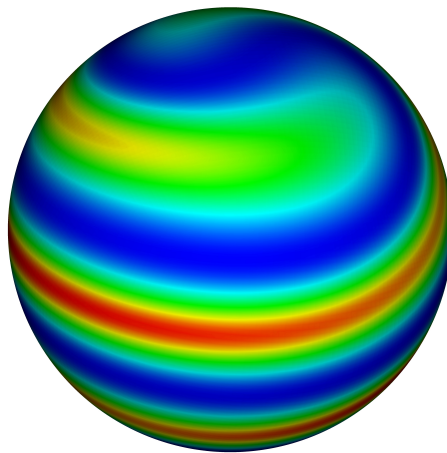


---

# Exploration numérique de la transition isotrope-nématique

---



**Résumé :**

**Mots clefs :** cristaux liquides, nématique, Monte-Carlo.

## Remerciements

## Table des matières

<b>Introduction</b>	<b>1</b>
<b>1 Méthodes numériques</b>	<b>2</b>
1.1 Modèle de Lebwohl-Lasher . . . . .	2
1.2 Paramètre d'ordre . . . . .	2
1.3 Algorithme Monte-Carlo . . . . .	2
1.4 Implémentation . . . . .	3
<b>2 Transition nématique-isotrope</b>	<b>4</b>
<b>3 Influence d'un champ électrique</b>	<b>5</b>
<b>Conclusion</b>	<b>6</b>
<b>A Première annexe</b>	<b>7</b>
<b>Références</b>	<b>8</b>

## Introduction

Le domaine des cristaux liquides a subi une importante expansion durant tout le 20<sup>ème</sup> siècle et est encore aujourd'hui un domaine actif de la recherche en physique. L'intérêt pour ces milieux intermédiaires entre cristaux et liquides provient entre autres de leurs applications industrielles en matière d'afficheurs (Figure 1).



FIGURE 1 – Un écran à cristaux liquides

Le nom cristal liquide regroupe les molécules ou mélange de molécules possédant une mésophase, c'est à dire une phase partiellement structurée, intermédiaire entre les phases liquide et cristalline. Dans ce rapport, on s'intéressera au cas particulier de la phase nématique qui emprunte aux liquides l'invariance par translation, mais brise partiellement la symétrie par rotation. Dans cette phase, les molécules s'organisent en effet pour avoir une orientation identique en moyenne (Figure 2).

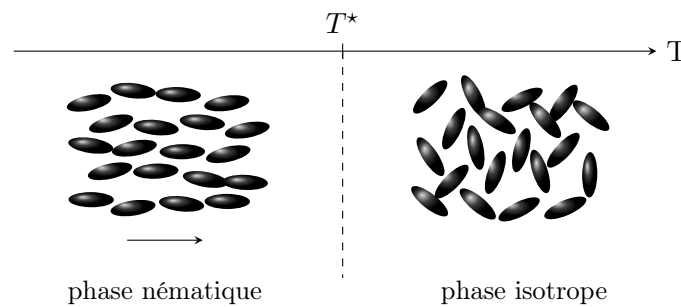


FIGURE 2 – Les cristaux liquides peuvent être représentées par un ensemble d'ellipsoïdes allongés dans une direction. Malgré les positions aléatoires des molécules, il existe un comportement collectif orientationnel : les molécules ont tendance à s'orienter dans la même direction en moyenne.

L'objectif de ce projet a été d'étudier par des méthodes numériques la transition de phase nématique-isotrope. Ce rapport présente dans une première partie le modèle ainsi que les outils numériques utilisés. Une deuxième partie présentera les résultats obtenus sur la transition observée. Enfin, une dernière partie étudiera l'influence d'un champ électrique sur cette transition.

# 1 Méthodes numériques

## 1.1 Modèle de Lebwohl-Lasher

Le modèle de Lebwohl-Lasher [1] est en quelque sorte l'analogue pour la transition nématique-isotrope du modèle d'Ising. Comme pour ce dernier, il permet d'obtenir des résultats très satisfaisant malgré sa simplicité.

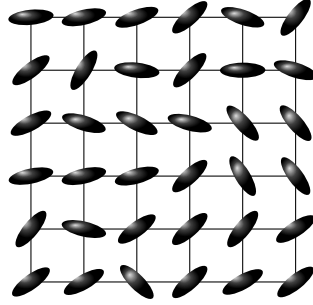


FIGURE 3 – Représentation à deux dimensions du modèle de Lebwohl-Lasher.

Dans ce modèle, les molécules de cristal liquides sont représentées uniquement par leur direction et occupent des positions fixes sur les sites d'un réseau cubique. Les différents sites du réseau interagissent uniquement entre plus proches voisins par l'intermédiaire d'un potentiel de la forme :

$$E_{i,j} = -\epsilon \frac{3 \cos^2 \theta_{i,j} - 1}{2} \quad (1.1)$$

où  $\epsilon$  est une constante positive et  $\theta_{i,j}$  est l'angle entre les deux molécules. Cette énergie est minimale lorsque les molécules sont parfaitement alignées : si  $\theta_{i,j} = 0$  alors  $E_{i,j} = -\epsilon$ , et est maximale lorsque les molécules ont des directions orthogonales : si  $\theta_{i,j} = \pi/2$  alors  $E_{i,j} = \epsilon/2$ . Ces interactions auront donc tendance à favoriser les configurations où les molécules sont alignées.

On comprend alors assez bien pourquoi ce système subit une transition de phase. Les deux énergies intervenant dans ce système sont l'interaction entre les molécules et l'agitation thermique dont les échelles sont respectivement  $\epsilon$  et  $k_B T$ . A haute température, l'agitation thermique prédomine et l'orientation des molécules est aléatoire. A basse température, l'énergie d'interaction entre les sites est la plus importante et les molécules privilégient une direction commune.

Pour toute notre étude, des conditions aux limites périodiques ont été imposées mais d'autres conditions sont également possibles. Des travaux récents [2] ont par exemple utilisé une énergie à la surface de la même forme que le potentiel d'interaction pour simuler une cellule avec un ancrage aux parois.

## 1.2 Paramètre d'ordre

## 1.3 Algorithme Monte-Carlo

L'idée de base derrière les algorithmes de type Monte-Carlo est de remplacer le calcul d'intégrales sur l'espace des phases par des moyennes sur une marche aléatoires. L'évolution Monte-Carlo de notre système utilise l'algorithme proposé par Metropolis et al [3] qui consiste à réaliser une série de mouvement aléatoire et d'accepter ces changements avec une probabilité en fonction de la variation d'énergie.

Plus précisément, on commence par sélectionner un site du réseau de manière aléatoire. Ensuite, une nouvelle direction de la molécule est tirée aléatoirement. Avec ce changement de direction est associé une variation d'énergie  $\Delta E$  due aux potentiel d'interactions avec les sites voisins. Si ce changement diminue l'énergie totale du système, le changement est accepté. Sinon, le changement est accepté avec une probabilité proportionnel au poids de Boltzmann de la variation d'énergie :

$$p = e^{-\Delta E/k_B T} \quad (1.2)$$

Il est possible de montrer qu'un grand nombre de répétition de ces mouvements permet d'obtenir la configuration d'équilibre du système. Des moyennes statistiques pour les quantités d'intérêts peuvent ensuite être calculés sur les micro-états générés par l'algorithme une fois l'équilibre atteint.

## 1.4 Implémentation

Les simulations reportées dans ce rapport ont toutes été réalisées sur un réseau cubique de taille  $30 \times 30 \times 30$  avec des conditions aux limites périodiques. Pour chaque site du réseau, l'orientation de la molécule est stockée en tant que  $\cos \theta$  et  $\phi$  où  $\theta$  et  $\phi$  sont respectivement les angles polaires et azimutales. Utiliser les variables  $\cos \theta$  et  $\phi$  plutôt que simplement  $\theta$  et  $\phi$  est nécessaire à l'équiprobabilité des directions. En effet, si l'on tire au hasard un  $\theta$  et un  $\phi$ , la probabilité d'obtenir une direction proche du pôle est plus importante. Cette anisotropie disparaît lorsque l'on sélectionne un  $\cos \theta$  et un  $\phi$ , ce qui se comprend assez bien en se rappelant que l'élément de surface en sphérique s'écrit  $d\theta \sin \theta d\phi = d \cos \theta d\phi$ .

Les simulations sont commencées depuis l'état fondamental où toutes les molécules sont alignées. Lorsque l'on démarre la simulation, les molécules sont bougées les unes après les autres en utilisant l'algorithme de Monte-Carlo. On nomme un cycle une suite de  $30 \times 30 \times 30$  mouvements. Durant un cycle, toutes les molécules du réseau sont bougées exactement une fois mais dans un ordre aléatoire. Une telle procédure assure que toutes les molécules ont la même chance d'être bougée en réduisant les irrégularités dues à un tirage totalement aléatoire [4].

Pour chaque température, au minimum 1000 cycles sont calculées pour faire évoluer le système vers la configuration d'équilibre. Les variations de l'énergie et du paramètre d'ordre permettent de vérifier que le système est bien à l'équilibre. Ensuite, un minimum de 5000 cycles sont réalisées de manière à calculer les quantités d'intérêts.

## 2 Transition nématique-isotrope

### 3 Influence d'un champ électrique

## Conclusion



## A Première annexe

## Références

- [1] P. A. Lebwohl and G. Lasher. Nematic-liquid-crystal order—a monte carlo calculation. *Phys. Rev. A*, 6 :426–429, Jul 1972. <http://journals.aps.org/pr/abstract/10.1103/PhysRevA.6.426>.
- [2] R. G. Marguta, Y. Martínez-Ratón, N. G. Almarza, and E. Velasco. Theory and simulation of the confined lebwohl-lasher model. *Phys. Rev. E*, 83 :041701, Apr 2011. <http://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.83.041701>.
- [3] Nicholas Metropolis, Arianna W Rosenbluth, Marshall N Rosenbluth, Augusta H Teller, and Edward Teller. Equation of state calculations by fast computing machines. *The journal of chemical physics*, 21(6) :1087–1092, 1953. <http://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.1699114>.
- [4] U Fabbri and C Zannoni. A monte carlo investigation of the lebwohl-lasher lattice model in the vicinity of its orientational phase transition. *Molecular Physics*, 58(4) :763–788, 1986. <http://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/00268978600101561>.