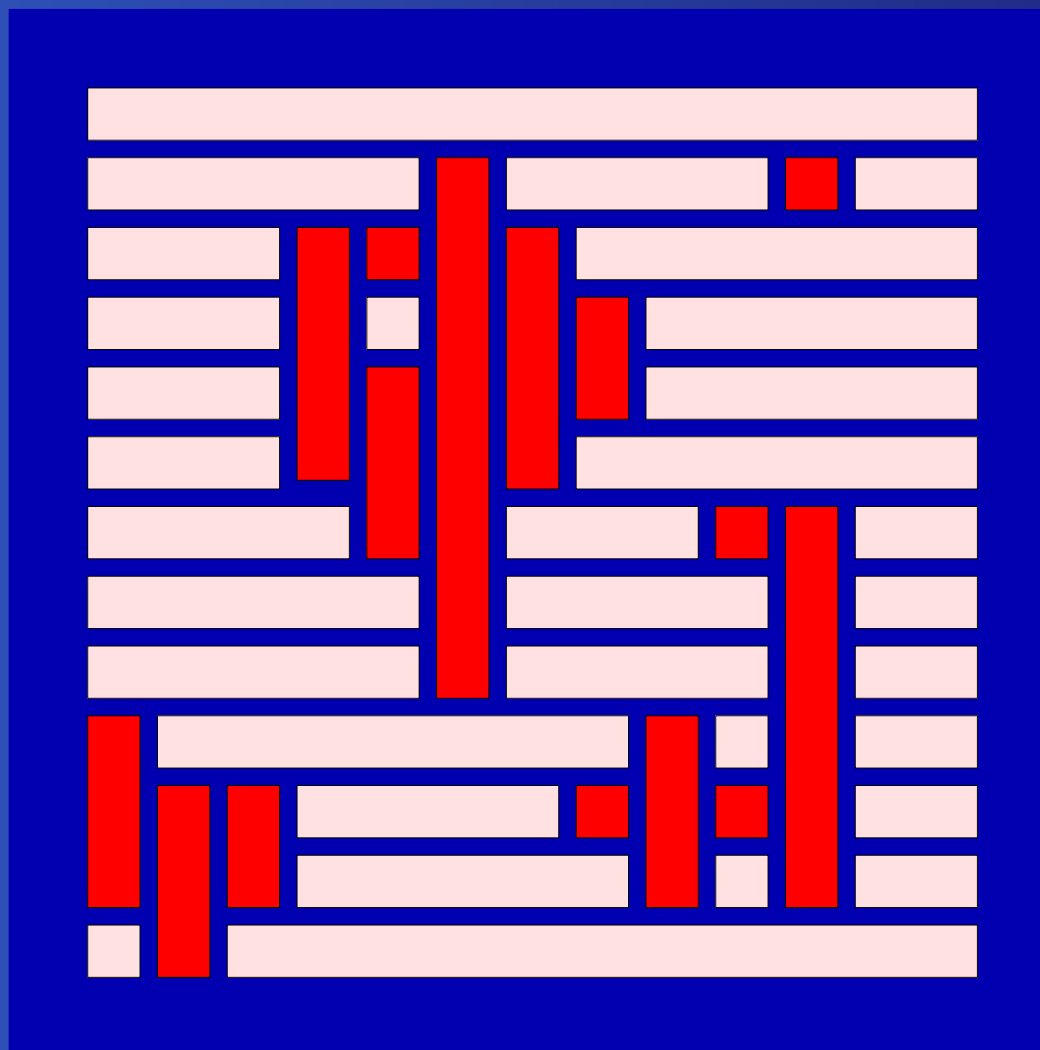
Preuve ($M = \infty$): poids des partitions

- Le facteur $(1 + q)^n$ ne joue aucun rôle, car le produit sur toutes les sous-boîtes unidimensionnelles dans V donne $(1 + q)^{|V|}$, qui est indépendant de la partition choisie.
- On peut ainsi associer à chaque sous-boîte unidimensionnelle une contribution

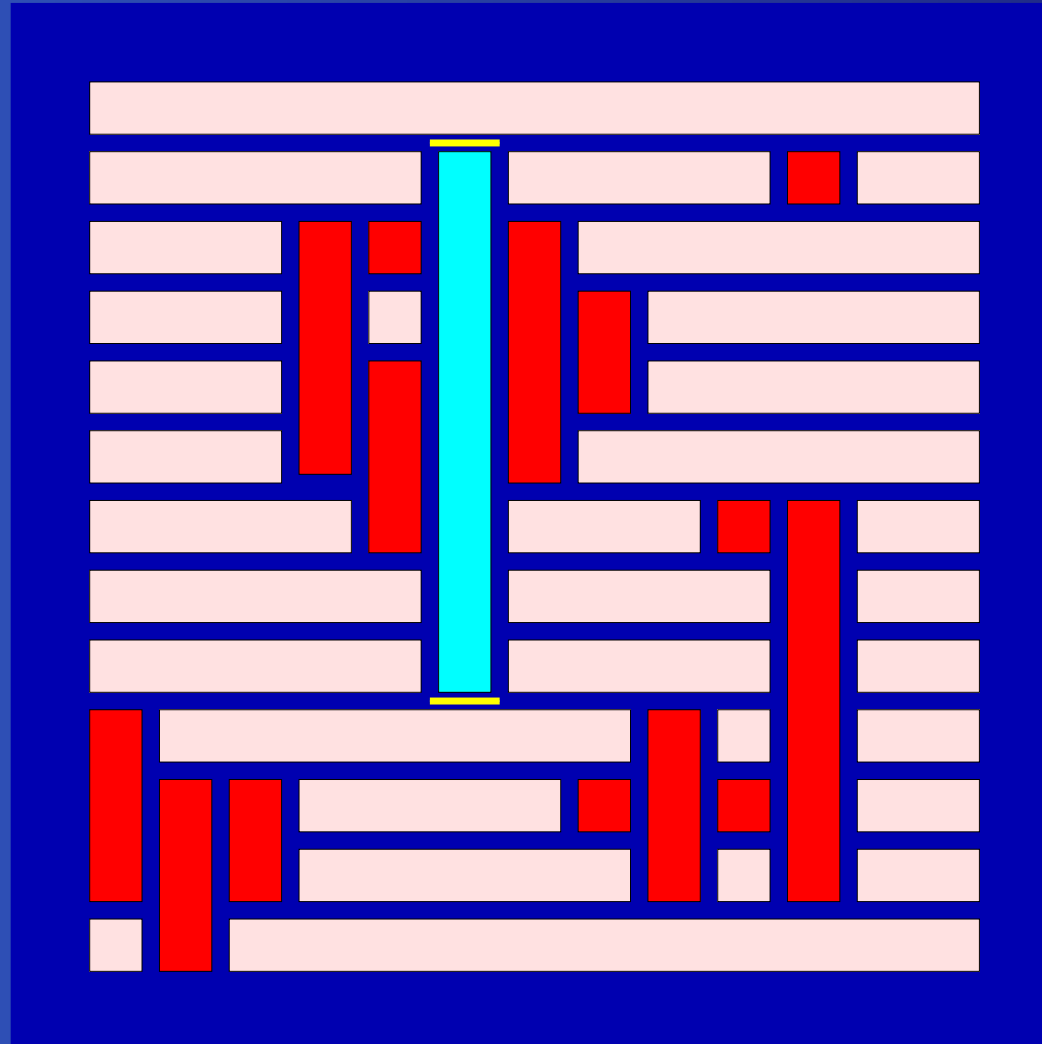
$$\frac{q}{1 + q} \equiv e^{-4\beta}$$

- Comme $q \in (0, \infty)$, on a aussi $\beta \in (0, \infty)$.

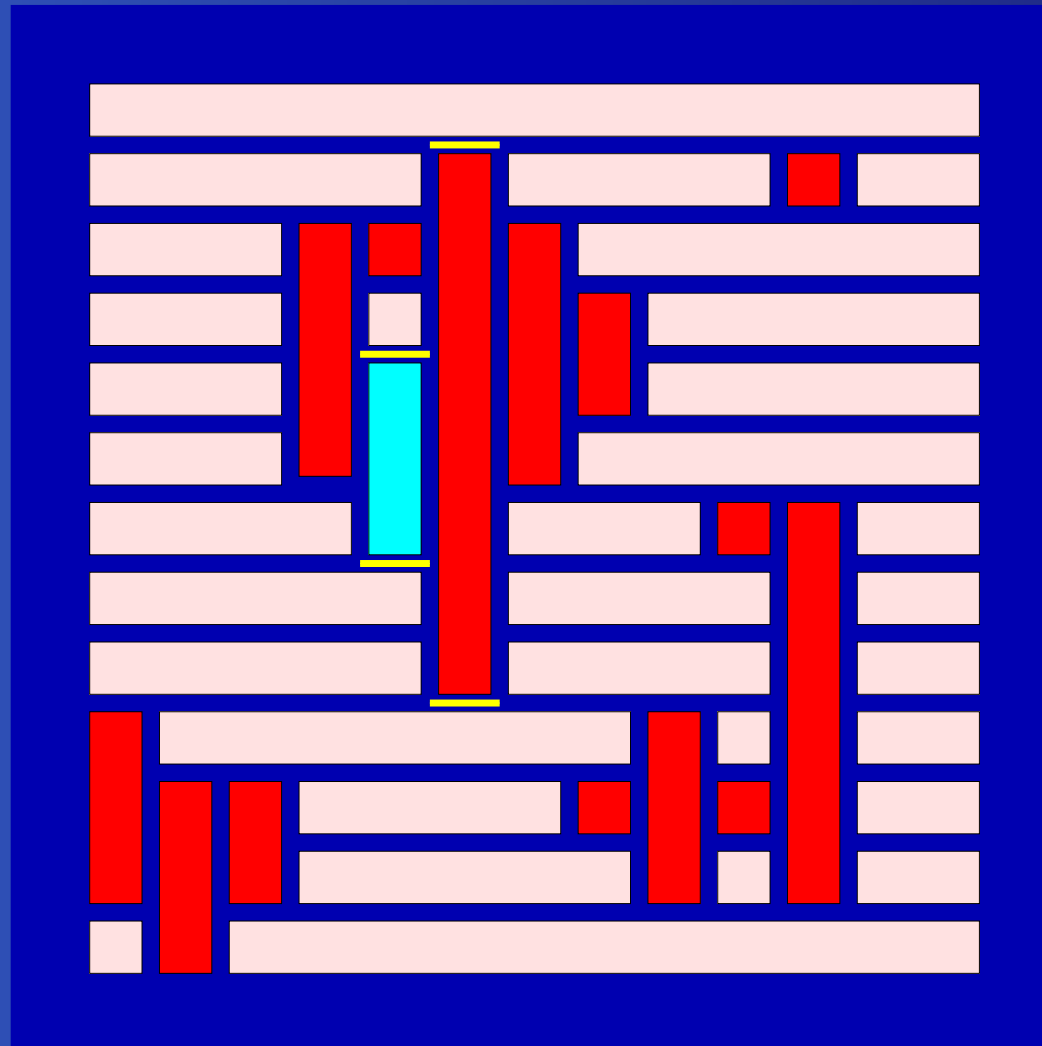
Preuve ($M = \infty$): poids des partitions



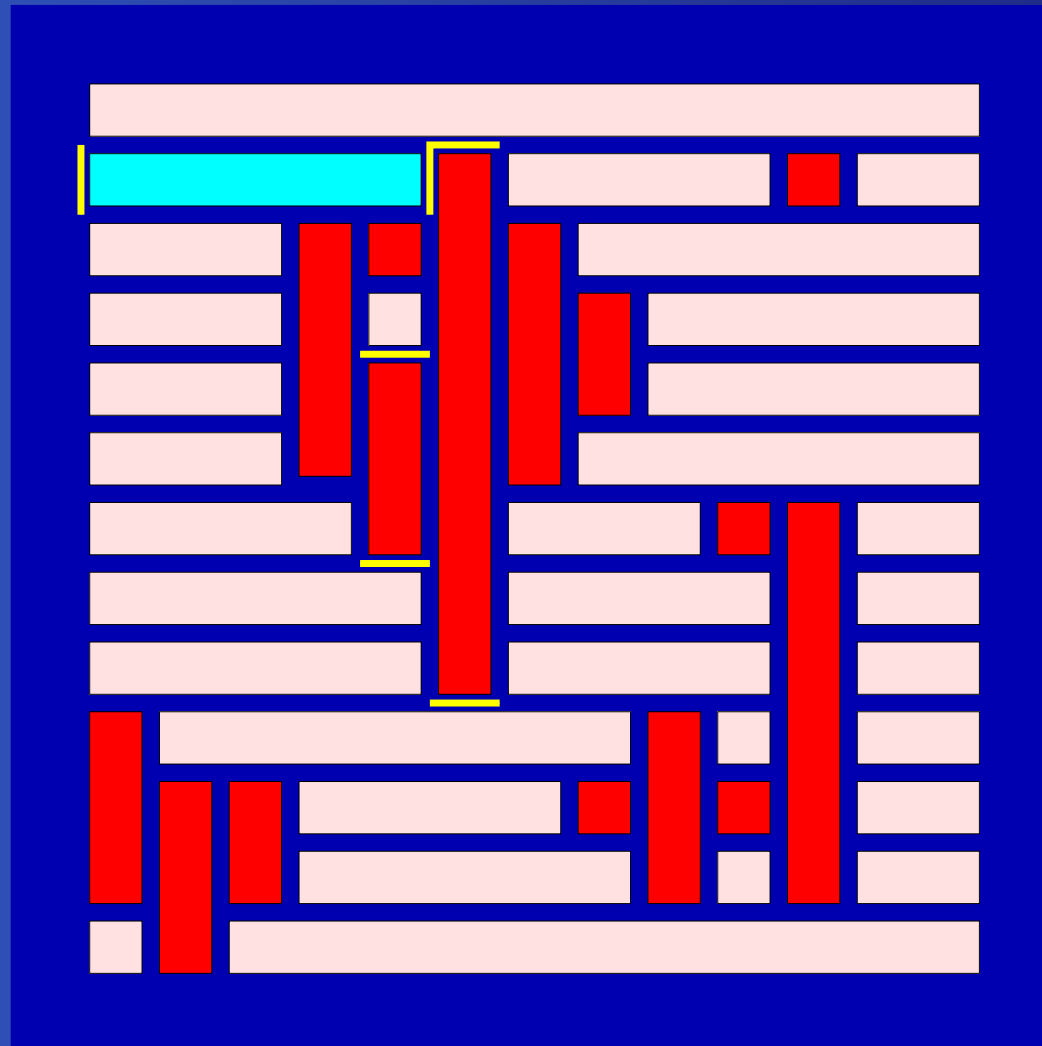
Preuve ($M = \infty$): poids des partitions



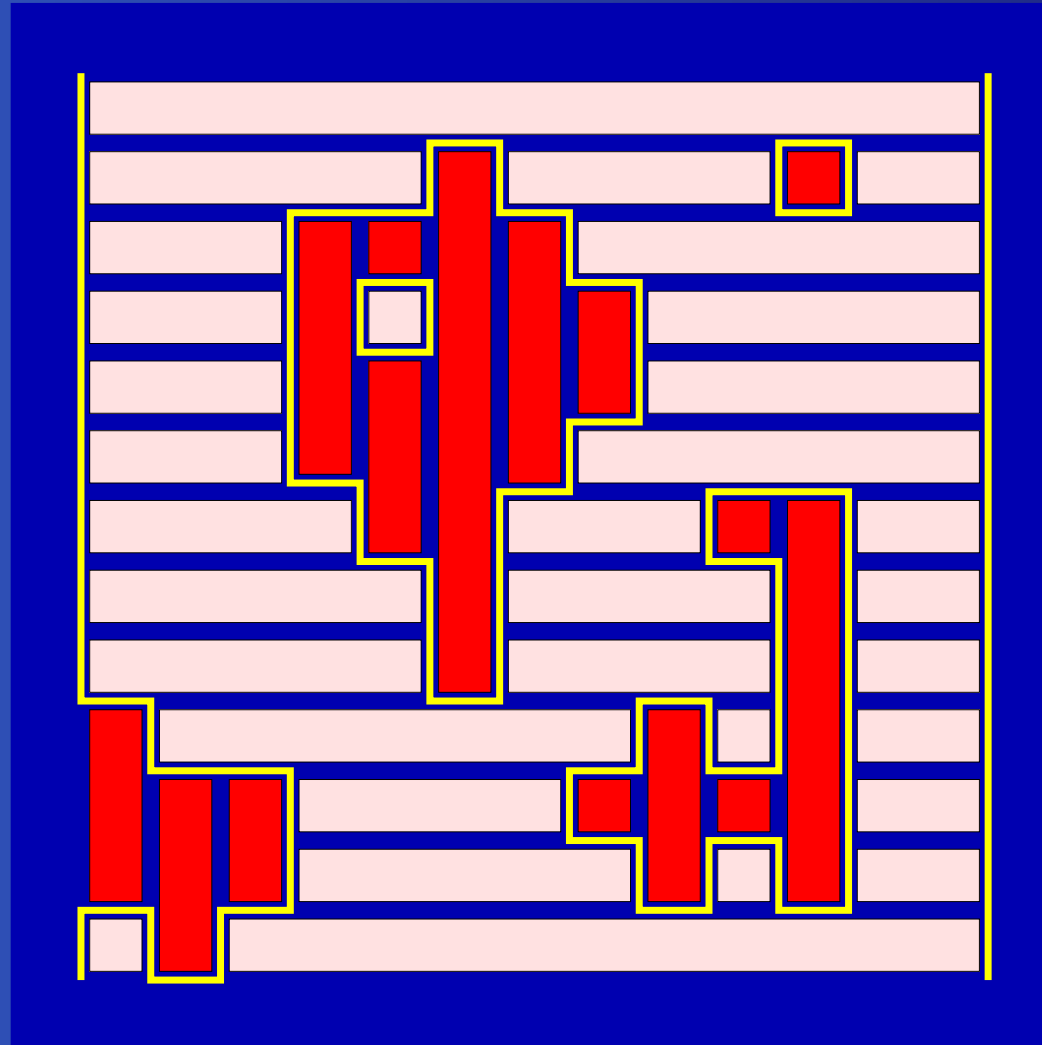
Preuve ($M = \infty$): poids des partitions



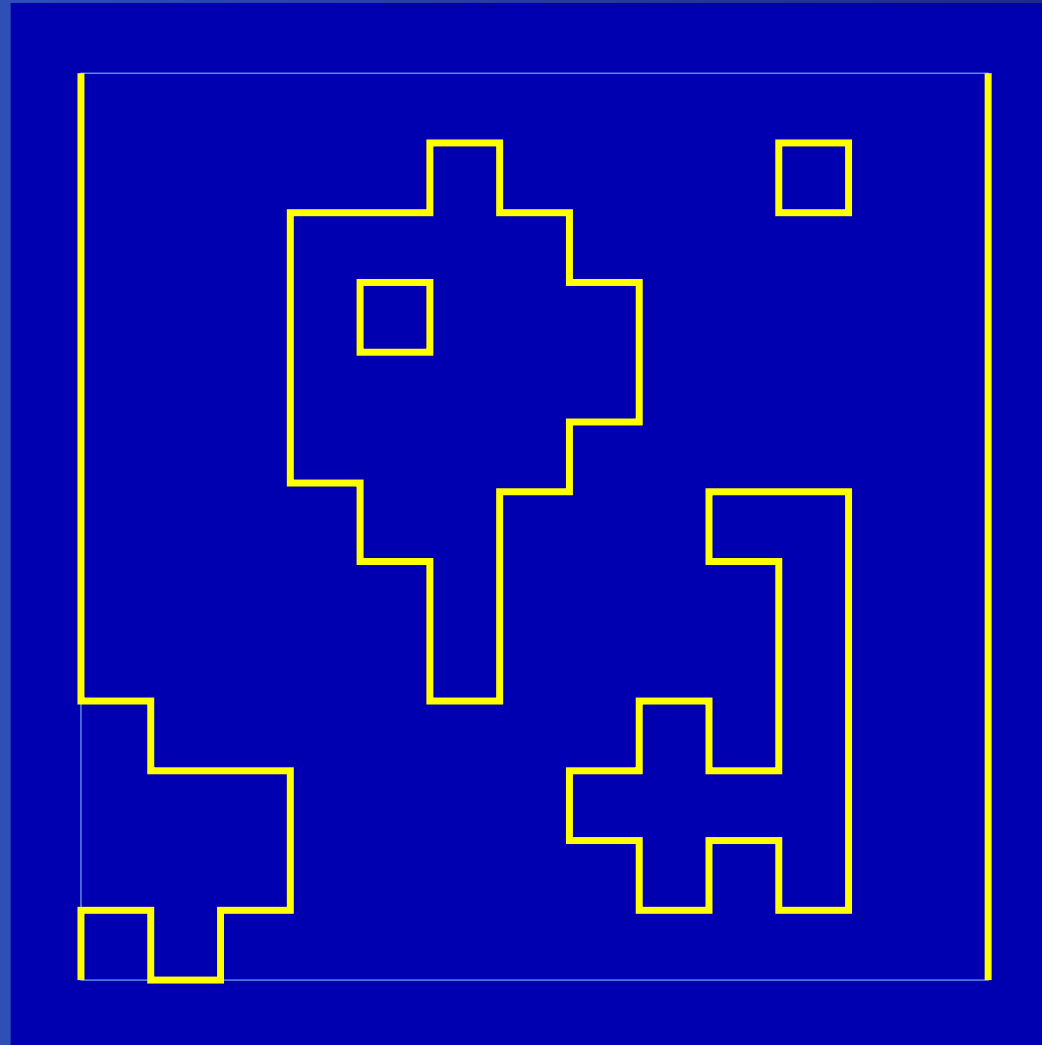
Preuve ($M = \infty$): poids des partitions



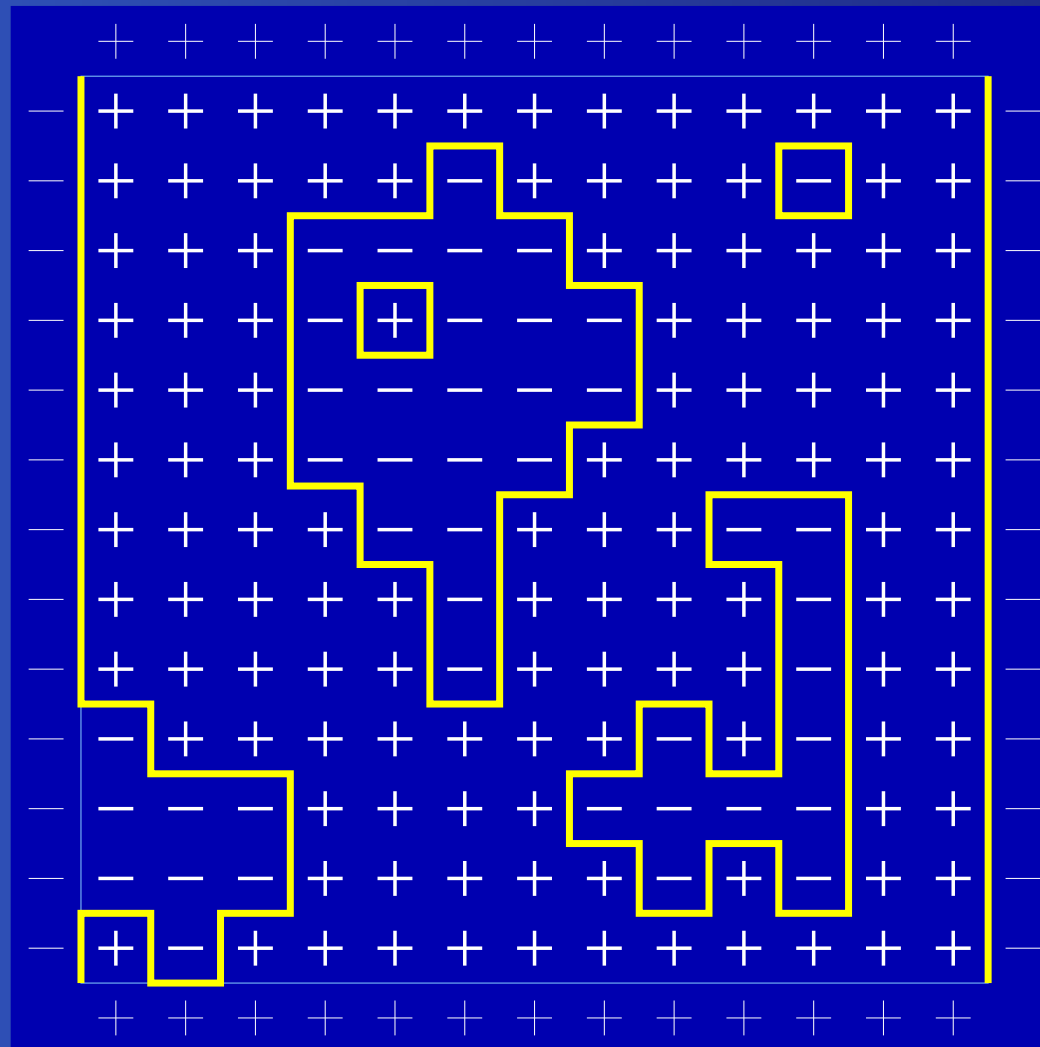
Preuve ($M = \infty$): poids des partitions



Preuve ($M = \infty$): poids des partitions



Preuve ($M = \infty$): poids des partitions



Preuve ($M = \infty$): Transition de phase

- La transition de phase du modèle d'Ising 2D en $\beta_c = \frac{1}{2} \log(1 + \sqrt{2})$ implique l'existence d'une transition de phase isotrope/nématique à $q(\beta_c) = q_c$.
- Remarque: le “décoloriage” des trous ne pose pas de problème. Par le TCL, la différence entre le nombre de trous horizontaux et verticaux est d'ordre $O(\sqrt{|V|})$, donc les densités des vrais bâtonnets horizontaux et verticaux sont bien différentes.

Preuve ($M < \infty$): Difficulté

On procède de façon identique: partition de V :

$$V = V_h \vee V_v$$

et passage à la représentation en termes de contours.

- **Difficulté:** Le poids de la configuration de contours est beaucoup plus compliqué; en particulier, il y a une interaction entre les contours. Ceci est dû au fait qu'à présent Z_n^{1D} a une dépendance non triviale en n .

Preuve ($M < \infty$): Définitions

- Fugacité d'un k -bâtonnet: $q\rho^k$, pour $k = 1, \dots, M$. Sinon 0.
- Comme précédemment, le terme ρ^k ne joue aucun rôle, puisqu'il conduit à un facteur global $\rho^{|V|}$, indépendant de la configuration. Nous choisissons ρ de façon à ce que $p_k \equiv q\rho^k$ satisfasse $\sum_{k=1}^M p_k = 1$.

Preuve ($M < \infty$): renouvellement

Les fonctions de partitions 1D satisfont l'*équation de renouvellement* suivante:

$$Z_0^{(M)} = 1, \quad Z_n^{(M)} = \sum_{k=1}^n p_k Z_{n-k}^{(M)}$$

Par conséquent,

$$Z_\infty^{(M)} \equiv \lim_{n \rightarrow \infty} Z_n^{(M)} = 1/m$$

avec $m = \sum_{k \geq 1} k p_k$.

Preuve ($M < \infty$): Perturbation

On écrit

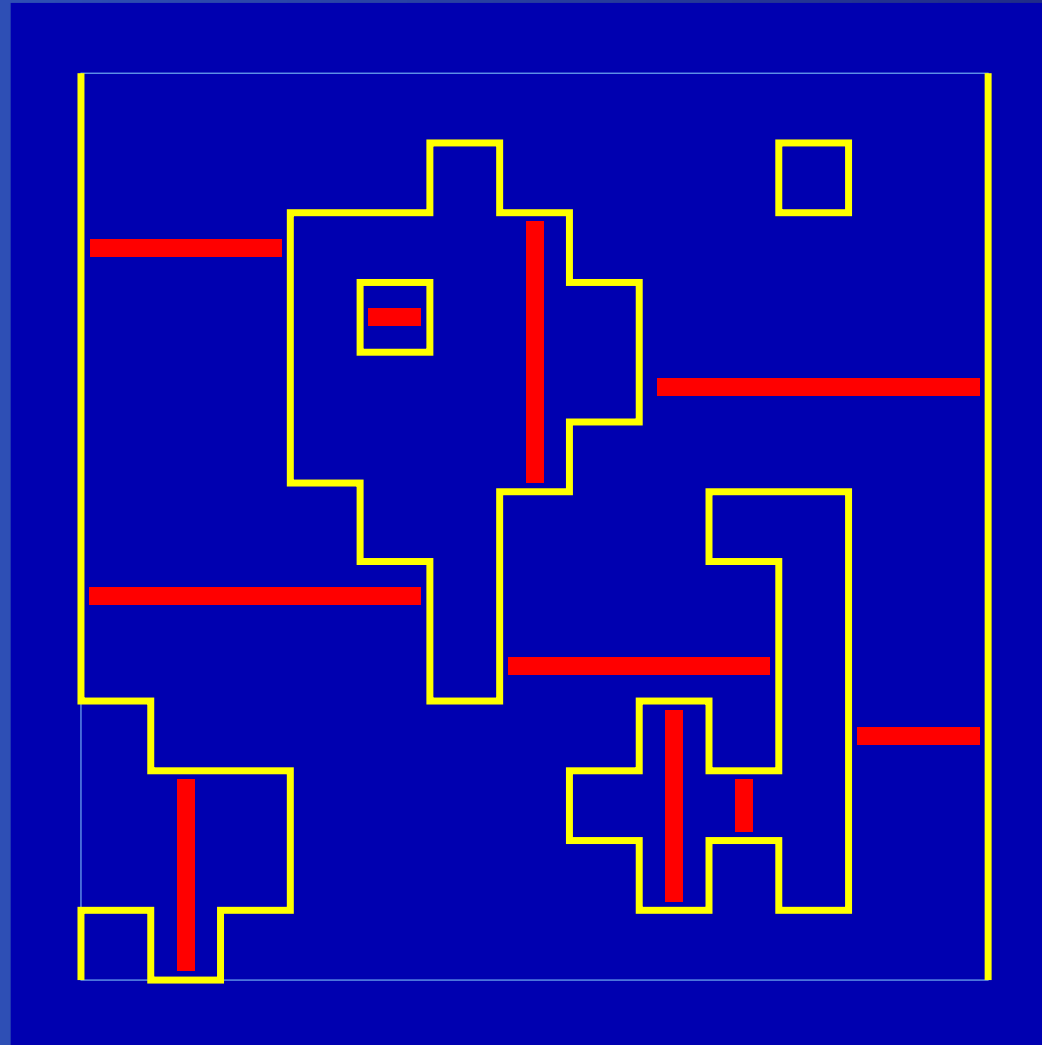
$$Z_n^{(M)} = Z_\infty^{(M)} \left(1 + \epsilon_n^{(M)} \right)$$

où

$$\epsilon_n^{(M)} = \frac{Z_n^{(M)}}{Z_\infty^{(M)}} - 1.$$

\implies Perturbation du modèle d'Ising à température inverse donnée par $e^{-4\beta} = Z_\infty^{(M)} = 1/m$.

Proof ($M < \infty$): Perturbation



Preuve ($M < \infty$): Pirogov-Sinai

Pour montrer qu'une configuration typique consiste encore en un fond uniforme de spins $+$ (ou $-$) avec de petites excitations locales, et donc que l'on a toujours un ordre nématique, nous utilisons la théorie de Pirogov-Sinai. Il se trouve qu'il est suffisant de montrer que, pour un ξ petit, le terme d'erreur satisfait

$$\sum_{n \geq 1} \epsilon_n^{(M)} e^{5\xi n} \leq \xi ,$$

pourvu que $q < q_0$ et $M > M_0(q)$.

Preuve ($M < \infty$): Asymptotique

Lemme: Il existe $q_0 > 0$ et $R > 1$ tels que, pour tout $q < q_0$, il existe $c(q) < \infty$ tel que

$$\epsilon_n^{(M)} \leq c R^{-M \vee n}$$

pour tout $M > M_0(q)$.

Preuve du lemme: fcts génératrices

Fonctions génératrices:

$$\mathbb{F}_M(z) = \sum_{k=1}^M z^k p_k$$

est définie et analytique sur \mathbb{C} ;

$$\mathbb{Z}_M(z) = \sum_{k \geq 0} z^k Z_k^{(M)} = \frac{1}{1 - \mathbb{F}_M(z)}$$

est définie et analytique sur $\{z \in \mathbb{C} : |z| < 1\}$.

Preuve du lemme: une formule

Formule de représentation:

$$\begin{aligned} Z_n^{(M)} - Z_\infty^{(M)} &= \\ \frac{1}{2\pi i} \oint_{C_r} \left\{ \frac{d\xi}{\xi^n (1 - \mathbb{F}_M(\xi))} - \frac{d\xi}{\xi^n (1 - \xi) \mathbb{F}'_M(1)} \right\} \\ &\equiv \frac{1}{2\pi i} \oint_{C_r} \frac{d\xi}{\xi^n} \mathbb{U}_M(\xi). \end{aligned}$$

où $r \in (0, 1)$ et $C_r = \{z \in \mathbb{C} : |z| = r\}$.

Preuve du lemme: taux exponentiel

Affirmation: 1. Pour tout $\delta > 0$, \mathbb{U}_M est analytique dans $\{|z| \leq R + \delta\}$ avec $R = 1 + \frac{1}{q} - 2\delta$, pourvu que $M \geq M_0(q)$.

2. $\max_{|z|=R} |\mathbb{U}_M| \leq c_1(q, \delta)$, uniformément en $M \geq M_0(q)$.

Ceci implique que

$$|Z_n^{(M)} - Z_\infty^{(M)}| \leq c_2(q, \delta) R^{-n},$$

Pour tout $q < q_0$ et $M > M_0(q)$.

Preuve du lemme: cas $n \leq M$

Affirmation: Pour tout $q < q_0$, $M > M_0(q)$ et $n \leq M$,

$$|Z_n^{(M)} - Z_\infty^{(M)}| \leq c_3(q, \delta) R^{-M}.$$

(Pour de tels n : $Z_n^{(M)} = Z_n^{(\infty)}$, et peut donc être calculée explicitement. Il suffit alors de comparer avec $Z_\infty^{(M)} = 1/m$.)

Problèmes ouverts

- Que se passe-t-il lorsque $q \rightarrow 0$ avec M fixé (grand)?
- Dimensions supérieures (semble OK, au moins sous une forme faible).
- Modèle de monomère- K -mère avec K grand? Et le modèle de monomère-trimère?
- Dans \mathbb{R}^d : bâtonnets d'épaisseur non nulle? Que se passe-t-il lorsque toutes les orientations sont permises? Mermin-Wagner lorsque $d = 2$?