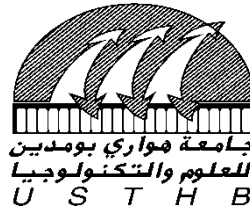


N° d'ordre :

**REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE**  
**Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique**  
**Université des Sciences et de la Technologie Houari Boumediène**

**Faculté de Physique**



**THESE**

Présentée pour l'obtention du **diplôme de DOCTORAT 3<sup>ème</sup> Cycle**

**En : PHYSIQUE**

**Spécialité : Physique Théorique**

**Par : BOUZAR Lila**

**Sujet**

**Etude Physique de Structures Biologiques sous Contraintes**

Soutenue publiquement, le 05/06/2016 , devant le jury composé de :

Mme IGHEZOU Fatima Zohra	Professeur	USTHB	Président
M MENAS Ferhat	Professeur	UMMTO et ENPEI	Directeur de thèse
M MÜLLER Martin Michael	Maître de Conférences A	UdL (Metz)	Co- Directeur de thèse
Mme AMROUN-SAIDI Nadia	Professeur	USTHB	Examineur
M DJEBLI Mourad	Professeur	USTHB	Examineur
M MOHRBACH Hervé	Professeur	UdL (Metz)	Invité
M ZENINE Nadjah	Directeur de Recherches	CRNA	Invité

## **Remerciements**

*Ce travail de thèse a été en partie effectué au Laboratoire de Physique et Chimie Quantique de l'Université de Tizi-Ouzou, sous la direction de Monsieur Ménas Ferhat, professeur à l'UMMTO et l'ENPEI. Je tiens à le remercier vivement pour ses conseils, son soutien et ses précieuses orientations, cela tout le long de la formation doctorale.*

*Une grande partie de mes recherches ont été réalisées au sein de l'équipe BioPhysStat du Laboratoire LCPA-2MC de l'Université de Lorraine sous la direction de Monsieur Müller Martin Michael, maître de conférences à l'UdL, que je remercie vivement. Sa disponibilité, sa compétence et sa passion pour la recherche ont rendu mon expérience de doctorante très enrichissante. Plus qu'un co-directeur de thèse, c'est aujourd'hui l'exemple du chercheur auquel je souhaite ressembler.*

*Je remercie également Monsieur Mohrbach Hervé, professeur à l'UdL, de m'avoir intégré dans son équipe et dans son axe de recherche sur la physique des polymères, ce fut une grande chance pour moi. J'ai beaucoup appris de ses méthodes de calcul analytiques et j'espère pouvoir continuer à travailler dans cette direction.*

*Je tiens aussi à remercier Monsieur Messina René, professeur à l'UdL, pour l'initiation approfondie à la simulation Monte Carlo qui m'a été indispensable.*

*Je remercie Madame Ighezou Fatma-Zohra, professeur à l'USTHB, pour m'avoir fait l'honneur d'accepter de présider mon jury de thèse.*

*J'adresse mes sincères remerciements à Madame Amroun-Saidi Nadia et Monsieur Djebli Mourad, professeurs à l'USTHB, Monsieur Mohrbach Hervé, professeur à l'UdL et Monsieur Zenine Nadjah, directeur de recherches au CRNA, pour avoir accepté de juger ce travail.*

# Table des matières

<b>Table des matières</b>	<b>1</b>
<b>Introduction</b>	<b>5</b>
<b>1 Membranes lipidiques toroïdales sous confinement</b>	<b>9</b>
1.1 Introduction . . . . .	9
1.2 Modèle analytique . . . . .	13
1.2.1 Énergie de courbure . . . . .	13
1.2.2 Paramétrisation en longueur d'arc . . . . .	15
1.2.3 Variations de l'énergie et conditions aux limites . . . . .	17
1.3 Résultats axisymétriques . . . . .	22
1.3.1 Formes libres . . . . .	22
1.3.2 Formes axisymétriques confinées . . . . .	27
1.4 Transformations conformes pour générer des solutions non-axisymétriques	32
1.4.1 Transformations conformes du tore de Clifford . . . . .	32
1.4.2 Transformations conformes de tores axisymétriques confinés . .	36
1.5 Diagramme des phases global . . . . .	43
1.6 Simulation numérique . . . . .	49
1.6.1 Description du code . . . . .	49
1.6.2 Équilibration des solutions analytiques . . . . .	53
1.6.3 Comparaison avec la topologie sphérique . . . . .	55
1.7 Influence de l'adhésion au container . . . . .	57

1.8	Conclusion . . . . .	61
<b>2</b>	<b>Confinement surfacique des polymères en hélice</b>	<b>63</b>
2.1	Introduction . . . . .	63
2.2	Modèle analytique . . . . .	65
2.3	Squeelix de longueur infinie . . . . .	70
2.3.1	Formes du squeelix . . . . .	72
2.3.1.1	Cas où le paramètre $m$ est inférieur à 1 . . . . .	72
2.3.1.2	Cas où le paramètre $m$ est égal à 1 . . . . .	72
2.3.1.3	Cas où le paramètre $m$ est supérieur à 1 . . . . .	74
2.3.2	Densités d'énergies . . . . .	74
2.4	Squeelix de longueur finie . . . . .	76
2.4.1	Formes du squeelix . . . . .	77
2.4.1.1	Cas où le paramètre $m$ est inférieur à 1 . . . . .	77
2.4.1.2	Cas où le paramètre $m$ est égal à 1 . . . . .	82
2.4.1.3	Cas où le paramètre $m$ est supérieur à 1 . . . . .	84
2.4.2	Diagramme des énergies . . . . .	85
2.5	Analyse de la stabilité . . . . .	86
2.5.1	Cas où le paramètre $m$ est inférieur à 1 . . . . .	88
2.5.2	Cas où le paramètre $m$ est supérieur à 1 . . . . .	93
2.5.3	Cas où le paramètre $m$ est égal à 1 . . . . .	95
2.6	Modèle des twist-kinks en interaction . . . . .	95
2.7	Conclusion . . . . .	103
<b>3</b>	<b>Polymères en hélice confinés dans un canal</b>	<b>105</b>
3.1	Introduction . . . . .	105
3.2	Filaments semi-flexibles confinées . . . . .	107
3.2.1	Classification des polymères . . . . .	107
3.2.2	Fonction de corrélation . . . . .	107
3.3	Expériences de confinement des actines dans un canal . . . . .	111
3.3.1	Procédure expérimentale . . . . .	111

3.3.2	Fonctions de corrélation expérimentales . . . . .	111
3.4	Simulation Monte-Carlo de squeelix dans un canal . . . . .	113
3.4.1	Description du code . . . . .	113
3.4.1.1	Coordonnées de la chaîne . . . . .	113
3.4.1.2	Mouvements aléatoires . . . . .	114
3.4.1.3	Algorithme de Métropolis . . . . .	116
3.4.2	Résultats obtenus . . . . .	116
3.5	Squeelix soumis à une force externe . . . . .	117
3.5.1	Température nulle . . . . .	117
3.5.2	Température finie . . . . .	125
3.6	Conclusion . . . . .	129
	<b>Conclusion</b>	<b>131</b>
	<b>Bibliographie</b>	<b>133</b>
	<b>Bibliographie</b>	<b>135</b>
	<b>Table des figures</b>	<b>146</b>



# Introduction

Le monde du vivant, de par sa complexité, nécessite la contribution de tous les domaines de la science pour élucider ses mystères. La physique, en premier lieu, est désormais incontournable. Dans cette thèse plusieurs domaines et outils de la physique théorique sont utilisés et développés afin de comprendre certains processus biologiques observés. Parmi eux la théorie de l'élasticité, la physique des polymères, la physique statistique et la simulation Monte-Carlo. Lorsque la validité d'une théorie atteint sa limite, on cherche quel outil est plus approprié pour prendre le relais. Ce n'est qu'ainsi qu'on arrive à avoir une image précise du comportement des constituants biologiques, ce qui permet de les manipuler et de prédire leurs comportements.

Dans ce travail on s'intéresse particulièrement aux structures sous contraintes car dans le monde du vivant tout est confiné. Tous les constituants s'agencent de manière à former un grand puzzle dans lequel chaque pièce subit les contraintes des autres. De plus le confinement permet d'activer des propriétés spécifiques indispensables. Le confinement modifie la forme de l'objet considéré, et dans le monde biologique la forme et la fonction son intimement liées.

La mitochondrie, par exemple, se compose de deux membranes lipidiques confinées l'une à l'intérieur de l'autre. Les plis de la membrane interne dus au confinement sont nécessaires pour produire plus d'ATP (le carburant des cellules). La compréhension de la morphogenèse de cette membrane est donc essentielle à la compréhension de sa fonction. Généralement, celle-ci est de topologie sphérique. Cependant, il est apparu dans les travaux de John et al. [1] que lorsqu'une protéine particulière manque, la mitofiline, la membrane interne croît anormalement et passe de la forme d'une sphère à la forme de

plusieurs sphères incluses les unes à l'intérieur des autres. Les changements topologiques ne sont pas rares dans la nature, on cite par exemple le cas des membranes qui adhèrent à un cube [2]. Celles-ci forment différentes structures spongieuses changeant fréquemment de topologie.

Dans le cadre de la modélisation de mitochondries, de précédents travaux [3, 4] expliquent le passage possible de la topologie sphérique à la topologie toroïdale en utilisant la théorie de l'élasticité ainsi que des simulations numériques. Pour obtenir la suite du processus, i. e. le passage de la topologie toroïdale à la forme de deux sphères incluses l'une à l'intérieur de l'autre, nous étudions, dans le premier chapitre, le confinement des membranes lipidiques de topologie toroïdale. Pour ce faire, nous modélisons la mitochondrie par une membrane interne fluide toroïdale confinée dans une sphère dure. Nous utilisons le modèle de Helfrich [5] pour quantifier l'énergie élastique de la membrane. En effectuant un calcul variationnel, on obtient toutes les phases à symétrie axiale, axisymétriques, que peut prendre la membrane interne. Ensuite, pour briser la symétrie on utilise les transformations conformes et leurs propriétés. Ceci nous permet d'avoir un diagramme des phases complet qui englobe les phases symétriques et les phases non-symétriques. On utilise ensuite un programme de simulation basé sur l'intégration par éléments finis pour étudier la répartition des forces de contact. Enfin nous étudions l'influence de l'adhésion mutuelle entre les deux membranes. On trouve que celle-ci modifie considérablement le diagramme des phases en y ajoutant de nouveaux processus d'évolution possibles.

Sur une échelle plus petite, une grande partie des protéines se trouvent à proximité de membranes lipidiques et sont confinées à leurs surfaces. Cette proximité leur permet d'accomplir des tâches particulières comme de diviser la membrane en deux vésicules distinctes [6]. On peut également confiner les polymères dans le but de révéler leur structure interne, comme par exemple dans les travaux de Sanchez et al. [7] où des actines ont été confinés par osmose sur une surface plane. Les résultats obtenus ont montré l'apparition d'anneaux si petits qu'il est impossible de les expliquer en considérant les actines comme des filaments semi-flexibles. De plus, le confinement des actines dans un canal [8] a révélé la présence d'oscillations dans la fonction de corrélation. C'est donc



principalement pour expliquer ces observations expérimentales sur les actines que nous étudions le confinement des polymères hélicoïdaux.

Dans le chapitre 2, nous considérons le cas du confinement planaire dans lequel on projette une chaîne hélicoïdale à deux dimensions. Le calcul des solutions stables montre que le confinement fait apparaître des quasi-particules conformationnelles, appelées twist-kinks ou TKs [9], qui se manifestent par un changement rapide du sens de la courbure. Ceci est dû à l'intrication entre la courbure et la torsion du filament. Lorsque l'angle de torsion augmente de  $\pi$ , la courbure change de signe en gardant la même valeur absolue. Ces pseudo-particules se déplacent sur la chaîne et interagissent entre elles. En fonction des paramètres physiques du filament on peut avoir des TKs très mobiles qui se déplacent avec un coût énergétique très faible, la chaîne est alors hyperflexible. Pour d'autres paramètres de l'hélice, les TKs occupent des positions périodiques formant un réseau très rigide.

Dans le chapitre 3, on ajoute au confinement planaire un confinement latéral dans le but de modéliser un canal quasi-plat. Ceci est fait via un code de simulation Monte-Carlo où l'on considère la chaîne comme une longue suite de liens rigides gouvernée par l'énergie d'un polymère en hélice. C'est le modèle communément appelé "freely jointed chain" auquel on a implémenté les énergies de l'hélice. Pour compléter l'étude, on modélise analytiquement le confinement latéral par une force d'étirement agissant sur toute la chaîne. Ceci nous permet de quantifier les observations obtenues par la simulation et de prédire les cas limites. On arrive ainsi à expliquer certaines des observations expérimentales sur le confinement des actines. Comme le modèle utilisé repose essentiellement sur la structure hélicoïdale du filament, on en déduit que les actines sont de bons candidats pour être classés parmi les polymères en hélice.



# Chapitre 1

## Membranes lipidiques toroïdales sous confinement

### 1.1 Introduction

Les membranes lipidiques sont des composants essentiels des cellules, elles représentent leur paroi. Elle se composent de deux couches de phospholipides ayant un pôle hydrophile et un autre hydrophobe. Ces deux couches s'agencent entre elles de manière à avoir leur pôle hydrophile dirigé vers l'extérieur. Elles forment ainsi des structures complexes telles que les vésicules membranaires, les micelles ou les liposomes.

La mitochondrie, qui fournit l'énergie aux cellules, est composée de deux vésicules membranaires lipidiques, l'une confinée à l'intérieur de l'autre. La membrane interne a une surface beaucoup plus grande que la membrane externe, elle forme des plis qui lui permettent d'augmenter le nombre de protéines responsables de la synthétisation de l'énergie, les ATPases. Dans le cas des membranes lipidiques de la mitochondrie, leurs dimensions de largeur et de longueur sont de l'ordre du micromètre alors que leur épaisseur est de l'ordre du nanomètre, ce qui nous permet de les considérer comme des surfaces bidimensionnelles.

Dans notre travail, on s'intéresse au confinement des membranes lipidiques dans le but de modéliser la mitochondrie. La membrane interne étant beaucoup plus fluide que la membrane externe, on modélise ce système par une membrane fluide confinée dans une sphère dure. Plusieurs travaux de recherche ont été effectués dans cette direction, [3, 4, 10–13].

Dans les recherches effectuées par Kahraman et al. [3], le modèle de la courbure spontanée et la simulation numérique ont été utilisés pour comprendre la morphogénèse des membranes de topologie sphérique confinées. Dans ces travaux il est apparu que pour certaines valeurs de l'aire et du volume de la membrane interne, celle-ci pouvait passer de la forme d'une sphère à celle d'un tore. Un tel changement de topologie serait possible in-vivo car dans la nature, les changements topologiques sont fréquents. Dans les flux visqueux par exemple, on observe ce type de transitions pour les films fluides [14, 15]. Par exemple, un film de savon qui entoure une boucle de fil change sa topologie si ce fil se déforme [16]. Dans le monde biologique, la cellule contrôle la topologie de ses constituants sur toutes les échelles. A l'échelle moléculaire, les fonctions de l'ADN [17] et des protéines [18] dépendent fortement de leur topologie. Sur une échelle plus grande, les structures membranaires attachées montrent des géométries spécifiques adaptées à chacune de leurs fonctions [2, 19–22]. Pour les mitochondries, John et al. [1] ont observé in-vitro que lorsqu'une protéine particulière manque, la mitofiline, la membrane interne croît anormalement et passe de la topologie d'une seule sphère à la forme de plusieurs sphères incluses les unes à l'intérieur des autres.

Si on suppose possibles les changements de topologies de la membrane fluide sphérique confinée [3], via des molécules spécialisées telles que les protéines SNARE [23], des transitions comme celle montrée dans la figure 1.1 se produisent. Les quatre images de cette figure sont les formes de la membrane pour différentes valeurs de l'aire et du volume et pour différentes topologies. La grille grise représente le confinement sphérique et la surface à l'intérieur représente la membrane interne confinée. Les aires, les volumes et les énergies sont en unités réduites calculées par rapport au confinement sphérique, qui a une aire, un volume et une énergie fixés à l'unité. Nous ne montrons que la moitié du système pour mieux visualiser les plis, cependant nous avons effectué les

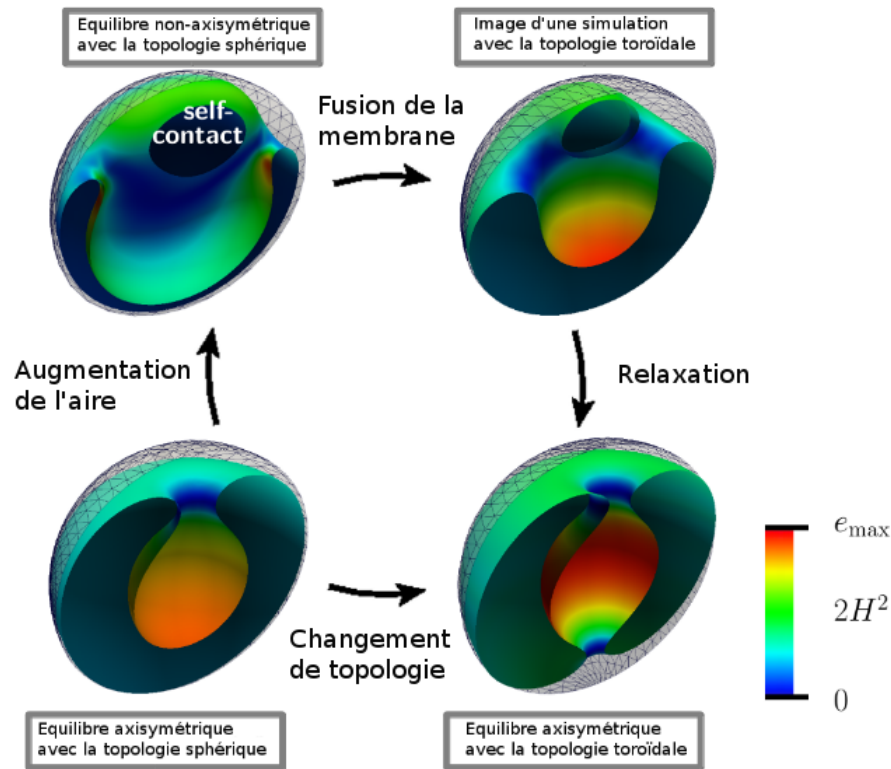


FIGURE 1.1: Transition d'une membrane de topologie sphérique (solutions obtenues par Kahraman et al. [3]) à la topologie toroïdale. En bas à gauche la forme sphérique à symétrie axiale en équilibre pour une aire et un volume en unités réduites  $(a, v) = (1.2, 0.8)$ . En haut à gauche les solutions de topologie sphérique avec self-contacts pour  $(a, v) = (1.5, 0.8)$ . En haut à droite une forme toroïdale non symétrique pour  $(a, v) = (1.2, 0.8)$  (capture instantanée d'une simulation). En bas à droite la solution axi-symétrique à l'équilibre de topologie toroïdale pour  $(a, v) = (1.2, 0.8)$ . Les valeurs maximales de la barre d'échelle des énergies de courbure en unités réduites sont respectivement  $e_{max} = 10, 23, 11, 8$ .

coupes sur des plans de symétrie et la partie retirée est exactement identique à la partie visible. L'échelle des couleurs correspond à la densité d'énergie de courbure du système qui varie du bleu, là où la courbure moyenne est faible, au rouge lorsque celle-ci est la plus élevée. On remarque que l'énergie de courbure est plus faible au niveau des "necks", le goulot au début des plis, car là les deux courbures principales sont de signes opposés et s'annihilent. En commençant par l'image en bas à gauche, la surface représentée est axisymétrique, de topologie sphérique, d'aire et de volume  $(a, v) = (1.2, 0.8)$ . En augmentant sa surface, l'axisymétrie se brise et une zone de self-contacts apparaît comme on le voit dans la figure en haut à gauche qui représente la solution sphérique pour  $(a, v) = (1.5, 0.8)$ . Cependant, cette forme a une énergie de courbure très grande  $e_{max} = 23$  au lieu de 10 pour la première forme. Si on autorise la fusion des deux parties de la membrane en contact, la surface décroît ainsi que l'énergie de courbure. Cette fusion correspond à un changement de topologie, en passant de la surface en haut à gauche, de topologie sphérique, à la surface en haut à droite, de topologie toroïdale, qui représente un état intermédiaire de la simulation. Si on laisse le système s'équilibrer, celui-ci retrouve la symétrie axiale, c'est la solution représentée en bas à droite. Elle a la plus faible énergie de courbure,  $e_{max} = 8$ . Cette dernière forme est obtenue par notre travail actuel que l'on développe étape par étape dans le présent chapitre.

Nous exposons d'abord le modèle utilisé, c'est le modèle classique de la courbure [5] que l'on développe dans le cas de la topologie toroïdale. Grâce à ce modèle nous obtenons analytiquement toutes les solutions axisymétriques. Nous exposons ces résultats dans la troisième section. Afin d'étendre l'étude au cas non-axisymétrique, nous utilisons les transformations conformes et leurs propriétés pour générer de nouvelles solutions (section 1.4). Ceci nous permet de réunir toutes les phases possibles de la membrane dans un diagramme que l'on présente dans la section 1.5. Ensuite en section 1.6, nous utilisons un programme de simulation numérique pour vérifier la stabilité de toutes les formes obtenues, étudier la distribution des forces de contact et comparer les énergies des deux topologies sphérique et toroïdale. Enfin, dans la section 1.7, nous étudions l'influence de l'adhésion entre la membrane interne et son confinement. Nous terminons ce chapitre par une brève conclusion.

## 1.2 Modèle analytique

Pour décrire la membrane supposée fluide [5], on cherche d'abord à formuler une expression pour toutes les énergies mises en jeu. Ceci nous permet ensuite, en la minimisant, de trouver quelles sont les formes stables que prennent les vésicules toroïdales confinées.

### 1.2.1 Énergie de courbure

À l'échelle de la mitochondrie, les dimensions de longueur et de largeur de la membrane sont de l'ordre du micromètre, alors que son épaisseur est de l'ordre de quelques nanomètres, ce qui nous permet de la considérer comme une surface bi-dimensionnelle. Nous savons également que les vésicules lipidiques peuvent se présenter sous deux états en fonction de la concentration et de la température. Pour les basses températures, on a un gel bi-dimensionnel de structure cristalline. Pour des températures adéquates au monde biologique la vésicule devient un cristal liquide. Cette propriété de la membrane lipidique la rend invariante à toute contrainte de cisaillement, ce qui nous permet de la considérer comme un fluide homogène. Par contre, une flexion dans la direction normale à la surface peut contribuer à l'énergie. Selon la loi de Hooke, une expansion harmonique de l'énergie de la déformation est proportionnelle au carré de celle-ci. Dans le cas particulier d'une courbure, on considère une expression quadratique de l'énergie proposée indépendamment par Canham [24], Helfrich [5] et Evans [25]

$$E_b = \int_{\Sigma} dA \left( \frac{\kappa}{2} (2H - C_0)^2 + \bar{\kappa} K_G \right), \quad (1.1)$$

où  $H^2 = \frac{1}{4} (k_1 + k_2)^2$  avec  $H$  la courbure moyenne et  $K_G = k_1 k_2$  est la courbure de Gauss, avec  $k_1$  et  $k_2$  les deux courbures principales. Les coefficients  $\kappa$  et  $\bar{\kappa}$  représentent les rigidités de courbure et de Gauss respectivement. Le coefficient  $C_0$  est la courbure spontanée, celle-ci est due à une différence dans le nombre de phospholipides présents sur chacune des deux couches de la membrane, voir la figure 1.2. L'intégration porte sur  $dA$ , l'élément de surface, et s'effectue sur la surface totale de la membrane  $\Sigma$ .

Le théorème de Gauss-Bonnet [27] stipule que l'intégrale de la courbure de Gauss est un invariant topologique et sa valeur est  $4\pi(1 - g)$  avec  $g$  le genus de la topologie en

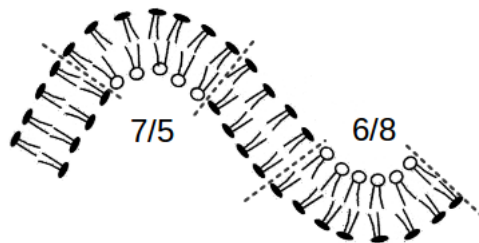


FIGURE 1.2: Illustration d'une courbure spontanée  $C_0$  non nulle due aux différences dans le nombre de phospholipides des deux couches intérieure et extérieure. Les cercles avec des lignes attachées représentent les phospholipides. Dans les parties incurvées nous notons le rapport entre le nombre de phospholipides sur la face intérieure et leur nombre sur la face extérieure [26].

question. Le genus correspond au nombre de trous que contient la surface, ainsi, les surfaces de topologie sphérique ont un genus nul, et les surfaces de topologie toroïdal on un genul égal à 1. Le terme de Gauss est donc constant pour une topologie fixée, on n'en tient pas compte par la suite. Il ne reste alors que le terme

$$E_b = \frac{\kappa}{2} \int_{\Sigma} dA (2H - C_0)^2. \quad (1.2)$$

Cependant, une fois que le système est en équilibre, il n'y a pratiquement plus d'échange de lipides entre la solution et la membrane. Ce qui veut dire que l'aire  $A$  de la vésicule est fixe. La pression osmotique influe également sur la mécanique de la membrane. Elle est due à la différence de concentration entre l'intérieur et l'extérieur de la membrane et doit être nulle à l'équilibre. Ceci impose au volume  $V$  à l'intérieur de la vésicule reste invariant.

Ces contraintes physiques se traduisent dans l'expression de l'énergie par l'ajout des deux contraintes de Lagrange  $\sigma A$  et  $PV$ . Les multiplicateurs de Lagrange sont  $\sigma$  pour l'aire, c'est la tension de surface, et  $P$  pour le volume, c'est la pression osmotique. L'énergie est alors

$$E = \frac{\kappa}{2} \int_{\Sigma} dA (2H - C_0)^2 + \sigma A + PV. \quad (1.3)$$



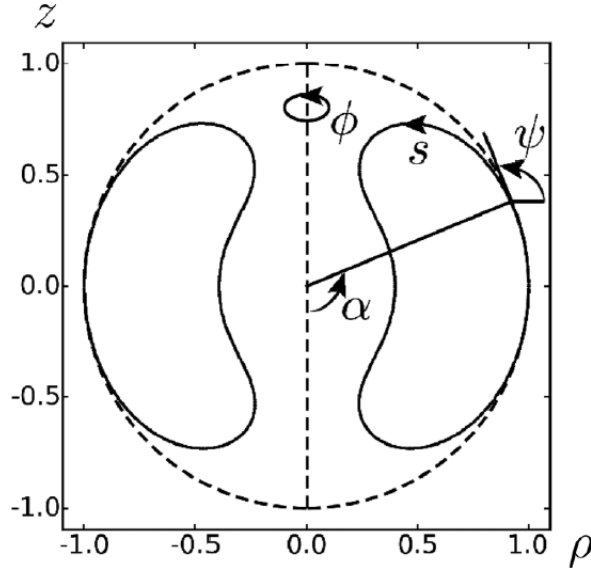


FIGURE 1.3: Paramétrisation en longueur d'arc des tores axisymétriques en coordonnées cylindriques  $(\rho z)$ . L'axe  $\vec{\sigma z}$  est l'axe de symétrie du tore. La ligne noire représente la coupe du tore axisymétrique à angle azimutal  $\phi$  fixé. Le cercle discontinu représente le confinement sphérique.  $s$  est la longueur d'arc,  $\psi$  l'angle que fait la tangente à la membrane avec l'axe  $\vec{\sigma \rho}$ ,  $\alpha$  représente l'angle de détachement de la membrane par rapport à la paroi.

Il faut, ensuite, effectuer une première variation de cette énergie pour obtenir ses extrema. Pour ce faire, on suppose d'abord la symétrie axiale, ce qui nous permet d'utiliser une paramétrisation de la surface appropriée, la paramétrisation en longueur d'arc.

### 1.2.2 Paramétrisation en longueur d'arc

Si on suppose la symétrie axiale, avec comme axe de symétrie l'axe cartésien  $(oz)$ , on a la même coupe de la surface quel que soit l'angle azimutal  $\phi$  choisi. Ceci est illustré dans la figure 1.3, où le container sphérique est représenté en pointillés et son rayon est pris égal à l'unité.

La longueur d'arc  $s$  nous permet de nous situer sur la coupe. L'axe  $\vec{o}\rho$  est la direction radiale en coordonnées cylindriques. L'angle  $\psi$  représente l'angle que fait la tangente à la surface avec l'axe horizontal. L'angle  $\alpha$  représente l'angle à partir duquel la membrane interne se détache de son container.

Ainsi l'élément de surface  $dA$  s'écrit

$$dA = 2\pi\rho ds \quad (1.4)$$

et l'élément de volume

$$dV = \pi\rho^2 \sin\psi ds. \quad (1.5)$$

La courbure moyenne  $H$  s'écrit

$$H = \frac{1}{2} \left( \dot{\psi} + \frac{\sin(\psi)}{\rho} \right) \quad (1.6)$$

avec  $\dot{\psi}(s)$  la courbure dans le sens de l'axe de symétrie et  $\frac{\sin(\psi)}{\rho}$  la courbure dans le sens perpendiculaire à l'axe de symétrie.

En remplaçant  $H$  dans l'équation 1.3, et en prenant une énergie sans dimension  $\tilde{E} = \frac{E}{\pi\kappa}$  on a

$$\tilde{E} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \int_{\underline{s}}^{\bar{s}} ds \tilde{L} = \int_{\underline{s}}^{\bar{s}} ds \tilde{L} \quad (1.7)$$

avec le Lagrangien

$$\tilde{L} = \rho \left( \dot{\psi} + \frac{\sin\psi}{\rho} - C_0 \right)^2 + 2\tilde{\sigma}\rho + \tilde{P}\rho^2 \sin\psi + \lambda_\rho(\dot{\rho} - \cos\psi) + \lambda_z(\dot{z} - \sin\psi). \quad (1.8)$$

$\tilde{\sigma} = \frac{\sigma}{\kappa}$  et  $\tilde{P} = \frac{P}{\kappa}$  sont respectivement la tension de surface et la pression sans dimensions. Les multiplicateurs de Lagrange  $\lambda_\rho$  et  $\lambda_z$  couplent l'angle  $\psi$  aux coordonnées cartésiennes  $\rho$  et  $z$ . Les moments conjugués  $P_i = \frac{\partial \tilde{L}}{\partial \dot{q}_i}$  du système sont  $P_\psi = 2\rho \left( \dot{\psi} + \frac{\sin\psi}{\rho} - C_0 \right)$ ,  $P_\rho = \lambda_\rho$  et  $P_z = \lambda_z$ .

Dans tout ce qui suit, nous simplifions le problème en considérant une courbure spontanée  $C_0$  nulle, i. e. nous supposons qu'il y a exactement le même nombre de phospholipides sur les deux couches qui constituent la membrane (voir la figure 1.2).

### 1.2.3 Variations de l'énergie et conditions aux limites

Pour une variation des variables et des bords de l'intégration

$$\psi(s) = \psi_0(s) + \delta\psi, \quad (1.9)$$

$$\rho(s) = \rho_0(s) + \delta\rho, \quad (1.10)$$

$$z(s) = z_0(s) + \delta z, \quad (1.11)$$

$$P_\rho(s) = P_{\rho_0}(s) + \delta P_\rho, \quad (1.12)$$

$$P_\psi(s) = P_{\psi_0}(s) + \delta P_\psi, \quad (1.13)$$

$$P_z(s) = P_{z_0}(s) + \delta P_z, \quad (1.14)$$

$$\underline{s} = \underline{s}_0 + \delta \underline{s}, \quad (1.15)$$

$$\bar{s} = \bar{s}_0 + \delta \bar{s}, \quad (1.16)$$

on trouve l'expression de la variation de l'énergie

$$\begin{aligned} \delta \tilde{E} = & \int_{\underline{s}}^{\bar{s}} ds \left\{ \left[ \frac{\partial \tilde{L}}{\partial \psi} - \frac{d}{ds} \frac{\partial \tilde{L}}{\partial \dot{\psi}} \right] \delta \psi + \left[ \frac{\partial \tilde{L}}{\partial \rho} - \frac{d}{ds} \frac{\partial \tilde{L}}{\partial \dot{\rho}} \right] \delta \rho + \left[ \frac{\partial \tilde{L}}{\partial z} - \frac{d}{ds} \frac{\partial \tilde{L}}{\partial \dot{z}} \right] \delta z + \frac{\partial \tilde{L}}{\partial P_\rho} \delta P_\rho \right. \\ & \left. + \frac{\partial \tilde{L}}{\partial P_\psi} \delta P_\psi + \frac{\partial \tilde{L}}{\partial P_z} \delta P_z \right\} - \tilde{H} \delta s \Big|_{\underline{s}}^{\bar{s}} + \frac{\partial \tilde{L}}{\partial \psi} \delta \psi \Big|_{\underline{s}}^{\bar{s}} + \frac{\partial \tilde{L}}{\partial \rho} \delta \rho \Big|_{\underline{s}}^{\bar{s}} + \frac{\partial \tilde{L}}{\partial z} \delta z \Big|_{\underline{s}}^{\bar{s}}, \quad (1.17) \end{aligned}$$

où l'hamiltonien  $\tilde{H} = \sum_i \dot{q}_i p_i - \tilde{L}$ .

Si les équations d'Euler-Lagrange sont satisfaites, la partie intégrale de l'équation précédente s'annule, ce qui nous donne en plus des relations géométriques

$$\dot{\rho} = \cos \psi \quad (1.18)$$

$$\dot{z} = \sin \psi, \quad (1.19)$$

les expressions suivantes

$$\dot{\psi} = \frac{P_\psi}{2\rho} - \frac{\sin \psi}{\rho} \quad (1.20)$$

$$\dot{P}_\psi = \left( \frac{P_\psi}{\rho} + \tilde{P}\rho^2 - P_z \right) \cos \psi + P_\rho \sin \psi \quad (1.21)$$

$$\dot{P}_\rho = \frac{P_\psi}{\rho} \left( \frac{P_\psi}{4\rho} - \frac{\sin \psi}{\rho} \right) + 2\tilde{\sigma} + 2\tilde{P}\rho \sin \psi \quad (1.22)$$

$$\dot{P}_z = 0. \quad (1.23)$$

On obtient une relation supplémentaire en dérivant l'équation (1.20) et en utilisant l'équation (1.21) pour remplacer la valeur de  $\dot{P}_\psi$ , on a donc

$$2 \cos \psi \left( \dot{\psi} + \frac{\sin \psi}{\rho} \right) + 2\rho \left( \ddot{\psi} + \frac{\dot{\psi} \cos \psi \rho - \cos \psi \sin \psi}{\rho^2} \right) = \left( \frac{P_\psi}{\rho} + \tilde{P}\rho^2 - P_z \right) \cos \psi + P_\rho \sin \psi. \quad (1.24)$$

Considérons maintenant le terme

$$\tilde{H} \delta s \Big|_{\underline{s}}^{\bar{s}} = \tilde{H}(\bar{s}) \delta \bar{s} - \tilde{H}(\underline{s}) \delta \underline{s}. \quad (1.25)$$

La variation  $\delta \tilde{E}$  doit s'annuler pour des variations quelconques  $\delta \underline{s}$  et  $\delta \bar{s}$ , qui sont indépendantes car on ne fixe pas la longueur d'arc totale. On a alors  $\tilde{H}(\underline{s}) = \tilde{H}(\bar{s}) = 0$ . Comme  $\tilde{L}$  est indépendant de  $s$ ,  $\tilde{H}$  l'est également, ce qui nous donne la relation

$$\tilde{H} = \frac{P_\psi^2}{4\rho} + p_\psi \left( -\frac{\sin \psi}{\rho} - C_0 \right) - 2\tilde{\sigma}\rho + P_\rho \cos \psi - \tilde{P}\rho^2 \sin \psi = 0. \quad (1.26)$$

Dans ce qui suit, nous n'utilisons que des variables sans dimensions et nous omettons le signe  $\sim$  afin d'alléger les écritures.

Notre but est d'exprimer toutes les variables  $q$  et  $P_q$  en fonction de la longueur d'arc de façon à annuler  $\delta E$  pour différentes valeurs de l'aire et du volume. Le système d'équations précédent ne dépend pas implicitement de  $A$  et  $V$  mais de la tension de surface  $\sigma$  et de la pression  $P$ . On fait alors varier  $P$  et  $\sigma$  et on cherche, à posteriori, les valeurs de  $A$  et  $V$  en intégrant les équations (1.4) et (1.5).

On intègre ensuite le système d'équations par la méthode de Runge-Kutta d'ordre 4 [28]. Dans ce qui suit, nous prenons respectivement  $\underline{s}$  et  $\bar{s}$  les longueurs d'arc au niveau du premier et du deuxième cercle de détachement du container s'ils existent, i. e. s'il y a confinement. Pour le cas des tores libres  $\underline{s}$  et  $\bar{s}$  sont les longueurs d'arc au niveau du plan médian (l'axe  $\vec{o}\vec{\rho}$ ).

Pour les conditions aux limites, on doit distinguer trois cas : les tores libres qui ne touchent pas le confinement, les tores qui touchent le confinement en un seul cercle et enfin ceux qui sont confinés en une surface.

### Tores libres

Lorsque la membrane interne ne touche pas le confinement, on choisit de commencer l'intégration au point défini par les variables suivantes

$$\rho_0 = \rho(\underline{s}) = 1, \quad (1.27)$$

$$z_0 = z(\underline{s}) = 0, \quad (1.28)$$

$$\psi_0 = \psi(\underline{s}) = \frac{\pi}{2}. \quad (1.29)$$

On a alors  $\cos \psi_0 = 0$  et  $\sin \psi_0 = 1$ .

Lorsque l'on cherche les solutions symétriques par rapport à l'horizontal, on fixe  $\ddot{\psi}_0 = 0$ . Ceci est dû au fait que  $\dot{\psi}_0(\bar{s})$  et  $\dot{\psi}_0(\underline{s})$ , qui est la courbure juste après  $\underline{s}$  et juste avant  $\bar{s}$ , doivent être égales car elles sont les reflets l'une de l'autre via la symétrie par rapport au plan horizontal. Dans ce cas, on a  $P_{\rho_0} = 0$ , à partir de l'équation (1.24). Si on n'a pas la symétrie haut/bas on intègre les équations pour toutes les valeurs possibles de  $\ddot{\psi}_0$ , on dit dans ce cas qu'on effectue un scan sur  $\ddot{\psi}_0$ .

Sachant que

$$P_\psi = 2\rho \left( \dot{\psi} + \frac{\sin \psi}{\rho} \right), \quad (1.30)$$

on a

$$P_{\psi_0} = 2 \left( \dot{\psi}_0 + 1 \right). \quad (1.31)$$

On fait varier les valeurs de  $\dot{\psi}_0$  de manière à avoir à la fin de l'intégration un retour au point de départ avec les mêmes tangentes et les mêmes courbures, ceci se fait en ajustant au fur et à mesure la valeur  $\dot{\psi}_0$  par la méthode de la bisection.

Enfin, on détermine  $P_{z_0}$  en utilisant la relation (1.24) où  $P_z$  reste la seule inconnue.

### **Tores confinés en un seul cercle**

Pour comprendre le confinement en un seul cercle, on peut imaginer le cas d'une feuille de papier roulée en cylindre que l'on plaque contre un mur. Au début, lorsque la feuille frôle le mur, le contact se fait sur une seule ligne sans modifier la forme cylindrique du papier. Cependant, si on augmente la force avec laquelle on plaque la feuille, la courbure au niveau de la ligne où le papier touche le mur devient de plus en plus petite jusqu'à ce qu'elle s'annule et devient égale à la courbure du mur.

Dans le cas des membranes lipidiques dans un container, le même phénomène apparaît. Si on prend une membrane interne qui ne touche pas encore le confinement, on augmente son aire, celle-ci touche le confinement sphérique en un seul cercle. Au début, la force de contact est quasi-nulle et la courbure au niveau du cercle de contact est la même que pour le cas libre. Puis, si on augmente l'aire, la force de contact croît et la courbure au niveau du cercle de contact diminue, jusqu'à atteindre la valeur minimale qui est celle du container. Le confinement se traduit par la discontinuité de la dérivée  $\ddot{\psi}$ . En effet, même si les formes sont symétriques par rapport à l'horizontale, la valeur de  $\ddot{\psi}$  au niveau de la ligne de contact ne s'annule pas. Dans ce cas, les conditions initiales sont fixées de la même manière que pour le tore libre en effectuant un scan sur la valeur initiale de  $\ddot{\psi}$ .

### **Tores confinés en une surface**

Dans le cas du confinement en une surface, on effectue une bisection sur l'angle de détachement  $\alpha$ , de manière à avoir à la fin de l'intégration un retour à un point du container avec la bonne tangente et la bonne courbure. Il est important de noter la

différence avec le cas libre. Dans le cas d'un confinement en une surface la courbure initiale est fixée par le confinement (alors qu'elle peut varier pour un tore libre) et l'angle de détachement est variable (alors que dans le cas libre on n'a pas d'angle de détachement).

La tangente est fixée par le container, c'est à dire

$$\psi(\bar{s}) = \psi_c(\bar{s}) = \alpha \quad (1.32)$$

$$\psi(\underline{s}) = \psi_c(\underline{s}) \quad (1.33)$$

où l'indice  $c$  désigne tout ce qui est relatif au container.

On ajoute la condition sur les courbures perpendiculaires aux lignes de contact [29]

$$\dot{\psi}(\bar{s}) = \dot{\psi}_c(\bar{s}) + \sqrt{\omega} \quad (1.34)$$

$$\dot{\psi}(\underline{s}) = \dot{\psi}_c(\underline{s}) + \sqrt{\omega} \quad (1.35)$$

avec  $\omega$  le coefficient d'adhésion entre la membrane interne et le confinement. Dans ce qui suit nous nous limitons au cas où  $\omega = 0$  ( le cas  $\omega \neq 0$  est considérée dans la section 7).

Les coordonnées dans le plan et l'angle  $\psi$  à la ligne de détachement sont alors simplement

$$\rho_0 = \sin \alpha \quad (1.36)$$

$$z_0 = -\cos \alpha \quad (1.37)$$

$$\psi_0 = \alpha. \quad (1.38)$$

En remplaçant le tout dans l'équation (1.30) on a

$$P_{\psi_0} = 2 \sin \alpha (\sqrt{\omega} + 2). \quad (1.39)$$

On détermine ensuite  $P_{z_0}$  à l'aide d'un scan et enfin, on déduit la dernière variable  $P_{\rho_0}$  à l'aide de l'équation (1.26).

## 1.3 Résultats axisymétriques

En utilisant la méthode exposée ci dessus, nous cherchons à établir un diagramme des phases  $(a, v_r)$  de la membrane, avec  $v_r$  le volume réduit invariant par rééchelonnement

$$v_r = \frac{v}{a^{3/2}}. \quad (1.40)$$

Pour cela, on cherche d'abord à retrouver les solutions libres, déjà obtenues par Seifert [30]. En effet, il y a forcément des régions du diagramme des phases  $(a, v_r)$  dans lesquelles la membrane interne ne touche pas encore le confinement. Dans tout ce qui suit, l'aire, le volume et l'énergie de courbure sont normalisés par rapport à ceux du container.

### 1.3.1 Formes libres

L'énergie de courbure est invariante par rééchelonnement, en conséquence, le seul paramètre restant est le volume réduit  $v_r$ . On trouve ainsi plusieurs types de solutions. On a toujours affaire à des tores, ce qui change c'est la forme que l'on obtient si on effectue une coupe à un angle azimutal fixé. Les minima locaux sont de types circulaires, en faucille, discoïdaux et stomatocytes (voir la figure 1.4). Seuls les stomatocytes ne possèdent pas la symétrie haut/bas. Dans le cas des tores libres, on trouve trois types de minima globaux. Pour un volume réduit  $0 < v_r < 0.58$  la solution la plus stable est la forme en faucille, pour  $0.58 < v_r < 0.71$  ce sont les tores circulaires qui sont les plus stables. Enfin pour  $v_r > 0.71$  on obtient les formes circulaires non axi-symétriques.

Ainsi, pour les solutions libres, seul le volume réduit reste un paramètre pertinent. Une fois celui-ci fixé on peut faire varier l'aire sans que l'énergie ne change (en faisant varier également le volume de manière à avoir  $v_r = \frac{v}{a^{3/2}} = \text{constante}$ ). Cependant, on ne peut pas dire la même chose du cas confiné. Si on augmente l'aire et le volume d'une solution qui ne touche pas le container, elle le touchera certainement à partir d'une certaine valeur limite de l'aire et du volume .

Dans la figure 1.5, nous avons représenté en lignes pleines le volume réduit en fonction de l'aire pour les branches de solutions de différents types qui frôlent le confinement en



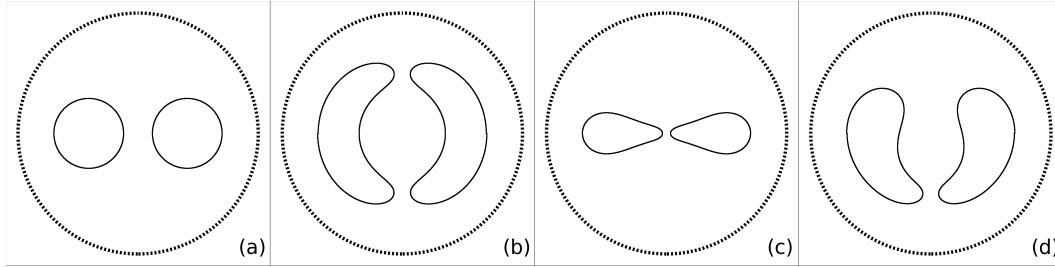


FIGURE 1.4: Coupes azimutales des tores libres axisymétriques. Les lignes continues représentent la membrane interne et les lignes discontinues la paroi sphérique. Le profil de la membrane est soit circulaire (a), en faucille (b), discoïdal (c) ou stomatocyte (d) [30].

un seul cercle sans être affecté par celui-ci. En inset, nous avons représenté l'énergie de courbure en fonction du volume réduit pour ces mêmes solutions.

Une fois ces branches obtenues on peut diminuer l'aire avec un redimensionnement, sans changer le volume réduit. La solution reste toujours libre et on obtient ainsi des régions de solutions limitées à droite (du côté des grandes surfaces) par la ligne des solutions qui frôlent le confinement en un seul cercle.

La ligne cyan (1) représente les solutions de formes en faucille et en effectuant des redimensionnements on trouve toute la région balayée par cette branche en allant vers des aires plus petites : c'est la région verte des solutions libres en faucille. La limite inférieure de cette branche, lorsque le volume réduit tend vers zéro, correspond à une aire et une énergie de courbure qui tendent vers 2. Ceci correspond à la forme limite de deux sphères concentriques reliées par deux canaux infinitésimaux au niveau des deux pôles, et l'énergie de courbure obtenue est égale à deux fois l'énergie de la sphère unité. La limite haute de cette branche représente un point critique commun entre les parties stable et instable de la branche en faucille. La partie instable est représentée en ligne discontinue dans l'inset, et n'est pas discutée par la suite.

La ligne rouge (2) représente les formes circulaires qui frôlent le confinement en un seul cercle. Nous déduisons toute la région des solutions circulaires en diminuant l'aire de la

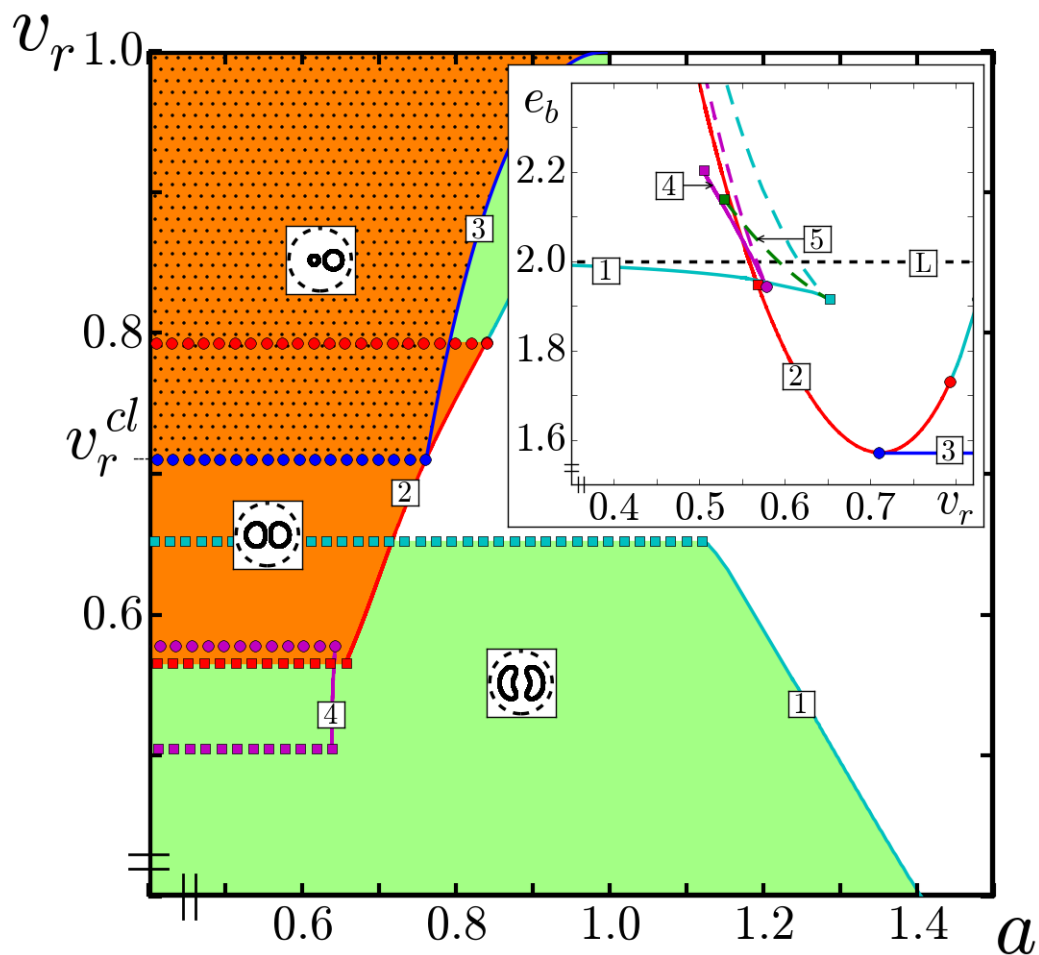


FIGURE 1.5: Diagramme des phases du volume réduit  $v_r$  en fonction de l'aire  $a$  pour les solutions sans contact avec le confinement. Il y a trois phases illustrées chacune par une coupe d'une solution en inset et une couleur. Ainsi, la région des tores en faucille est en vert, celle des tores circulaires en orange et celle des tores non-axisymétriques circulaires est en orange hachurée. En inset, le graphe l'énergie de courbure  $e_b$  en fonction de  $v_r$  des lignes limites de chaque phase.

courbe rouge (2) tout en gardant son volume réduit fixe via des redimensionnements, c'est la région orange claire. Cette phase contient une solution particulière qui est le minimum global de l'énergie de courbure : c'est le tore de Clifford [31]. Ce tore a la particularité d'être formé de la translation d'un cercle de rayon  $r$  le long d'un autre cercle de rayon  $R = \sqrt{2}r$ . Son volume réduit vaut  $v_r = v_r^{cl} = \frac{3}{2^{5/4}\pi^{1/2}} \simeq 0.71$ , il est caractérisé par une coupe azimutale en forme de cercle parfait. Pour des volumes réduits plus grands que  $v_r^{cl}$ , la coupe circulaire se déforme en une ellipse plus allongée parallèlement à l'axe  $o\vec{z}$ . A partir de  $v_r > 0.79$ , cette branche présente une transition continue vers la forme en faucille, c'est à dire que la coupe ayant une forme allongée selon  $o\vec{z}$  se plie sur elle même changeant ainsi le signe de la courbure. La limite haute de cette branche est le point d'aire et de volume réduit égaux à un, la solution tend vers la forme d'une sphère identique au confinement traversée par un cylindre creux de rayon infinitésimal parallèle à l'axe  $o\vec{z}$ . La limite des volumes réduits nuls correspond à une solution de coupe azimutale quasi-circulaire de rayon infinitésimal.

La ligne bleue (3) représente les transformations conformes du tore de Clifford. Dans la section 4, nous développons plus amplement les transformations conformes. Pour l'instant, nous donnons uniquement leurs propriétés. Lorsqu'on applique une transformation conforme à une solution libre on brise sa symétrie axiale, on change son aire, son volume et son volume réduit tout en laissant invariante son énergie de courbure. Du fait que le tore de Clifford est la forme toroïdale d'énergie minimale, lorsqu'on lui applique cette transformation, on se déplace dans le diagramme des phases en étant sûr que cette solution transformée non axisymétrique a une énergie plus faible que la solution axisymétrique qui est sur le même point du diagramme.

En effectuant des transformations conformes au tore de Clifford qui touche le confinement en un seul cercle, on obtient la ligne bleue (3). La limite haute de la ligne bleue représente le tore de Clifford extrêmement déformé. Il prend la forme d'une sphère avec un pincement infinitésimal extrêmement excentré, son aire et son volume réduit valent alors 1. L'existence de formes stables transformées conformes du tore de Clifford a déjà été établie expérimentalement [32, 33], comme montré dans la figure 1.6.

La branche magenta (4) de la figure (1.5) représente la branche des solutions discoïdales

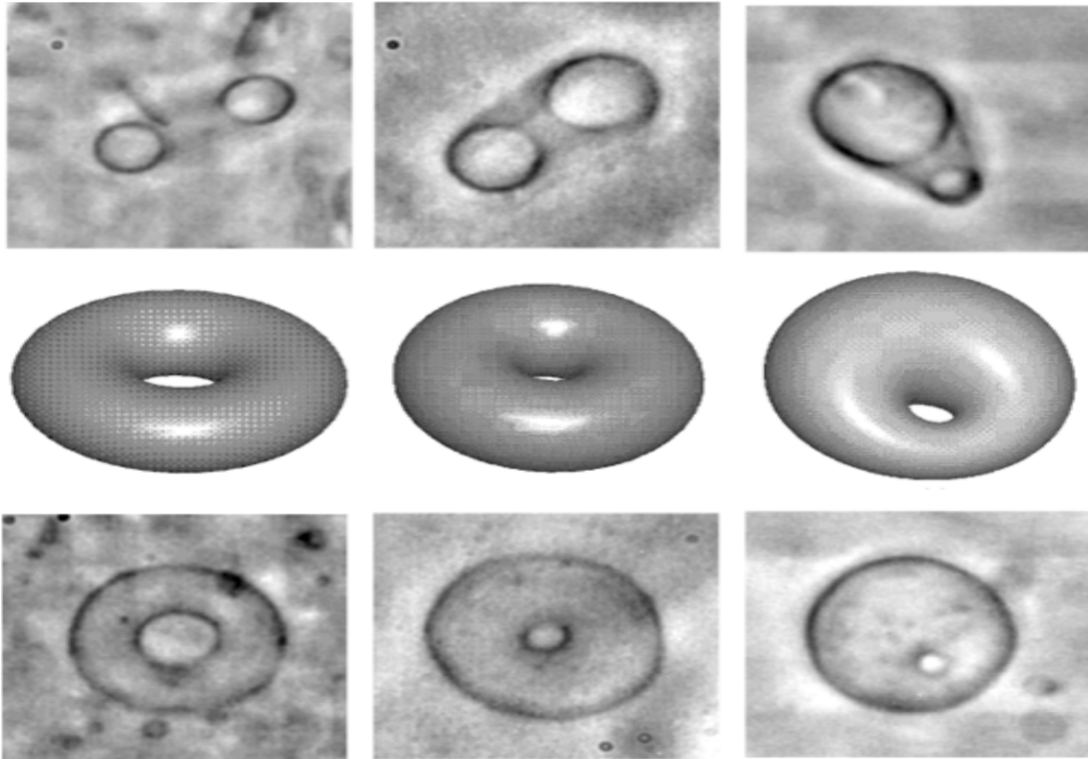


FIGURE 1.6: Observations in-vitro de membranes toroïdales pour différents volumes réduits [32]. Chaque colonne représente une même membrane. La première et la dernière ligne représente des clichés de l'expérience pris par des angles différents. La deuxième ligne est la modélisation 3D de la membrane toroïdale.

qui frôlent le confinement en un seul cercle. On en déduit la région où on peut avoir des formes discoïdales stables à gauche de cette branche dans le diagramme des phases. La limite inférieure de cette branche représente les formes discoïdes qui ont un vide intérieur infiniment petit. Tandis que la limite des grands volumes réduits (le cercle magenta) représente le point critique où la branche stable rejoint la branche instable représentée en ligne magenta discontinue dans l'inset.

La branche stomatocyte, la ligne verte (5) dans l'inset ne contient que des maxima, on ne la considère donc plus dans ce qui suit.

Les différentes lignes (1)-(4) que l'on a représenté dans le diagramme des phases ont le même volume réduit pour certains points, il s'ensuit automatiquement des zones de chevauchement lorsqu'on effectue les redimensionnements. Comme, par exemple, le point à aire et volume réduit égaux à 0.6, qui est commun à la région des formes circulaires et des formes en faucilles libres. C'est pour cela que, pour ces zones de chevauchement, nous devons comparer les énergies de courbure grâce au diagramme représenté dans l'inset et considérer la forme la plus stable.

En résumé, nous avons trois régions distinctes, la région des formes en faucilles libres en vert, la région des formes circulaires libres en orange et la région des transformés conformes du tore de Clifford en orange hachurée. La zone blanche est la zone où on anticipe un contact entre la membrane et le confinement. Les lignes représentées dans la figure 1.5, représente la limite des formes libres qui frôlent le confinement en un seul cercle. En augmentant légèrement l'aire tout en gardant le volume réduit fixe (on augmente ainsi le volume également) on a forcément l'apparition de zones de contact avec la paroi.

### 1.3.2 Formes axisymétriques confinées

Considérons maintenant le cas où la membrane interne touche le confinement en un seul cercle, ceci est obtenu en augmentant l'aire des solutions libres. Cela se traduit par une diminution de la courbure au niveau du cercle de contact. La courbure diminue petit à petit jusqu'à ce que la membrane interne épouse parfaitement le confinement, c'est à dire que la courbure au niveau du cercle de contact atteint celle du container.

Dans cette phase la courbure reste une variable continue sur toute la surface de la membrane interne, par contre sa dérivée  $\frac{d(\frac{d\psi}{ds})}{ds} = \ddot{\psi}$  est discontinue. Ceci est le résultat de la force  $f_\rho = 2\pi\ddot{\psi}$  agissant dans la direction radiale au niveau du cercle de contact. Au delà de la limite où la courbure de la membrane interne est égale à celle du container, le confinement se fait sur une surface.

Dans les figures 1.7-1.8, nous montrons le diagramme des phases  $(a, v_r)$  ainsi que les énergies de courbures  $e_b$  en fonction de  $v_r$  pour les solutions libres et confinées ax-

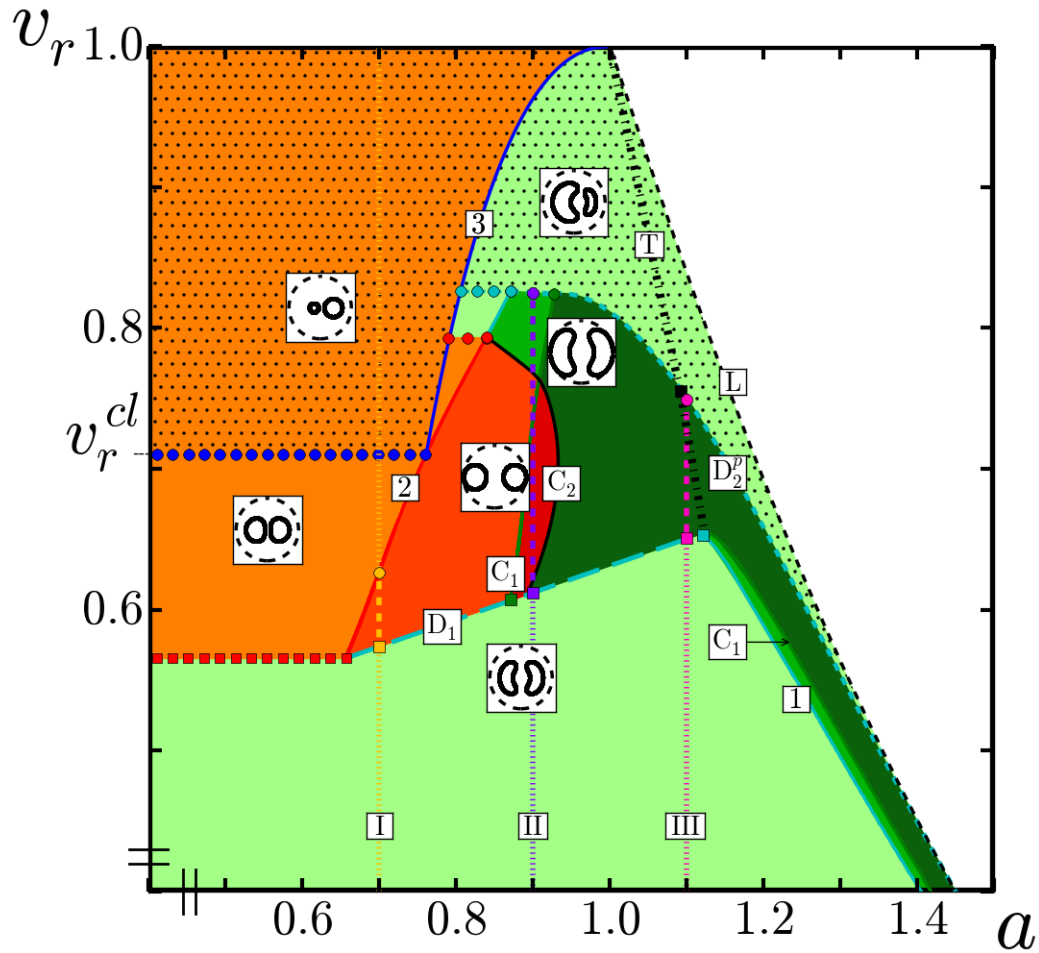


FIGURE 1.7: Diagramme des phases du volume réduit en fonction de l'aire des solutions confinées axisymétriques. Les phases non-axisymétriques sont hachurées. En orange-rouge les formes circulaires et en vert les formes en faucille. Les couleurs claires représentent les phases libres. Les couleurs intermédiaires représentent les phases de confinement en un seul cercle. Les couleurs foncées correspondent au confinement en une surface. La région blanche est la région des self-contacts. Pour la signification des lignes voir le texte.

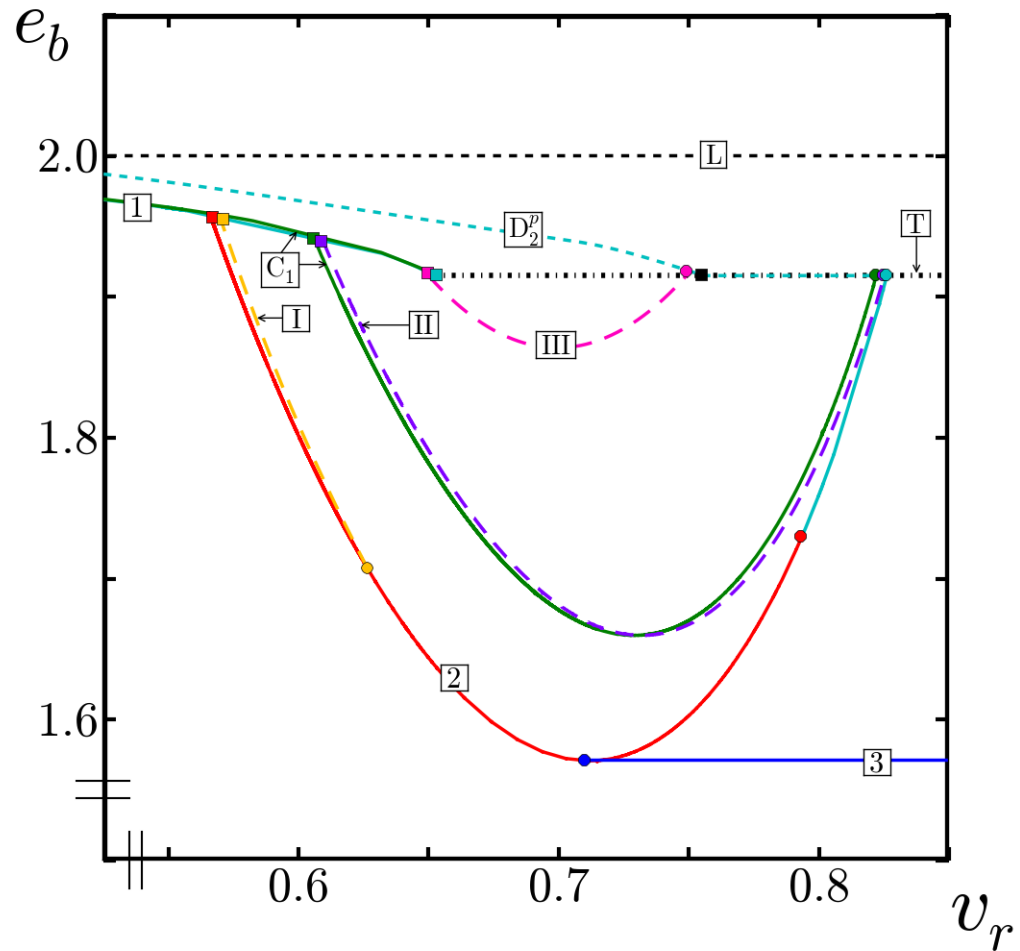


FIGURE 1.8: Énergies de courbure  $e_b$  en fonction du volume réduit  $v_r$  des branches limitant les différentes phases de la figure 1.7, ainsi que des lignes à aire fixes I-III.

isymétriques. Les régions claires sont les régions où la membrane interne ne touche pas la paroi. A droite des lignes cyan (1) et rouge (2) le confinement se fait en un seul cercle. Ce sont les régions vertes pour la forme en faucille et oranges pour la forme circulaire. La ligne verte foncée ( $C_1$ ) représente la limite pour laquelle la courbure de la membrane interne est égale à celle du confinement, donc à droite de cette limite (pour des aires plus grandes) on a une surface de contact qui est une portion de sphère. La ligne ( $C_2$ ) représente la transition continue entre les formes circulaires et les formes en faucille.

Pour un volume réduit  $v_r < 0.65$  ces solutions confinées coexistent avec les formes en faucille libres. En comparant les énergies de courbures, on trouve une ligne de transition de phase discontinue (la ligne bleu ciel ( $D_1$ )) en dessous de laquelle les tores en faucille libres sont les minima globaux. Une première estimation de la limite supérieure de la région des tores confinés axisymétriques peut être obtenue en comparant l'énergie de courbure de ces solutions avec les énergies des transformées conformes des tores libres, cette limite est représentée par la ligne ( $D_2^p$ ). Dans la section 5, on montre que cette ligne est bien plus basse. Certaines des solutions représentées dans cette figure ne sont que des minima locaux.

Considérons d'abord le tore libre en faucille de volume réduit  $v_r = 0.65$  (le carré bleu ciel). Il a la plus petite énergie de courbure de toute la branche des tores libres en faucille. Une transformation conforme de sa surface le long de l'axe ( $ox$ ) ne change pas son énergie mais augmente son volume réduit et brise la symétrie axiale (la ligne en pointillées noires ( $T$ )). A l'aide d'un redimensionnement et d'une transformation de cette solution on peut atteindre n'importe quel point du diagramme des phase qui est à gauche de la ligne noire ( $T$ ). On aura ainsi plusieurs zones de chevauchement où l'on doit comparer les énergies de courbures des formes axisymétriques avec les énergie des formes obtenues par transformations du tore libre en faucille de volume réduit  $v_r = 0.65$ . Le long de la ligne ( $T$ ), on trouve que l'énergie de la forme non-axisymétrique est inférieure à la forme axisymétrique pour un volume réduit  $v_r \geq 0.76$  (carré noir). En répétant cette comparaison pour de plus faibles surfaces on obtient la ligne ( $D_2^p$ ) qui représente la ligne où les solutions transformées conformes et les solutions axisymétriques ont des énergies égales. Cette courbe se termine lorsqu'elle rencontre la branche circulaire des



tores libres qui frôlent le confinement en un seul cercle (le cercle bleu ciel). La partie à droite du carré noir de cette limite supérieure où l'axisymétrie se brise est obtenue en comparant les énergies des transformées conformes des autres tores libres en faucille avec les solutions axisymétriques en contact avec le container. La ligne ( $L$ ) représente les transformées conformes de la solution à aire maximale, elle est constituée de deux sphères concentriques avec deux canaux infinitésimaux au niveau des deux pôles, son aire est égale à 2 et son volume réduit vaut 0. La ligne ( $L$ ) représente la limite à droite de laquelle on a des self-contacts. Son expression analytique est donnée par

$$v_r = \frac{1 - (a - 1)^{\frac{3}{2}}}{a^{\frac{3}{2}}}. \quad (1.41)$$

Afin de mieux comprendre la zone des tores confinés dans le centre du diagramme des phases, considérons les lignes à aires constantes ( $I$ ) – ( $III$ ) de la figure 1.7. Pour de faibles volumes réduits les solutions sont des tores en faucille libres. Leur énergie de courbure ne dépend pas de l'aire  $a$  et correspond à la courbe (1) dans la figure 1.8. Lorsque l'on traverse la ligne ( $D_1$ ) dans le diagramme des phases (les carrés jaune, violet et rose respectivement), une transition de phase discontinue vers un état confiné est préférable énergétiquement. Selon la valeur de  $a$ , la membrane peut adopter une forme confinée en un seul cercle, c'est le cas de la courbe  $I$ , ou une forme confinée en une surface c'est le cas des courbes  $II$  et  $III$ . Dans le cas  $a = 0.7$  (la courbe jaune  $I$ ) la solution adopte à nouveau une forme libre pour un volume réduit  $v_r = 0.63$  (cercle jaune). L'énergie de courbure correspondante est donnée par la courbe (2) (entre les cercles jaune et bleu) puis par la courbe (3) à droite du cercle bleu dans la figure 1.8. Dans les deux autres cas correspondants à  $a = 0.9$  et  $a = 1.1$ , nous pouvons observer plus en détails comment la limite supérieure préliminaire ( $D_2^p$ ) des régions confinées axisymétriques peut être obtenue. L'énergie de courbure correspondant aux solutions confinées des courbes  $II$  et  $III$  diminue d'abord avec l'augmentation du volume réduit, puis augmente jusqu'à ce qu'elle soit égale à celle d'une transformée conforme d'une solution libre (les cercles violet et rose respectivement). On s'attend alors à une transition vers une forme libre non-axisymétrique pour des volumes réduits plus grands. En réalité, la membrane ne devient pas un tore libre à nouveau mais

préfère adopter une forme confinée non-axisymétrique. C'est ce que l'on étudie dans la prochaine section.

## 1.4 Transformations conformes pour générer des solutions non-axisymétriques

L'étude des solutions non-axisymétriques est motivée par l'observation effective de membranes toroïdales libres transformées conformes de solutions axisymétriques (figure 1.6). La brisure de symétrie est obtenue à l'aide de transformations conformes. Ces transformations ont la propriété de conserver l'énergie de courbure. On peut donc choisir une combinaison adéquate de translations et d'inversions de manière à générer des formes non-axisymétriques à partir de formes axisymétriques. Dans le cas sans confinement nous appliquons ces transformations au tore de Clifford. On ne se soucie pas de la stabilité de la forme obtenue, car elle a déjà l'énergie minimale globale de toutes les formes toroïdales possibles. De plus, connaissant la paramétrisation du tore de Clifford symétrique, nous pouvons obtenir une relation entre  $a$  et  $v_r$  pour toutes les formes transformées de ce tore, c'est ce que nous développons dans la première sous-section.

### 1.4.1 Transformations conformes du tore de Clifford

Les transformations conformes de la forme

$$\mathbf{X}' = \frac{\frac{\mathbf{X}}{\mathbf{X}^2} + \mathbf{\Lambda}}{\left(\frac{\mathbf{X}}{\mathbf{X}^2} + \mathbf{\Lambda}\right)^2} \quad (1.42)$$

conserve la topologie toroïdale de la surface de paramétrisation  $\mathbf{X}(\xi^1, \xi^2) \in \mathbb{R}^3$  et laisse son énergie de courbure invariante. Elles consistent en une inversion autour de l'origine, suivie d'une translation le long d'un vecteur  $\mathbf{\Lambda}$ , puis d'une seconde inversion autour de l'origine. La surface transformée  $\mathbf{X}'(\xi^1, \xi^2)$  a un volume réduit qui peut être plus large ou égal au volume réduit de la surface d'origine.  $\mathbf{X}'$  peut toujours être redimensionné pour rester à l'intérieur du container. Pour un volume réduit supérieur à  $v_r^{cl}$ , les minima

globaux sont les transformés conformes non-axisymétriques du tore de Clifford car leur énergie de courbure,  $e_b^{cl} = \frac{\pi}{2}$  (la ligne bleue (3) dans l'inset de la figure (1.5)) est toujours plus petite que celle de la solution axisymétrique ayant le même volume réduit (la courbe rouge (2) dans l'inset de la figure (1.5)) [30,34,35].

La forme générale de la transformation conforme 1.42 inclut les trois composantes du vecteur  $\mathbf{\Lambda} = (\Lambda_x, \Lambda_y, \Lambda_z)$ . Comme on applique la transformation à des formes axisymétriques, seuls deux paramètres sont pertinents. On peut choisir, sans perdre le caractère général de la transformation, comme axe de symétrie l'axe  $z$  et une composante  $\Lambda_y$  nulle. Le tore de Clifford ayant une coupe azimutale parfaitement circulaire, les transformations conformes selon son axe de symétrie ne représente qu'un simple redimensionnement. Il ne reste donc qu'un seul paramètre  $\Lambda_x$  pour définir la transformation conforme spéciale qui génère les minima globaux non-axisymétriques [35], avec

$$\mathbf{\Lambda} = \Lambda_x \mathbf{x}. \quad (1.43)$$

Pour obtenir la courbe bleue (3) dans la figure 1.5, on applique la transformation au tore de Clifford frôlant le confinement en un seul cercle. Ses rayons générateurs sont  $r = \frac{1}{\sqrt{2}+1}$  qui est le rayon de la coupe azimutale, et  $R = \sqrt{2}r$ , qui est le rayon du vide intérieur. En coordonnées polaires  $(\theta, \phi)$ , la surface de ce tore s'écrit

$$\mathbf{X}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{2}+1} \left( (\sqrt{2} + \sin \theta) \cos \phi, (\sqrt{2} + \sin \theta) \sin \phi, \cos \theta \right).$$

Si on lui applique la transformation (1.42), le tore sort du container. On doit alors utiliser un redimensionnement de facteur  $(1 - \Lambda^2)$  et une translation de vecteur  $\mathbf{\Lambda}$  pour le repositionner au centre du confinement de manière à ce qu'il frôle le confinement en un seul cercle. La transformation qui vérifie ces conditions est

$$\bar{\mathbf{X}} = \mathbf{X}' (1 - \Lambda^2) + \mathbf{\Lambda}, \quad (1.44)$$

ainsi, le transformé de chaque point du container reste sur la sphère. Les formes obtenues sont des cyclides de Dupin [36, 37], définies comme suit. En partant d'une ellipse d'excentricité  $e$ , on trace une hyperbole d'excentricité  $\frac{1}{e}$  ayant comme apices les points

focaux de l'ellipse. La paramétrisation de ces deux courbes est

$$\mathbf{X}_e = (\lambda \cos v, \lambda' \sin v), \quad (1.45)$$

$$\mathbf{X}_h = \left( \sqrt{\lambda^2 - \lambda'^2} \cosh u, \lambda' \sinh u \right) \quad (1.46)$$

avec  $\lambda$  et  $\lambda'$ , les demi-axes de l'ellipse, l'excentricité  $e$  est alors

$$e = \sqrt{1 - \frac{\lambda'^2}{\lambda^2}}. \quad (1.47)$$

Les lignes des courbures principales sont obtenues à partir de ces deux coniques. Considérons une branche de l'hyperbole, on trace une ligne entre le point de coordonnée  $v$  pour l'ellipse et  $u$  pour l'hyperbole. Cette ligne croise la surface du cyclide au point  $M$  où les deux sphères de courbures principales sont centrées au point  $v$  de l'ellipse et  $u$  de l'hyperbole et sont tangentes au point  $M$ . La distance entre les deux centres de courbures est donnée par  $d = \lambda \cosh u - \sqrt{\lambda^2 - \lambda'^2} \cos v$ . On définit ensuite le paramètre  $r$  tel que les rayons des deux sphères de courbure soient  $\lambda \cosh u - r$  pour l'ellipse et  $r - \sqrt{\lambda^2 - \lambda'^2} \cos v$  pour l'hyperbole. Ainsi, on obtient la surface intérieure du tore. Pour obtenir la surface extérieure, on considère l'autre branche de l'hyperbole, le point  $M$  est défini comme l'intersection des deux sphères de courbure mais dans ce cas, la plus petite sphère est à l'intérieur de la plus grande. Le paramètre  $r$  est défini d'une manière analogue avec un changement de signe.

Il a été démontré par Kléman, que pour minimiser la courbure moyenne, il faut que  $r$  prenne la valeur :

$$r = \pm \sqrt{\lambda^2 - \frac{\lambda'^2}{2}} \quad (1.48)$$

avec le signe  $+$  qui correspond à la surface interne et le signe  $-$  à la surface externe.

On génère ainsi toute la famille des transformées conformes du tore de Clifford. Le tore de Clifford en est un cas particulier où l'ellipse est un cercle et l'hyperbole une droite, i. e.  $\lambda = \lambda'$ .

Si on impose en plus que le cyclide touche le confinement en un cercle, on a la relation

$$2 \left( r + \sqrt{\lambda^2 - \lambda'^2} \right) + 2(\lambda - r) + 2 \left( r - \sqrt{\lambda^2 - \lambda'^2} \right) = 2 \quad (1.49)$$

ce qui nous donne

$$\lambda' = \sqrt{4\lambda - 2}. \quad (1.50)$$

Il ne reste que le paramètre  $\lambda$  pour déterminer les propriétés de l'ellipse et de l'hyperbole. Il est relié au paramètre de la transformation conforme  $\Lambda_x$  par la relation

$$\lambda = \frac{\left(\frac{3}{2} - \sqrt{2}\right) (1 - \Lambda_x^2)}{1 - (17 - 12\sqrt{2}) \Lambda_x^2} - \frac{1}{2} \quad (1.51)$$

et à l'excentricité  $e$  par

$$e = \frac{\sqrt{\lambda^2 - 4\lambda + 2}}{\lambda}. \quad (1.52)$$

En utilisant les formules générales de l'aire et du volume des cyclides de Dupin [36,37], on obtient pour le cas particulier des transformées conformes du tore de Clifford qui touche le confinement en un seul cercle les valeurs suivantes

$$a(\lambda) = 4(1 - \lambda)\lambda \left[ \mathcal{E}(e(\lambda)^2) + \frac{e^2(\lambda) - 1}{2} \mathcal{K}(e(\lambda)^2) \right], \quad (1.53)$$

$$v(\lambda) = 8\lambda^3 \left[ \frac{(1 - \lambda)^2}{\lambda^2} \mathcal{E}(e(\lambda)^2) + \frac{e(\lambda)^2 - 1}{2} \left( 1 + \frac{3e(\lambda)^2 - 1}{4} \right) \mathcal{K}(e(\lambda)^2) \right] \quad (1.54)$$

Avec  $\mathcal{K}(e(\lambda)^2)$  et  $\mathcal{E}(e(\lambda)^2)$  les intégrales elliptiques complètes du premier et du second type respectivement [38]. Ainsi, on déduit la courbe paramétrée  $(a(\lambda), v_r(\lambda))$  des transformations conformes du tore de Clifford qui touchent le confinement en un seul cercle, c'est la courbe bleue (3) de la figure (1.5).

À gauche de cette courbe, on peut s'attendre à avoir une transition continue de la phase non-axisymétrique sans confinement à la phase non-axisymétrique confinée. C'est pour cela qu'on cherche les transformées conformes des tores confinés en un seul cercle et des tores confinés en une surface. Cependant, si on applique la transformation à une forme confinée, nous devons tenir compte des conditions aux bords et de l'équilibre des forces agissant sur la membrane, c'est ce que nous développons dans la prochaine sous-section.

### 1.4.2 Transformations conformes de tores axisymétriques confinés

Considérons la transformation conforme (1.44) d'une surface axisymétrique  $\mathbf{X}$ ,

$$\bar{\mathbf{X}} = \frac{\frac{\mathbf{X}}{|\mathbf{X}|^2} + \boldsymbol{\Lambda}}{\left(\frac{\mathbf{X}}{|\mathbf{X}|^2} + \boldsymbol{\Lambda}\right)^2} (1 - \Lambda^2) + \boldsymbol{\Lambda}, \quad (1.55)$$

avec  $\boldsymbol{\Lambda} \in \mathbb{R}^3$ . On obtient la surface déformée  $\bar{\mathbf{X}}$  qui est axisymétrique uniquement lorsque  $\boldsymbol{\Lambda}$  est parallèle à l'axe de symétrie. Les vecteurs tangents de la surface transformée sont [39]

$$\bar{\mathbf{e}}_{\mathbf{a}} = \partial_a \bar{\mathbf{X}} = \frac{(1 - \Lambda^2)}{|\mathbf{X}_0 + \boldsymbol{\Lambda}|^2} \left( \mathbf{e}_{\mathbf{a}}^0 - \frac{2[(\mathbf{X}_0 + \boldsymbol{\Lambda}) \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{a}}^0] (\mathbf{X}_0 + \boldsymbol{\Lambda})}{|\mathbf{X}_0 + \boldsymbol{\Lambda}|^2} \right) \quad (1.56)$$

avec  $\mathbf{X}_0 = \frac{\mathbf{X}}{|\mathbf{X}|^2}$  et  $\mathbf{e}_{\mathbf{a}}^0 = \partial \mathbf{X}_0 = (\mathbf{e}_{\mathbf{a}} - 2(\mathbf{X} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{a}}) \mathbf{X}) / |\mathbf{X}|^2$ .

La métrique de la surface transformée, qui est définie par  $\bar{g}_{ab} = \bar{\mathbf{e}}_{\mathbf{a}} \cdot \bar{\mathbf{e}}_{\mathbf{b}}$  s'écrit

$$\bar{g}_{ab} = \frac{(1 - \Lambda^2)^2}{\left| \frac{\mathbf{X}}{|\mathbf{X}|^2} + \boldsymbol{\Lambda} \right|^4 |\mathbf{X}|^4} g_{ab}. \quad (1.57)$$

On oriente la normale dans le sens extérieure de la membrane. La transformée de la normale qui est  $\bar{\mathbf{n}} = \frac{\bar{\mathbf{e}}_{\mathbf{a}} \times \bar{\mathbf{e}}_{\mathbf{b}}}{|\bar{\mathbf{e}}_{\mathbf{a}} \times \bar{\mathbf{e}}_{\mathbf{b}}|}$  s'écrit alors

$$\bar{\mathbf{n}} = -\mathbf{n}_0 + \frac{2[\mathbf{n}_0 \cdot (\mathbf{X}_0 + \boldsymbol{\Lambda})] (\mathbf{X}_0 + \boldsymbol{\Lambda})}{|\mathbf{X}_0 + \boldsymbol{\Lambda}|^2} \quad (1.58)$$

où  $\mathbf{n}_0 = -\mathbf{n} + \frac{2(\mathbf{n} \cdot \mathbf{X}) \mathbf{X}}{|\mathbf{X}|^2}$ .

En calculant  $\partial_a \bar{\mathbf{e}}_{\mathbf{b}}$

$$\begin{aligned} \partial_a \bar{\mathbf{e}}_{\mathbf{b}} = & (1 - \Lambda^2) \left\{ \frac{\partial_a \mathbf{e}_{\mathbf{b}}^0}{|\mathbf{X}_0 + \boldsymbol{\Lambda}|^2} - \frac{2[(\mathbf{X}_0 + \boldsymbol{\Lambda}) \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{a}}^0] \mathbf{e}_{\mathbf{b}}^0}{|\mathbf{X}_0 + \boldsymbol{\Lambda}|^4} - \frac{2[(\mathbf{X}_0 + \boldsymbol{\Lambda}) \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{b}}^0] \mathbf{e}_{\mathbf{a}}^0}{|\mathbf{X}_0 + \boldsymbol{\Lambda}|^4} \right. \\ & \left. - 2(\mathbf{X}_0 + \boldsymbol{\Lambda}) \left[ \frac{g_{ab}^0 + (\mathbf{X}_0 + \boldsymbol{\Lambda}) \cdot \partial_a \mathbf{e}_{\mathbf{b}}^0}{|\mathbf{X}_0 + \boldsymbol{\Lambda}|^4} - \frac{4[(\mathbf{X}_0 + \boldsymbol{\Lambda}) \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{b}}^0][(\mathbf{X}_0 + \boldsymbol{\Lambda}) \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{a}}^0]}{|\mathbf{X}_0 + \boldsymbol{\Lambda}|^6} \right] \right\} \end{aligned}$$

et en le projetant sur la normale  $\bar{\mathbf{n}}$  on obtient le tenseur de courbure extrinsèque  $\bar{K}_{ab} = -\bar{\mathbf{n}} \cdot \partial_a \bar{\mathbf{e}}_b$

$$\begin{aligned}
 \bar{K}_{ab} &= (1 - \Lambda^2) \left\{ \frac{-K_{ab}^0}{|\mathbf{X}_0 + \Lambda|^2} \right. \\
 &\quad - 2 [\mathbf{n}_0 \cdot (\mathbf{X}_0 + \Lambda)] \left[ \frac{g_{ab}^0 + (\mathbf{X}_0 + \Lambda) \cdot \partial_a \mathbf{e}_b^0}{|\mathbf{X}_0 + \Lambda|^4} - \frac{4 [(\mathbf{X}_0 + \Lambda) \cdot \mathbf{e}_b^0] [(\mathbf{X}_0 + \Lambda) \cdot \mathbf{e}_a^0]}{|\mathbf{X}_0 + \Lambda|^6} \right] \\
 &\quad - \frac{2 [\mathbf{n}_0 \cdot (\mathbf{X}_0 + \Lambda)] (\mathbf{X}_0 + \Lambda)}{|\mathbf{X}_0 + \Lambda|^2} \left[ \frac{\partial_a \mathbf{e}_b^0}{|\mathbf{X}_0 + \Lambda|^2} - \frac{2 [(\mathbf{X}_0 + \Lambda) \cdot \mathbf{e}_a^0] \mathbf{e}_b^0}{|\mathbf{X}_0 + \Lambda|^4} - \frac{2 [(\mathbf{X}_0 + \Lambda) \cdot \mathbf{e}_b^0] \mathbf{e}_a^0}{|\mathbf{X}_0 + \Lambda|^4} \right] \\
 &\quad \left. + 4 [\mathbf{n}_0 \cdot (\mathbf{X}_0 + \Lambda)] \left[ \frac{g_{ab}^0 + (\mathbf{X}_0 + \Lambda) \cdot \partial_a \mathbf{e}_b^0}{|\mathbf{X}_0 + \Lambda|^4} - \frac{4 [(\mathbf{X}_0 + \Lambda) \cdot \mathbf{e}_b^0] [(\mathbf{X}_0 + \Lambda) \cdot \mathbf{e}_a^0]}{|\mathbf{X}_0 + \Lambda|^6} \right] \right\} \\
 &= \frac{(1 - \Lambda^2)}{|\mathbf{X}_0 + \Lambda|^2} \left\{ -K_{ab}^0 + \frac{2g_{ab}^0 [\mathbf{n}_0 \cdot (\mathbf{X}_0 + \Lambda)]}{|\mathbf{X}_0 + \Lambda|^2} \right\}. \tag{1.59}
 \end{aligned}$$

Si les lignes de courbures principales sont prises comme étant les lignes tangentes aux vecteurs  $\mathbf{e}_{a,b}$ , alors la première et la seconde forme fondamentales sont diagonales. Ces lignes sont les lignes de courbures principales de la forme transformée également et la courbure principale se déduit

$$\bar{K}_i = \frac{\bar{K}_{ii}}{\bar{g}_{ii}} = \frac{|\mathbf{X}_0 + \Lambda|^2}{(1 - \Lambda^2)} \left\{ -K_i^0 + \frac{2 [\mathbf{n}_0 \cdot (\mathbf{X}_0 + \Lambda)]}{|\mathbf{X}_0 + \Lambda|^2} \right\} \tag{1.60}$$

avec  $K_i^0 = -|\mathbf{X}|^2 K_i + 2\mathbf{n} \cdot \mathbf{X}$ . La dérivée est donnée par

$$\begin{aligned}
 \partial_a \bar{K}_i &= \frac{1}{(1 - \Lambda^2)} \left\{ -|\mathbf{X}_0 + \Lambda|^2 \partial_a K_i^0 - 2 (\mathbf{X}_0 + \Lambda) \cdot \mathbf{e}_a^0 K_i^0 + 2 [(\mathbf{X}_0 + \Lambda) \cdot \partial_a \mathbf{n}_0 + \mathbf{n}_0 \cdot \mathbf{e}_a^0] \right\} \\
 &= \frac{1}{(1 - \Lambda^2)} \left\{ -|\mathbf{X}_0 + \Lambda|^2 \partial_a K_i^0 + 2 (\mathbf{X}_0 + \Lambda) \cdot (K_a^{b0} \mathbf{e}_b^0 - K_i^0 \mathbf{e}_a^0) \right\} \tag{1.61}
 \end{aligned}$$

où nous avons utilisé l'équation de Weingarten dans la seconde étape.

Pour décrire la surface axisymétrique de départ, on choisit les coordonnées  $(s, \phi)$ . Les lignes des coordonnées sont les lignes de courbures principales  $K_1 = K_\perp = \dot{\psi}$  et  $K_2 = K_\parallel = \sin \psi / \rho$ . Pour chaque portion de la surface qui est en contact avec le confinement sphérique (les lignes de contact circulaires incluses) on a  $K_\perp = K_\parallel = 1$ . En suivant l'équation 1.60 on obtient les courbures principales des surfaces transformées. Sur la

sphère, on a  $|\mathbf{X}|^2 = 1$ ,  $\mathbf{n} = \mathbf{X}$  et donc  $K_i^0 = 1$ . De plus,  $\mathbf{X}_0 = \mathbf{X}$ ,  $\mathbf{n}_0 = \mathbf{n}$ , et

$$\bar{K}_i = \frac{1}{(1 - \Lambda^2)} [-|\mathbf{X} + \boldsymbol{\Lambda}|^2 + 2\mathbf{n} \cdot (\mathbf{X} + \boldsymbol{\Lambda})] \quad (1.62)$$

$$= \frac{1}{(1 - \Lambda^2)} [-1 - 2\mathbf{X} \cdot \boldsymbol{\Lambda} - \Lambda^2 + 2(1 + \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\Lambda})] = 1. \quad (1.63)$$

On a donc bien, pour un coefficient d'adhésion nul, les conditions de continuité 1.34 et 1.35 sur les courbures au niveau des lignes de contact qui restent satisfaites.

Les vecteurs tangents et la normale sur la ligne de contact sont donnés par  $\mathbf{e}_a^0 = \mathbf{e}_a$ ,  $\mathbf{n}^0 = \mathbf{n}$ , et

$$\bar{\mathbf{e}}_a = \frac{(1 - \Lambda^2)}{|\mathbf{n} + \boldsymbol{\Lambda}|^2} \left( \mathbf{e}_a - \frac{2(\boldsymbol{\Lambda} \cdot \mathbf{e}_a)(\mathbf{n} + \boldsymbol{\Lambda})}{|\mathbf{n} + \boldsymbol{\Lambda}|^2} \right), \quad (1.64)$$

$$\bar{\mathbf{n}} = -\mathbf{n} + \frac{2(1 + \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\Lambda})(\mathbf{n} + \boldsymbol{\Lambda})}{|\mathbf{n} + \boldsymbol{\Lambda}|^2}. \quad (1.65)$$

La métrique est diagonale avec  $\bar{g}_{ab} = \frac{(1 - \Lambda^2)^2}{|\mathbf{n} + \boldsymbol{\Lambda}|^4} g_{ab}$ . En tenant compte du fait que  $K_a^b$  ainsi que  $K_a^{b0}$  sont diagonaux,  $K_a^{b0} \mathbf{e}_b^0 - K_i^0 \mathbf{e}_a^0 = (K_a^0 - K_i^0) \mathbf{e}_a = 0$ . De ce fait, le dernier terme de l'équation 1.61 s'annule et on obtient pour la dérivée des courbures principales la formule suivante

$$\partial_a \bar{K}_i = \frac{-|\mathbf{n} + \boldsymbol{\Lambda}|^2 \partial_a K_i^0}{(1 - \Lambda^2)} = \frac{|\mathbf{n} + \boldsymbol{\Lambda}|^2}{(1 - \Lambda^2)} \partial_a K_i. \quad (1.66)$$

Afin de déterminer les forces extérieures dues au confinement, on considère le tenseur de contrainte de la membrane fluide (normalisé du pré-facteur  $\kappa$ ) [40]

$$\mathbf{f}^a = \left\{ K \left( K^{ab} - \frac{1}{2} K g^{ab} \right) - \left[ \frac{\tilde{P}}{2} (\mathbf{X} \cdot \mathbf{n}) + \tilde{\sigma} \right] g^{ab} \right\} \mathbf{e}_b - \left[ \nabla^a K - \frac{\tilde{P}}{2} (\mathbf{X} \cdot \mathbf{e}^a) \right] \mathbf{n}. \quad (1.67)$$

En projetant sur le vecteur unitaire  $\mathbf{l} = l_a \mathbf{e}^a$  perpendiculaire à la ligne de contact on



obtient la densité locale de force

$$l_a \mathbf{f}^a = \left\{ \frac{1}{2} (K_{\perp}^2 - K_{\parallel}^2) - \left[ \frac{\tilde{P}}{2} (\mathbf{X} \cdot \mathbf{n}) + \tilde{\sigma} \right] \right\} \mathbf{l} - \left[ \nabla_{\perp} K - \frac{\tilde{P}}{2} (\mathbf{X} \cdot \mathbf{l}) \right] \mathbf{n} \quad (1.68)$$

$$= \left[ \frac{1}{2} \left( \dot{\psi}^2 - \frac{\sin^2 \psi}{\rho^2} \right) - \left( \frac{\tilde{P}}{2} (\mathbf{X} \cdot \mathbf{n}) + \tilde{\sigma} \right) \right] \mathbf{e}_s - \left[ \ddot{\psi} + \frac{\dot{\psi} \cos \psi}{\rho} - \frac{\cos \psi \sin \psi}{\rho^2} - \frac{\tilde{P}}{2} (\mathbf{X} \cdot \mathbf{l}) \right] \mathbf{n}, \quad (1.69)$$

où la deuxième ligne correspond aux surfaces axisymétriques. Au niveau de la ligne de contact circulaire on a

$$l_a \mathbf{f}^a = - \left( \frac{\tilde{P}}{2} + \tilde{\sigma} \right) \mathbf{e}_s - \ddot{\psi} \mathbf{n}. \quad (1.70)$$

Pour les formes surfaces transformées conformes on obtient (les variations du tenseur de contrainte sous une transformation conforme sont données dans [41–43] )

$$\bar{l}_a \bar{\mathbf{f}}^a = - \left( \frac{\tilde{P}}{2} + \tilde{\sigma} \right) \frac{\bar{\mathbf{e}}_s}{\sqrt{\bar{g}_{ss}}} - \frac{|\mathbf{n} + \mathbf{\Lambda}|^2}{(1 - \Lambda^2)} \ddot{\psi} \bar{\mathbf{n}} \quad (1.71)$$

$$= - \left( \frac{\tilde{P}}{2} + \tilde{\sigma} \right) \left( \mathbf{e}_s - \frac{2(\mathbf{\Lambda} \cdot \mathbf{e}_s)(\mathbf{n} + \mathbf{\Lambda})}{|\mathbf{n} + \mathbf{\Lambda}|^2} \right) + \frac{|\mathbf{n} + \mathbf{\Lambda}|^2}{(1 - \Lambda^2)} \ddot{\psi} \left[ \mathbf{n} - \frac{2(1 + \mathbf{n} \cdot \mathbf{\Lambda})(\mathbf{n} + \mathbf{\Lambda})}{|\mathbf{n} + \mathbf{\Lambda}|^2} \right]$$

$$= - \left( \frac{\tilde{P}}{2} + \tilde{\sigma} \right) \left( \frac{\mathbf{e}_s(1 + \Lambda^2) - 2\mathbf{\Lambda}(\mathbf{\Lambda} \cdot \mathbf{e}_s) + 2\mathbf{\Lambda} \times \mathbf{e}_{\phi}}{|\mathbf{n} + \mathbf{\Lambda}|^2} \right) + \ddot{\psi} \left[ \frac{-\mathbf{n}(1 - \Lambda^2) - 2\mathbf{\Lambda}(1 + \mathbf{n} \cdot \mathbf{\Lambda})}{(1 - \Lambda^2)} \right]. \quad (1.72)$$

Afin d'analyser l'équilibre des forces, considérons d'abord les transformations conformes le long de l'axe  $\mathbf{z}$  :  $\mathbf{\Lambda} = \Lambda_z \mathbf{z}$ . Les projections de la normale des vecteurs tangents sur les vecteurs de bases s'écrivent

$$\rho \cdot \mathbf{e}_s = -\mathbf{z} \cdot \mathbf{n} = \cos \psi, \quad (1.73)$$

$$\rho \cdot \mathbf{n} = \mathbf{z} \cdot \mathbf{e}_s = \sin \psi. \quad (1.74)$$

Avec

$$\mathbf{n} + \mathbf{\Lambda} = \sin \psi \rho + (\Lambda_z - \cos \psi) \mathbf{z}, \quad (1.75)$$

on obtient les projections

$$\begin{aligned}
 \rho \cdot \bar{l}_a \bar{\mathbf{f}}^a &= - \left( \frac{\tilde{P}}{2} + \tilde{\sigma} \right) \left( \cos \psi - \frac{2\Lambda_z \sin^2 \psi}{|\mathbf{n} + \mathbf{\Lambda}|^2} \right) + \frac{|\mathbf{n} + \mathbf{\Lambda}|^2}{(1 - \Lambda_z^2)} \ddot{\psi} \left[ \sin \psi - \frac{2(1 - \Lambda_z \cos \psi) \sin \psi}{|\mathbf{n} + \mathbf{\Lambda}|^2} \right] \\
 &= - \left( \frac{\tilde{P}}{2} + \tilde{\sigma} \right) \left( \frac{\cos \psi (1 + \Lambda_z^2) - 2\Lambda_z}{1 - 2\Lambda_z \cos \psi + \Lambda_z^2} \right) - \ddot{\psi} \sin \psi,
 \end{aligned} \tag{1.76}$$

$$\begin{aligned}
 \mathbf{z} \cdot \bar{l}_a \bar{\mathbf{f}}^a &= - \left( \frac{\tilde{P}}{2} + \tilde{\sigma} \right) \left( \sin \psi - \frac{2\Lambda_z \sin \psi (\Lambda_z - \cos \psi)}{|\mathbf{n} + \mathbf{\Lambda}|^2} \right) \\
 &\quad + \frac{|\mathbf{n} + \mathbf{\Lambda}|^2}{(1 - \Lambda_z^2)} \ddot{\psi} \left[ -\cos \psi - \frac{2(1 - \Lambda_z \cos \psi) (\Lambda_z - \cos \psi)}{|\mathbf{n} + \mathbf{\Lambda}|^2} \right]
 \end{aligned} \tag{1.77}$$

$$\begin{aligned}
 &= - \left( \frac{\tilde{P}}{2} + \tilde{\sigma} \right) \left( \frac{\sin \psi (1 - \Lambda_z^2)}{1 - 2\Lambda_z \cos \psi + \Lambda_z^2} \right) \\
 &\quad + \frac{\ddot{\psi}}{(1 - \Lambda_z^2)} [\cos \psi (1 + \Lambda_z^2) - 2\Lambda_z].
 \end{aligned} \tag{1.78}$$

Les solutions axisymétriques que l'on considère sont également symétriques par rapport au plan  $(xy)$ . Les deux lignes de contact circulaires qui sont à  $\psi_+ = \frac{\pi}{2} + \gamma$  et  $\psi_- = \frac{\pi}{2} - \gamma$  sont transformées en deux cercles de longueurs différentes. Afin de calculer la force extérieure totale, nous devons d'abord déterminer les nouvelles positions des cercles de contact.

Avant la transformation, nous avons la paramétrisation des deux cercles

$$\mathbf{X}_\pm(\phi) = \sin \psi_\pm \rho - \cos \psi_\pm \mathbf{z} + \phi \mathbf{e}_\phi \tag{1.79}$$

après la transformation on a toujours la symétrie axiale mais plus la symétrie par rapport au plan  $(xy)$

$$\bar{\mathbf{X}}_\pm(\phi) = \lambda_\pm \sin \psi_\pm \rho + [\lambda_\pm (\Lambda_z - \cos \psi_\pm) + \Lambda_z] \mathbf{z} + \phi \mathbf{e}_\phi \tag{1.80}$$

avec

$$\lambda_\pm = \frac{1 - \Lambda_z^2}{1 - 2\Lambda_z \cos \psi_\pm + \Lambda_z^2}. \tag{1.81}$$

On obtient pour les nouvelles lignes de contact

$$\bar{\psi}_{\pm} = \frac{\pi}{2} + \arctan \left[ \frac{\lambda_{\pm} (\Lambda_z - \cos \psi_{\pm}) + \Lambda_z}{\lambda_{\pm} \sin \psi_{\pm}} \right]. \quad (1.82)$$

La longueur des lignes de contact est alors

$$\bar{L}_{\pm} = 2\pi \sin \bar{\psi}_{\pm} = 2\pi \lambda_{\pm} \sin \psi_{\pm}. \quad (1.83)$$

Les composantes horizontales de la force s'équilibrent entre elles du fait de la symétrie axiale. Par contre, l'absence de force dans la direction verticale n'est pas aussi évidente. Cette condition s'écrit

$$\begin{aligned} 0 &= \mathbf{z} \cdot \left( 2\pi \lambda_+ \sin \psi_+ (\bar{l}_a \bar{\mathbf{f}}^a)_+ + 2\pi \lambda_- \sin \psi_- (\bar{l}_a \bar{\mathbf{f}}^a)_- \right) \\ \iff 0 &= \frac{-C \cos \gamma (1 - \Lambda_z^2)^2}{(1 + 2\Lambda_z \sin \gamma + \Lambda_z^2)^2} + \frac{-\sin \gamma (1 + \Lambda_z^2) - 2\Lambda_z}{1 + 2\Lambda_z \sin \gamma + \Lambda_z^2} + \frac{-C \cos \gamma (1 - \Lambda_z^2)^2}{(1 - 2\Lambda_z \sin \gamma + \Lambda_z^2)^2} \\ &\quad + \frac{\sin \gamma (1 + \Lambda_z^2) - 2\Lambda_z}{1 - 2\Lambda_z \sin \gamma + \Lambda_z^2}, \end{aligned} \quad (1.84)$$

où nous avons introduit le paramètre  $C = \frac{(\frac{\bar{P}}{2} + \tilde{\sigma})}{\ddot{\psi}}$ .

Pour  $\gamma = 0$ , i. e., les solutions qui sont confinées en un seul cercle, cette condition implique

$$0 = C (1 - \Lambda_z^2)^2 + 2\Lambda_z (1 + \Lambda_z^2). \quad (1.86)$$

Considérons maintenant les transformations conformes dans le plan  $(xy)$ . Dans ce cas, la symétrie axiale est brisée et la symétrie par rapport au plan  $(xy)$  est préservée.

On peut supposer, sans perdre le caractère général de l'étude,  $\mathbf{\Lambda} = \Lambda_x \mathbf{x}$ .

Avec

$$\mathbf{n} + \mathbf{\Lambda} = \sin \psi \rho - \cos \psi \mathbf{z} + \Lambda_x \mathbf{x}, \quad (1.87)$$

$$\rho = \cos \phi \mathbf{x} + \sin \phi \mathbf{y} \quad (1.88)$$

on obtient les projections

$$\begin{aligned} \rho \cdot \bar{l}_a \bar{\mathbf{f}}^a &= - \left( \frac{\tilde{P}}{2} + \tilde{\sigma} \right) \left( \frac{\cos \psi (1 + \Lambda_x^2) - 2\Lambda_x^2 \cos^2 \phi \cos \psi}{1 + 2\Lambda_x \cos \phi \sin \psi + \Lambda_x^2} \right) \\ &\quad - \frac{\ddot{\psi}}{(1 - \Lambda_x^2)} \left[ \sin \psi (1 - \Lambda_x^2) + 2\Lambda_x \cos \phi (1 + \Lambda_x \sin \psi \cos \phi) \right], \end{aligned} \quad (1.89)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{x} \cdot \bar{l}_a \bar{\mathbf{f}}^a &= - \left( \frac{\tilde{P}}{2} + \tilde{\sigma} \right) \cos \psi \left( \frac{\cos \psi (1 - \Lambda_x^2)}{1 + 2\Lambda_x \cos \phi \sin \psi + \Lambda_x^2} \right) \\ &\quad - \frac{\ddot{\psi}}{(1 - \Lambda_x^2)} [\sin \psi \cos \phi (1 - \Lambda_x^2) + 2\Lambda_x], \end{aligned} \quad (1.90)$$

$$\mathbf{y} \cdot \bar{l}_a \bar{\mathbf{f}}^a = - \left( \frac{\tilde{P}}{2} + \tilde{\sigma} \right) \sin \psi \left( \frac{\cos \psi (1 - \Lambda_x^2)}{1 + 2\Lambda_x \cos \phi \sin \psi + \Lambda_x^2} \right) - \ddot{\psi} \sin \psi \sin \phi, \quad (1.91)$$

$$\mathbf{z} \cdot \bar{l}_a \bar{\mathbf{f}}^a = - \left( \frac{\tilde{P}}{2} + \tilde{\sigma} \right) \left( \frac{\sin \psi (1 + \Lambda_x^2) + 2\Lambda_x \sin \phi}{1 + 2\Lambda_x \cos \phi \sin \psi + \Lambda_x^2} \right) + \ddot{\psi} \cos \psi. \quad (1.92)$$

Les deux lignes de contact circulaires à  $\psi_{\pm} = \frac{\pi}{2} \pm \gamma$  sont transformées en deux courbes qui ne sont plus parallèles au plan  $(xy)$ . Ces courbes sont données par

$$\bar{\mathbf{X}}_{\pm}(\phi) = [\lambda_{\pm} (\sin \psi_{\pm} \cos \phi + \Lambda_x) + \Lambda_x] \mathbf{x} + \lambda_{\pm} \sin \psi_{\pm} \sin \phi \mathbf{y} - \lambda_{\pm} \cos \psi_{\pm} \mathbf{z}, \quad (1.93)$$

avec

$$\lambda_{\pm} = \frac{1 - \Lambda_x^2}{1 + 2\Lambda_x \sin \psi_{\pm} \cos \phi + \Lambda_x^2}. \quad (1.94)$$

La force totale appliquée sur chaque courbe est donnée par

$$\mathbf{F} = \int_0^{2\pi} d\phi \sqrt{g_{\phi\phi}} \bar{l}_a \bar{\mathbf{f}}^a \quad (1.95)$$

avec  $\sqrt{g_{\phi\phi}} = \lambda \sin \psi$ .

Les composantes verticales de la force s'équilibrent entre elles grâce à la symétrie par rapport au plan  $(xy)$ . Sur le plan horizontal, on obtient l'équation suivante qui doit être satisfaite pour les deux lignes de contact à l'équilibre

$$0 = \int_0^{2\pi} d\phi \frac{(1 - \Lambda_x^2) \sin \psi}{1 + 2\Lambda_x \cos \phi \sin \psi + \Lambda_x^2} \mathbf{x} \cdot \bar{l}_a \bar{\mathbf{f}}^a = \int_0^{2\pi} d\phi \frac{(1 - \Lambda_x^2) \sin \psi}{1 + 2\Lambda_x \cos \phi \sin \psi + \Lambda_x^2} \mathbf{y} \cdot \bar{l}_a \bar{\mathbf{f}}^a. \quad (1.96)$$

L'intégration de la projection sur  $\mathbf{y}$  est trivialement égale à zéro car

$$\int_0^{2\pi} d\phi \frac{\sin \phi}{(A + B \cos \phi)^n} = 0 \quad (1.97)$$

avec  $A > B > 0$  constants et  $n \in \mathbb{N}$ . La projection sur  $\mathbf{x}$  donne la condition sur  $\Lambda_x$  :

$$\begin{aligned}
 0 &= \int_0^{2\pi} d\phi \left\{ \frac{\left(\frac{\tilde{P}}{2} + \tilde{\sigma}\right) (1 - \Lambda_x^2)^2 \cos \psi \sin \psi}{(1 + 2\Lambda_x \cos \phi \sin \psi + \Lambda_x^2)^2} \cos \phi + \frac{\ddot{\psi} \sin \psi [\sin \psi \cos \phi (1 + \Lambda_x^2) + 2\Lambda_x]}{1 + 2\Lambda_x \cos \phi \sin \psi + \Lambda_x^2} \right\} \\
 &= -\frac{\left(\frac{\tilde{P}}{2} + \tilde{\sigma}\right) 4\pi\Lambda_x (1 - \Lambda_x^2)^2 \cos \psi \sin^2 \psi}{(1 + 2\Lambda_x^2 \cos 2\psi + \Lambda_x^4)^{3/2}} + \ddot{\psi} \sin \psi \left[ \frac{4\pi\Lambda_x}{(1 + 2\Lambda_x^2 \cos 2\psi + \Lambda_x^4)^{1/2}} \right. \\
 &\quad \left. + \frac{\pi(1 + \Lambda_x^2)}{\Lambda_x} \left( 1 - \frac{1 + \Lambda_x^2}{(1 + 2\Lambda_x^2 \cos 2\psi + \Lambda_x^4)^{1/2}} \right) \right] \tag{1.98}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \iff 0 &= -\frac{4C\Lambda_x (1 - \Lambda_x^2)^2 \cos \psi \sin \psi}{(1 + 2\Lambda_x^2 \cos 2\psi + \Lambda_x^4)^{3/2}} + \frac{4\Lambda_x}{(1 + 2\Lambda_x^2 \cos 2\psi + \Lambda_x^4)^{1/2}} \\
 &\quad + \frac{1 + \Lambda_x^2}{\Lambda_x} \left( 1 - \frac{1 + \Lambda_x^2}{(1 + 2\Lambda_x^2 \cos 2\psi + \Lambda_x^4)^{1/2}} \right). \tag{1.99}
 \end{aligned}$$

Pour  $\psi = \frac{\pi}{2}$ , la seule solution triviale est pour  $\Lambda_x = 0$ . Ce cas correspond aux solutions en contact en un seul cercle avec le confinement,

On observe donc que la force totale qui agit sur la membrane n'est équilibrée que pour des valeurs spécifiques de  $\Lambda$ . Ce qui implique que les transformations conformes définies dans l'équation 1.44 n'engendrent pas des surfaces équilibrées en général. Cependant, dans la section 6, nous utilisons ces surfaces transformées comme mailles initiales pour une simulation à élément finis dans le but d'obtenir les surfaces équilibrées. Nous montrerons alors que celles-ci sont de bonnes approximations.

## 1.5 Diagramme des phases global

Dans cette section, nous complétons le diagramme des phases axisymétrique de la figure 1.7 en générant les phases non-axisymétriques. Pour ce faire, chaque solution axisymétrique est transformée à l'aide des transformations conformes 1.44 en une solution non-axisymétrique qui a la même énergie de courbure mais dont l'aire et le volume

différent. Ainsi, chaque point du diagramme des phases peut correspondre à plusieurs solutions différentes. En comparant les énergies de chacune d'entre elles, on obtient le diagramme des phases de la figure 1.9, où l'on n'a représenté que les minima globaux. Nous discutons également des modifications apportées au diagramme axisymétrique 1.7

On distingue deux types de régions, les régions axisymétriques (sans pointillés) et les régions non-axisymétriques (avec les pointillés). Ces deux régions sont séparées par une ligne (la ligne noire  $[D_2]$ ) sur laquelle se trouvent les minima axisymétriques à aire fixe. Ce sont ces minima auxquels on applique des transformations conformes pour augmenter leur volume réduit. La région non-axisymétrique est donc entièrement formée de transformées conformes des tores axisymétriques se trouvant sur la lignes  $[D_2]$  et sur la ligne de ronds bleus des tores de Clifford.

Pour de faibles aires, on a la région orange claire en pointillés qui représente la région des transformées conformes du tore de Clifford. Celle-ci est limitée par la ligne bleue [3] qui représente les transformations conformes du tore de Clifford qui frôlent le confinement en un seul cercle. Si on augmente l'aire, on a la région orange des tores circulaires confinés en un seul cercle non axisymétrique. Celle-ci est limitée par la ligne verte  $[C_1]$  qui est la branche des tores confinés en un seul cercle dont la courbure au niveau du cercle de contact est égale à celle du container. Elle ne peut donc pas décroître davantage. En augmentant encore l'aire on trouve les régions confinées en une surface, circulaires en rouge et en faucille en vert. Ces deux régions sont séparées par la ligne noire  $[C_2]$ , qui marque un changement de phase continu. Enfin, la limite des grandes surfaces reste la ligne noire discontinue  $[L]$  qui représente les tores non-axisymétriques dont les necks fusionnent lorsque  $v_r$  tend vers 1, formant ainsi deux sphères incluses l'une à l'intérieure de l'autre, c'est la limite des self-contacts. En dessous de la ligne  $[D_2]$  on a les régions axisymétriques inchangées par rapport à la figure 1.7.

La figure 1.10 représente l'énergie de courbure en fonction du volume réduit des branches particulières du diagramme 1.9. On retrouve la ligne cyan [1] des solutions libres en faucille ainsi que la ligne noire discontinue  $[L]$  de la limite des self-contacts. La ligne rouge [2] de la branche circulaire libre s'arrête au niveau du tore de Clifford représenté par

le rond bleu. Au delà de ce volume réduit on a les transformées conformes du tore de Clifford (la ligne bleue [3]). La partie croissante de la courbe  $(e_b, v_r)$  de la branche [2] axisymétrique pour des volumes réduits supérieurs à  $v_{r_{Cl}}$  est supprimée car dans le diagramme des phases 1.9 ces solutions sont remplacées par les formes circulaires confinées en un seul cercle non-axisymétriques. La ligne verte  $[C_1]$  est inchangée jusqu'au rond violet, qui représente son minimum axisymétrique. Pour des volumes réduits supérieurs, on obtient les transformées conformes de ce minimum que sont les tores circulaires confinés en un seul cercle et dont la courbure au niveau du cercle de contact est égale à celle du container.

La ligne à aire fixe  $a = 0.7$  (la ligne jaune  $[I]$ ) reste inchangée par rapport à la figure 1.10. La ligne  $[II]$  violet ( $a = 0.9$ ) reste inchangée jusqu'au rond violet qui représente son minimum axisymétrique. Au delà, l'axisymétrie se brise, et on a les solutions circulaires confinées en un seul cercle non-axisymétriques jusqu'au triangle bleu. Là, la membrane se détache du confinement et prend la forme des transformées conformes du tore de Clifford. La ligne rose ( $III$ ) ( $a = 1.1$ ), est également inchangée pour toute la phase axisymétrique qui va jusqu'au rond rose. Pour des volumes réduits supérieurs on a des formes en faucilles confinées en une surface non-axisymétriques. Au niveau du triangle rose, la courbe atteint la zone des self-contacts dans laquelle notre modèle n'est plus valide.

Enfin, la ligne noire  $[D_2]$  représente la ligne de séparation entre la phase axisymétrique (à gauche) et la phase non-axisymétrique (à droite). Cette ligne relie les cercles rose, violet et bleu ainsi que tous les minimas axisymétriques des courbes  $(e_b, v_r)$  à aire fixe, à angle de détachement fixe, ou à  $\ddot{\psi}_0$  fixe.

Afin d'illustrer les différentes phases du diagramme, nous représentons les coupes des images  $3D$  de l'évolution d'une solution à volume réduit fixe lorsque l'on augmente sa surface. Ces solutions correspondent aux triangles noirs dans le diagramme 1.9.

Pour un volume réduit  $v_r = 0.7$  nous avons la figure 1.11. En haut à gauche on a la membrane d'aire  $a = 0.5$ , elle est du type circulaire et n'est pas en contact avec la paroi sphérique. Si on augmente l'aire jusqu'à  $a = 0.8$  on traverse la ligne rouge [2] des formes circulaires libres qui frôlent le confinement en un seul cercle. On est alors dans la phase

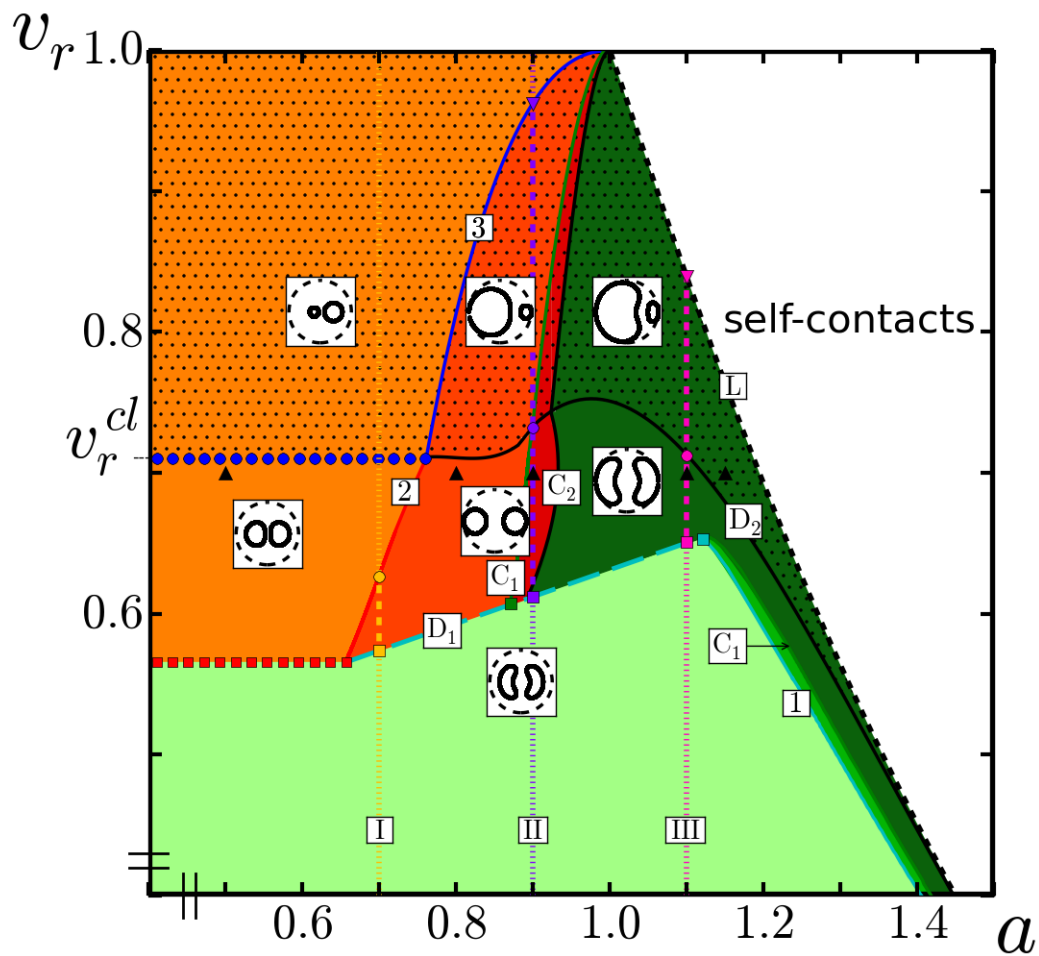


FIGURE 1.9: Diagramme des phases du volume réduit en fonction de l'aire des solutions confinées axisymétriques et non-axisymétriques. Les phases non-axisymétriques sont hachurées. En orange-rouge les formes circulaires et en vert les formes en faucille. Les couleurs claires représentent les phases libres. Les couleurs intermédiaires représentent les phases de confinement en un seul cercle. Les couleurs foncées correspondent au confinement en une surface. La région blanche est la région des self-contacts. Pour la signification des lignes voir le texte. [44]



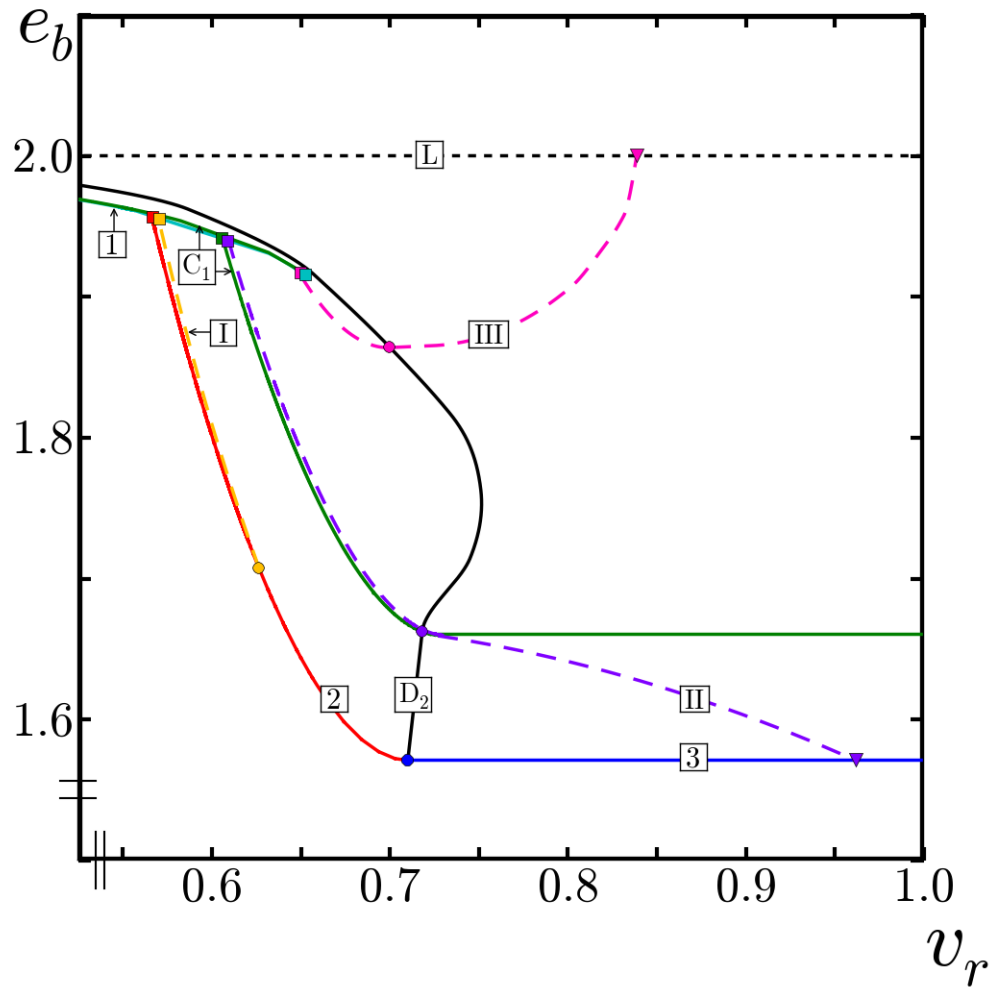


FIGURE 1.10: Énergies de courbure  $e_b$  en fonction du volume réduit  $v_r$  des branches limitant les différentes phases de la figure 1.9, ainsi que des lignes à aire fixes I-III.

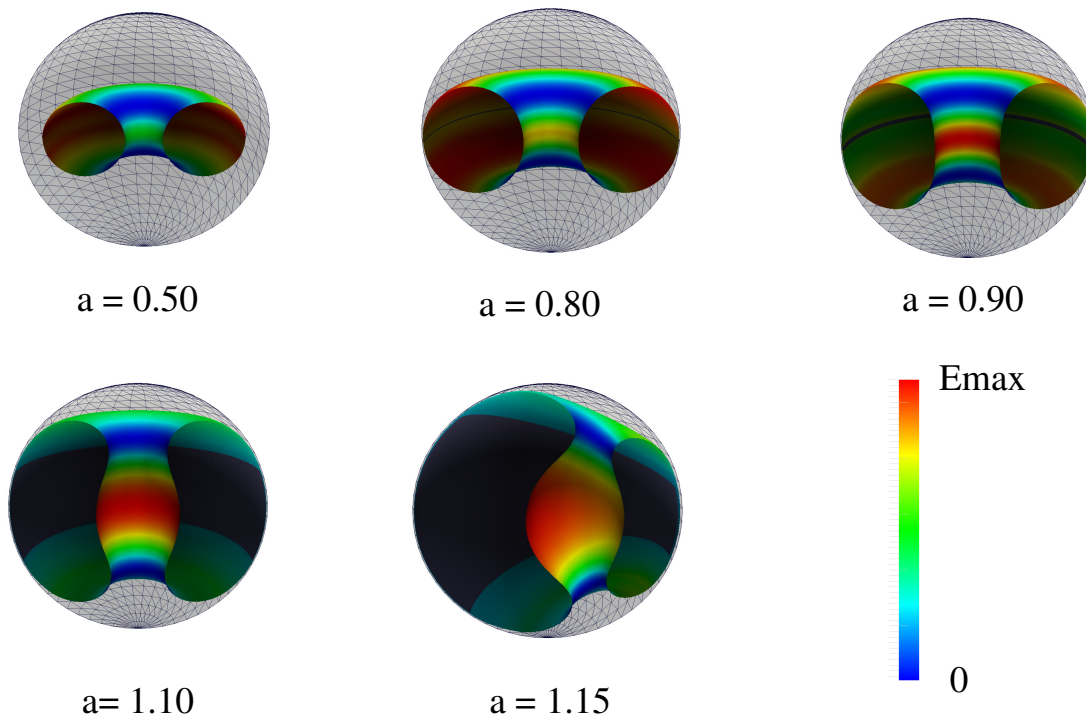


FIGURE 1.11: Évolution d'une solution à volume réduit fixe  $v_r = 0.7$  lorsque l'on augmente son aire  $a$ . L'échelle des couleurs correspond à la densité d'énergie de courbure.

du confinement circulaire. En augmentant encore l'aire, on traverse la ligne verte [C1] et on passe à la zone de confinement en une surface. On a d'abord les solutions à profils circulaires ( $a = 0.9$ ) puis celles en faucilles ( $a = 1.1$ ), en effectuant une transition de phase continue via la ligne noire [C2]. Enfin pour de très grandes aires, on passe la ligne [D2] noire qui représente la ligne de brisure de symétrie. Pour  $a = 1.15$  on a une membrane toroïdale non-axisymétrique confinée en une surface.

Pour un volume réduit  $v_r = 0.6$  nous avons la figure 1.12. Lorsque  $a = 0.5$  la membrane est dans la phase libre circulaire. Ensuite, pour  $a = 0.8$ , elle est dans la phase de confinement en un seul cercle circulaire (après avoir traversé la ligne rouge [2]). Cependant, si on augmente encore l'aire, la membrane interne n'accroît pas sa surface de contact comme dans le cas du volume réduit  $v_r = 0.7$ . Au contraire, celle-ci se détache

du container via la transition de phase discontinue représentée par la ligne discontinue bleue [D1]. Elle prend la forme sans contact en faucille qui est la forme la plus stable ( $a = 1.0$ ). Dans cette région, la forme confinée en une surface est un état métastable. À partir de la forme en faucille à aire  $a = 1.0$ , on augmente l'aire et on arrive à la ligne cyan [1] des formes en faucille frôlant le container. Ensuite, on a la phase de confinement en un seul cercle en faucille ( $a = 1.2$ ) suivie de la phase de confinement en une surface. L'axisymétrie se brise alors pour des aires plus grandes ( $a = 1.26$ ), c'est la phase non-axisymétrique confinée en faucille. Les points de jonction des apex des profils en faucille sont appelés les necks. Plus on a une aire élevée, plus ces necks deviennent étroits. En s'approchant de la ligne noire discontinue [L] ceux-ci se referment. La membrane interne prend alors la forme de deux sphères incluses l'une à l'intérieur de l'autre.

Ainsi, nous avons déterminé le diagramme des phases de l'aire en fonction du volume réduit des membranes toroïdales confinées dans une sphère. Cependant, dans la méthode utilisée nous ne nous sommes pas intéressés à l'équilibre des forces de contact. Pour étudier l'influence de ces forces nous utilisons un programme de simulation numérique que nous exposons dans la prochaine section.

## 1.6 Simulation numérique

Afin d'étudier l'équilibre des forces, nous utilisons un code de simulation basé sur l'intégration des équations de Newton en modélisant la surface par des éléments finis suivant les méthodes développées par Klug et al. [45, 46]. Son fonctionnement est décrit ci-dessous.

### 1.6.1 Description du code

Les calculs analytiques exposés précédemment nous donnent les expressions formelles et les conditions aux limites pour obtenir la surface du tore confiné en équilibre. Cepen-

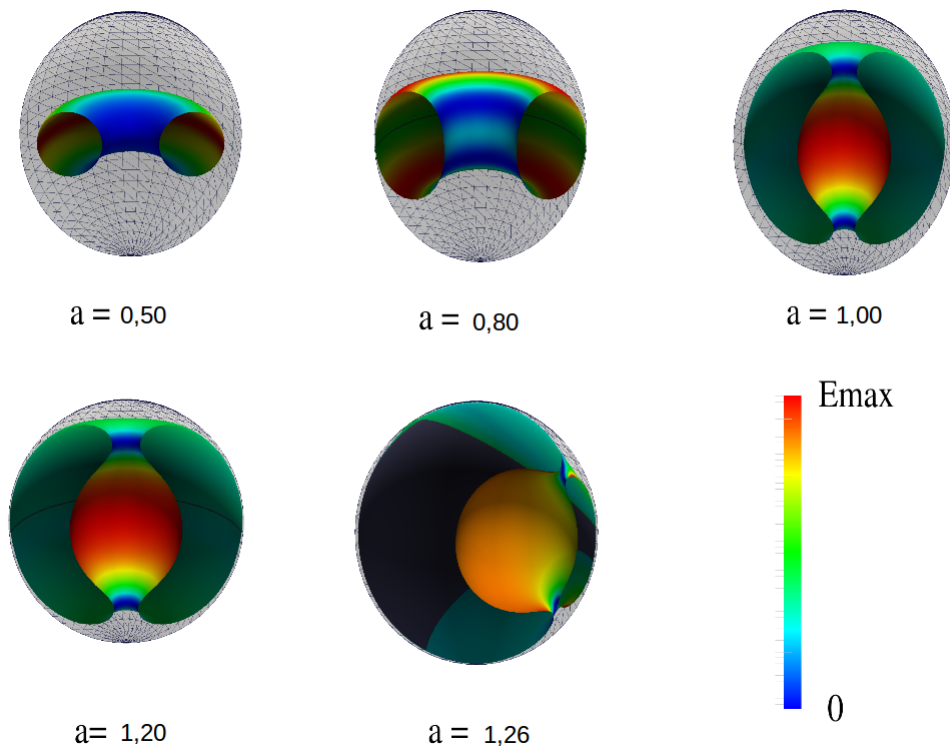


FIGURE 1.12: Évolution d'une solution à volume réduit fixe  $v_r = 0.6$  lorsque l'on augmente son aire  $a$ . L'échelle des couleurs correspond à la densité d'énergie de courbure.

dant, pour effectuer un calcul numérique sur ces surfaces, on doit d'abord les discrétiser en éléments finis [45, 46].

On part d'une solution axisymétrique analytique. Celle-ci a le même profil quel que soit l'angle azimutal  $\phi$  des coordonnées cylindriques. Afin d'avoir une maille tridimensionnelle on reproduit le même profil sur plusieurs angles  $\phi_n$  pris à des intervalles constants  $\Delta\phi$ . Ainsi on a plusieurs plans adjacents, chacun contenant la même courbe fermée paramétrée par la longueur d'arc  $s$ . Ensuite, nous devons établir un pas sur la longueur d'arc  $\Delta s$  pour discrétiser les profils.  $\Delta s$  est donc la distance entre deux points successifs du même plan à angle azimutal  $\phi$  constant. Pour ce faire, on calcule la

distance entre le premier point du plan  $\phi = 0$ , ( $s = 0, z = 0, \rho_1 = 1, \psi = \frac{\pi}{2}, \phi = 0$ ) et le premier point du plan suivant ( $s = 0, z = 0, \rho_1 = 1, \psi = \frac{\pi}{2}, \phi = \Delta\phi$ ). Étant donné la symétrie axiale, cette distance est la même quels que soient les deux plans adjacents choisis. Cette distance vaut  $d = \rho_1 \Delta\phi$ , et représente le pas en longueur d'arc que l'on considère entre le premier et le deuxième point du même plan, i. e.  $\Delta s_{1 \rightarrow 2} = \rho_1 \Delta\phi$ . On répète cette opération pour tous les points  $i$  du profile de telle sorte que  $\Delta s_{i \rightarrow i+1} = \rho_i \Delta\phi$  jusqu'à ce que l'on ferme la courbe en rejoignant le premier point. Ainsi, on obtient une maille composée de carrés élémentaires dont les cotés sont les liens entre deux points successifs du même plan à  $\phi$  constant, et les liens entre deux points analogues (de même longueur d'arc) de deux plans successifs. On divise ensuite ces carrés en deux pour obtenir des triangles élémentaires quasi-équilatéraux. Ces triangles ont la propriété de rapetisser lorsque la courbure grandit près de l'axe de symétrie, car si  $\rho_i$  diminue  $\Delta s_{i \rightarrow i+1}$  diminue aussi. Ceci est nécessaire pour avoir une grande précision sans trop augmenter le nombre de noeuds.

Une fois les mailles axisymétriques obtenues, on déduit les mailles non-axisymétriques en appliquant les transformations conformes sur chaque noeud et en laissant invariant les connectivités. En faisant cela, on préserve la proportionnalité inversée entre l'intensité de la courbure et la taille des triangles.

Les membranes que nous étudions ont une énergie déterminée par l'équation 1.3. Comme cette énergie est une intégrale sur la courbure, nous devons utiliser des surfaces élémentaires dont les dérivées sont continues. Nous suivons donc l'approche déjà établie dans la référence [3]. Dans ces travaux, les membranes lipidiques sphériques confinées ont été simulées en utilisant la méthode de Klug des éléments finis appliqués aux membranes fluides et en tenant compte des contraintes du container.

La surface de la membrane toroïdale est alors composée de  $N$  noeuds et de  $2N$  triangles. A l'intérieur de ces triangles, la position  $x$  de chaque point est interpolée comme suit

$$x(s, \phi) = \sum_{a=1}^N x_a N^a(s, \phi), \quad (1.100)$$

où  $x_a$  est la position du noeud  $a$  et les fonctions  $N^a$  sont les fonctions tests proposées dans la référence [47].

Puis, chaque noeud de la membrane est soumis à plusieurs forces. On a d'abord la force qui tend à minimiser l'énergie de courbure

$$E_b = \int_{\Omega} \frac{\kappa}{2} (2H - C_0) dA. \quad (1.101)$$

On implémente ensuite des contraintes globales sur l'aire et le volume via des énergies supplémentaires  $E_A = \frac{\mu_A}{2} (A - A_0)^2$  et  $E_V = \frac{\mu_V}{2} (V - V_0)^2$ . Pour l'aire, on peut également implémenter une contrainte locale où l'aire est fixée au niveau de chaque triangle élémentaire.

La force  $\mathbf{f}_a^M$  due à la membrane appliquée au noeud  $a$  est obtenue par la variation de l'énergie par rapport à la variation de la position  $x_a$  du noeud. Celle ci est calculée numériquement par l'équation

$$\mathbf{f}_a^M = -\frac{\partial E}{\partial x_a}. \quad (1.102)$$

On introduit également une force artificielle,  $\mathbf{f}_a^R$  qui permet de préserver la taille des liens de manière à avoir toujours des triangles équilatéraux. Elle s'écrit

$$\mathbf{f}_a^R = \sum_i k (l_i - l_i^0) \mathbf{e}_i \quad (1.103)$$

où la somme se fait sur tous les liens connectés au noeud  $a$ .  $l_i^0$  représente la longueur idéale que devrait avoir le lien  $l_i$  pour former des triangles équilatéraux.  $\mathbf{e}_i$  est le vecteur unitaire portant le lien  $l_i$ .

Le confinement agit quant à lui uniquement sur les noeuds  $a$  qui sont sortis de la paroi d'une distance  $d_a$  non nulle. La force de contact est alors

$$\mathbf{f}_a^{C_1} = kd_a^2 \mathbf{n} \quad (1.104)$$

avec  $\mathbf{n}$  le vecteur normal à la surface.

Enfin, pour éviter les self-contacts, nous rajoutons une force  $\mathbf{f}_a^{C_2}$  qui minimise la longueur du contour d'intersection entre deux triangles [48].

Une fois que la somme des forces agissant sur le noeud  $a$  est calculée, on intègre les équations différentielles de Newton par la méthode de Newmark [49], en prenant les

paramètres  $\gamma = 1$  et  $\beta = \frac{1}{4}$ . On obtient alors le déplacement du noeud  $a$ . On effectue ces déplacements sur tous les noeuds de la maille un grand nombre de fois jusqu'à ce que la solution converge vers une forme stable.

Grâce à ce code de simulation, nous pouvons étudier l'équilibre des solutions ainsi que la distribution des forces de contact sur la membrane.

### 1.6.2 Équilibration des solutions analytiques

A l'aide du programme décrit ci dessus, nous testons la stabilité des solutions du diagramme des phases (figure 1.9). Nous prenons des mailles initiales d'environ 4000 noeuds. On fixe l'aire totale et le volume et on laisse le système s'équilibrer.

Les solutions axisymétriques restent stables et ne changent pas de forme lors des simulation, comme le montre l'exemple illustré dans la figure 1.13 (a). La forme analytique initiale est représentée en pointillés noirs, la forme équilibrée à la fin de la simulation est représentée par la ligne continue rouge. La ligne rouge discontinue représente les forces de contacts agissant sur la membrane (équation 1.104). Dans le cas des formes axisymétriques, les forces de contact se situent uniquement au niveau des lignes de détachement.

Dans le cas des régions non-axisymétriques, les formes initiales (transformées conformes des solutions axisymétriques) ont changé légèrement. Ces nouvelles formes ont la même énergie de courbure (dans la marge d'erreur de la simulation), ce qui a changé, c'est la distribution des forces de contact. Les formes non-axisymétriques transformées conformes subissent des forces de contact en deltas au niveau des deux lignes de détachement, comme c'est le cas pour les formes axisymétriques. Cependant cette distribution des forces n'assure pas un équilibre global (section 1.4.2). La forme de la membrane interne change donc forcément au cours de la simulation jusqu'à s'équilibrer lorsque toutes les forces de contact s'annihilent. Dans la figure 1.13 (b), on voit les forces de contact à la fin de la simulation représentées par la ligne rouge discontinue. En plus des forces en deltas au niveau des deux lignes de contact, une force diffuse s'applique sur

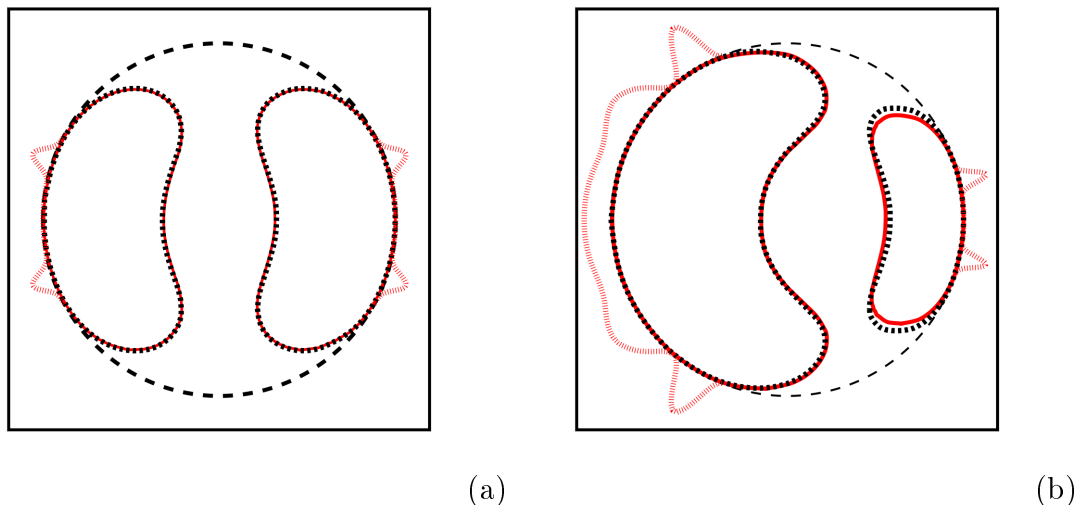


FIGURE 1.13: Équilibre des forces de contacts avec la simulations. En ligne discontinue noire, le profile de la solution analytique. La ligne rouge continue représente le profile de la membrane à la fin de la simulation. La ligne rouge discontinue représente la distribution des forces de contact.

toute le surface de contact avec une intensité variable selon la direction de l'excentricité. Si le centre du tore est décalé vers la droite, la force de contact supplémentaire est élevée sur le côté gauche et quasi-nulle sur le côté droit.

Concernant le module de la force de contact, celui-ci varie avec l'aire et le volume réduit. Il est intéressant de suivre cette variation à volume réduit fixe afin de comprendre le changement qu'apporte chaque phase. Par exemple, considérons le volume réduit  $v_r = 0.7$ . La figure 1.14 représente conjointement l'énergie de courbure  $e_b$  et la densité de force  $f_0$  sur les lignes de contact en fonction de l'aire. Pour de faibles surfaces on a la phase libre circulaire (orange claire). Dans cette phase il n'y a bien sûr aucune force de contact et l'énergie de courbure est constante. Pour une aire légèrement supérieure à 0.7, la membrane interne entre en contact avec le container et est dans la phase de confinement en un seul cercle (orange foncé). Dans cette phase, plus l'aire augmente plus la force de contact et l'énergie de courbure augmentent, alors que la courbure au niveau



du cercle de contact diminue. Lorsque cette courbure atteint celle du container ( la ligne [C1] verte) le confinement se fait sur une surface. L'énergie de courbure continue de croître avec l'aire sur toute la phase de confinement en une surface. La force de contact augmente légèrement avec l'aire lors de la phase circulaire confinée puis décroît lors de la phase en faucille axisymétrique stable. Celle-ci atteint un minimum autour de  $a = 1.12$  qui correspond au point de brisure de l'axisymétrie (la ligne [D2]). La partie de la courbe  $f_0(a)$  pour  $a > 1.12$  représente les solutions axisymétriques métastables.

### 1.6.3 Comparaison avec la topologie sphérique

Le programme de simulation décrit ci-dessus a été également utilisé pour étudier le confinement des membranes de topologie sphérique [3]. Une comparaison des énergies des deux topologies obtenues à partir du même code est donc intéressante.

Pour le cas des membranes libres, la topologie toroïdale a une énergie de courbure inférieure si le volume réduit  $v_r < 0.72$ . Au delà c'est la topologie sphérique qui est la plus stable. Lorsque l'on a un confinement on observe un comportement différent. Dans le tableau 1.1, nous avons rapporté les énergies de courbures  $e_\kappa$  des deux topologies ainsi que les phases toroïdales correspondantes pour plusieurs aires  $a$  et volumes  $v$ . On observe que pour tous les aires et volumes considérés, les énergies de courbure de la topologie toroïdale sont inférieures. Cependant cette comparaison des énergies de courbures n'est pas suffisante pour déterminer la topologie la plus stable de la membrane. Lorsque l'on considère des topologies différentes on doit tenir compte de l'expression complète de l'énergie de Helfrich, équation 1.1. En unités réduites cette énergie s'écrit

$$e = \frac{E}{8\pi\kappa} = e_\kappa + e_{\bar{\kappa}}, \quad (1.105)$$

avec  $e_\kappa$  l'énergie de courbure et  $e_{\bar{\kappa}}$  le terme dû à la courbure de Gauss. Pour la topologie sphérique  $e_{\bar{\kappa}}^{sph} = \frac{\bar{\kappa}}{2\kappa}$ , tandis que pour la topologie toroïdale  $e_{\bar{\kappa}}^{tor} = 0$ .

Pour les membranes lipidiques usuelles  $\frac{\bar{\kappa}}{\kappa} \approx -1$  [50], le système a donc une énergie supplémentaire  $\Delta e_{\bar{\kappa}} \approx \frac{1}{2}$  lors du passage de la topologie sphérique à la topologie toroïdale. Comme les différences dans les énergies de courbure des deux topologies ne sont jamais

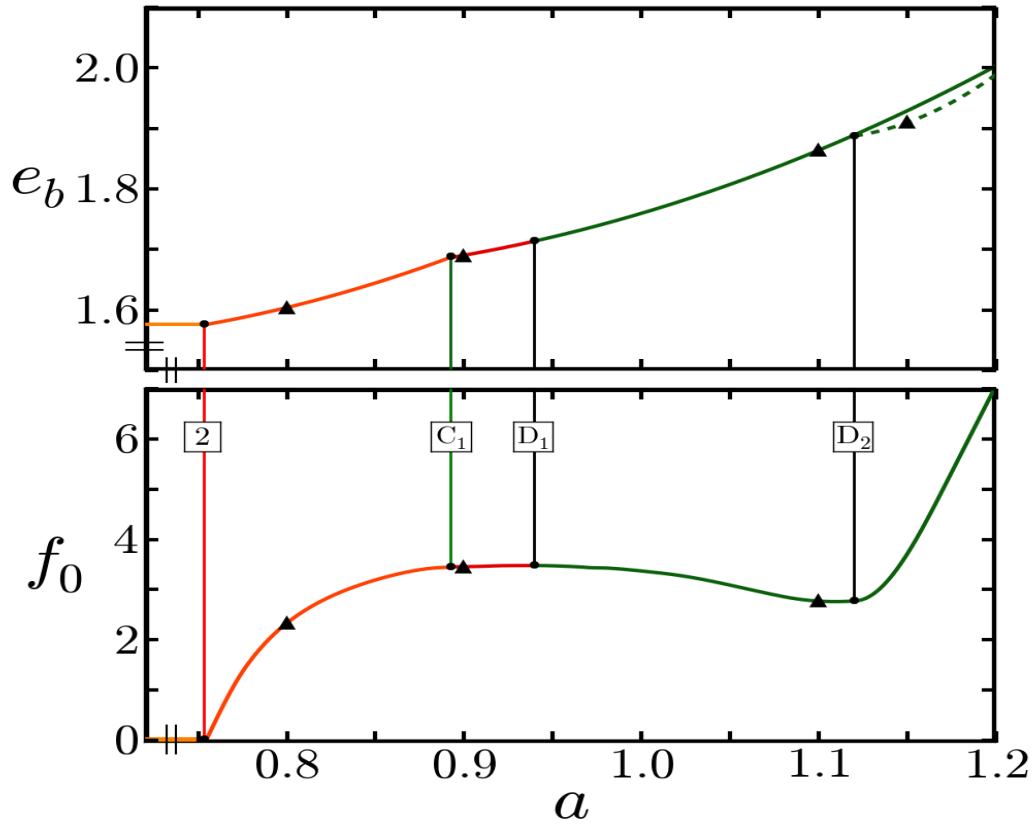


FIGURE 1.14: Variations de la densité de la force de contact  $f_0$  et de l'énergie de courbure  $e_b$  en fonction de l'aire  $a$  pour un volume réduit  $v_r = 0.7$ . Les couleurs et les noms des lignes correspondent à ceux attribués dans le diagramme des phases de la figure 1.9.

$(a, v)$	$e_{\kappa}^{sph}$	$e_{\kappa}^{tor}$	phase toroïdale correspondante
(1.1, 0.9)	1.91	1.88	non-axisymétrique confiné
(1.2, 0.9)	1.97	1.97	non-axisymétrique confiné
(1.1, 0.8)	1.95	1.87	axisymétrique confiné
(1.2, 0.8)	1.98	1.94	axisymétrique confiné
(1.3, 0.8)	1.99	1.97	non-axisymétrique confiné
(1.1, 0.7)	1.99	1.94	non confiné
(1.2, 0.7)	1.99	1.97	non confiné
(1.3, 0.7)	2.00	1.98	non confiné
(1.4, 0.7)	2.00	1.98	axisymétrique confiné

TABLE 1.1: Comparaison des énergies de courbures  $e_{\kappa}$  entre les topologies sphériques et toroïdales pour différentes valeurs de l'aire  $a$  et du volume  $v$ .

supérieures à  $\frac{1}{2}$  (tableau 1.1), la topologie sphérique est la plus stable. Cependant pour des membranes avec de plus grandes rigidités gaussiennes, surtout si  $\frac{\bar{\kappa}}{\kappa} > 0$ , c'est la topologie toroïdale qui est la plus stable.

## 1.7 Influence de l'adhésion au container

Lorsque l'on a dans la nature une membrane confinée, elle adhère souvent à son container. C'est le cas par exemple des deux membranes interne et externe constituant la mitochondrie. Au niveau des équations analytiques du cas axisymétrique, l'effet de l'adhésion apparaît uniquement pour la condition aux limites sur les lignes de contact

$$\dot{\psi}(s_0) = \dot{\psi}_c(s_0) + \sqrt{\omega} \quad (1.106)$$

On résout ensuite le système d'équations (1.20-1.23) pour différentes valeurs du coefficient d'adhésion  $\omega$ .

Évidemment, les régions sans confinement du diagramme des phases restent inchangées. Par contre, l'adhésion influe considérablement les phases de confinement (circulaires et surfaciques).

Nous avons représenté dans la figure 1.15, un zoom du diagramme 1.7 sur la région de confinement en un seul cercle. Nous y avons ajouté les trois lignes noires discontinues. Elles représentent les lignes de passage à la phase de confinement en une surface pour  $\omega = 0.1$  (la ligne  $C_1^{0.1}$ ),  $\omega = 0.5$  (la ligne  $C_1^{0.5}$ ),  $\omega = 1$  (la ligne  $C_1^1$ ) et  $\omega = 2$  (la ligne  $C_1^2$ ).

On remarque que plus  $\omega$  est grand, plus la ligne  $C_1$  se décale vers les aires plus petites, les zones de confinement en un seul cercle rétrécissent en faveur de la zone de confinement surfacique. Par exemple, le tore de Clifford qui frôle le container en seul cercle ( $a = 0.76, v_r = 0.71$ ) a une courbure perpendiculaire  $\dot{\psi} = 1 + \sqrt{2}$ . Ce qui est exactement la courbure de contact minimale au delà de laquelle on a un confinement surfacique pour  $\omega = 2$ . Dans ce cas, pour un volume réduit de  $v_r = 0.71$  on passe directement de la phase libre à la phase de confinement en une surface. Enfin pour  $\omega \geq 6.6$ , le confinement en une surface commence pour des valeurs de l'aire qui ont aussi comme solutions des tores libres. On a donc deux minima possibles, le plus probable étant la solution libre qui a l'énergie la plus basse.

Le même comportement est observé pour la phase en faucille. Ceci s'explique par la relation 1.106. Plus l'adhésion est grande, plus la courbure du tore au niveau du cercle de contact doit être grande pour avoir un confinement en une surface. Dans la phase de confinement en un seul cercle, la courbure décroît avec l'aire jusqu'à atteindre la valeur limite donnée par l'équation 1.106. Plus le coefficient  $\omega$  est grand, plus cette limite inférieure est élevée et plus la zone de confinement en un seul cercle diminue. Ainsi lorsque le coefficient d'adhésion est très grand, la membrane interne est confinée sur une surface pour des formes ayant de grandes courbures, ce qui correspond aux régions des faibles surfaces.

D'autre part, on montre que plus le coefficient d'adhésion est grand, plus on obtient de régions de solutions non symétriques par rapport au plan médian du tore. Par exemple, pour le volume réduit  $v_r = 0.6$  le passage de la forme libre à la forme confinée en une surface peut s'effectuer via des formes symétriques, comme dans le cas sans adhésion de la figure 1.12, ou via d'autres transformations qui impliquent des formes moins symétriques, figure 1.16. Ceci est dû à la forme en faucille qui présente une cour-

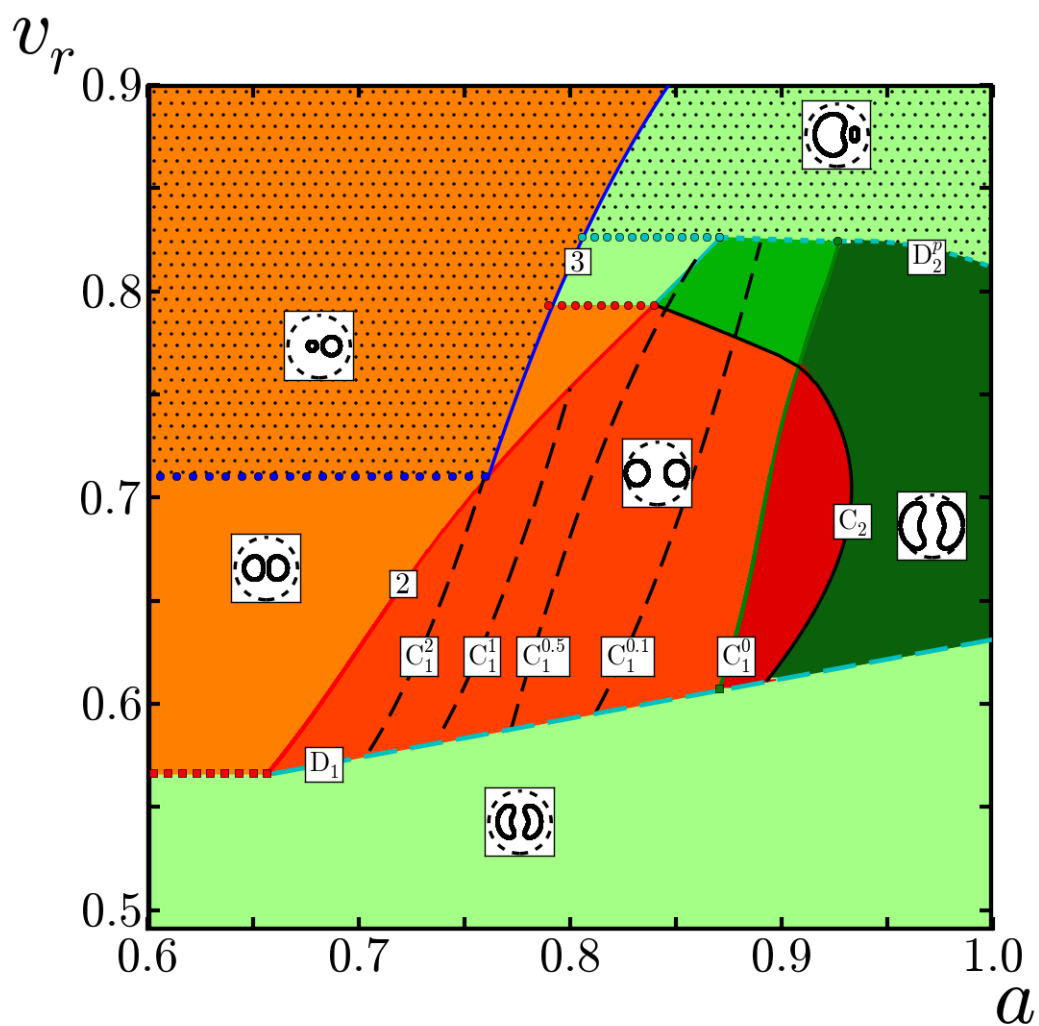


FIGURE 1.15: Zoom du diagramme des phases du volume réduit en fonction de l'aire pour le cas axisymétrique sans adhésion, figure 1.7. Les lignes  $[C_1^\omega]$  supplémentaires représentent les lignes de passage de la phase de confinement en un seul cercle à la phase de confinement en une surface pour différentes valeurs de  $\omega$ .

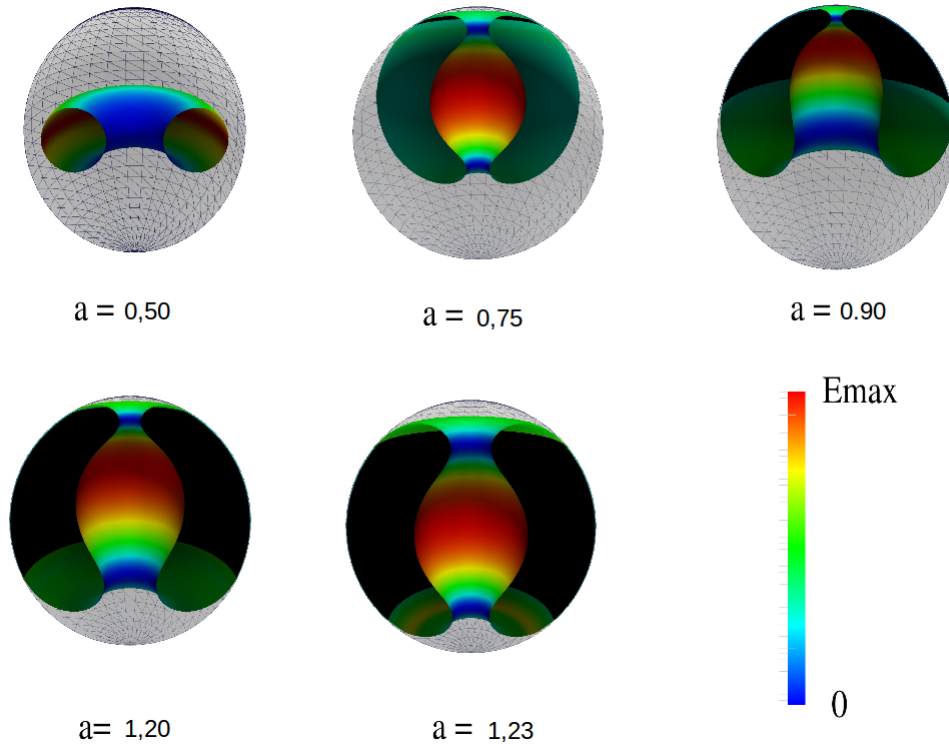


FIGURE 1.16: Évolution d'une solution à volume réduit  $v_r = 0.6$  pour différentes valeurs de l'aire  $a$  avec un coefficient d'adhésion  $\omega = 1$ . L'échelle des couleurs correspond à la densité d'énergie de courbure.

bure perpendiculaire plus élevée près des pôles qu'aux niveau de l'équateur. Lorsque le coefficient d'adhésion est grand, la courbure perpendiculaire au niveau de la ligne de contact doit être grande. Le tore s'attache alors à la membrane par un cercle qui n'est pas sur le plan de symétrie, comme on l'observe dans la figure 1.16 pour  $a = 0.75$ . En augmentant l'aire, c'est la zone de contact qui augmente car l'énergie d'adhésion est négative (figure 1.16  $a = 0.9$  et  $a = 1.2$ ) jusqu'à ce que la symétrie par rapport au plan horizontale est retrouvée ( $a = 1.23$ ).

## 1.8 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié le comportement des membranes lipidiques toroïdales. Nous avons utilisé le modèle de Helfrich pour quantifier les différentes énergies mises en jeu. Ce qui nous a permis d'obtenir les solutions analytiques dans le cas axisymétrique. Ces solutions ont été rassemblées dans un diagramme des phases du volume réduit en fonction de l'aire. Pour de faibles aires, on retrouve le cas des tores libres sans confinement. Pour des aires plus grandes, des transitions de phase se produisent. On a alors des régions de confinement de deux types, le confinement en un seul cercle et le confinement en une surface. Le profil de la membrane interne présente également deux aspects distincts, le profil circulaire et le profil en faucille.

Après cela, nous avons utilisé les transformations conformes pour briser l'axisymétrie et avoir un diagramme des phases global. Nous avons ainsi obtenu une nouvelle ligne de transition de phase dans le diagramme, c'est la ligne où la symétrie axiale se brise.

Ensuite, pour valider nos résultats nous avons utilisé un programme de simulation numérique. Celui-ci nous a également permis d'étudier la distribution des forces de contact sur la membrane. Nous avons montré que, pour les formes axisymétriques, les forces de contacts se situent uniquement au niveau des lignes de détachement, tandis que, pour le cas non axisymétrique, des forces supplémentaires agissent sur toute la surface en contact avec la paroi rigide. Nous avons également étudié la possibilité d'une transition entre les deux topologies sphérique et toroïdale. Nous avons déduit que pour des valeurs habituelles des coefficients de rigidité de courbure et de rigidité gaussienne, la topologie sphérique a l'énergie la plus basse.

Enfin, nous avons considéré l'influence de l'adhésion entre la membrane interne et son container. Celle-ci modifie considérablement la phase de confinement et fait apparaître des solutions non symétriques par rapport au plan médian.

Avec cette étude, on espère améliorer la compréhension de la morphogenèse des membranes lipidiques confinées telles les mitochondries. Cependant, notre modèle étant limité par l'absence de self-contacts, une façon de l'améliorer est d'inclure la possibilité de fusion de plusieurs parties de la membrane. D'autre part, les fluctuations thermiques

peuvent affecter considérablement les changements topologiques [51–53]. Dans ce cas une interaction attractive apparaît en plus de la répulsion stérique de Helfrich [54].



# Chapitre 2

## Confinement surfacique des polymères en hélice

### 2.1 Introduction

Les objets élastiques confinés présentent une pléthore de formes diverses que l'on peut observer dans la nature. Il est souvent difficile de déduire intuitivement la forme originale à partir de la forme confinée. En général, un confinement spatial induit des brisures de symétrie, c'est le cas par exemple des vésicules membranaires confinées dans une sphère [3, 44]. Le confinement de polymères sur plusieurs types de surfaces a été étudié. On cite, par exemple le cas de filaments confinés entre deux plaques [7, 55], ou sur une surfaces sphérique [56]. Dans ces travaux, il est apparu une large variété de formes (circulaires, ondulatoire et en spirales) ainsi qu'un comportement à température finie inexplicable par le modèle des chaînes semi-flexibles habituel.

Dans ce chapitre, nous étudions les filaments en hélice confinés entre deux plans. Ce cas présente un grand intérêt que ce soit d'un point de vue théorique ou appliqué. Différentes structures hélicoïdales sont fréquemment créées et manipulées en biotechnologie, notamment des nanotubes de carbone [57–59], d'ADN [60] ainsi que des micelles hélicoïdales [61]. Dans le monde vivant, on trouve des micro-organismes entiers

qui présentent des structures en hélice, souvent acquises de leurs constituants [62]. Les filaments en hélice sont aussi très fréquents, comme les microtubules [63–65], les filaments Ftsz [66], Mrb [67], les flagelles des bactéries [68–70], les tropomyosines [71], les filaments intermédiaires [72] et les actines [73]. Les deux derniers exemples impliquent la présence de polymères en hélice à proximité ou sur la surface des membranes cellulaires [74]. De récentes études sur le confinement des actines sur une surface plane ont montré que le confinement engendre la formation d’anneaux [7, 75, 76]. Certains des anneaux observés sont si petits ( $5\mu m$  de long) qu’une explication plausible via le modèle de la chaîne semi-flexible semble impossible.

D’autre part, les confinements sont importants dans l’étude des biopolymères [77–79]. On confine souvent des filaments hélicoïdaux sur le plan focal du microscope, changeant ainsi les propriétés physiques de l’hélice qui devient une hélice confinée, i. e. un squeelix [80]. Ces squeelix possèdent une torsion intrinsèque qui peut provoquer un changement rapide dans le sens de la courbure, c’est ce que l’on appelle un twist-kink [9]. Ces twist-kinks, ou TKs, sont des quasi-particules qui interagissent entre elles, via des interactions portées par l’élasticité du filament, d’une manière analogue aux boucles dans les filaments semi-flexibles étirés [81, 82] et aux “Sine-Gordon-kinks” étudiés en physique des solitons [83]. En fonction des paramètres physiques du filament en hélice non confiné, on peut prédire si l’état fondamental du squeelix contient des TKs. Dans les travaux de Nam et al. [9], le régime sans twist-kink a été étudié en utilisant des simulations Monte-Carlo. Dans ce cas du régime sans TK, l’état fondamental de l’hélice confiné est un arc de cercle avec une courbure constante. A température finie, le squeelix atteint des états métastables qui présentent un ou plusieurs twist-kinks.

Dans le but d’approfondir la compréhension du phénomène des hélices confinées, on reprend l’étude de Nam et al. [9] à l’aide d’une méthode purement analytique. Cette approche nous permet de tenir compte de tous les régimes possibles. Dans la prochaine section, nous commençons par présenter le modèle utilisé. Dans les troisième et quatrième sections, nous déterminons les extrema de l’énergie, et nous déduisons toutes les formes qu’un squeelix de longueur finie ou infinie peut prendre. Nous distinguons ensuite les minima des maxima via une analyse de la stabilité que nous présentons dans

la cinquième section. Dans la sixième section, on utilise une description simplifiée basée sur les twist-kinks en interaction afin de quantifier les différentes énergies mises en jeu et comprendre la dynamique du squeelix. Nous terminons le chapitre par une brève conclusion.

## 2.2 Modèle analytique

La géométrie des chaînes en hélice est déterminée par ses courbures intrinsèques  $\omega_1$  et  $\omega_2$  ainsi que sa torsion préférée  $\omega_3$ . Son énergie élastique est entièrement déterminée par les rigidités de courbures et de torsion, notées  $B$  et  $C$  respectivement. L'énergie de l'hélice non confinée en  $3D$  est alors

$$E = \frac{1}{2} \int B ((\Omega_1 - \omega_1)^2 + (\Omega_2 - \omega_2)^2) + C (\Omega_3 - \omega_3)^2 ds, \quad (2.1)$$

avec  $\Omega_{1,2}$  les deux courbures locales et  $\Omega_3$  la torsion locale définies en tout point de la chaîne. L'intégration sur  $ds$  se fait tout le long de l'hélice. En prenant une orientation adéquate du référentiel intrinsèque, on peut fixer  $\omega_2 = 0$ , simplifiant l'énergie totale

$$E = \frac{1}{2} \int B ((\Omega_1 - \omega_1)^2 + \Omega_2^2) + C (\Omega_3 - \omega_3)^2 ds. \quad (2.2)$$

L'état fondamental à  $3D$  est une hélice de rayon  $R = \frac{\omega_1}{\omega_1^2 + \omega_3^2}$  et de pas  $H = \frac{2\pi\omega_3}{\omega_1^2 + \omega_3^2}$  qui a une courbure  $\omega_1$  et une torsion  $\omega_3$  sur toute la chaîne. Plusieurs auteurs ont déjà étudié le cas sans torsion intrinsèque, i. e.  $\omega_3 = 0$  [84, 85].

Pour passer du repère intrinsèque à une description par les angles d'Euler on utilise les relations

$$\Omega_1 = \phi' \sin \theta \sin \psi + \theta' \cos \psi, \quad (2.3)$$

$$\Omega_2 = \phi' \sin \theta \cos \psi - \theta' \sin \psi, \quad (2.4)$$

$$\Omega_3 = \phi' \cos \theta + \psi', \quad (2.5)$$

où les angles  $\phi(s)$ ,  $\theta(s)$  et  $\psi(s)$  sont, dans l'ordre, les trois angles d'Euler. On utilise la notation  $(\ )' = \frac{d}{ds}$ . Si on confine l'hélice sur un plan à  $2D$ , la projection de la solution peut être choisie telle que  $\theta = \frac{\pi}{2}$ . On a alors

$$\begin{aligned}\Omega_1 &= \phi' \sin \psi, \\ \Omega_2 &= \phi' \cos \psi, \\ \Omega_3 &= \psi'.\end{aligned}\tag{2.6}$$

On déduit que  $\phi'^2 = \Omega_1^2 + \Omega_2^2$ , c'est donc la courbure locale de la chaîne à  $2D$ . D'autre part,  $\psi' = \Omega_3$ , ce qui implique que  $\psi'$  est la torsion locale. Une illustration géométrique est donnée dans la figure 2.1. On commence par un référentiel fixe  $(X_0, Y_0, Z_0)$  où l'axe  $\vec{X}$  est représenté en bleu, l'axe  $\vec{Y}$  en jaune et l'axe  $\vec{Z}$  en rouge. On a alors une tige sans courbure ni twist,  $\phi = \theta = \psi = 0$  tout le long de la chaîne. Les points  $A, B, C, D$  et  $E$  sont positionnés sur la chaîne à intervalles de longueur fixes. On applique ensuite une rotation variable de  $\phi$ , le premier angle d'Euler, autour de l'axe  $\vec{Z}$  (figure 2.1 (a)). On choisit une variation linéaire de l'angle  $\phi(s)$  entre les segments  $[AB]$ ,  $[BC]$ ,  $[CD]$  et  $[DE]$  de sorte que  $\phi(s_A) = \phi(s_E) = 0$ ,  $\phi(s_B) = \phi(s_D) = \frac{\pi}{2}$  et  $\phi(s_C) = \pi$ . Ensuite, on effectue la deuxième rotation d'Euler d'angle  $\theta = \frac{\pi}{2}$  autour du nouvel axe  $\vec{X}$  (figure 2.1 (b)). La variation de l'angle  $\phi$  de la première rotation détermine alors la courbure. On voit que la courbure entre le point  $C$  et le point  $E$  ( $\phi' < 0$ ) est de sens opposé par rapport à la courbure entre les points  $A$  et  $C$  ( $\phi' > 0$ ). L'axe  $\vec{Z}$  en rouge est toujours tangent au squeelux tandis que l'axe  $\vec{Y}$  en jaune est la normale au plan de confinement. L'axe  $\vec{X}$  en bleu est la normale du squeelux parallèle au plan. On ajoute ensuite la troisième rotation d'Euler d'angle  $\psi$  autour du nouvel axe  $\vec{Z}$ , le plan  $(\vec{X}, \vec{Y})$  qui est normal au squeelux tourne d'un angle  $\psi(s)$ . Si celui-ci est variable le long de la chaîne on a une torsion  $\Omega_3 = \psi'$ , (figure 2.1 (c)).

Dans la formule de l'énergie 2.2, on remplace les coordonnées intrinsèques  $\Omega_i$  par leurs valeurs en fonction des angles d'Euler en utilisant les équations 2.6. Ce qui nous donne

$$E = \frac{B}{2} \int (\phi'^2 - 2\omega_1 \phi' \sin \psi + \omega_1^2) + c(\psi' - \omega_3)^2 ds = \int \mathcal{L} ds,\tag{2.7}$$

avec  $c = \frac{C}{B}$ .

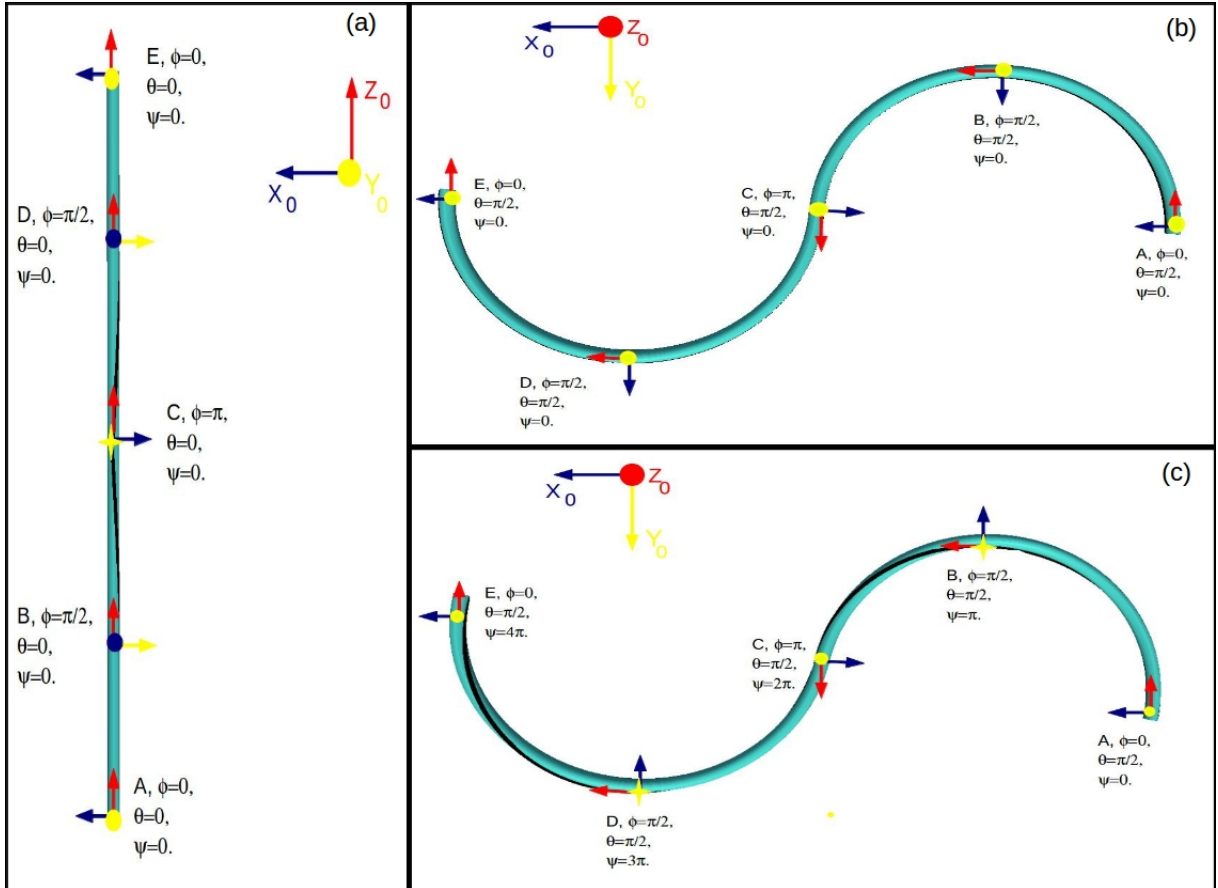


FIGURE 2.1: Angles d'Euler du squeelix. (a) Chaîne droite à laquelle on a appliqué la première rotation d'Euler d'angle  $\phi$  autour de l'axe  $\vec{Z}$ . (b) La deuxième rotation d'Euler est appliquée, d'angle  $\theta = \frac{\pi}{2}$  autour du nouvel axe  $\vec{X}$ . (c) La dernière rotation est appliquée, d'angle  $\psi$  autour du nouvel axe  $\vec{Z}$ .

La variation de  $E$  le long du contour  $[-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}]$  s'écrit

$$\begin{aligned} \delta E = & \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} ds \left( \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} - \frac{d}{ds} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi'} \right) \delta \psi + \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} - \frac{d}{ds} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi'} \right) \delta \phi \right) \\ & + \left[ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi'} \delta \psi \right]_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} + \left[ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi'} \delta \phi \right]_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}}. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Comme les variations  $\delta \psi$  et  $\delta \phi$  sont indépendantes sur les bords du filament, i. e. il n'y a pas de couple externe, on peut déduire

$$\psi'(-\frac{L}{2}) = \psi'(\frac{L}{2}) = \omega_3, \quad (2.9)$$

$$\phi'(\pm \frac{L}{2}) = \omega_1 \sin \psi(\pm \frac{L}{2}). \quad (2.10)$$

À partir du terme intégrale de l'équation (2.8), on obtient les équations d'Euler-Lagrange

$$\frac{\delta E}{\delta \phi} = B \frac{d}{ds} (\phi' - \omega_1 \sin \psi) = 0 \quad (2.11)$$

$$\frac{\delta E}{\delta \psi} = 2c \frac{d}{ds} (\psi' - \omega_3) + 2\omega_1 \phi' \cos \psi = 0. \quad (2.12)$$

On considère  $\omega_1$  et  $\omega_3$  constants, ce qui correspond à une hélice constante en  $3D$ , ce qui nous permet écrire

$$\phi' - a_1 - \omega_1 \sin \psi = 0 \quad (2.13)$$

$$\psi'' + \frac{1}{c} \omega_1 (a_1 + \omega_1 \sin \psi) \cos \psi = 0. \quad (2.14)$$

On obtient que la constante d'intégration  $a_1$  est nulle,  $a_1 = 0$ , en comparant la condition aux bords (2.10) et l'équation (2.13) avec  $s = \frac{L}{2}$ . Les équations deviennent

$$\phi' = \omega_1 \sin \psi \text{ et} \quad (2.15)$$

$$\psi'' + \frac{\omega_1^2}{2c} \sin 2\psi = 0. \quad (2.16)$$

L'équation (2.15) montre que la courbure ne dépend que de la torsion  $\psi$  et que ses valeurs sont comprises entre  $+\omega_1$  et  $-\omega_1$ . Lorsque  $\psi$  effectue un demi-tour  $\psi \rightarrow \psi + \pi$ ,

le signe de la courbure  $\phi'$  change, en laissant inchangées les valeurs absolues. On désigne par twist-kink, ou TK, les endroits de la chaîne dans lesquels ce changement dans le signe de la courbure apparaît.

L'équation (2.16) est l'équation du pendule, ce qui implique que la torsion solution  $\psi(s)$  est une fonction elliptique de Jacobi. La constante  $\omega_3$  n'apparaît que dans les conditions aux limites (2.15-2.16) .

Multipliant (2.16) par  $\psi'$  , on a

$$\psi' \psi'' + \frac{\omega_1^2}{c} \cos \psi \sin \psi \psi' = 0. \quad (2.17)$$

On effectue alors une intégration sur la longueur d'arc

$$(\psi')^2 = a_2 - \frac{\omega_1^2}{c} \sin^2 \psi \quad (2.18)$$

$$\psi' = \pm \sqrt{a_2} \sqrt{1 - m \sin^2 \psi}, \quad (2.19)$$

avec  $a_2$  une constante d'intégration toujours positive, comme on peut le déduire de l'équation (2.18). À partir de l'équation (2.9), on a la relation entre  $a_2$  et la valeur de la torsion  $\psi$  à  $s = -\frac{L}{2}$

$$a_2 = \omega_3^2 + \frac{\omega_1^2}{c} \sin^2 \psi \left( -\frac{L}{2} \right). \quad (2.20)$$

Le paramètre  $m$  de l'équation (2.19) est défini par  $m = \frac{\omega_1^2}{ca_2}$  , il varie de  $\frac{\omega_1^2}{c\omega_3^2 + \omega_1^2}$  à  $\frac{\omega_1^2}{c\omega_3^2}$  lorsque  $\psi \left( -\frac{L}{2} \right)$  varie.

En intégrant une seconde fois, on a

$$\int_{s_0}^s ds = \pm \frac{1}{\sqrt{a_2}} \int_{\psi(s_0)=0}^{\psi(s)} \frac{d\psi}{\sqrt{1 - m \sin^2 \psi}} = \pm \frac{1}{\sqrt{a_2}} F(\psi|m), \quad (2.21)$$

avec  $s_0$  la longueur d'arc qui vérifie la relation  $\psi(s_0) = 0$  et  $F(\psi|m)$  l'intégrale elliptique incomplète de première espèce [38]. En inversant l'équation

$$F(\psi|m) = \pm \sqrt{a_2} (s - s_0) \quad (2.22)$$

on a l'expression de l'angle  $\psi$  en fonction de la longueur d'arc  $s$

$$\psi(s) = \pm_1 \text{am}(\sqrt{a_2}(s - s_0)|m) \quad (2.23)$$

avec  $\text{am}(x|m)$  l'amplitude de Jacobi. Sa dérivée étant

$$\psi'(s) = \pm_1 \sqrt{a_2} \text{dn}(\sqrt{a_2}(s - s_0)|m), \quad (2.24)$$

on obtient, en utilisant l'équation (2.15), l'expression de la courbure  $\phi'(s)$

$$\phi'(s) = \pm_1 \omega_1 \text{sn}(\sqrt{a_2}(s - s_0)|m), \quad (2.25)$$

où les fonctions  $\text{dn}(x|m)$  et  $\text{sn}(x|m)$  sont les fonctions elliptiques de Jacobi. Il est important de noter que pour  $m \leq 1$  le signe  $\pm_1$  est déterminé par le signe de  $\omega_3$ , qui est la valeur de  $\psi'(\pm \frac{L}{2})$ . Ceci est dû au fait que pour  $m \leq 1$ , le signe de  $\text{dn}(x|m)$  est toujours positif,  $\psi'(s)$  est donc toujours du signe de  $\pm_1$  (équation (2.24)).

Avec les trois équations (2.23)-(2.25), on dispose de tous les outils nécessaires pour effectuer notre analyse. On commence par un cas simplifié sans conditions aux bords, c'est le cas de la chaîne infinie.

## 2.3 Squeelix de longueur infinie

Lorsque la longueur du filament est très grande, l'effet des conditions aux limites est négligeable. Sans perte de généralités, on peut considérer  $s_0 = 0$  et fixer  $\psi(0) = 0$ ,  $\phi(0) = 0$ ,  $\psi'(0) = p > 0$ , la constante  $a_2$  est alors  $a_2 = p^2$ . Le signes des équations (2.23-2.25) est fixé  $\pm_1 = +$ , car dans ce cas, quelque soit la valeur de  $m$ , les deux solutions  $\pm_1 = +$  et  $\pm_1 = -$  sont les reflets l'une de l'autre par la symétrie miroir.

Si on considère l'échelle des longueur comme étant  $\frac{1}{p}$ , on a

$$s \rightarrow ps \text{ et} \quad (2.26)$$

$$\omega_1 \rightarrow \frac{\omega_1}{p}. \quad (2.27)$$



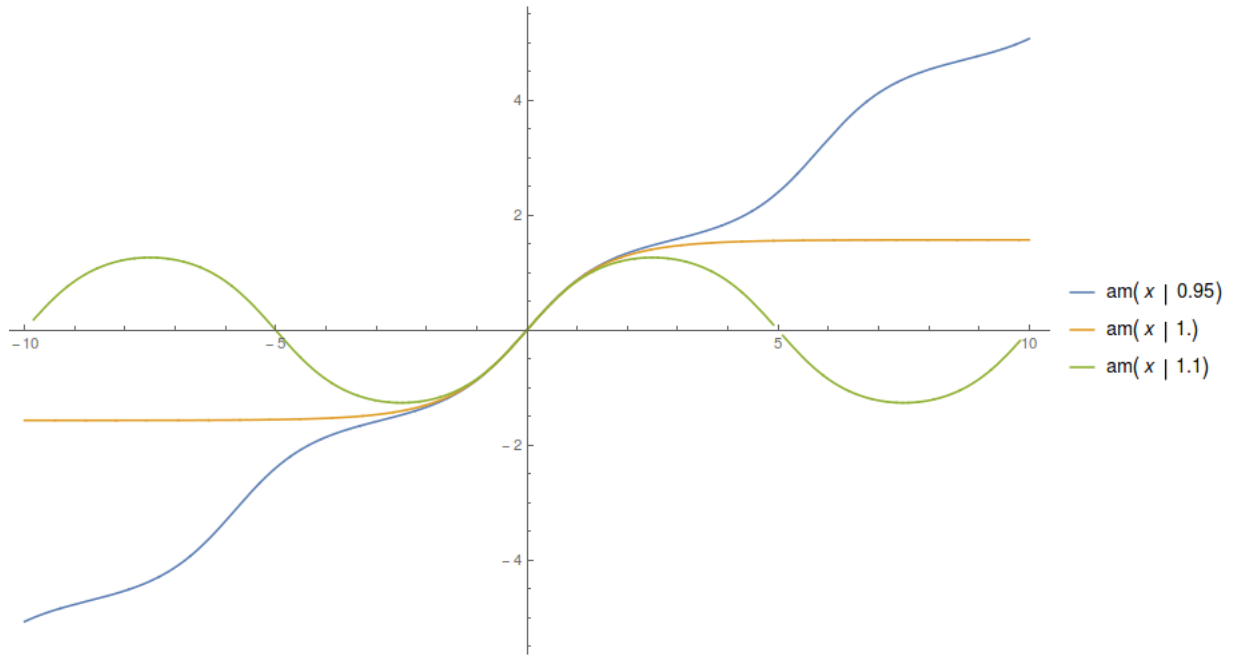


FIGURE 2.2: L'amplitude de Jacobi  $\text{am}(x|m)$  en fonction de  $x$  pour différentes valeurs de  $m$ .

Les équations (2.23-2.25) deviennent

$$\psi(s) = \text{am}(s|m), \quad (2.28)$$

$$\psi'(s) = \text{dn}(s|m) \text{ et} \quad (2.29)$$

$$\phi'(s) = \omega_1 \text{sn}(s|m). \quad (2.30)$$

Le comportement de ces fonctions change beaucoup si le paramètre  $m$  est inférieur à 1, si il est égal à 1 ou si il est supérieur à 1 (figure (2.2)). On doit alors considérer ces trois cas séparément. Notons qu'ici, le paramètre  $m = \frac{\omega_1^2}{c}$  est entièrement déterminé par les caractéristiques de la chaîne.

### 2.3.1 Formes du squeelix

#### 2.3.1.1 Cas où le paramètre $m$ est inférieur à 1

Lorsque  $m < 1$ ,  $\psi(s) = \text{am}(s|m)$  croît avec  $s$ . Pour chaque cycle de longueur d'arc  $L_{cycle} = 2K(m)$ , avec  $K(m)$  l'intégrale elliptique complète de première espèce, la torsion  $\psi$  croît de  $\pi$  induisant un changement de signe de la courbure. En fonction du paramètre  $m$ , on peut avoir de longs ou de courts intervalles le long desquels  $\psi = n\pi$  est constant. Lorsque cet intervalle est assez long le squeelix forme une ou plusieurs boucles de courbure constante  $\phi' = \pm\omega_1$ .

Lorsque  $m$  est très petit,  $L_{cycle}$  devient faible et les twist-kinks sont très rapprochés. Dans ce cas, la forme du squeelix est ondulatoire (partie (a) de la figure 2.3)

Lorsque l'on augmente la valeur de  $m$  juste assez pour avoir  $L_{cycle} \approx L_{loop}$ , avec  $L_{loop} = \frac{2\pi}{\omega_1}$  qui est la taille de la plus petite boucle, nous avons une chaîne infinie composée de boucles de courbures opposées (partie (b) de la figure 2.3).

Si on augmente encore  $m$ , ou si on diminue la taille des boucles  $L_{loop}$ , le squeelix présente plusieurs boucles avant de changer le signe de sa courbure (partie (c) de la figure 2.3). Ceci est dû au fait que dans ce cas,  $L_{loop} \ll L_{cycle}$ .

#### 2.3.1.2 Cas où le paramètre $m$ est égal à 1

Lorsque le paramètre  $m = 1$ , i. e.  $c = \omega_1^2$ , nous avons

$$\psi(s) = \text{gd}(s), \quad (2.31)$$

$$\psi'(s) = \text{sech}(s), \quad (2.32)$$

$$\phi'(s) = \omega_1 \tanh s, \quad (2.33)$$

avec  $\text{gd}(s)$  la fonction de Gudermann,  $\text{sech}(s)$  la sécante hyperbolique et  $\tanh(s)$  la tangente hyperbolique.

Dans ce cas, la forme de la chaîne est composée de deux séries infinies de cercles concentriques de rayon  $r = \frac{1}{\omega_1}$ . Les deux séries de cercles ont des courbures de signes opposés, elles sont séparées par un twist-kink, figure 2.4.

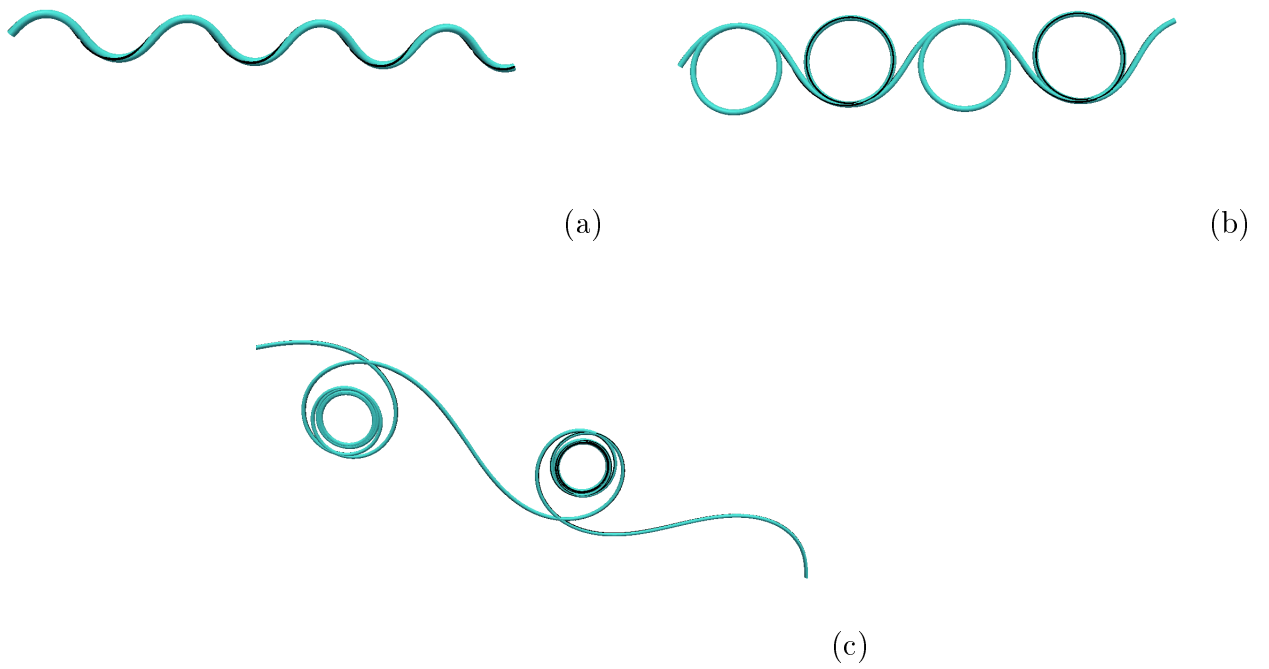


FIGURE 2.3: Squeelix de longueur infinie pour  $m < 1$  avec (a)  $L_{loop} \gg L_{cycle}$ , (b)  $L_{loop} \approx L_{cycle}$  et (c)  $L_{loop} \ll L_{cycle}$ .



FIGURE 2.4: Squeelix de longueur infinie avec  $m = 1$ .

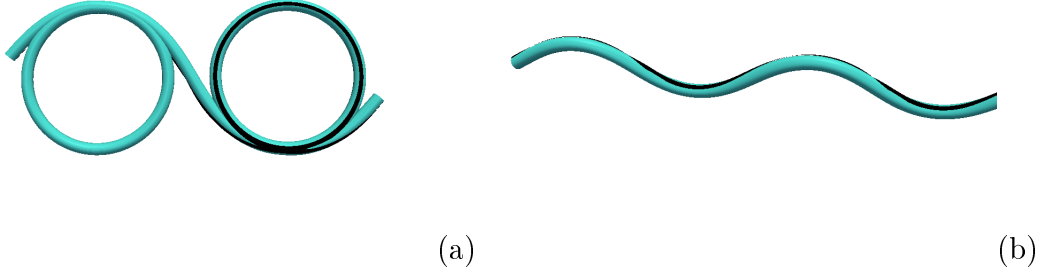


FIGURE 2.5: Squeelix de longueur infinie pour  $m > 1$  avec (a)  $m \gtrsim 1$  et (b)  $m \gg 1$ .

### 2.3.1.3 Cas où le paramètre $m$ est supérieur à 1

Si  $m > 1$ , les équations (2.28-2.30) donnent une torsion périodique  $\psi(s)$  qui oscille entre deux valeurs  $\pm\psi_{max} = \pm \arcsin\left(\frac{1}{m}\right)$  avec une période  $L_{period} = \frac{4}{\sqrt{m}}K\left(\frac{1}{m}\right)$ . De ce fait, la courbure  $\phi'(s) = \omega_1 \sin \psi$  oscille entre deux valeurs  $\pm\phi'_{max} = \pm\omega_1 \sin \psi_{max}$ . Si le paramètre  $m$  est proche de 1, on observe la formation de boucles, car dans ce cas  $L_{period}$  devient plus grand que la taille d'une boucle  $L_{loop} = \frac{2\pi}{\omega_1}$  (partie (a) de la figure 2.5). Si par contre  $m$  est grand,  $L_{period}$  devient plus petit que  $L_{loop}$  et on a un squeelix de forme ondulatoire (partie (b) de la figure 2.5).

## 2.3.2 Densités d'énergies

Une fois les différentes formes stables du squeelix obtenues, on peut calculer l'énergie moyenne par unité de longueur. En injectant les équations (2.28-2.30) à l'équation (2.7) on obtient l'énergie totale  $E(l)$  d'une portion de squeelix de longueur  $l$

$$\begin{aligned}
 E(l) = & B\omega_1^2 m^{-1} \left[ E\left(\psi\left(\frac{l}{2}\right), m\right) - E\left(\psi\left(-\frac{l}{2}\right), m\right) \right] + \frac{B}{2}\omega_1^2 \left(1 + \frac{\omega_3^2}{m} - m^{-1}\right) l \\
 & - B\frac{\omega_1^2}{m}\omega_3 \left[ \psi\left(\frac{l}{2}\right) - \psi\left(-\frac{l}{2}\right) \right]. \tag{2.34}
 \end{aligned}$$

Si  $m < 1$ , on peut fixer  $l = L_{cycle} = 2K(m)$ . Dans ce cas les termes

$$\left[ E\left(\psi\left(\frac{l}{2}\right), m\right) - E\left(\psi\left(-\frac{l}{2}\right), m\right) \right] = 2E[m] \quad (2.35)$$

et

$$\left[ \psi\left(\frac{l}{2}\right) - \psi\left(-\frac{l}{2}\right) \right] = \pi \quad (2.36)$$

sont invariants par translation. L'énergie par unité de longueur  $e_{m<1}(m)$  est alors

$$e_{m<1}(m) = B\omega_1^2 m^{-1} \frac{E[m]}{K[m]} + \frac{B}{2}\omega_1^2 \left(1 + \frac{\omega_3^2}{m} - m^{-1}\right) - B\frac{\omega_1^2}{m}\omega_3 \frac{\pi}{K[m]}. \quad (2.37)$$

Si  $m = 1$ , il n'y a pas de comportement périodique des fonction  $\psi(s)$ , on considère alors la limite de  $\frac{E(l)}{l}$  pour  $l \rightarrow \infty$

$$e_{m=1} = \lim_{l \rightarrow \infty} \frac{E(l)}{l} = \frac{B}{2}\omega_1^2 \left(1 + \frac{\omega_3^2}{m} - m^{-1}\right) = \frac{B}{2}\omega_1^2 \omega_3^2, \quad (2.38)$$

ce qui est égal à la limite de l'équation (2.37) lorsque  $m$  tend vers 1, i. e.  $e_{m=1} = \lim_{m \rightarrow 1} e_{m<1}(m)$ . Ceci est dû au fait que lorsque  $m$  est légèrement inférieur à 1, les twist-kinks sont très dilués dans la chaîne ce qui rend leur contribution à l'énergie négligeable.

Pour  $m > 1$ , la fonction  $\psi(s)$  est périodique. Les deux termes

$$\left[ E\left(\psi\left(\frac{l}{2}\right), m\right) - E\left(\psi\left(-\frac{l}{2}\right), m\right) \right] \quad (2.39)$$

et

$$\left[ \psi\left(\frac{l}{2}\right) - \psi\left(-\frac{l}{2}\right) \right] \quad (2.40)$$

sont nuls si on prend  $l = L_{period} = \frac{4}{\sqrt{m}}K\left(\frac{1}{m}\right)$ . Ceci est dû au fait que les contributions énergétiques de deux arcs de cercles de courbures opposées s'annihilent. On a alors

$$e_{m>1} = \frac{B}{2}\omega_1^2 \left(1 + \frac{\omega_3^2}{m} - m^{-1}\right). \quad (2.41)$$

En résumé, pour des squeelix très longs, l'énergie moyenne par unité de longueur est

$$e(m) = \begin{cases} B\omega_1^2 m^{-1} \frac{E[m]}{K[m]} + \frac{B}{2}\omega_1^2 \left(1 + \frac{\omega_3^2}{m} - m^{-1}\right) - B\frac{\omega_1^2}{m}\omega_3 \frac{\pi}{K[m]} & \text{for } m < 1 \\ \frac{B}{2}\omega_1^2 \left(1 + \frac{\omega_3^2}{m} - m^{-1}\right) & \text{for } m \geq 1. \end{cases}$$

L'étude des squeelicks de longueur infinie permet d'en saisir les différentes propriétés. Celles-ci sont dictées essentiellement par le paramètre  $m = \frac{\omega_1^2}{c}$ . Cependant pour des chaînes de longueur finie, la torsion préférée  $\omega_3$  joue un rôle important via les conditions aux limites et une autre approche doit être suivie.

## 2.4 Squeelicks de longueur finie

En considérant la longueur de la chaîne finie, nous devons tenir compte de toutes les conditions aux limites. Reprenons les équations (2.23-2.25), nous cherchons d'abord quels sont les états stables possibles qui satisfont aux conditions 2.9.

En utilisant les équations 2.20, on a

$$\sin^2 \left( \psi \left( -\frac{L}{2} \right) \right) = \frac{ca_2}{\omega_1^2} - \frac{\omega_1^2}{c\omega_3^2} \quad (2.42)$$

alors

$$\psi \left( -\frac{L}{2} \right) = \pm_2 \arcsin \sqrt{\frac{1}{m} - \frac{1}{\mu}} + n\pi, \quad n \in \mathbb{Z}, \quad (2.43)$$

avec  $\mu = \frac{\omega_1^2}{c\omega_3^2}$ .

D'autre part l'angle de torsion  $\psi(s)$  s'écrit, équation (2.23),

$$\psi(s) = \pm_1 \operatorname{am}(\sqrt{a_2}(s - s_0)|m). \quad (2.44)$$

Sachant que l'amplitude de Jacobi  $\operatorname{am}(x, m)$  a un comportement cyclique nous pouvons nous limiter à  $\psi \left( -\frac{L}{2} \right) \in \left[ -\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2} \right]$ . En effet, pour  $m \neq 1$ ,  $\sin(\psi(s))$  est une fonction périodique, et pour  $m = 1$  on a toujours  $\operatorname{am}(x, 1) \in \left[ -\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2} \right]$ ,  $\forall x \in \mathcal{R}$ . On peut alors écrire

$$\psi \left( -\frac{L}{2} \right) = \pm_2 \arcsin \sqrt{\frac{1}{m} - \frac{1}{\mu}}. \quad (2.45)$$

Le signe  $\pm_2$  désigne ici deux solutions distinctes, à ne pas confondre avec le signe  $\pm_1$  apparaissant dans les équations (2.23)-(2.25). En intégrant l'équation (2.21), on obtient

l'expression de  $s_0$

$$\int_{s_0}^{-\frac{L}{2}} ds = \pm \frac{1}{\sqrt{a_2}} \int_{\psi(s_0)=0}^{\psi(-\frac{L}{2})} \frac{d\psi}{\sqrt{1 - m \sin^2 \psi}}, \quad (2.46)$$

$$-\frac{L}{2} - s_0 = \pm_1 \frac{1}{\sqrt{a_2}} F \left( \pm_2 \arcsin \sqrt{\frac{1}{m} - \frac{1}{\mu}} \middle| m \right), \quad (2.47)$$

$$s_0 = -\frac{L}{2} \mp_{1 \times 2} \frac{1}{\sqrt{a_2}} F \left( \arcsin \sqrt{\frac{1}{m} - \frac{1}{\mu}} \middle| m \right), \quad (2.48)$$

où  $\pm_{1 \times 2} = \pm_1 \times \pm_2$ , ce qui nous donne quatre combinaisons possibles.

## 2.4.1 Formes du squeelix

Afin développer davantage les calculs nous devons, comme dans le section précédente, distinguer trois cas selon la valeur du paramètre  $m$  qui peut être inférieur, égal ou supérieur à 1.

### 2.4.1.1 Cas où le paramètre $m$ est inférieur à 1

Pour  $m < 1$ , i.e.  $\sin^2 \psi \left(-\frac{L}{2}\right) > 1 - \frac{c\omega_3^2}{\omega_1^2}$ , la torsion  $\psi' = \pm_1 \sqrt{a_2} \sqrt{1 - m \sin^2 \psi}$  ne s'annule jamais, elle ne peut donc pas changer de signe. Comme nous devons satisfaire les conditions aux limites (2.9), le signe  $\pm_1$  est déterminé par la torsion préférée  $\omega_3$ .

A partir de l'équation (2.9), on a également

$$1 - m \sin^2 \psi \left(-\frac{L}{2}\right) = 1 - m \sin^2 \psi \left(\frac{L}{2}\right), \quad (2.49)$$

d'où

$$\sin \psi \left(-\frac{L}{2}\right) = \pm \sin \psi \left(\frac{L}{2}\right). \quad (2.50)$$

Comme  $\phi' = \omega_1 \sin \psi$ , le signe  $\pm$  de l'équation (2.50) correspond à des courbures égales ou opposées au niveau des bords, i. e.

$$\phi' \left(-\frac{L}{2}\right) = \pm \phi' \left(\frac{L}{2}\right). \quad (2.51)$$

En conséquence, on a deux cas possibles, (a) ou (b)

$$\psi\left(\frac{L_a}{2}\right) = \psi\left(-\frac{L_a}{2}\right) + k_a\pi \quad \text{ou} \quad (2.52)$$

$$\psi\left(\frac{L_b}{2}\right) = -\psi\left(-\frac{L_b}{2}\right) + k_b\pi \quad . \quad (2.53)$$

avec  $k_a, k_b = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Les deux cas (a) et (b) correspondent à des tangentes de l'angle de torsion aux bords  $\psi(\pm \frac{L}{2})$  égales ou de signes opposées respectivement.

**Cas (a) :**  $\tan \psi\left(\frac{L}{2}\right) = \tan\left(-\frac{L}{2}\right)$

Dans ce cas, si  $k_a$  est pair, les courbures aux bords sont égales. Si  $k_a$  est impair ces courbures sont opposées. Sachant que  $\text{am}(x|m) + k\pi = \text{am}(x + 2kK(m)|m)$ , alors l'équation (2.52) implique

$$\text{am}\left(\sqrt{a_2}\left(\frac{L_a}{2} - s_{0a}\right)|m\right) = \text{am}\left(\sqrt{a_2}\left(-\frac{L_a}{2} - s_{0a}\right) + 2k_a K(m)|m\right). \quad (2.54)$$

On en déduit

$$L_a = \frac{2k_a}{\sqrt{a_2}} K(m), \quad (2.55)$$

avec  $k_a = +1, +2, \dots$

À partir de l'équation (2.48), on déduit  $s_{0a}$

$$s_{0a_{\pm}} = -\frac{k_a}{\sqrt{a_2}} K(m) \mp_{1 \times 2} \frac{1}{\sqrt{a_2}} F\left(\arcsin \sqrt{\frac{1}{m} - \frac{1}{\mu}} | m\right). \quad (2.56)$$

Avec  $\mp_{1 \times 2} = -(\pm_{1 \times 2})$ . Il nous faut encore déterminer les valeurs possibles de  $k_a$  et  $a_2 = \frac{\omega_1^2}{cm}$  pour une longueur totale  $L_a$  donnée. Pour ce faire, on utilise l'équation (2.55)

$$L_a(k_a, m) = \frac{2k_a}{\sqrt{a_2}} K(m) = \frac{2\sqrt{c}k_a}{\omega_1} \sqrt{m} K(m). \quad (2.57)$$

$L_a(k_a, m)$  est une fonction décroissante de  $m$ , alors  $L_{a_{min}}(k_a) = L_a\left(k_a, \frac{\mu}{1+\mu}\right)$  et  $L_{a_{max}}(k_a) = L_a(k_a, \mu)$ ,  $m$  étant toujours compris entre  $\frac{\mu}{1+\mu}$  et  $\mu$ .



Si on fixe  $k_a$ , on a un intervalle de longueurs possibles selon le paramètre  $\mu$ . Ce qui veut dire que nous ne pouvons pas diminuer la longueur de la chaîne infiniment même si  $k_a = 1$ . De même, si nous avons une longue chaîne de longueur  $L$ , on doit augmenter la valeur du paramètre  $k_a$  pour atteindre un intervalle de longueurs accessibles qui contient  $L$ . Ceci est dû à la condition aux limites (2.52) qui impose à l'angle de torsion  $\psi$  de tourner  $k_a$  fois le long de  $L$ . En conséquence,  $L$  doit être assez long pour accepter le nombre de tours spécifiés et doit être assez court pour ne pas avoir à ajouter de twist-kink supplémentaire.

L'analyse de la stabilité dans la prochaine section montre que ces solutions sont les points de selles.

**Cas (b) :**  $\tan \psi \left( \frac{L}{2} \right) = -\tan \left( -\frac{L}{2} \right)$

Dans ce cas, si  $k_b$  est impair, les courbures aux bords sont égales. Si  $k_b$  est pair ces courbures sont opposées. Sachant que  $\text{am}(x|m) + k\pi = \text{am}(x + 2kK(m)|m)$  et  $\text{am}(x|m) = -\text{am}(-x|m)$ , l'équation (2.53) implique

$$\text{am} \left( \sqrt{a_2} \left( \frac{L}{2} - s_0 \right) | m \right) = \text{am} \left( \sqrt{a_2} \left( \frac{L}{2} + s_0 \right) + 2k_b K(m) | m \right), \quad (2.58)$$

d'où

$$s_{0b} = \frac{-k_b}{\sqrt{a_2}} K(m). \quad (2.59)$$

À partir de l'équation (2.48), on déduit  $L_b$

$$L_b(k_b, m)_{\pm} = \frac{2\sqrt{c}k_b}{\omega_1} \sqrt{m} \left( K(m) \mp_{1 \times 2} F \left( \arcsin \sqrt{\frac{1}{m} - \frac{1}{\mu}} | m \right) \right). \quad (2.60)$$

$L_b(k_b, m)$  est une fonction de  $m$  avec

$$L_{b_{min}}(k_b) = L_b \left( k_b, \frac{\mu}{1 + \mu} \right)_{+} = \frac{2\sqrt{c}(k_b - 1)}{\omega_1} \sqrt{\frac{\mu}{1 + \mu}} \left( K \left( \frac{\mu}{1 + \mu} \right) \right). \quad (2.61)$$

Si  $k_b = 1$  on a  $L_{b_{min}}(1) = 0$ , on peut avoir une longueur totale infiniment petite. Ceci est dû à la condition (2.53) qui permet au squeelix de n'effectuer aucun tour. Pour  $k_b > 1$ , on a un intervalle de longueurs possibles comme pour le cas (a).

Si on a un squeelix de longueur  $L$  donnée, on fixe le nombre de TKs via le paramètre  $k$  et on obtient les différentes valeurs possibles de  $m$  en résolvant numériquement l'équation 2.55 pour le cas (a) et 2.60 pour le cas (b). Le paramètre  $s_0$  est alors déduit via les relations (2.56) ou (2.59).

Dans le modèle des twist-kinks en interaction, on quantifie l'énergie d'un twist-kink par

$$E_{1kink} = (\gamma - 1)\pi C\omega_3 \quad (2.62)$$

avec  $\gamma = \frac{2\omega_1}{\pi\sqrt{c}\omega_3}$ . Lorsque  $\gamma > 1$ , l'énergie d'un twist-kink est positive, la forme la plus stable est donc sans twist-kink, ce qui correspond au cas (b) avec  $k_b = 1$ . Lorsque  $\gamma < 1$ , l'énergie d'un twist-kink est négative, alors la forme la plus stable est un squeelix avec  $k_b > 1$ . Une démonstration mathématique est donnée dans la section 2.6. Pour l'instant, nous utilisons l'équation (2.62) comme ansatz pour avoir une première estimation du nombre de TKs que contient le minimum énergétique global.

**Cas  $\gamma > 1$  :** ( $L = l$ ,  $\omega_1 = \frac{20}{l}$ ,  $\omega_3 = \frac{1}{l}$  et  $c = 1$ )

Dans ce cas,  $\gamma \simeq 12.7$  et  $E_{1kink} \simeq 36.8\frac{B}{l}$ . Dans la figure 2.6 on représente les différents extrema de l'énergie en augmentant  $k_a$  et  $k_b$ . Comme  $E_{1kink} > 0$ , le minimum de l'énergie est la forme circulaire sans twist-kink. La solution a la forme de trois cercles superposés de rayon  $r = \frac{1}{\omega_1}$  (figure 2.6 (a)). Si on ajoute un twist-kink l'énergie est augmentée de  $E_{1kink}$  (figure 2.6 (b) et (c)). Le twist-kink préfère être au centre mais se déplace avec un faible coût énergétique. Si on ajoute un deuxième twist-kink (figure 2.6 (d) et (e)), la différence d'énergie  $E_{2TK} - E_{1TK}$  est supérieure à  $E_{1kink}$  à cause de l'énergie de répulsion entre les deux TKs.

**Cas  $\gamma \lesssim 1$  :** ( $L = l$ ,  $\omega_1 = \frac{24}{l}$ ,  $\omega_3 = \frac{16}{l}$  et  $c = 1$ )

Dans ce cas,  $\gamma \simeq 0.99$  et  $E_{1kink} \simeq -0.2\frac{B}{l}$ . La figure 2.7 représente les différents extrema de l'énergie en augmentant  $k_a$  et  $k_b$ . Le minimum global est la solution du cas (b) avec  $k_b = 3$ , elle est représentée par la figure 2.7-(e).

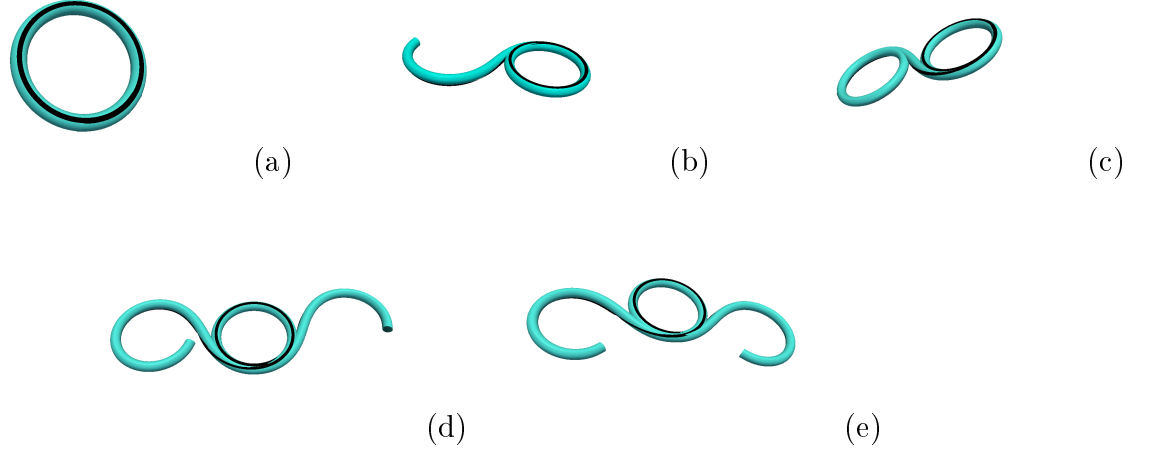


FIGURE 2.6: Évolution de la forme d'un squeelix en ajoutant progressivement des twist-kinks pour  $\gamma > 1$ . Les énergies  $E(k)$  des formes de (a) à (e) sont respectivement :  $E(k_b = 1) = 0.45 \frac{B}{l}$ ,  $E(k_a = 1) = 37.36 \frac{B}{l}$ ,  $E(k_b = 2) = 37.31 \frac{B}{l}$ ,  $E(k_a = 2) = 74.23 \frac{B}{l}$  and  $E(k_b = 3) = 74.21 \frac{B}{l}$ .

**Cas  $\gamma < 1$  :** ( $L = l$ ,  $\omega_1 = \frac{20}{l}$ ,  $\omega_3 = \frac{20}{l}$  et  $c = 1$ )

Avec ces paramètres  $\gamma \simeq 0.64$  et  $E_{1kink} = -22.8318 \frac{B}{l}$ , le minimum global de l'énergie correspond au cas (b) avec  $k_b = 7$  (figure 2.8).

Dans les deux derniers cas l'énergie d'un twist-kink est négative. Le squeelix le plus stable a un nombre optimal de twist-kink de manière à ce que si on ajoute un kink, l'énergie de répulsion TK-TK est supérieure à l'énergie négative d'un TK. Pour le cas  $\gamma = 0.64$ , le nombre optimal de TK est 6, ce qui correspond à  $k_b = 7$ . Lorsque l'on passe de  $k_b = 6$  ( $E_{k_b=6} = 89.88 \frac{B}{l}$ ) à  $k_b = 7$  ( $E_{k_b=7} = 89.20 \frac{B}{l}$ ) l'énergie d'interaction entre les twist-kinks est encore inférieure à l'énergie d'un twist-kink. Lorsqu'on ajoute un septième TK,  $k_b = 8$ , ( $E_{k_b=8} = 95.90 \frac{B}{l}$ ) l'énergie du squeelix augmente car l'énergie d'interaction supplémentaire dépasse l'énergie d'un TK. On remarque aussi que les TK préfèrent être centrés au milieu du squeelix, les énergies du cas (b) sont inférieures aux énergies du cas (a). Cependant, lorsque l'on a un grand nombre de TK la différence

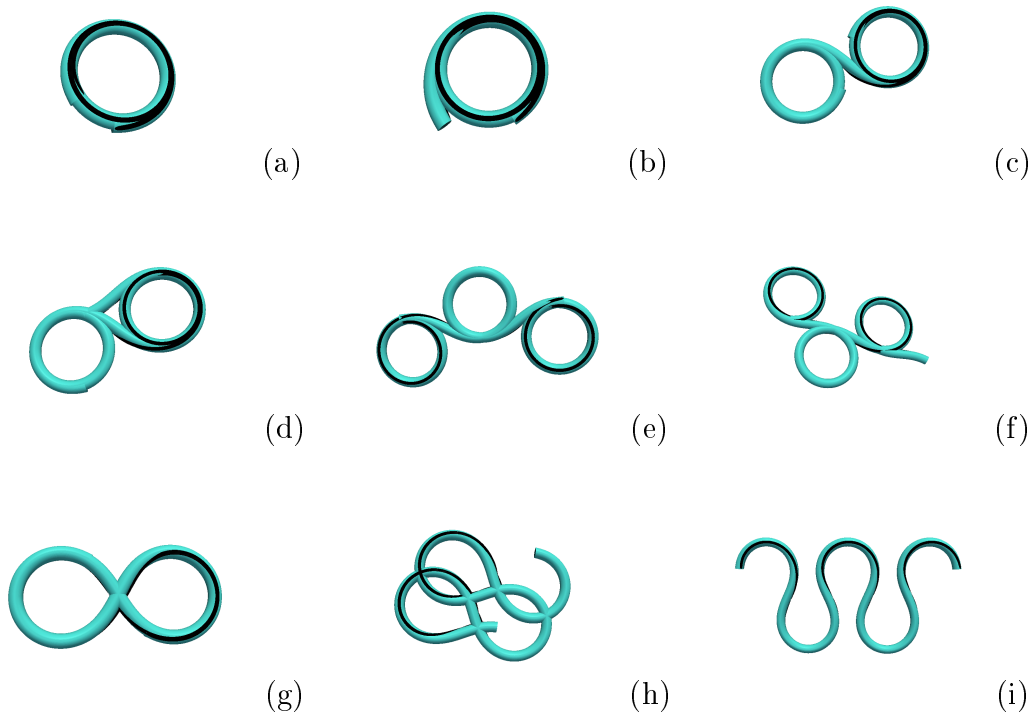


FIGURE 2.7: Évolution de la forme d'un squeelix en ajoutant progressivement des twist-kinks pour  $\gamma \lesssim 1$ . Les énergies  $E(k)$  des formes de (a) à (i) sont respectivement :  $E(k_b = 1) = 111.32 \frac{B}{l}$ ,  $E(k_a = 1) = 121.47 \frac{B}{l}$ ,  $E(k_b = 2) = 111.11 \frac{B}{l}$ ,  $E(k_a = 2) = 121.26 \frac{B}{l}$ ,  $E(k_b = 3) = 110.98 \frac{B}{l}$ ,  $E(k_a = 3) = 121.22 \frac{B}{l}$ ,  $E(k_b = 4) = 111.72 \frac{B}{l}$ ,  $E(k_a = 4) = 122.56 \frac{B}{l}$ , and  $E(k_b = 5) = 115.18 \frac{B}{l}$ .

d'énergie entre les cas (a) et (b) est négligeable.

#### 2.4.1.2 Cas où le paramètre $m$ est égal à 1

Lorsque le paramètre  $m = 1$ , i. e.  $\sin^2 \psi \left(-\frac{L}{2}\right) = 1 - \frac{c\omega_3^2}{\omega_1^2}$ , les paramètres physiques de la chaîne doivent satisfaire la relation  $\frac{c\omega_3^2}{\omega_1^2} \leq 1$ . On a alors

$$\psi \left(-\frac{L}{2}\right) = \pm_2 \arcsin \sqrt{1 - \frac{1}{\mu}}. \quad (2.63)$$


 FIGURE 2.8: Minimum global de l'énergie pour  $\gamma < 1$ .

Les trois équations (2.23), (2.24) et (2.25) deviennent

$$\psi(s) = \pm_1 \text{gd} \left( \sqrt{\frac{\omega_1^2}{c}} (s - s_0) \right), \quad (2.64)$$

$$\psi'(s) = \pm_1 \sqrt{\frac{\omega_1^2}{c}} \text{sech} \left( \sqrt{\frac{\omega_1^2}{c}} (s - s_0) \right) \text{ et} \quad (2.65)$$

$$\phi'(s) = \pm_1 \omega_1 \tanh \left( \sqrt{\frac{\omega_1^2}{c}} (s - s_0) \right). \quad (2.66)$$

Comme la fonction  $\text{sech}(x)$  est paire et toujours positive, on déduit des conditions aux limites  $\psi'(-\frac{L}{2}) = \psi'(\frac{L}{2}) = \omega_3$  que  $s_0 = 0$  et le signe  $\pm_1$  est le même que le signe de  $\omega_3$ . On sait aussi que la fonction  $\text{gd}(x)$  est impaire et négative sur l'intervalle  $x \in [-\infty, 0]$ . À partir de l'équation (2.63) on déduit que le signe  $\pm_2$  est négatif lorsque  $\pm_1$  est positif et vice-versa, i. e.  $\pm_2 = \mp_1$ . En utilisant les équations (2.64) et (2.45), on obtient l'unique valeur possible de la longueur  $L$  qui dépend des paramètres physiques de la chaîne

$$L = 2 \sqrt{\frac{c}{\omega_1^2}} g d^{-1} \left( \arcsin \left( \sqrt{1 - \frac{c \omega_3^2}{\omega_1^2}} \right) \right). \quad (2.67)$$

La forme du squeelix dans ce cas est un TK centré entre deux arcs de courbures opposées, comme c'est le cas lorsque  $L$  tend vers l'infini (figure 2.4).

### 2.4.1.3 Cas où le paramètre $m$ est supérieur à 1

Dans le cas où  $\sin^2 \psi \left(-\frac{L}{2}\right) < 1 - \frac{c\omega_3^2}{\omega_1^2}$ , le paramètre  $m > 1$ . L'équation (2.18) nous donne une valeur minimale et une valeur maximale pour l'angle de torsion  $\psi(s)$  qui sont  $\psi_{max} = \arcsin \sqrt{\frac{1}{m}}$  et  $\psi_{min} = -\arcsin \sqrt{\frac{1}{m}}$ . Dans ce cas  $\psi(s)$ , qui est donné par l'équation (2.23), est une fonction impaire de centre  $s_0$ , périodique et de période  $L_{period} = 4\sqrt{\frac{c}{\omega_1^2}}K\left(\frac{1}{m}\right)$ .

Les équations (2.9) et (2.18) impliquent

$$\sin \psi \left(\frac{L}{2}\right) = \pm \sin \psi \left(-\frac{L}{2}\right). \quad (2.68)$$

Comme  $\psi_{max} < \frac{\pi}{2}$ ,  $\psi(s)$  ne peut pas traverser les barrières  $\pm\frac{\pi}{2}$ , alors la condition (2.68) se réduit à

$$\psi \left(\frac{L_a}{2}\right) = \psi \left(-\frac{L_a}{2}\right) \quad (a) \text{ ou} \quad (2.69)$$

$$\psi \left(\frac{L_b}{2}\right) = -\psi \left(-\frac{L_b}{2}\right) \quad (b), \quad (2.70)$$

ce qui correspond à des courbures aux bords égales pour le cas (a) ou opposées pour le cas (b).

### Courbures aux bords égales

Comme  $\psi(s)$  est une fonction périodique,  $\psi \left(\frac{L}{2}\right) = \psi \left(-\frac{L}{2}\right)$  avec  $\psi' \left(-\frac{L}{2}\right) = \psi' \left(\frac{L}{2}\right) = \omega_3$  impliquent

$$L_{k_a} = k_a L_{period} = k_a 4\sqrt{\frac{c}{\omega_1^2}}K\left(\frac{1}{m}\right). \quad (2.71)$$

La longueur d'arc  $s_0$  est liée à  $L$  par la relation (2.48)

$$s_{0a} = -\frac{L_a}{2} \mp_{1 \times 2} \frac{1}{\sqrt{a_2}} F \left( \arcsin \sqrt{\frac{1}{m} - \frac{1}{\mu}} \middle| m \right). \quad (2.72)$$

La forme correspondante est un nombre  $k_a$  d'ondulations, partie (a) de la figure 2.9.

**Courbures aux bords opposées** L'équation (2.70) implique

$$\sqrt{a_2} \left( \frac{L}{2} - s_0 \right) = -\sqrt{a_2} \left( -\frac{L}{2} - s_0 \right) + k_b \frac{4}{\sqrt{m}} K\left(\frac{1}{m}\right), \quad (2.73)$$

ce qui donne

$$s_{0b} = -\frac{1}{2} k_b L_{period} = -k_b \frac{2\sqrt{c}}{\omega_1} K\left(\frac{1}{m}\right). \quad (2.74)$$

On déduit la valeur de  $L$  à partir de l'équation (2.48)

$$L_b = 2 \left( k_b \frac{2\sqrt{c}}{\omega_1} K\left(\frac{1}{m}\right) \mp_{1 \times 2} \frac{1}{\sqrt{a_2}} F \left( \arcsin \sqrt{\frac{1}{m} - \frac{1}{\mu}} |m \right) \right). \quad (2.75)$$

Le squeelix correspondant a une forme ondulée (parties (b) et (c) de la figure 2.9).

## 2.4.2 Diagramme des énergies

A partir de l'expression de l'énergie (2.7) et des équations (2.23-2.25) on a l'énergie du squeelix qui s'écrit

$$E = B \left[ \frac{\omega_1 \sqrt{c}}{\sqrt{m}} \left( E \left( \psi \left( \frac{L}{2} \right) |m \right) - E \left( \psi \left( -\frac{L}{2} \right) |m \right) \right) + \frac{\omega_1^2}{2} \left( 1 + \frac{1}{\mu} - \frac{1}{m} \right) L - c\omega_3 \left( \psi \left( \frac{L}{2} \right) - \psi \left( -\frac{L}{2} \right) \right) \right]. \quad (2.76)$$

Si on ne tient pas compte des conditions aux limites, on peut faire varier  $s_0$  et  $m$  pour un  $L$  fixé.

On obtient alors le diagramme 3D de l'énergie, figure 2.10. Les extrema sont les solutions exposées plus haut satisfaisant les conditions aux limites (2.9)-(2.10). Si on zoom sur le minimum absolu on a la figure 2.11 . On voit qu'il existe plusieurs extrema qui peuvent être des minimas ou des maximas. Afin de distinguer entre eux on effectue une analyse de la stabilité.

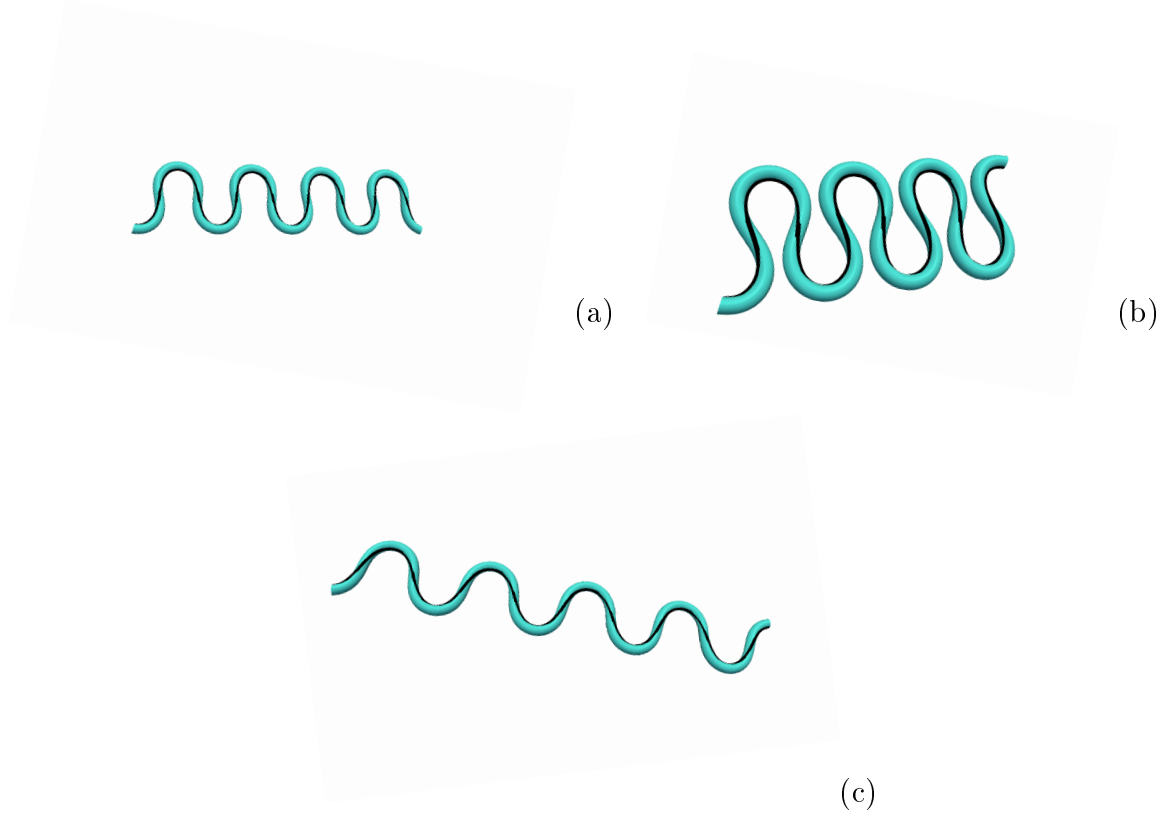


FIGURE 2.9: Formes du squeelix pour  $m > 1$  avec  $\omega_1 = 40l$ ,  $\omega_3 = 4l$ ,  $c = 1$ ,  $k = 4$  et  $L = l$ . Pour la partie (a) les courbures finales sont égales et  $\pm_{1 \times 2} = +$ . Dans (b) et (c) les courbures finales sont opposées avec  $\pm_{1 \times 2} = +$  pour (b) et  $\pm_{1 \times 2} = -$  pour (c).

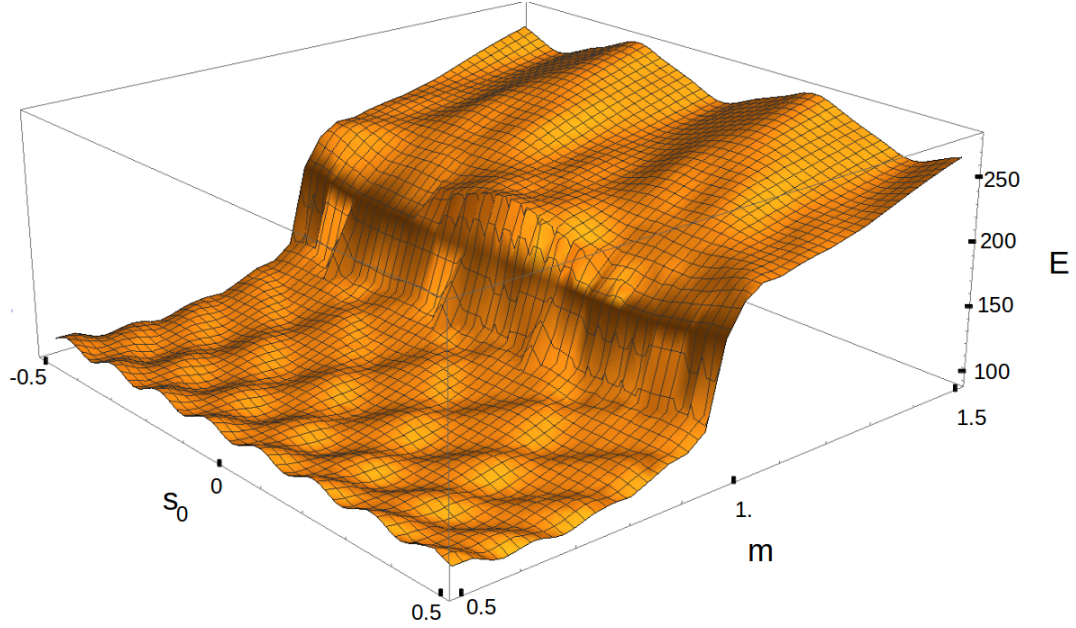
## 2.5 Analyse de la stabilité

Afin de distinguer entre les différents extrema obtenus dans la section précédente nous effectuons une seconde variation de l'énergie (2.7)

$$\delta^2 E = Bc \int_{-\frac{l}{2}}^{\frac{l}{2}} \left( \tilde{\psi}'^2 + \frac{\omega_1^2}{c} (2 \sin^2 \psi - 1) \tilde{\psi}^2 \right) ds, \quad (2.77)$$

$$= Bc \int_{-\frac{l}{2}}^{\frac{l}{2}} \left( \tilde{\psi}'^2 + V(s) \tilde{\psi}^2 \right) ds. \quad (2.78)$$





(a)

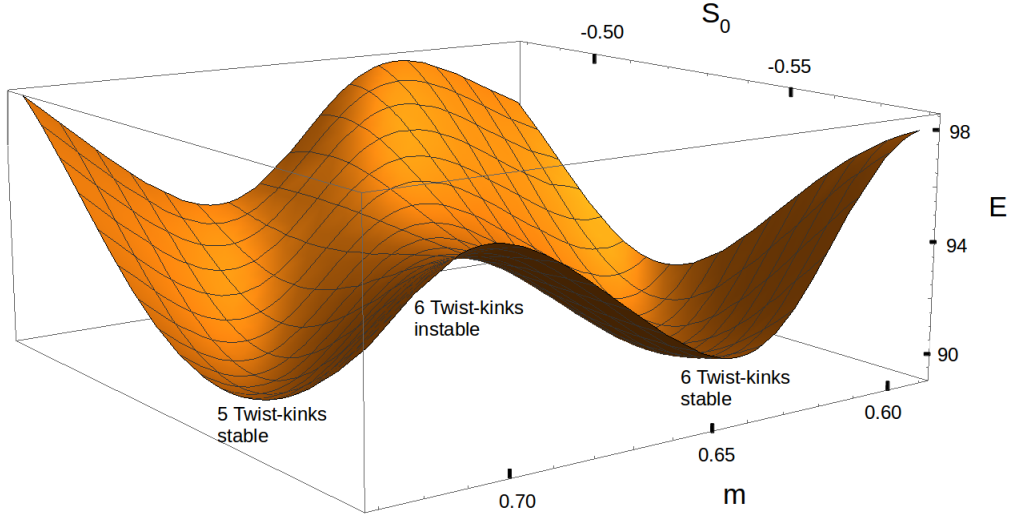
FIGURE 2.10: Diagramme de l'énergie pour un squeelix de longueur  $l$  avec  $\omega_1 = \frac{20}{l}$ ,  $\omega_3 = \frac{20}{l}$  et  $c = 1$ . Les énergies sont en unités de  $Bl^{-1}$ .

avec  $V(s) = \frac{\omega_1^2}{c} (2 \sin^2 \psi - 1)$  et  $\tilde{\psi} = \delta\psi$ . En intégrant l'expression (2.78) on a

$$\delta^2 E = Bc \left[ \tilde{\psi} \frac{d}{ds} \tilde{\psi} \right]_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} + Bc \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \tilde{\psi} \mathcal{L} \tilde{\psi} ds, \quad (2.79)$$

où  $\mathcal{L} = -\frac{d^2}{ds^2} + V(s)$  est l'opérateur de Lamé.

Afin de développer davantage les calculs nous distinguons les trois cas  $m < 1$ ,  $m = 1$  et  $m > 1$ .



(b)

FIGURE 2.11: Zoom du diagramme 2.10 autour du minimum d'énergie global. Les paramètres du squeelix de longueur  $l$  sont  $\omega_1 = \frac{20}{l}$ ,  $\omega_3 = \frac{20}{l}$  et  $c = 1$  et les énergies sont en unités de  $B l^{-1}$ .

### 2.5.1 Cas où le paramètre $m$ est inférieur à 1

On commence par une fluctuation de la forme  $\tilde{\psi} \rightarrow \tilde{\psi} + \lambda s + \rho$  avec  $\tilde{\psi} = 0$  aux bords. L'équation (2.79) devient

$$\delta^2 E = Bc \left\{ A_1 \lambda^2 + 2A_2 \lambda \rho + A_3 \rho^2 + 2\lambda \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} (sV(s)\tilde{\psi} ds) + 2\rho \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} V(s)\tilde{\psi} ds + \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \tilde{\psi} \mathcal{L} \tilde{\psi} ds \right\}, \quad (2.80)$$

où on a défini

$$A_1 = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} s^2 V(s) ds + L, \quad (2.81)$$

$$A_2 = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} V(s) s ds, \quad (2.82)$$

$$A_3 = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} V(s) ds. \quad (2.83)$$

Pour  $\lambda$  et  $\rho$  donnés, on cherche à minimiser  $\delta^2 E$  par rapport à  $\tilde{\psi}$ . Ceci revient à résoudre l'équation

$$\lambda s V(s) + \rho V(s) + \mathcal{L}\tilde{\psi}(s) = 0 \quad (2.84)$$

avec  $\tilde{\psi}(s)$  nul aux bords. Cette solution est un minimum si la fluctuation du deuxième ordre est positive  $\delta^2 E(\tilde{\psi}) > 0$  (où  $\tilde{\psi}$  est la fluctuation de la fluctuation  $\tilde{\psi}$ ). Si on pose

$$\tilde{\psi}(s) = \alpha \tilde{\psi}^{(0)}(s) + \lambda \tilde{\psi}^{(1)}(s) + \rho \tilde{\psi}^{(2)}(s), \quad (2.85)$$

à partir de l'équation (2.84), on a

$$\mathcal{L}\tilde{\psi}^{(0)}(s) = 0, \quad (2.86)$$

$$sV(s) + \mathcal{L}\tilde{\psi}^{(1)}(s) = 0, \quad (2.87)$$

$$V(s) + \mathcal{L}\tilde{\psi}^{(2)}(s) = 0 \quad (2.88)$$

avec  $\tilde{\psi}^{(i)}$  nul aux bords.

La première équation montre que  $\tilde{\psi}^{(0)}(s) = \text{dn}(\sqrt{a_2}(s - s_0)|m)$ , c'est la fonction propre à valeur nulle de  $\mathcal{L}$ . Comme  $\text{dn}(\sqrt{a_2}(s - s_0)|m)$  ne satisfait pas à la condition aux bords, on a  $\alpha = 0$ .

Pour construire les deux autres composantes on pose

$$\varphi(\sqrt{a_2}(s - s_0), m) = \frac{1}{1 - m} [\text{dn}(\sqrt{a_2}(s - s_0), m) E(\text{am}(\sqrt{a_2}(s - s_0), m), m) - m \text{cn}(\sqrt{a_2}(s - s_0), m) \text{sn}(\sqrt{a_2}(s - s_0), m)]. \quad (2.89)$$

Les solutions générales des équations (2.87 -2.88) sont

$$\tilde{\psi}^{(1)}(s) = C_1 \operatorname{dn}(\sqrt{a_2}(s - s_0), m) + C_2 \varphi(\sqrt{a_2}(s - s_0), m) - s \quad (2.90)$$

$$\tilde{\psi}^{(2)}(s) = C_3 \operatorname{dn}(\sqrt{a_2}(s - s_0), m) + C_4 \varphi(\sqrt{a_2}(s - s_0), m) - 1. \quad (2.91)$$

Pour fixer les coefficients  $C_i$ , on tient compte de la condition aux bords  $\tilde{\psi}^{(i)}(\pm \frac{L}{2}) = 0$ , en utilisant

$$\psi\left(-\frac{L}{2}\right) = \pm_1 \operatorname{am}\left(\sqrt{a_2}\left(-\frac{L}{2} - s_0\right), m\right) = \pm_2 \arcsin \sqrt{\frac{1}{m} - \frac{1}{\mu}}, \quad (2.92)$$

$$\psi\left(\frac{L}{2}\right) = \pm_1 \operatorname{am}\left(\sqrt{a_2}\left(\frac{L}{2} - s_0\right), m\right) = \begin{cases} \psi\left(-\frac{L}{2}\right) + k_a \pi & (a) \\ -\psi\left(-\frac{L}{2}\right) + k_b \pi & (b) \end{cases} \quad \text{ou } (2.93)$$

et le fait que  $\pm_1 \omega_3 = |\omega_3| = \sqrt{\omega_3^2}$ . On obtient pour le cas (a)

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}_a^{(1)}(s) &= -L \sqrt{\frac{\mu}{m}} \frac{E\left(\pm_1 \psi\left(-\frac{L}{2}\right), m\right) - \frac{\sqrt{\mu m}}{2} \sin\left(\pm_1 2\psi\left(-\frac{L}{2}\right)\right)}{E\left(\pm_1 \psi\left(\frac{L}{2}\right), m\right) - E\left(\pm_1 \psi\left(-\frac{L}{2}\right)\right)} \operatorname{dn}(\sqrt{a_2}(s - s_0), m) \\ &\quad + L \sqrt{\frac{\mu}{m}} \frac{1 - m}{E\left(\pm_1 \psi\left(\frac{L}{2}\right), m\right) - E\left(\pm_1 \psi\left(-\frac{L}{2}\right)\right)} \varphi(\sqrt{a_2}(s - s_0), m) - s, \end{aligned} \quad (2.94)$$

$$\tilde{\psi}_a^{(2)}(s) = \sqrt{\frac{\mu}{m}} \operatorname{dn}(\sqrt{a_2}(s - s_0), m) - 1. \quad (2.95)$$

Pour le cas (b)

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}_b^{(1)}(s) &= -L \sqrt{\frac{\mu}{m}} \frac{\left[ E\left(\pm_1 \psi\left(-\frac{L}{2}\right), m\right) - \frac{\sqrt{\mu m}}{2} \sin\left(\pm_1 2\psi\left(-\frac{L}{2}\right)\right) \right] \operatorname{dn}(\sqrt{a_2}(s - s_0), m)}{E\left(\pm_1 \psi\left(\frac{L}{2}\right), m\right) - E\left(\pm_1 \psi\left(-\frac{L}{2}\right)\right) + \sqrt{\mu m} \sin\left(\pm_1 2\psi\left(-\frac{L}{2}\right)\right)} \\ &\quad + L \sqrt{\frac{\mu}{m}} \frac{(1 - m) \varphi(\sqrt{a_2}(s - s_0), m)}{E\left(\pm_1 \psi\left(\frac{L}{2}\right), m\right) - E\left(\pm_1 \psi\left(-\frac{L}{2}\right)\right) + \sqrt{\mu m} \sin\left(\pm_1 2\psi\left(-\frac{L}{2}\right)\right)} \end{aligned} \quad (2.96)$$

$$\tilde{\psi}_b^{(2)}(s) = \sqrt{\frac{\mu}{m}} \operatorname{dn}(\sqrt{a_2}(s - s_0), m) - 1. \quad (2.97)$$

Dans le but d'avoir le signe de  $\delta^2 E(\bar{\psi})$  on utilise la décomposition (2.85) qui nous

permet d'écrire

$$\begin{aligned}
 & 2\lambda \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \left( sV(s) \tilde{\psi}(s) ds \right) + 2\rho \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} V(s) \tilde{\psi}(s) ds + \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \tilde{\psi}(s) \mathcal{L}\tilde{\psi}(s) ds \\
 = & \lambda^2 \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} sV(s) \tilde{\psi}^{(1)}(s) ds + \rho^2 \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} V(s) \tilde{\psi}^{(2)}(s) ds \\
 & + \lambda\rho \left[ \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} sV(s) \tilde{\psi}^{(2)}(s) ds + \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} V(s) \tilde{\psi}^{(1)}(s) ds \right]. \tag{2.98}
 \end{aligned}$$

En le remplaçant dans l'équation (2.80), on a

$$\delta^2 E(\bar{\psi}) = Bc \left\{ \lambda^2 \tilde{A}_1 + 2\lambda\rho \tilde{A}_2 + \rho^2 \tilde{A}_3 \right\}, \tag{2.99}$$

où on a défini

$$\tilde{A}_1 = A_1 + \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} sV(s) \tilde{\psi}^{(1)}(s) ds, \tag{2.100}$$

$$\tilde{A}_2 = A_2 + \frac{1}{2} \left[ \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} sV(s) \tilde{\psi}^{(2)}(s) ds + \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} V(s) \tilde{\psi}^{(1)}(s) ds \right] \text{ et } \tag{2.101}$$

$$\tilde{A}_3 = A_3 + \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} V(s) \tilde{\psi}^{(2)}(s) ds. \tag{2.102}$$

Les conditions de stabilité sont alors

$$\tilde{A}_1 > 0, \tag{2.103}$$

$$\tilde{A}_3 > 0, \tag{2.104}$$

$$\tilde{A}_1 \tilde{A}_3 - \tilde{A}_2^2 > 0. \tag{2.105}$$

En utilisant les équations (2.87-2.88) et les conditions aux bords on a

$$\tilde{A}_1 = A_1 + \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} sV(s) \tilde{\psi}^{(1)}(s) ds \quad (2.106)$$

$$= \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} s^2 V(s) ds + \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} s \left( \mathcal{L} + \frac{d^2}{ds^2} \right) \tilde{\psi}^{(1)}(s) ds + L \quad (2.107)$$

$$= \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} s \left( \frac{d^2}{ds^2} \tilde{\psi}^{(1)}(s) \right) ds + L \quad (2.108)$$

$$= \frac{L}{2} \left( \frac{d}{ds} \tilde{\psi}^{(1)} \left( -\frac{L}{2} \right) + \frac{d}{ds} \tilde{\psi}^{(1)} \left( \frac{L}{2} \right) \right) - \left[ \tilde{\psi}^{(1)}(s) \right]_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} + L \quad (2.109)$$

$$= \frac{L}{2} \left( \frac{d}{ds} \tilde{\psi}^{(1)} \left( -\frac{L}{2} \right) + \frac{d}{ds} \tilde{\psi}^{(1)} \left( \frac{L}{2} \right) \right) + L, \quad (2.110)$$

$$\tilde{A}_2 = A_2 + \frac{1}{2} \left[ \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} sV(s) \tilde{\psi}^{(2)}(s) ds + \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} V(s) \tilde{\psi}^{(1)}(s) ds \right] \quad (2.111)$$

$$= \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} ds \left[ V(s) s + \frac{1}{2} s \left( \mathcal{L} + \frac{d^2}{ds^2} \right) \tilde{\psi}^{(2)}(s) + \frac{1}{2} \left( \mathcal{L} + \frac{d^2}{ds^2} \right) \tilde{\psi}^{(1)}(s) \right] \quad (2.112)$$

$$= \frac{1}{2} \left[ \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} s \frac{d^2}{ds^2} \tilde{\psi}^{(2)}(s) ds + \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \frac{d^2}{ds^2} \tilde{\psi}^{(1)}(s) ds \right] \quad (2.113)$$

$$= \frac{1}{2} \left[ \frac{L}{2} \left( \frac{d}{ds} \tilde{\psi}^{(2)} \left( -\frac{L}{2} \right) + \frac{d}{ds} \tilde{\psi}^{(2)} \left( \frac{L}{2} \right) \right) + \left[ \frac{d}{ds} \tilde{\psi}^{(1)}(s) \right]_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \right], \quad (2.114)$$

$$\tilde{A}_3 = A_3 - \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} V(s) \tilde{\psi}^{(2)}(s) ds \quad (2.115)$$

$$= \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} V(s) ds + \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \left( \mathcal{L} + \frac{d^2}{ds^2} \right) \tilde{\psi}^{(2)}(s) ds \quad (2.116)$$

$$= \left[ \frac{d}{ds} \tilde{\psi}^{(2)}(s) \right]_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}}. \quad (2.117)$$

On doit maintenant distinguer entre les cas (a) et (b) pour vérifier si les conditions (2.103-2.105) sont satisfaites.

Après avoir calculé les différents termes de  $\tilde{A}_i$  en utilisant les expressions de  $\tilde{\psi}_{a,b}^{(i)}(s)$ , on a pour le cas (a)

$$\tilde{A}_{1a} = LC_{2a}\sqrt{a_2}\sqrt{\frac{\mu}{m}}, \quad (2.118)$$

$$\tilde{A}_{2a} = -\frac{L}{2}\sqrt{a_2}\sqrt{\frac{\mu}{m}}m \sin\left(\pm_1 2\psi\left(-\frac{L}{2}\right)\right), \quad (2.119)$$

$$\tilde{A}_{3a} = 0, \quad (2.120)$$

et pour le cas (b)

$$\tilde{A}_{1b} = \sqrt{a_2}\sqrt{\frac{\mu}{m}}\left(\frac{L^2}{4}\sqrt{\frac{\mu}{m}}m \sin\left(\pm_1 2\psi\left(-\frac{L}{2}\right)\right) + LC_{2b}\right), \quad (2.121)$$

$$\tilde{A}_{2b} = 0, \quad (2.122)$$

$$\tilde{A}_{3b} = \sqrt{a_2}\sqrt{\frac{\mu}{m}}m \sin\left(\pm_1 2\psi\left(-\frac{L}{2}\right)\right). \quad (2.123)$$

Cela veut dire que les conditions (2.103-2.105) ne sont jamais satisfaites pour le cas (a). Pour le montrer, il suffit de considérer l'équation 2.105 en posant  $\tilde{A}_{3a} = 0$ .

Pour que les conditions de stabilité du cas (b) soient satisfaites, il faut avoir  $\tilde{A}_{1b} > 0$  et  $\tilde{A}_{3b} > 0$ . Ceci est vrai uniquement si  $\pm_1\psi\left(-\frac{L}{2}\right) \in [0, \frac{\pi}{2}]$ , i. e. lorsque  $\pm_1 \times 2 = +$ , car le signe de  $\psi\left(-\frac{L}{2}\right)$  est le signe de  $\pm_2$ . Ceci est dû au fait que si  $\sin\left(\pm_1 2\psi\left(-\frac{L}{2}\right)\right) > 0$  alors  $\tilde{A}_{3b} > 0$ . Pour  $\tilde{A}_{1b}$ , on doit vérifier le signe de  $C_{2b}$  qui est le signe de la différence  $E\left(\pm_1\psi\left(\frac{L}{2}\right), m\right) - E\left(\pm_1\psi\left(-\frac{L}{2}\right)\right)$ . Celle-ci est toujours positive car  $E(x, m)$  est une fonction croissante monotone, si  $\pm_1 > 0$  i. e.  $\psi'(s) > 0$ , alors  $\pm_1\psi\left(\frac{L}{2}\right) > \pm_1\psi\left(-\frac{L}{2}\right)$ , si  $\pm_1 < 0$  i. e.  $\psi'(s) < 0$  alors  $\psi\left(\frac{L}{2}\right) < \psi\left(-\frac{L}{2}\right)$  et donc  $\pm_1\psi\left(\frac{L}{2}\right) > \pm_1\psi\left(-\frac{L}{2}\right)$ .

## 2.5.2 Cas où le paramètre $m$ est supérieur à 1

Lorsque  $m > 1$ , la fonction  $\psi(s)$  est périodique.

Considérons d'abord le cas  $\psi\left(\frac{L}{2}\right) = \psi\left(-\frac{L}{2}\right)$ . La forme du squeelix présente un certain nombre de zigzags. Dans ce qui suit on considère un zigzag de  $s = -\frac{L}{2}$  à  $s = -\frac{L}{2} +$

$L_{period} = \frac{L}{2}$  . On commence par une perturbation

$$\tilde{\psi} = \cos \psi(s). \quad (2.124)$$

La variation du deuxième ordre de l'énergie est (de l'équation (2.79))

$$\begin{aligned} \delta^2 E &= [-Bc\sqrt{a_2}\text{cn}(\sqrt{a_2}(s-s_0)|m)\text{sn}(\sqrt{a_2}(s-s_0)|m)\text{dn}(\sqrt{a_2}(s-s_0)|m)]_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \\ &\quad + Bc \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \tilde{\psi} \mathcal{L} \tilde{\psi} ds \end{aligned} \quad (2.125)$$

$$= Bc \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \text{cn}(\sqrt{a_2}(s-s_0)|m) \mathcal{L} \tilde{\psi} \text{cn}(\sqrt{a_2}(s-s_0)|m) ds \quad (2.126)$$

$$= Bc(1-m)\sqrt{a_2} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \text{cn}(\sqrt{a_2}(s-s_0)|m)^2 ds < 0. \quad (2.127)$$

La solution est donc instable.

Pour le cas où  $\psi\left(\frac{L}{2}\right) = -\psi\left(-\frac{L}{2}\right)$ . On considère un zigzag de  $s = -\frac{L}{2}$  à  $s = -\frac{L}{2} + L_{period} = s_1$  puis une portion de chaîne de  $s = s_1$  à  $s = \frac{L}{2}$ .

On choisit

$$\tilde{\psi} = \text{dn}(\sqrt{a_2}(s-s_0)|m), \quad (2.128)$$

qui est la fonction propre de  $\mathcal{L}$  , on a

$$\begin{aligned} \delta^2 E_{-\frac{L}{2} \rightarrow s_1} &= -Bcm\sqrt{a_2} [\text{cn}(\sqrt{a_2}(s-s_0)|m)\text{sn}(\sqrt{a_2}(s-s_0)|m)\text{dn}(\sqrt{a_2}(s-s_0)|m)]_{-\frac{L}{2}}^{s_1} \\ &\quad + Bc \int_{-\frac{L}{2}}^{s_1} \tilde{\psi} \mathcal{L} \tilde{\psi} ds = 0 \end{aligned} \quad (2.129)$$



Ce qui implique

$$\begin{aligned} \delta^2 E &= -Bcm\sqrt{a_2} [\text{cn}(\sqrt{a_2}(s-s_0)|m) \text{sn}(\sqrt{a_2}(s-s_0)|m) \text{dn}(\sqrt{a_2}(s-s_0)|m)]_{s_1}^{\frac{L}{2}} \\ &\quad + Bc \int_{s_1}^{\frac{L}{2}} \tilde{\psi} \mathcal{L} \tilde{\psi} ds \end{aligned} \quad (2.130)$$

$$\begin{aligned} &= 2Bcm\sqrt{a_2} \text{cn}\left(\sqrt{a_2}\left(-\frac{L}{2}-s_0\right)|m\right) \text{sn}\left(\sqrt{a_2}\left(-\frac{L}{2}-s_0\right)|m\right) \\ &\quad \text{dn}\left(\sqrt{a_2}\left(-\frac{L}{2}-s_0\right)|m\right) \end{aligned} \quad (2.131)$$

$$\begin{aligned} &= 2Bcm\sqrt{a_2} \cos\left(\pm_1\psi\left(-\frac{L}{2}\right)\right) \sin\left(\pm_1\psi\left(-\frac{L}{2}\right)\right) \\ &\quad \sqrt{1-m\sin^2\left(\pm_1\psi\left(-\frac{L}{2}\right)\right)}. \end{aligned} \quad (2.132)$$

Sachant que  $\psi\left(-\frac{L}{2}\right) = \pm_2 \arcsin\left(\sqrt{\frac{1}{m}-\frac{1}{\mu}}\right)$ , si  $\pm_1 \times \pm_2 = -$  la solution est instable, et si  $\pm_1 \times \pm_2 = +$  la solution est stable.

### 2.5.3 Cas où le paramètre $m$ est égal à 1

Lorsque  $m = 1$ , on a uniquement le cas où  $\pm_1\psi\left(-\frac{L}{2}\right) < 0$ . Afin d'étudier ce cas, on utilise comme pour  $m > 1$  une fluctuation de la forme  $\tilde{\psi} = \text{dn}\left(\sqrt{a_2}(s-s_0)|m\right)$ , ce qui nous donne

$$\begin{aligned} \delta^2 E &= 2Bcm\sqrt{a_2} \cos\left(\pm_1\psi\left(-\frac{L}{2}\right)\right) \sin\left(\pm_1\psi\left(-\frac{L}{2}\right)\right) \\ &\quad \sqrt{1-m\sin^2\left(\pm_1\psi\left(-\frac{L}{2}\right)\right)} < 0. \end{aligned} \quad (2.133)$$

La solution est donc toujours instable si  $m = 1$ .

## 2.6 Modèle des twist-kinks en interaction

L'équation de l'énergie (2.76) ne permettant pas d'avoir une image globale des différentes énergies mises en jeu, nous développons dans cette section une approche plus

simplifiée en faisant l'analogie avec le cas des chaîne semi-flexibles sous tension. Commençons par remplacer  $\phi' = \omega_1 \sin \psi$  dans l'expression générale de l'énergie (2.7), on obtient

$$E(\psi) = \frac{B}{2} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} (\omega_1^2 \cos^2 \psi + c\psi'^2) ds - Bc\omega_3 \left( \psi \left( \frac{L}{2} \right) - \psi \left( -\frac{L}{2} \right) \right) + \frac{Bc\omega_3^2}{2} L. \quad (2.134)$$

L'énergie peut encore être transformée via le changement de variable  $\psi = \frac{1}{2}(\Psi + \pi)$  en

$$E(\Psi) = E_{WLC}(\Psi) - \frac{M}{2} \left[ \Psi \left( \frac{L}{2} \right) - \Psi \left( -\frac{L}{2} \right) \right] + \frac{Bc\omega_3^2}{2} L, \quad (2.135)$$

où

$$E_{WLC}(\Psi) = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \left( \frac{1}{2} A \Psi'^2 + F(1 - \cos \Psi) \right) ds \quad (2.136)$$

est l'énergie de la chaîne semi-flexible (worm-like chain) de tangente  $\Psi$  soumise à la force externe  $F = \frac{1}{4}B\omega_1^2$  et de rigidité de courbure  $A = \frac{1}{4}C$ . On a en plus le terme  $\frac{M}{2} [\Psi(\frac{L}{2}) - \Psi(-\frac{L}{2})]$  qui agit comme un couple effectif sur les bords. Lorsque  $\Psi$ , la tangente de la chaîne semi-flexible, est augmentée de  $2\pi$ , une boucle apparaît. On a donc une analogie entre les boucles dans la chaîne semi-flexible sous tensions et les TK dans le squeelix, ce qui nous permet de reprendre une partie des résultats obtenus par Kulic et al. [81]. Considérons d'abord le cas sans TK.

### Solutions sans TK

Lorsqu'on n'a pas de TKs, les conditions aux bords  $\psi(\frac{L}{2}) - \psi(-\frac{L}{2}) = 0$  sont adéquates pour la chaîne semi-flexible sans boucles. L'état fondamental est une chaîne droite  $\Psi = 0$ , i. e. un squeelix d'angle de torsion fixe  $\psi = \frac{\pi}{2}$ . Dans ce régime sans TK la courbure est constante  $\kappa = \omega_1$  et le squeelix forme un arc circulaire. Ceci correspond à une configuration circulaire dans laquelle la torsion a été complètement expulsée. Cependant, comme on n'a pas de couple externe aux bords, on a la condition  $\psi'(-\frac{L}{2}) = \psi'(\frac{L}{2}) = \omega_3$  qui implique une déviation au niveau des bords de la torsion. Si on suppose que cette déviation est faible  $\psi - \pi/2 \ll 1$ , on peut prendre  $\cos \Psi = 1 - \frac{1}{2}\Psi^2$ . On peut alors obtenir cette déviation en résolvant l'équation d'Euler-Lagrange  $A\Psi'' - F\Psi = 0$ .

La solution qui vérifie les conditions aux limites, i. e.  $\psi'(-\frac{L}{2}) = \psi'(\frac{L}{2}) = \omega_3$  est alors

$$\psi(s) - \pi/2 = \frac{\lambda\omega_3}{\cosh(L/2\lambda)} \sinh(s/\lambda), \quad (2.137)$$

avec  $\lambda = \sqrt{A/F} = \sqrt{c\omega_1^{-1}}$  la largeur du bord.

L'énergie qui correspond au squeelix sans TK est calculée en intégrant l'équation (2.135) de  $-\frac{L}{2}$  à  $\frac{L}{2}$  avec  $\Psi = 2(\psi(s) - \frac{\pi}{2})$  donné par l'équation (2.137),

$$\tilde{E}_{0TK} = E_{WLC,0TK} = c^{\frac{3}{2}} B \frac{\omega_3^2}{\omega_1}. \quad (2.138)$$

Le travail du couple externe est  $-2c^{\frac{3}{2}} B \frac{\omega_3^2}{\omega_1}$ . On en déduit l'énergie totale du squeelix sans TK

$$E_{0TK} = -c^{\frac{3}{2}} B \frac{\omega_3^2}{\omega_1} + \frac{Bc\omega_3^2}{2} L. \quad (2.139)$$

La condition  $\psi - \pi/2 \ll 1$  implique  $\lambda\omega_3 = \sqrt{c\omega_3/\omega_1} \ll 1$ . Si on compare les valeurs des énergies ainsi obtenues avec les valeurs exactes on a le tableau suivant

$\omega_1 (L^{-1})$	$\omega_3 (L^{-1})$	$c$	$\lambda\omega_3$	$k$	$\gamma$	$\psi(-\frac{L}{2})$	$E_{0TK} (BL^{-1})$	Exact $E (BL^{-1})$
20	1	1	0.05	1	12.7	1.52	0.45	0.45
20	20	1	1	1	0.63	$10^{-4}$	177.	180.

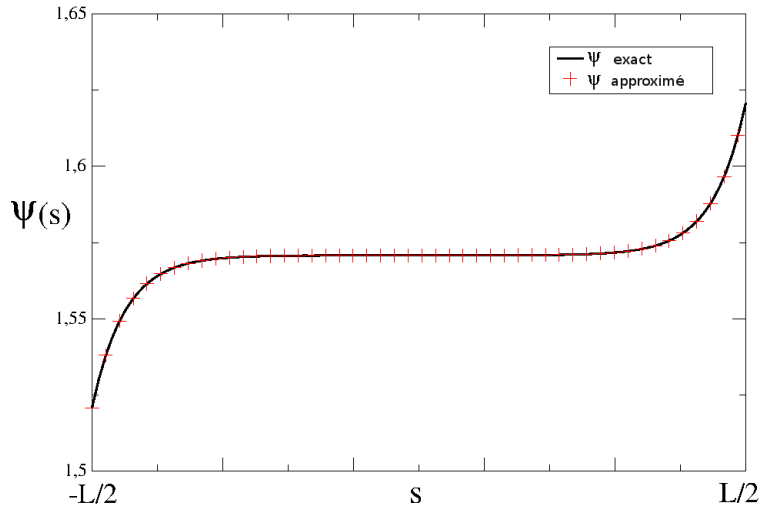
On voit qu'on a un accord exact dans le premier cas, lorsque  $\lambda\omega_3 \ll 1$  et  $\psi \approx \frac{\pi}{2}$ . Dans le second cas, on a une légère différence qui est due aux bords où on a  $\psi(-\frac{L}{2}) = 0$  et  $\psi(\frac{L}{2}) = \pi$ . Le même constat est fait en comparant les courbes de  $\psi(s)$  le long de la chaîne, figure 2.12.

### Solutions avec un seul TK

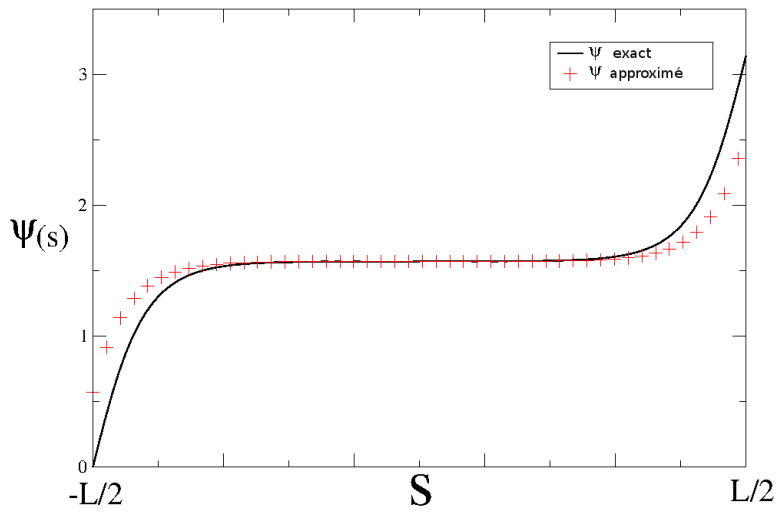
Si on a un seul TK, on peut supposer

$$\psi - \pi/2 = 2 \arctan(\exp(s/\lambda)). \quad (2.140)$$

Cette solution est exacte uniquement dans le cas de la chaîne de longueur infinie où  $\psi(-\infty) = \pi/2$  et  $\psi(\infty) = 3\pi/2$ . Pour une longueur finie mais assez grande, la correction est de l'ordre de  $e^{-L/\lambda}$ . L'énergie de courbure du TK est  $\tilde{E}_{1TK} = 2\sqrt{CB}\omega_1 + O(e^{-L/\lambda})$ .



(a)



(b)

FIGURE 2.12: Graphes de la torsion en fonction de la longueur d'arc  $\psi(s)$  pour le cas sans TK avec  $\lambda\omega_3 = 0.05$  (a) and  $\lambda\omega_3 = 1$  (b). Les valeurs exactes sont en lignes continues, et les valeurs approximées en plus rouges.

L'énergie totale est alors la somme de  $\tilde{E}_{1TK}$ , le travail du couple  $-\pi C\omega_3$  et la constante triviale  $\frac{Bc\omega_3^2}{2}L$  (à partir de l'équation (2.135)),

$$E_{1TK} = 2\sqrt{CB}\omega_1 - \pi C\omega_3 + \frac{Bc\omega_3^2}{2}L + O(e^{-L/\lambda}). \quad (2.141)$$

Si on compare les énergies du cas à 0 - TK et du cas à 1 - TK on a

$$E_{1TK} - E_{0TK} = \pi C\omega_3 \left( -1 + \gamma + \frac{2}{\pi^2} \frac{1}{\gamma} \right), \quad (2.142)$$

avec  $\gamma = \frac{2}{\pi} \sqrt{\frac{B}{C}} \frac{\omega_1}{\omega_3} = \frac{2}{\pi} \sqrt{B} \frac{1}{\lambda\omega_3}$ . Comme ces calculs ne sont valides que pour le cas  $\lambda\omega_3 \ll 1$ , on peut négliger le terme  $\frac{1}{\gamma}$  et ainsi avoir l'énergie d'un kink

$$E_{1-kink} = \pi C\omega_3 (\gamma - 1). \quad (2.143)$$

Cette équation permet d'avoir un critère quantitatif pour la détermination de l'état fondamental. En effet, pour  $\gamma > 1$  on voit déjà que le minimum d'énergie correspond au cas sans TK et que la forme est circulaire (excepté au niveau des extrémités). Alors que pour  $\gamma < 1$  le squeelix devient ondulé. En d'autres termes, le critère pour avoir des TK est  $\gamma < 1$ .

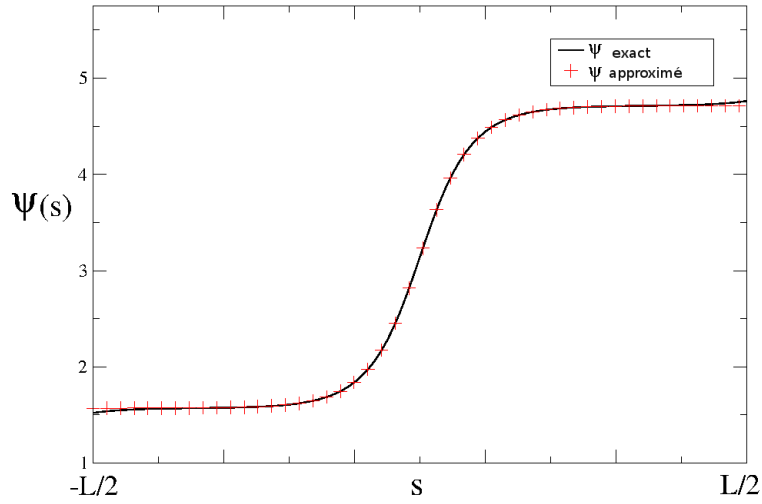
Si l'on compare ces résultats approximatifs avec les valeurs exactes on a la table suivante

$\omega_1 (L^{-1})$	$\omega_3 (L^{-1})$	$c$	$\lambda\omega_3$	$\gamma$	$k$	$\psi(-\frac{L}{2})$	$E_{1TK} (BL^{-1})$	Exact $E (BL^{-1})$
20	1	1	0.05	12.7	2	1.52	37.35	37.31
20	20	1	1	0.63	1	0.	177.17	177.17

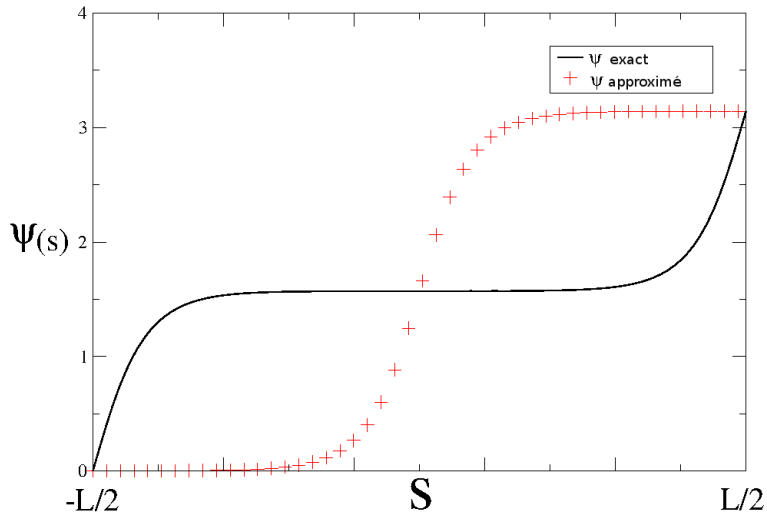
On conclut que l'équation (2.141) est valide pour  $\lambda\omega_3 \ll 1$ . Pour  $\lambda\omega_3 \geq 1$  les effets de bords pour le cas sans TK ont une énergie similaire au cas à un TK centré. La forme du squeelix est un arc de cercle avec à chaque bord un demi TK. Le même constat est fait en comparant les valeurs de la torsion  $\psi(s)$  le long de la chaîne, figure 2.13.

### Solutions avec deux TK

Pour  $\gamma \lesssim 1$ , l'état fondamental est supposé avoir peu de TK, alors que pour de plus faibles valeurs de  $\gamma$ , plus de TKs peuvent apparaître dans la chaîne. Le squeelix prend



(a)



(b)

FIGURE 2.13: Graphes de la torsion en fonction de la longueur d'arc  $\psi(s)$  pour le cas à 1 TK avec  $\lambda\omega_3 = 0.05$  (a) and  $\lambda\omega_3 = 0.05$  (b) . Les valeurs exactes sont en lignes continues, et les valeurs approximées en plus rouges.

une forme ondulée, la densité de kinks est limitée par leur répulsion mutuelle. Pour quantifier cette énergie répulsive, on considère le cas de deux TKs séparés d'une distance  $l$  telle que  $\lambda \ll l$ .

Posons l'ansatz suivant

$$\psi(s) = \frac{\pi}{2} + 2 \arctan(\exp((s + l/2)/\lambda)) + 2 \arctan(\exp((s - l/2)/\lambda)), \quad (2.144)$$

tel que  $\psi(-\infty) = \pi/2$  et  $\psi(\infty) = 5\pi/2$ .

En calculant l'énergie de cette configuration on obtient

$$\tilde{E}_{TK-TK} = 4\sqrt{CB}\omega_1(1 + \exp(-l/\lambda)) + O(e^{-L/\lambda}). \quad (2.145)$$

L'énergie de répulsion entre deux TKs est alors de l'ordre de  $\sim \exp(-l/\lambda)$ . Dans le régime où  $\lambda \ll l$ , on peut négliger ces interactions.

Les déformations aux bords étant des portions de TK (lorsque  $\gamma < 1$ ) les interactions entre les kinks des bords et les kinks du centre sont aussi de l'ordre de  $\sim \exp(-l/\lambda)$ .

### Régime à multiple twist-kinks

Considérons maintenant  $n$  TKs distribués le long de la chaîne. Pour chaque kink on a une énergie de courbure supplémentaire de  $2\sqrt{CB}\omega_1$  et une énergie répulsive de  $2\sqrt{CB}\omega_1 e^{-l/\lambda}$ . Ce terme est également valable pour les interactions entre les bords déformés et les plus proches TKs.

La distance entre les  $n$  kinks/bords est  $l = \frac{L}{n+1}$  de telle manière que l'énergie du système sans le travail du couple externe est

$$E_{nTK} - E_{0TK} = (\gamma(1 + (1 + \frac{1}{n})e^{-\frac{L}{(n+1)\lambda}}) - 1)\pi C\omega_3 n \quad (2.146)$$

où le terme  $\frac{1}{n} \exp(-L/((n+1)\lambda))$  compte pour l'énergie d'interaction entre un bord et les plus proches TKs. Cependant, cette contribution est négligeable pour de grandes valeurs de  $n$ . Alors, l'énergie du squeelux dans le régime à multiple TKs est donnée approximativement par

$$E_{nTK} - E_{0TK} \approx (\gamma(1 + e^{-\frac{L}{n\lambda}}) - 1)\pi C\omega_3 n. \quad (2.147)$$

En rajoutant les constantes triviales on a

$$E_{nTK_{diluted}} \approx (\gamma(1 + e^{-\frac{L}{n\lambda}}) - 1)\pi C\omega_3 n + C\omega_3^2 \frac{L}{2}. \quad (2.148)$$

La valeur optimale de  $n$  correspond au plus grand entier tel que  $E_{nTK} - E_{(n-1)TK} < 0$ , i. e. (pour un grand nombre  $n$ )

$$n < \frac{L/\lambda}{\log(\frac{\gamma}{1-\gamma})}. \quad (2.149)$$

Le membre de droite est divergent pour  $\gamma$  approchant  $1/2$ . Cette divergence n'est pas physique, elle est due au fait que l'interaction répulsive à longue portée  $e^{-l/\lambda}$  n'est pas assez grande pour stabiliser le squeelix. On doit alors regarder le régime opposé où on a une grande densité de TK et calculer l'énergie de répulsion à courte portée.

Lorsque les kinks sont confinés, leur densité est très grande, la distance inter-TK est  $d \ll \lambda$ . La chaîne a une forme très ondulée et  $\psi(s)$  est linéaire par rapport à  $s$ . Un bon ansatz pour ce régime est

$$\psi(s) = \frac{\pi}{d}s - \frac{\pi}{2} \quad \text{pour } 0 \ll s \ll L = nd \quad (2.150)$$

avec  $n \gg 1$  le nombre de TKs le long de la chaîne, i. e.  $\psi(L) - \psi(0) = \pi n$ . La courbure est dans ce cas  $\kappa(s) = \omega_1 \cos \frac{\pi}{d}s$ .

Notons que dans ce régime, les effets de la condition aux limites  $\psi'(0) = \psi'(L) = \omega_3$  sont négligeables. L'énergie totale des TKs est donnée par

$$\tilde{E}_{TK}(d) = \frac{1}{2}B \int_0^L \omega_1^2 \cos^2 \psi + c\psi'^2 ds = \frac{\omega_1^2 B}{4}L + \frac{\pi^2 CL}{2d^2} \quad (2.151)$$

$$= \frac{\omega_1^2 B}{4}L + \frac{\pi^2 Cn}{2d}. \quad (2.152)$$

En ajoutant les constantes triviales, on a

$$E_{nTK_{dense}} = \frac{\omega_1^2 B}{4}L + \frac{\pi^2 Cn}{2d} - \pi C\omega_3 n + C\omega_3^2 \frac{L}{2}. \quad (2.153)$$

On peut comparer les différentes approximations avec la valeur exacte de la solution en prenant un nombre de kink  $n$  très élevé et en faisant varier le paramètre  $\lambda$ . On a la table suivante qui résume tous les résultats obtenus avec  $\omega_1 = \omega_3 = 80L^{-1}$  et  $n \approx 25$ .



$\lambda/d$	$E_{dense} (BL^{-1})$	$E_{diluted} (BL^{-1})$	$E_{exact} (BL^{-1})$
$10^2$	1600.	$-3 \cdot 10^8$	1580.
10	1600.	$-2 \cdot 10^6$	1580.
1	1600.	$-1 \cdot 10^4$	1570.
$10^{-1}$	1600.	962.	954.
$3 \cdot 10^{-2}$	1600.	370.	369.

On voit que pour  $\frac{\lambda}{d} \geq 1$ , le régime dense approxime bien la solution exacte. Inversement, pour  $\frac{\lambda}{d} < 1$  c'est le régime dilué qui est une bonne approximation.

## 2.7 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié le comportement physique des polymères en hélice confinés, les squeelicks. En effectuant une première puis une seconde variation de l'énergie nous avons obtenu les différentes formes stables que peut prendre le squeelick. Ces formes dépendent des constantes du matériau que l'on peut donc les déduire à partir de l'observation de la chaîne confinée. Inversement, si on a besoin d'une forme particulière, un expérimentateur peut ajuster les paramètres de l'hélice en se basant sur nos résultats.

D'un point de vue purement énergétique, le comportement global du squeelick peut être modélisé en introduisant une quasi-particule : le twist-kink. En utilisant une description basée uniquement sur ces kinks, nous avons quantifié les différentes énergies mises en jeu, à savoir, les énergies de courbures d'un kink et les énergies de répulsion mutuelle. Nous avons distingué deux régimes opposés, le régime dense et le régime dilué.

Ce travail est un bon point de départ à une étude de l'effet de forces externes ou d'un confinement latéral, comme c'est le cas du travail développé dans le prochain chapitre.



# Chapitre 3

## Polymères en hélice confinés dans un canal

### 3.1 Introduction

Le concept de quasi-particules a beaucoup simplifié notre compréhension des phénomènes physiques surtout dans le domaine de la matière condensée. On a souvent recours à une description via des quasi-particules lorsqu'un système compliqué se comporte comme si il contenait différentes particules interagissant dans l'espace. On a par exemple les phonons qui représentent les excitations collectives, i. e., les modes de vibration des constituants du solide ou du liquide. Plus récemment, il a été démontré que la notion de quasi-particules est essentielle à la compréhension du comportement thermo-mécanique des structures filamenteuses, en particulier les biofilaments. Dans ce contexte, les quasi-particules ne sont pas les excitations collectives des atomes ou des molécules de la chaîne, ce sont des déformations localisées, qui gouvernent les comportements statiques et dynamiques de la chaîne via des interactions médiées par l'élasticité. Récemment, deux exemples du rôle des quasi-particules dans la physique des polymères ont été mis en évidence. Le premier concerne les filaments tubulaires avec une contrainte interne [86]. Dans le cas particulier des microtubules les contraintes internes sont le résultat de la

compétition entre la géométrie tubulaire du réseau et la bistabilité des conformations droites et courbées du dimère tubulaire. Pour ce type de structure, les quasi-particules conformationnelles localisées émergent naturellement. Lorsqu'on les couple avec des interactions coopératives, ces quasi-particules forment de larges structures en quasi-polymères. Ainsi, les notions de quasi-particules, quasi-polymères forment un langage plus naturel dans la description du système. Le deuxième exemple où la notion de quasi-particules a montré son efficacité est le comportement élastique des hélices confinées à deux dimensions, les squeelix. Le confinement d'une hélice produit un changement dramatique de sa forme, celle-ci peut devenir ondulatoire, en spirales ou en multi-cercles comme démontré dans le précédent chapitre. Il apparaît alors que la statistique de ces hélices peut être naturellement décrite en termes de quasi-particules appelées "twist-kinks". Celles-ci correspondent aux points de la chaîne où la courbure change de sens. Il est démontré aussi que le squeelix peut thermiquement changer d'état à nombre de TK fixes, ce qui induit une hyperflexibilité du filament et l'augmentation de la probabilité de circularisation [9].

Dans ce chapitre, on étend la précédente étude du polymère en hélice à 2D en ajoutant un confinement latéral. On commence d'abord par rappeler les principaux résultats de la littérature concernant le confinement des chaînes semi-flexibles dans des canaux. Ensuite, nous présentons les résultats d'observations expérimentales d'actines confinés dans un canal [8,87]. Ceux-ci sont souvent apparentés à des filaments semi-flexibles [88–94], cependant lorsque les actines sont confinés, leur fonctions de corrélations présentent des oscillations. On démontre, dans ce chapitre, que ces oscillations sont la signature d'une structure en hélice. Pour ce faire, on utilise d'abord des simulations Monte-Carlo de squeelix confinés latéralement. Ensuite, dans le but d'approfondir la compréhension théorique du phénomène, on effectue une analyse statistique des fluctuations du squeelix confiné en modélisant le canal par une force externe. Enfin, nous terminons le chapitre par une brève conclusion.

## 3.2 Filaments semi-flexibles confinées

### 3.2.1 Classification des polymères

Les filaments biologiques peuvent être classés en trois types. La chaîne peut être rigide, semi-flexible ou flexible, figure 3.1. Ces filaments sont soumis à la force élastique donnée par [95]

$$E = \frac{B}{2} \int_0^L \phi'^2 ds \quad (3.1)$$

avec  $\phi'$  la dérivée de la tangente à la chaîne, donc la courbure,  $ds$  représente la longueur d'arc,  $B$  représente la rigidité de courbure, il est relié à la longueur de persistance par

$$L_p = \frac{B}{k_B T} \quad (3.2)$$

avec  $k_B$  la constante de Boltzmann et  $T$  la température.

La classification précédente est basée sur le rapport entre  $L_p$  et la longueur totale de la chaîne  $L$ . Lorsque  $\frac{L_p}{L} \ll 1$ , la chaîne est flexible, c'est le cas par exemple des filaments intermédiaires. Lorsque  $\frac{L_p}{L} \approx 1$  la chaîne est semi-flexible, c'est le cas des filaments d'ADN ou d'actines. Si  $\frac{L_p}{L} \gg 1$ , la chaîne est rigide, c'est le cas des microtubules.

### 3.2.2 Fonction de corrélation

Dans les expériences de fluorescence, le principal output est souvent la fonction de corrélation notée ici  $Cor(s)$ . Elle est définie par la relation

$$Cor(s) = \frac{1}{L-s} \int_0^{L-s} \langle \cos(\phi(t) - \phi(t+s)) \rangle dt. \quad (3.3)$$

Les crochets désignent la moyenne statistique sur toutes les configurations possibles.

Pour une chaîne semi-flexible libre, celle-ci vaut [96–98]

$$Cor_{3D} = \exp\left(-\frac{s}{L_p}\right). \quad (3.4)$$

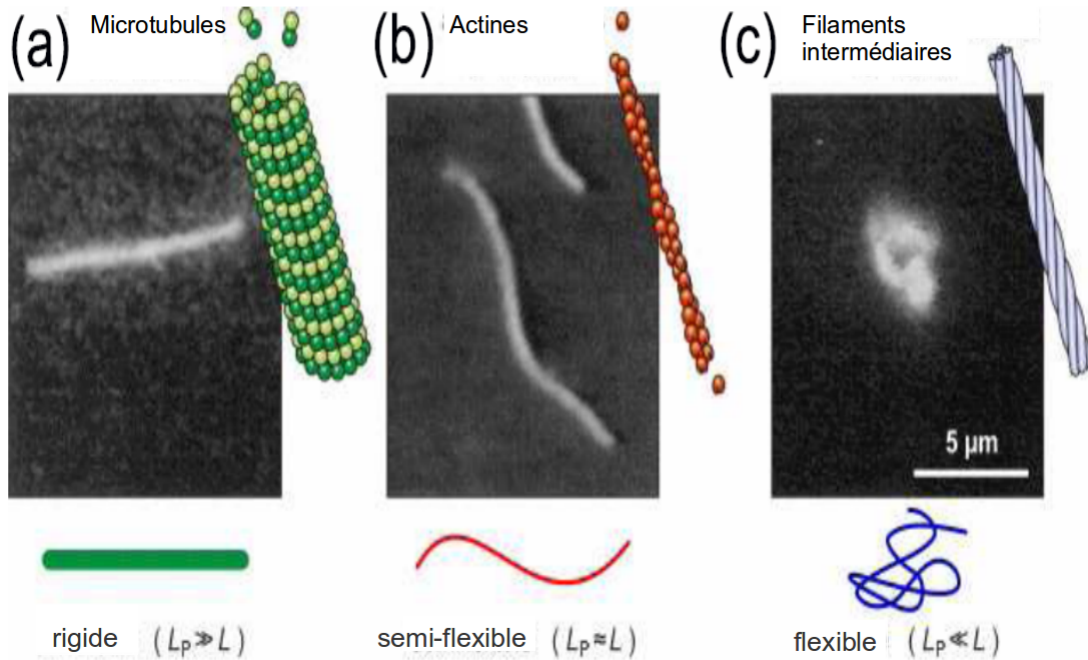


FIGURE 3.1: Représentation schématique de plusieurs filaments à longueurs de persistance  $L_p$  différentes. (a) représente une chaîne rigide, (b) une chaîne semi-flexible et (c) une chaîne flexible. Les captures expérimentales ont été réalisées dans la référence [92].

À deux dimensions, celle-ci devient

$$Cor_{2D} = \exp\left(-\frac{s}{2L_p}\right). \quad (3.5)$$

Si un confinement latéral est ajouté, la fonction de corrélation est d'abord décroissante puis atteint un minimum avant de croître et d'atteindre un plateau. C'est le régime de Odijk [99]. Plus le confinement latéral est restreint plus la valeur de la fonction au niveau du plateau est élevée. Le confinement influe aussi sur la position du minimum, celui-ci se situe à une longueur d'arc  $s$  petite lorsque la taille du canal est petite. Avec

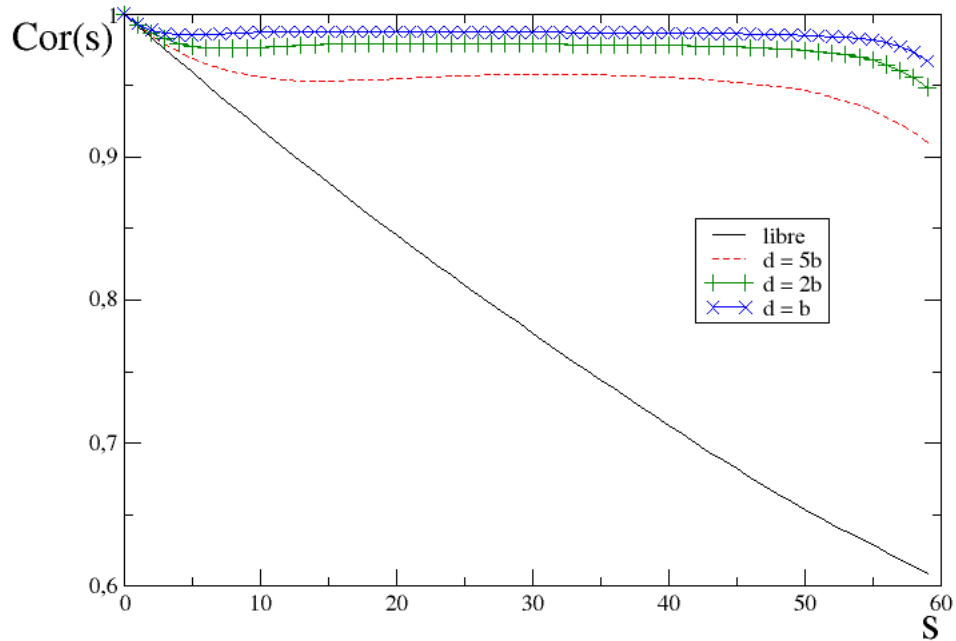


FIGURE 3.2: Fonctions de corrélation obtenues par simulation Monte-Carlo pour des chaînes semi-flexibles.  $b$  est la distance intermonomère. La longueur totale de la chaîne est  $L = 60b$ , la longueur de persistance  $L_p = L = 60b$ . La taille  $d$  du confinement varie et prend les valeurs  $d = \infty$ ,  $d = 5b$ ,  $d = 2b$  et  $d = b$ .

la simulation Monte-Carlo décrite plus bas, nous retrouvons aisément ce régime. Les résultats obtenus sont représentés dans les figures 3.2 et 3.3. On retrouve bien toutes les caractéristiques du régime de Odijk, hormis la partie décroissante à la fin de la chaîne qui est due aux effets de bord.

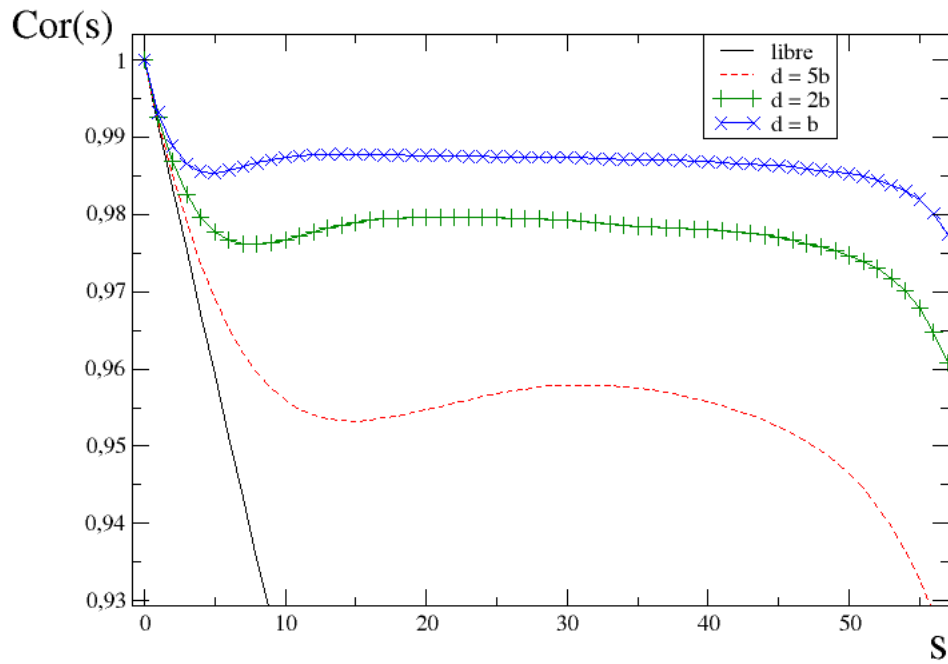


FIGURE 3.3: Zoom de la figure 3.2- Fonctions de corrélation obtenues par simulation Monte-Carlo pour des chaînes semi-flexibles.  $b$  est la distance intermonomères. La longueur totale de la chaîne est  $L = 60b$ , la longueur de persistance  $L_p = L = 60b$ . La taille  $d$  du confinement varie et prend les valeurs  $d = \infty$ ,  $d = 5b$ ,  $d = 2b$  et  $d = b$ .



## 3.3 Expériences de confinement des actines dans un canal

les propriétés mécaniques et dynamiques des actines représentent des problèmes importants en biologie cellulaire [100]. Dans la littérature ces filaments sont souvent considérés comme des chaînes semi-flexibles de longueur de persistance de 7 à  $22\mu m$ . Plusieurs expériences sur les actines libres ont déjà été effectuées [101, 102], cependant il est d'un intérêt crucial de les étudier dans des conditions qui ressemblent à leur environnement naturel très étroit, le dense réseau du cytosquelette [103, 104].

### 3.3.1 Procédure expérimentale

Afin de mimer l'environnement naturel des actines, Koster et al. [8] ont confiné ces filaments dans des canaux en utilisant des dispositifs microfluidiques en combinaison avec la microscopie en fluorescence. On trouve des explications détaillées de la procédure expérimentale dans les articles de Xia et al. [105] et de Delamarche et al. [106]. La statistique du polymère dépend beaucoup de son environnement tel que le degré de confinement. Le principal output de ces expériences est la fonction de corrélation qui dépend des paramètres internes du filament qui sont la longueur de persistance et la longueur totale.

### 3.3.2 Fonctions de corrélation expérimentales

La figure 3.4 représente une partie des résultats obtenus par Koster et al. [8]. Ce sont les fonctions de corrélation des actines de longueur variant entre  $18\mu m$  et  $50\mu m$  avec une longueur de persistance  $L_p = 19\mu m$ . Ceux-ci sont confinés dans un canal de largeur  $d = 2\mu m$  et de hauteur quasi-nulle [107]. Dans ces fonctions de corrélations, on observe clairement l'apparition d'oscillations périodiques. Ceci ne peut être expliqué par le modèle des chaînes semi-flexibles, car dans le régime de Odijk le plateau est bien constant comme dans la figure 3.2.

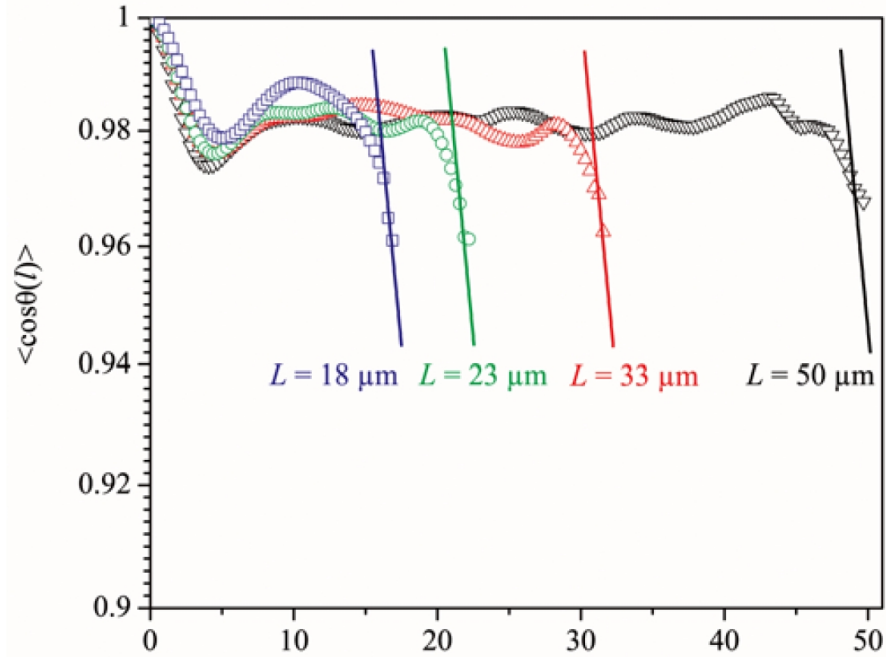


FIGURE 3.4: Fonctions de corrélation expérimentales pour des actines confinées dans un canal [8]. Les filaments sont de longueurs  $L$  différentes. La longueur de persistance  $L_p$  et la largeur  $d$  du canal sont les mêmes pour toutes les chaînes, leurs valeurs sont  $L_p = 19\mu\text{m}$  et  $d = 2\mu\text{m}$ .

Ces oscillations dans la fonction de corrélation peuvent être la signature d'une structure en hélice. Car si on a affaire à un polymère en hélice, des twist-kinks apparaissent dans la chaîne faisant inverser le signe de la courbure d'une manière cyclique. C'est pour cela que dans les prochaines sections nous étudions le confinement latéral des squeelicks.

## 3.4 Simulation Monte-Carlo de squeelix dans un canal

Plusieurs travaux de recherche en physique des polymères ont montré l'efficacité de la simulation Monte-Carlo pour étudier les longues chaînes de molécules [108–111]. C'est pour cela que pour l'étude des squeelix dans un canal, nous développons un programme de simulation Monte-Carlo, qui a d'abord été validé en reproduisant exactement les résultats connus des chaînes semi-flexibles.

### 3.4.1 Description du code

#### 3.4.1.1 Coordonnées de la chaîne

On considère une chaîne à un nombre  $N$  de monomères, l'unité de base de la simulation est la longueur inter-monomères notée  $b$ . Chaque couple de monomères successifs est lié par une tige rigide, la longueur totale de la chaîne est  $L = Nb$ .

Pour chaque monomère  $i$ , on définit quatre variables. Les positions  $x_i$  et  $y_i$  dans le plan, l'angle de la tangente à la chaîne  $\phi_i$  et l'angle de torsion  $\psi_i$ . L'angle  $\phi_i$  est pris comme l'angle que fait le lien rigide entre les deux monomères  $i$  et  $i + 1$ .

Les positions cartésiennes sont reliées à  $\phi$  par les relations théoriques

$$x(s) = x(0) + \int_0^s \cos(\phi(s')) ds' \quad (3.6)$$

$$y(s) = y(0) + \int_0^s \sin(\phi(s')) ds'. \quad (3.7)$$

Ce qui donne en version discrète

$$x_i = x_{i-1} + \cos \phi_{i-1} \quad (3.8)$$

$$y_i = y_{i-1} + \sin \phi_{i-1} \quad (3.9)$$

L'énergie totale du squeelix est calculée à partir de la formule continue

$$E = \frac{B}{2} \int (\phi'^2 - 2\omega_1 \phi' \sin \psi + \omega_1^2) + c(\psi' - \omega_3)^2 ds \quad (3.10)$$

qui est discrétisée par

$$E = \frac{B}{2} \sum_{i=1}^{N-1} ((\phi_{i+1} - \phi_i)^2 - 2\omega_1 (\phi_{i+1} - \phi_i) \sin \psi_i + c((\psi_{i+1} - \psi_i) - \omega_3)^2). \quad (3.11)$$

### 3.4.1.2 Mouvements aléatoires

Le programme commence à partir d'une chaîne initiale générée aléatoirement. Il effectue ensuite une série de mouvements aléatoires qui sont acceptés ou pas en utilisant l'algorithme de Métropolis. Les mouvements aléatoires sont les suivants.

**Translation globale** La chaîne est translatée entièrement dans l'espace  $(x, y)$ . Ceci n'a de sens uniquement lorsque l'on a un confinement. Un pas  $\Delta l_x$  est déterminé aléatoirement par  $\Delta l_x = r \times \Delta l_{max}$ . Avec  $\Delta l_{max}$  ajustable au cours de la simulation et  $r$  un nombre aléatoire de  $-1$  à  $1$ . La coordonnée  $x$  de chaque monomère de la chaîne est alors translatée de  $\Delta l_x$ . La même chose est effectuée pour la coordonnée  $y$ .

**Rotation locale d'un angle  $\phi$**  On parcourt la chaîne monomère après monomère. Pour chaque monomère  $i$  on choisit un pas  $\Delta\phi$  par la relation  $\Delta\phi = r \times \Delta\phi_{max}$  avec  $\Delta\phi_{max}$  ajustable au cours de la simulation pour avoir un taux d'acceptation de 50%. On ajoute  $\Delta\phi$  à l'angle  $\phi_i$  via

$$\phi_i \rightarrow \phi_i + r\Delta\phi_{max}. \quad (3.12)$$

À partir des deux équations (3.8-3.9), on a

$$\cos \phi_i = x_{i+1} - x_i, \quad (3.13)$$

$$\sin \phi_i = y_{i+1} - y_i \quad (3.14)$$

Le fait de changer localement l'angle  $\phi_i$  au point  $i$  nous donne donc le choix de modifier soit la position au point  $i$  soit la position au point  $i + 1$ . Si c'est le monomère  $i$  qui est

déplacé, tous les monomères  $j$  allant de 1 à  $i$  doivent être également déplacés via

$$x_j = x_{j+1} - \cos \phi_j, \quad (3.15)$$

$$y_j = y_{j+1} - \sin \phi_j. \quad (3.16)$$

Si c'est le monomère  $i + 1$  qui est déplacé, tous les monomères  $j$  de  $i + 1$  à  $N$  doivent être également déplacés via

$$x_{j+1} = x_j + \cos \phi_j, \quad (3.17)$$

$$y_{j+1} = y_j + \sin \phi_j. \quad (3.18)$$

**Rotation globale d'un angle  $\phi$**  On choisit un monomère aléatoirement dans la chaîne. On choisit un nombre  $\Delta\phi = r \times \frac{\pi}{2}$ . On choisit ensuite un coté de la chaîne aléatoirement. Soit tous les angles  $\phi_j$  avec  $j \in [i, N]$  sont augmentés de  $\Delta\phi$ , soit tous les angles  $\phi_j$  avec  $j \in [1, i]$  sont augmentés de  $\Delta\phi$ .

On retrouve ensuite les positions  $(x, y)$  en utilisant les procédures (3.17)-(3.18) ou (3.15)-(3.16).

**Rotation locale d'un angle  $\psi$**  On parcourt la chaîne monomère après monomère. Pour chaque monomère  $i$  on choisit un  $\Delta\psi$  à partir de la relation  $\Delta\psi = r \times \Delta\psi_{max}$  avec  $\Delta\psi_{max}$  ajustable au cours de la simulation. On ajoute alors  $\Delta\psi$  à l'angle  $\psi_i$  uniquement ( $\psi_i \rightarrow \psi_i + \Delta\psi$ ). Le changement de l'angle  $\psi$  ne change pas les positions dans l'espace  $(x, y)$ .

**Rotation globale d'un angle  $\psi$**  On choisit un monomère aléatoirement dans la chaîne. On choisit un nombre  $\Delta\psi = r \times \frac{\pi}{2}$ . On choisit ensuite un coté de la chaîne aléatoirement. Soit tous les angles  $\psi_j$  avec  $j \in [i, N]$  sont augmentés de  $\Delta\psi$ , soit tous les angles  $\psi_j$  avec  $j \in [1, i]$  sont augmentés de  $\Delta\psi$ .

### 3.4.1.3 Algorithme de Métropolis

A chaque mouvement aléatoire effectué, le programme calcule l'énergie totale de la chaîne avant et après le mouvement et vérifie si les nouvelles positions du polymère sortent du confinement. Si il y a sortie du canal, le mouvement est refusé. Si la chaîne est encore à l'intérieur du canal le mouvement est accepté avec une probabilité  $P = \exp\left(-\frac{\Delta E}{k_B T}\right)$ , avec  $\Delta E$  la différence d'énergie avant et après le mouvement,  $k_B$  la constante de Boltzmann et  $T$  la température.

A chaque mouvement, on compte le nombre d'essais accepté  $n_a$  et le nombre d'essais total effectué  $n_t$ . Le rapport entre ces deux quantités nous donne le taux d'acceptation  $n_r = \frac{n_a}{n_t}$ . On ajuste alors les amplitudes des sauts ( $\Delta l_{max}$ ,  $\Delta \phi_{max}$  et  $\Delta \psi_{max}$ ) de manière à avoir  $n_r = 50\%$  pour chaque type de mouvement, comme c'est souvent considéré dans les simulations Monte-Carlo [112].

### 3.4.2 Résultats obtenus

Avec la simulation décrite ci-dessus nous obtenons les fonctions de corrélation de la figure 3.5 pour le cas à petit nombre de TKs et la figure 3.6 pour un grand nombre de TKs.

Le cas à peu de kinks correspond qualitativement aux observations expérimentales des actines. En effet, de la figure 3.5, on voit que la fonction de corrélation présente, en plus de la forme des fonctions de corrélation des chaînes semi-flexibles, des oscillations plus ou moins marquées en fonction des paramètres physiques de la chaîne. Plus la largeur du canal est petite, plus on peut injecter un plus grand nombre de TKs. Le paramètre  $\gamma$  qui détermine l'énergie d'un TK augmente leur nombre lorsque celui-ci est proche de 1. Le paramètre  $\lambda$  qui représente la taille d'un kink fixe le nombre maximal de TKs qu'une chaîne peut porter en fonction de sa longueur. Lorsque celui-ci est à son maximum les TKs se figent formant ainsi une sorte de cristal très rigide. Quant au paramètre  $\omega_1$ , celui-ci est inversement proportionnel aux amplitudes des oscillations de la fonction de corrélation.

Lorsque le nombre de TKs est très grand, on observe une longue série d'oscillations qui présente les caractéristiques d'un filament semi-flexible à large échelle. En effet, on observe dans la figure 3.6 qu'en diminuant la largeur du canal, la fonction de corrélation à large échelle présente un minimum. Ceci s'explique par le fait qu'avec un très grand nombre de TK, on peut considérer comme unité de la chaîne un TK entier. Si leur nombre est fixé (ou varie très peu) on retrouve le comportement d'une chaîne semi-flexible sans torsion. On peut visualiser ce phénomène en observant les images du filaments au cours de la simulation représentées dans la figure 3.7.

## 3.5 Squeelix soumis à une force externe

Dans le but de quantifier toutes les observations qualitatives obtenues avec la simulation, nous effectuons le calcul analytique de la fonction de corrélation du squeelix soumis à une force externe. Le cas du confinement latéral et de la force d'étirement étant analogues d'un point de vue statistique. Nous commençons par considérer le cas sans température.

### 3.5.1 Température nulle

L'énergie du squeelix soumis à une force externe est donnée par

$$E = \frac{B}{2} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \left\{ (\phi'^2 - 2\omega_1 \phi' \sin \psi + \omega_1^2) + c(\psi' - \omega_3)^2 - F \cos(\phi) \right\} ds, \quad (3.19)$$

avec  $F$  la force d'étirement.

Dans le cas d'un régime où on a de faibles déviations de la tangente  $\phi - \langle \phi \rangle \ll 1$ , on peut développer le terme cosinus au deuxième ordre, ce qui nous donne

$$E = \frac{B}{2} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \left\{ (\phi'^2 - 2\omega_1 \phi' \sin \psi + \omega_1^2) + c(\psi' - \omega_3)^2 + f\phi^2 \right\} ds, \quad (3.20)$$

où nous avons négligé la constante  $-FL$ , et introduit la notation  $f = F/B$ .

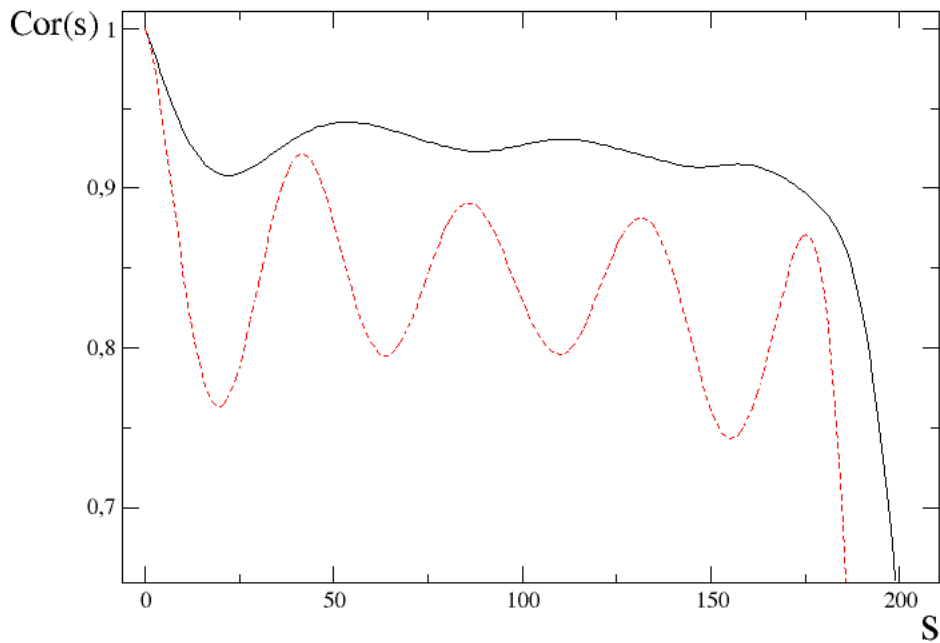


FIGURE 3.5: Fonctions de corrélation obtenues avec la simulation d'une chaîne ayant quelques TKs. La simulation est effectuée pour un polymère de longueur  $L = 200b$  et un confinement latéral  $d = 8b$ . Pour la courbe noire continue  $\omega_1 = 0.07b^{-1}$ ,  $\gamma = 1.6$ ,  $\lambda = 7$ , et pour la ligne rouge discontinue  $\omega_1 = 0.125b^{-1}$ ,  $\gamma = 5.2$ ,  $\lambda = 4$ . L'unité de la longueur d'arc  $s$  est  $b$ .



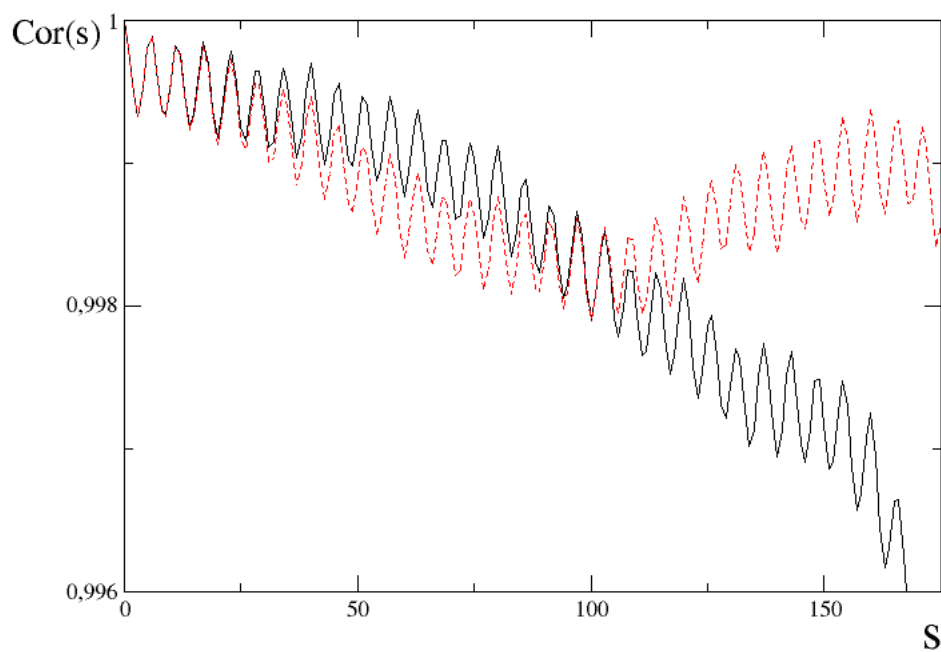


FIGURE 3.6: Fonctions de corrélation d'une chaîne ayant un grand nombre de TKs. La simulation est effectuée pour des squeelix de paramètres  $L = 200b$ ,  $\omega_1 = 0.02b^{-1}$ ,  $\gamma = 2 \cdot 10^{15}$ ,  $\lambda = 5 \cdot 10^{-6}$ . Le confinement latéral pour la courbe noire continue est  $d = 2.5b$ , et pour la courbe rouge discontinue  $d = 2b$ . L'unité de la longueur d'arc  $s$  est  $b$ .

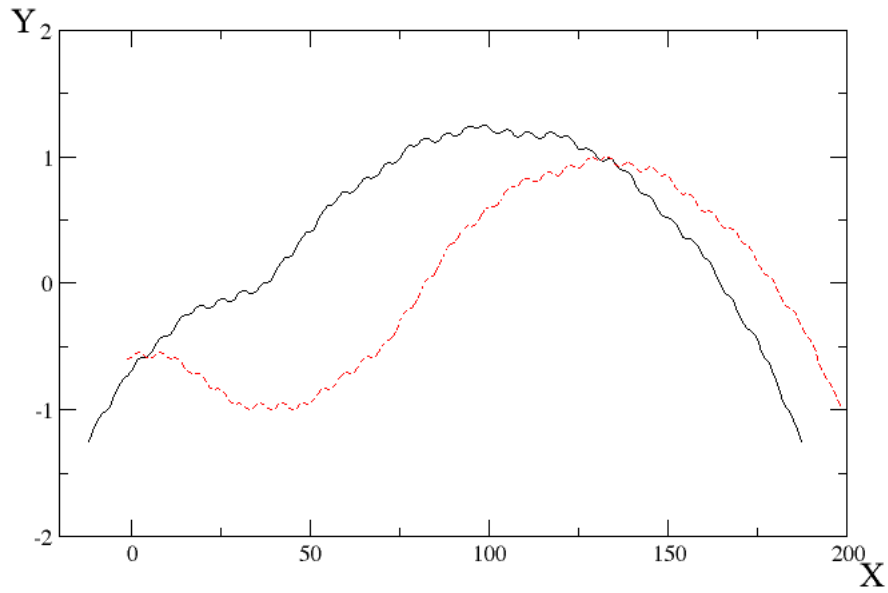


FIGURE 3.7: Images instantanées de simulation pour des squeelicks ayant un grand nombre de TKs. Les paramètres des chaînes sont  $L = 200b$ ,  $\omega_1 = 0.02b^{-1}$ ,  $\gamma = 2 \cdot 10^{15}$ ,  $\lambda = 5 \cdot 10^{-6}$ . Le confinement latéral pour la courbe noire continue est  $d = 2.5b$ , et pour la courbe rouge discontinue  $d = 2b$ . L'unité des coordonnées cartésiennes est  $b$ .

L'état fondamental satisfait aux équations d'Euler-Lagrange

$$\frac{d}{ds} (\phi' - \omega_1 \sin \psi) = f\phi(s), \quad (3.21)$$

$$\psi'' + \frac{2\omega_1}{2c} \phi' \cos \psi = 0. \quad (3.22)$$

Pour comprendre la physique du système, il est suffisant de considérer le régime de faibles forces effectives  $f = F/B \ll 1$ . Les équations (3.21) et (3.22) peuvent être résolues par la méthode des perturbations en développant les angles  $\phi = \phi_0 + f\phi_1 + O(f^2)$  et  $\psi = \psi_0 + f\psi_1 + O(f^2)$ . À l'ordre zéro de la perturbation on a le squeelix libre, étudié dans le chapitre précédent, qui obéit aux équations

$$\psi_0'' + \frac{\omega_1^2}{2c} \sin 2\psi_0 = 0 \quad (3.23)$$

$$\phi_0' = \omega_1 \sin \psi_0 \quad (3.24)$$

Nous voulons étudier le mécanisme d'injection de twist-kinks (TK) induit par la force d'étirement. Pour cela, nous considérons le régime  $\gamma > 1$ . La forme libre est dans ce cas un arc de cercle de longueur  $L$ .

Si on choisit  $\psi_0 = -\pi/2$  on a

$$\phi_0(s) = -\omega_1 s + \omega_1 L/2. \quad (3.25)$$

Le terme constant permet d'avoir  $\langle \phi_0 \rangle = 1/L \int_0^L \phi_0(s) ds = 0$ , ce qui correspond à une force d'étirement parallèle à l'axe  $x$ . L'énergie de cette configuration est  $E_{0-TK}^{f=0} = 0$ .

En présence de la force, l'arc de cercle est légèrement déformé. En résolvant l'équation (3.21) au premier ordre sur  $f$  on a

$$\phi(s) = \phi_0(s) + f\omega_1 (-4s^3 + 6Ls^2 - L^3) / 24. \quad (3.26)$$

On peut aisément voir que l'énergie au premier ordre sur  $f$  ne dépend que de  $\phi_0(s)$ , i. e.

$$E_{0-TK} \approx f \int_0^L \frac{B}{2} \phi_0^2 ds + O(f^2) \quad (3.27)$$

qui se simplifie en

$$E_{0-TK} \approx \frac{F\omega_1^2 L^3}{24} \quad (3.28)$$

On suppose maintenant qu'un TK est injecté dans la chaîne. A température nulle, comme nous allons le démontrer, la présence d'une force augmente la probabilité qu'un TK apparaisse.

À  $f = 0$ , la courbure s'écrit

$$\phi'_0 = \omega_1 \sin \psi_0 = \omega_1 \tanh((s - x)/\lambda_K), \quad (3.29)$$

où  $\lambda_K = \frac{1}{\omega_1} \sqrt{\frac{C}{B}}$  est la taille d'un TK et  $x$  la position du TK sur la chaîne. L'orientation angulaire de la ligne centrale est

$$\phi_0(s) = \omega_1 \lambda_K \ln(\cosh((s - x)/\lambda_K)), \quad (3.30)$$

à partir de laquelle on peut obtenir la forme 2D du squeelix. De larges  $B/C \gg 1$  impliquent  $\lambda_K \ll 1$ , ce qui donne une forme composée de deux arcs circulaires adjacents de courbures opposées  $\pm\omega_1$  qui se rejoignent en  $x$ . Les arcs circulaires étant légèrement déformés pour de larges  $B$ , on peut approximer au premier ordre sur  $f$  l'énergie d'un TK par

$$E_{1-TK} \approx E_{1-TK}^{f=0} + \frac{F}{2} \int_0^L (\phi_0(s) - \langle \phi \rangle)^2 ds, \quad (3.31)$$

avec  $E_{1-TK}^{f=0} = (\gamma - 1) \pi C \omega_3$  l'énergie d'un TK à force nulle.

Dans le régime circulaire que l'on considère  $\gamma \gg 1$ , on peut effectuer l'approximation  $E_{1-TK}^{f=0} \approx 2\omega_1 \sqrt{BC}$ .

Afin de calculer analytiquement  $E_{1-TK}$ , il est utile d'approximer  $\phi_0(s)$  par deux segments linéaires

$$\phi_0(s) = -\omega_1 s + \phi(0) \quad 0 < s < x \quad (3.32)$$

$$\phi_0(s) = \omega_1 s - 2\omega_1 x + \phi(0) \quad x < s < L. \quad (3.33)$$

La moyenne étant donnée par

$$\langle \phi \rangle = \phi(0) + \frac{\omega_1}{2} (L - 4x + \frac{2x^2}{L}), \quad (3.34)$$

la contribution de la force

$$V = \frac{F}{2} \int_0^L (\phi(s) - \langle \phi \rangle)^2 ds$$

à l'énergie totale est

$$V(x) = \frac{F\omega_1^2}{2} \left( \frac{L^3}{12} - Lx^2 + 2x^3 - \frac{x^4}{L} \right). \quad (3.35)$$

Le minimum de cette énergie est localisé à  $x_0 = L/2$  donnant

$$V(x_0) = \frac{F\omega_1^2 L^3}{96}. \quad (3.36)$$

La comparaison des deux énergies (3.28) et (3.31) permet d'obtenir la force critique nécessaire pour injecter un TK dans la chaîne, elle est donnée par

$$F_{critical} \approx 32 \frac{E_{1-TK}^{f=0}}{L^3 \omega_1^2} = 64 \frac{\sqrt{BC}}{L^3 \omega_1} \quad (3.37)$$

Notons que la température seule permet aussi d'injecter des TKs dans la chaîne. Cependant, lorsque la température est finie, le TK se déplace quasi librement, alors qu'une force externe permet d'injecter un TK mais le confine au milieu de la chaîne via un potentiel effectif obtenu en développant  $V(x)$  au second ordre autour de  $x_0$ ,

$$V \approx V(x_0) + \frac{F\omega_1^2 L}{4} (x - x_0)^2 + O((x - x_0)^4). \quad (3.38)$$

En commençant par un régime sans torsion,  $E_{0-TK}^{(0)} \approx 0$ , on obtient que l'effet d'une force externe est l'injection d'un TK au milieu de la chaîne. Pour une force plus élevée, on s'attend à ce que le squeelix forme un réseau de  $N$  TKs équidistants. Dans ce cas, la distance inter-TK est  $d_0 = L/(N+1)$  et la chaîne est une séquence périodique d'arcs circulaires de courbures opposées. L'énergie totale s'écrit

$$E_{N-TK} \approx N E_{1-TK} + \frac{F}{2} \int_0^L ds (\phi(s) - \langle \phi \rangle)^2 \quad (3.39)$$

Les  $N$  TK étant distribués uniformément sur les positions  $x_k = Lk/(2N)$ , l'énergie devient

$$E_{N-TK} = N E_{1-TK} + \frac{FL^3}{24} \omega_1^2 \frac{1}{(N+1)^2}. \quad (3.40)$$

La force critique nécessaire pour avoir  $N$  TKs est alors donnée par

$$F_{critical}(N) \approx 24 \frac{E_{1-TK}}{L^3 \omega_1^2} \frac{N^2 (N+1)^2}{2N+1} = \frac{48\sqrt{BC}}{L^3 \omega_1} \frac{N^2 (N+1)^2}{2N+1}. \quad (3.41)$$

Si la force est assez grande, le nombre de TKs optimal est

$$\frac{N^*}{L} = \frac{1}{d_0^*} \approx \left( \frac{\omega_1^2}{12E_{1-TK}} \right)^{1/3} F^{1/3} \approx \left( \frac{\omega_1}{24\sqrt{BC}} \right)^{1/3} F^{1/3} \quad (3.42)$$

L'énergie correspondante est

$$E^*/L = \frac{3}{2} 12^{-1/3} (\omega_1 E_{1-TK})^{2/3} F^{1/3}. \quad (3.43)$$

En développant l'énergie autour de cette valeur optimale, on obtient

$$E_{N-TK} = E^* + \frac{(12E_{1-TK})^{4/3}}{8L\omega_1^{2/3} F^{1/3}} (N - N^*)^2 = E^* + \frac{A}{L} (N - N^*)^2 \quad (3.44)$$

avec

$$A \approx 3.4 E_{1-TK}^{4/3} \omega_1^{-2/3} F^{-1/3}. \quad (3.45)$$

Cependant, à température nulle, le nombre de kinks est fixé à  $N^*$ , ce qui donne une corrélation entre tangentes  $\phi_0(s)$  donnée par

$$\langle (\phi_0(s) - \phi_0(s')^2) \rangle_N = \frac{d_0^2 \omega_1^2}{\pi^2} \left( \cos \left( \frac{\pi}{d_0} s \right) - \cos \left( \frac{\pi}{d_0} s' \right) \right)^2 \quad (3.46)$$

Sachant que pour de faibles déviations de  $\phi(s)$  on a

$$\overline{\langle \cos \phi(s) \rangle} \simeq 1 - \Sigma(s)/2 \quad (3.47)$$

avec

$$\Sigma(s) = \overline{\langle (\phi(x) - \phi(x+s))^2 \rangle}, \quad (3.48)$$

la fonction de corrélation à température nulle s'écrit

$$Cor_N^0(s) = 1 - \frac{1}{2} \overline{\langle (\phi_0(x) - \phi_0(x+s))^2 \rangle}_N \quad (3.49)$$

$$= 1 - \frac{d_0^2 \omega_1^2}{\pi^2} \sin^2 \left( \frac{\pi}{2d_0} s \right) \left( 1 + d_0 \frac{\sin \left( \frac{\pi}{d_0} s \right)}{\pi (L-s)} \right). \quad (3.50)$$

C'est une fonction périodique due à la nature périodique de l'état fondamental. En calculant la dérivée de  $Cor_N(s)$ , on a la position du premier minimum  $s_{\min} \simeq d_0$  et la valeur de la fonction est  $Cor_N(s_{\min}) = 1 - \frac{d_0^2 \omega_1^2}{\pi^2}$ . Ces valeurs correspondent parfaitement avec celles de la simulation des squeelix dans un canal.

### 3.5.2 Température finie

Les fluctuations thermiques permettent aux TKs de se déplacer autour de leur position d'équilibre  $x_k$  d'une distance  $\delta x_k$ .

Le coût énergétique d'un tel déplacement est

$$V = \frac{F}{2} \int_0^L ds (\phi(s) - \langle \phi \rangle_0)^2 \quad (3.51)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{FL}{2} \omega_1^2 \left( \frac{1}{12} d_0^2 + \sum_{k=1, N} \left( -\frac{d_0}{L} + 4 \frac{x_k}{L} \left( 1 - \frac{x_k}{L} \right) \right) \delta x_k^2 \right. \\ &\quad \left. - 8 \sum_{l>k} \left( \frac{x_k}{L} \left( 1 - \frac{x_l}{L} \right) \right) \delta x_k (-1)^l \delta x_l \right). \end{aligned} \quad (3.52)$$

Ce qui nous permet d'écrire

$$V = V_0 + \frac{FL}{2} \omega_1^2 \langle \delta x | V^{(2)} | \delta x \rangle \quad (3.53)$$

avec

$$V_0 = \frac{FL}{24} \omega_1^2 d_0^2 = \frac{L \omega_1^{2/3}}{24} F^{1/3} (12 E_{1-TK})^{2/3} \quad (3.54)$$

la valeur minimale du potentiel correspondant à un réseau parfait. Les valeurs propres et les fonctions propres de l'opérateur  $V^{(2)}$  sont

$$u_m(k) \sim \sin \left( \frac{\pi m k}{N+1} \right) \text{ avec } 1 < k < N \text{ et } 1 < m < N \quad (3.55)$$

$$\lambda_m = \frac{1}{N+1} \tan^2 \left( \frac{\pi m}{2(N+1)} \right). \quad (3.56)$$

On décompose le déplacement en termes de ces fonctions propres

$$\delta x_k = L \sum_{m=1}^N \sin \left( \frac{\pi m k}{N+1} \right) \varepsilon_m. \quad (3.57)$$

En posant la forme

$$\phi_0 = -\frac{d_0\omega_1}{\pi} \cos\left(\frac{\pi}{d_0}s\right), \quad (3.58)$$

on a une décomposition de  $\delta_\epsilon\phi$

$$\delta_\epsilon\phi = \frac{\omega_1 L}{2d_0} \sum_{m=1}^N \epsilon_m f_m(s) \quad (3.59)$$

avec

$$f_m(s) = \frac{2\pi}{L} \int_0^s \cos\left(\frac{\pi(N+1)}{L}s'\right) \sin\left(\frac{\pi m s'}{L}\right) ds'. \quad (3.60)$$

En utilisant la relation

$$\sum_{k=1}^N \sin\left(\frac{\pi n k}{N+1}\right) \sin\left(\frac{\pi m k}{N+1}\right) = \frac{N+1}{2} \delta_{n,m} \quad (3.61)$$

l'énergie devient

$$E \approx NE_{1-TK} + V_0 + \frac{FL}{2} \omega_1^2 \langle \delta x | V^{(2)} | \delta x \rangle = NE_{1-TK} + V_0 + \frac{1}{2} \sum_{m=1}^N K(m) \epsilon_m^2 \quad (3.62)$$

avec

$$K(m) = \frac{1}{2} FL^3 \omega_1^2 \tan^2\left(\frac{\pi m}{2(N+1)}\right). \quad (3.63)$$

L'énergie libre donnée par  $G_N = -k_B T \ln(Z_N)$  avec

$$Z_N = e^{-\beta(N E_{1-TK} + V_0 - FL)} \prod_{m=1}^N \int d\epsilon_m e^{-\frac{\beta}{2} K(m) \epsilon_m^2} \quad (3.64)$$

$$= e^{-\beta(N E_{1-TK} + V_0 - FL)} \prod_{m=1}^N \sqrt{\frac{2\pi k_B T}{K(m)}} \quad (3.65)$$

s'écrit

$$G_N = N \left( E_{1TK} - \frac{k_B T}{2} \ln(4\pi k_B T) \right) + V_0 - FL + \frac{k_B T}{2} \sum_{m=1}^N \left( FL^3 \omega_1^2 \tan^2\left(\frac{\pi m}{2(N+1)}\right) \right). \quad (3.66)$$



A partir de la relation  $\langle \Delta x \rangle = -\frac{\partial G}{\partial F}$ , on a

$$\frac{\langle \Delta x \rangle}{L} = 1 - \frac{\omega_1^2}{24} \frac{L^2}{(N+1)^2} - \frac{k_B T}{2} \frac{N}{LF} \quad (3.67)$$

Le deuxième terme est purement géométrique et est dû à la périodicité de l'état fondamental. Le troisième terme dépend de la température.

Pour une force donnée, il y a un nombre optimal de kinks donné par  $N/L \approx \left( \frac{\omega_1^2}{12E_{1-TK}} \right)^{1/3} F^{1/3}$ , pour un  $N \gg 1$ . Alors  $\langle \Delta x \rangle / L$  peut être réécrit sous la forme

$$\frac{\langle \Delta x \rangle}{L} = 1 - \left( 1 + \frac{k_B T}{E_{1-TK}} \right) \frac{(12E_{1-TK})^{2/3} \omega_1^{2/3}}{24F^{2/3}}. \quad (3.68)$$

On a

$$\langle \varepsilon_m^2 \rangle = \frac{k_B T}{K(m)} = \frac{2k_B T}{FL^3 \omega_1^2 \tan^2\left(\frac{\pi m}{2(N+1)}\right)} \approx \frac{8k_B T(N+1)^2}{FL\omega_1^2 \pi^2 m^2 L^2} \quad (3.69)$$

$$= \frac{8}{F^{1/3} (12E_{1-TK})^{2/3} L\omega_1^{2/3} \pi^2} \frac{k_B T}{m^2} = D \frac{k_B T}{m^2} \quad (3.70)$$

avec  $D = \frac{8}{F^{1/3} (12E_{1-TK})^{2/3} L\omega_1^{2/3} \pi^2}$ .

En conséquence

$$\langle (\delta x_k)^2 \rangle = L^2 \sum_{m=1}^N \sin^2\left(\frac{\pi mk}{N+1}\right) \langle \varepsilon_m^2 \rangle = L^2 D k_B T \sum_{m=1}^N \frac{\sin^2\left(\frac{\pi mk}{N+1}\right)}{m^2}. \quad (3.71)$$

$\langle (\delta x_k)^2 \rangle$  est maximal pour  $k = (N+1)/2$  et doit être inférieur à  $d_0^2$ , ce qui donne

$$\langle (\delta x)_{\max}^2 \rangle = L^2 D k_B T \sum_{m=1}^N \frac{\sin^2\left(\frac{\pi m}{2}\right)}{m^2} \ll \frac{L^2}{N^2} \quad (3.72)$$

où

$$\sum_{m=1}^N \frac{\sin^2\left(\frac{\pi m}{2}\right)}{m^2} = 1 + \frac{1}{3^2} + \frac{1}{5^2} + \dots = \sum_{m=1}^N \frac{1}{(2m-1)^2} \approx \frac{\pi^2}{8} = 1.234 \quad (3.73)$$

de telle sorte que pour un grand nombre  $N$ , si  $\frac{\pi^2}{8} L^2 D k_B T \ll \frac{L^2}{N^2}$  on a la condition supplémentaire

$$\frac{k_B T}{12E_{1-TK}} \ll \frac{(12E_{1-TK})^{1/3}}{LF^{1/3} \omega_1^{2/3}}. \quad (3.74)$$

A température finie, on doit aussi inclure les déformations élastiques du filament que l'on note  $\delta_{el}\phi(s)$ . On peut alors écrire

$$\phi(s) = \phi_0(s) + \delta_\varepsilon\phi(s) + \delta\phi(s) \quad (3.75)$$

pour de faibles déformations élastiques et déplacements de TKs autour de leurs positions d'équilibre. En écrivant  $\phi_0(s, \varepsilon) = \phi_0(s) + \delta_\varepsilon\phi(s)$  l'énergie devient

$$E(N, F) = NE_{1-TK} + \frac{F}{2} \int ds (\phi_0(s, \varepsilon) - \langle \phi_0 \rangle)^2 + \int ds \left( \frac{B}{2} \delta\phi'^2 + \frac{F}{2} \delta\phi^2 + F\phi_0(s, \varepsilon)\delta\phi \right) \quad (3.76)$$

En utilisant la décomposition en série de Fourier

$$\delta\phi(s) = \frac{\delta\phi_0}{\sqrt{L}} + \sqrt{\frac{2}{L}} \sum_{n=1}^{\infty} \cos\left(\frac{\pi n}{L}s\right) \delta\phi_n \quad (3.77)$$

l'énergie devient

$$E(N) \approx E_{N-TK} + \frac{1}{2} \sum_{m=1}^N K(m) \varepsilon_m^2 + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} G_n^{-1} \delta\phi_n^2 - \sum_{n=1}^{\infty} J_n \delta\phi_n \quad (3.78)$$

où

$$J_n = F \sqrt{\frac{2}{L}} \int_0^L \phi_0(s) \cos\left(\frac{\pi n}{L}s\right) ds \quad (3.79)$$

et

$$G_n^{-1} = B \left(\frac{\pi n}{L}\right)^2 + F. \quad (3.80)$$

On peut démontrer que le terme  $\sum_{n=1}^{\infty} J_n \delta\phi_n$  donne une contribution négligeable à la fonction de corrélation dans le cas étudié, i. e.  $\lambda_F \gg \lambda_{TK}$  avec  $\lambda_F = \sqrt{\frac{B}{F}}$  la longueur de Odijk.

L'énergie est alors

$$E(N, F) \approx E_{N-TK} + \frac{1}{2} \sum_{m=1}^N K(m) \varepsilon_m^2 + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} G_n^{-1} \delta\phi_n^2 \quad (3.81)$$

que l'on développe au deuxième ordre autour de  $N^*$

$$E(N, F) \approx E^* + \frac{A}{L} (N - N^*)^2 + \frac{1}{2} \sum_{m=1}^N K(m) \varepsilon_m^2 + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} G_n^{-1} \delta\phi_n^2. \quad (3.82)$$

La fonction de partition grand canonique est

$$Q = \mathcal{N} e^{-\beta E^*} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{n=1}^{\infty} d(\delta\phi_n) e^{-\beta \frac{1}{2} G_n^{-1} \delta\phi_n^2} \sum_{N=0}^{\infty} \left( e^{-\beta \frac{A}{L} (N-N^*)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{m=1}^{\infty} d\varepsilon_m e^{-\beta \frac{1}{2} K(m) \varepsilon_m^2} \right) \quad (3.83)$$

où le facteur de normalisation  $\mathcal{N}$  assure que pour  $F = 0$ , on retrouve la fonction de partition du squeelix libre.

On obtient  $\Sigma(s)$  par la relation

$$\Sigma(s) = \overline{\langle (\phi(x) - \phi(x+s))^2 \rangle} = \frac{1}{L-s} \int_0^{L-s} dx \langle (\phi(x) - \phi(x+s))^2 \rangle \quad (3.84)$$

sachant que

$$\langle (\phi(s) - \phi(s')^2) \rangle = \frac{1}{Q} \sum_{N=0}^{\infty} \langle (\phi(s) - \phi(s')^2) \rangle_N e^{-\beta \frac{A}{L} (N-N^*)^2} \quad (3.85)$$

où  $\langle (\phi(s) - \phi(s')^2) \rangle_N$  est calculé pour un nombre de TKs fixe.

On a ainsi obtenu tous les outils nécessaires pour entreprendre un calcul numérique de la fonction de corrélation à température finie.

## 3.6 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons étudié le comportement dynamique des polymères en hélice à 2D (squeelix) confinés dans un canal. Grâce à une combinaison entre simulation Monte-Carlo et une modélisation analytique du problème, nous avons pu prédire les fonctions de corrélation qu'un tel système pourrait avoir. Ces fonctions de corrélation présentent des oscillations caractéristiques que l'on ne peut obtenir avec un modèle de chaîne semi-flexible. Des expériences ont récemment montré que les actines confinées présentaient ce genre d'oscillations dans la fonction de corrélation. Ce qui nous permet de supposer que les actines, en plus d'avoir un arrangement hélicoïdal connu, ont une ligne centrale qui a, elle aussi, une structure en hélice.



# Conclusion

Tout au long de ce manuscrit, nous avons présenté nos efforts visant à comprendre le comportement de certains constituants biologiques dans leur environnement naturel où le confinement est omniprésent.

Nous avons commencé par l'étude de la membrane lipidique de topologie toroïdale confinée dans une sphère dure. Nous avons obtenu un diagramme des phases représentant toutes les formes stables que peut prendre la membrane, toutes symétriques par rapport au plan médian du tore. Quant à la symétrie axiale, celle-ci est vérifiée pour de faibles volumes uniquement. Au fur et à mesure que l'aire de la membrane est augmentée celle-ci traverse trois phases de confinement. Pour de faibles aires, il n'y a pas de contact avec la paroi. Pour des aires plus grandes, le confinement se fait en un seul cercle puis s'étale sur une surface de plus en plus large. Lorsque l'aire atteint une certaine limite, des zones de self-contact apparaissent. Si les parties de la membrane en contact fusionnent, un changement de topologie fait passer la membrane interne de la forme d'un tore à la forme de deux sphères incluses l'une à l'intérieur de l'autre.

Nous nous sommes ensuite intéressés à l'équilibre des forces de contact dues à la paroi rigide. Nous avons montré que, dans la phase axisymétrique, les forces se distribuent uniquement au niveau de la ligne où la membrane se détache de la paroi. Pour la phase non-axisymétrique, une force supplémentaire apparaît sur toute la surface de contact.

Enfin, nous avons étudié l'influence de l'adhésion entre la membrane interne et son confinement. On trouve que celle-ci fait apparaître de nouvelles zones dans le diagramme des phases où la membrane interne ne présente pas de symétrie par rapport au plan

médian.

Par cette première étude, nous espérons avoir contribué à la compréhension de la morphogenèse des mitochondries. En effet, le modèle utilisé représente une bonne approximation du système car celles-ci sont constituées d'une membrane lipidique confinée dans une membrane externe plus dure.

Dans la deuxième partie du travail nous nous sommes intéressés à une échelle plus petite. Nous avons étudié le confinement des polymères en hélice. On a d'abord considéré le confinement planaire. Celui-ci change complètement la forme originelle de l'hélice et fait apparaître des formes aussi variées que des spirales, des cercles et des ondulations, selon les paramètres physiques de l'hélice. Les formes obtenues dépendent fortement des paramètres de l'hélice, notre étude peut être utilisée comme un dictionnaire par des expérimentateurs pour pouvoir déduire les paramètres d'un polymère à partir des formes observées au microscope.

Nous avons également montré que le confinement à deux dimensions fait apparaître des régions où la courbure du filament change rapidement de signe. Ces régions se comportent comme des quasi-particules conformationnelles. En quantifiant les interactions entre ces quasi-particules, nous avons élaboré un modèle qui décrit entièrement la dynamique du polymère confiné .

À partir de ce modèle de quasi-particules en interaction, nous avons ajouté un confinement latéral dans le but de simuler un canal, en utilisant deux approches différentes. La première est effectuée par des simulations Monte-Carlo et la deuxième par un calcul analytique modélisant le confinement par une force externe. Le principal résultat obtenu est l'apparition d'oscillations dans la fonction de corrélation de la chaîne, similaires aux oscillations observées expérimentalement pour des actines confinés dans un canal. Notre modèle apporte donc une explication à ces observations et impliquerait que la structure des actines est en hélice.

Comme perspective à ce travail, nous envisageons :

- L'étude de polymères en hélices confinées à la surface d'une membrane lipidique.
- Le calcul numérique des fonctions de corrélations analytiques des squeelies confinés dans un canal.

- La prise en compte des self-contacts dans le modèle des membranes lipidiques confinées.





# Bibliographie

- [1] G B John, Y Shang, L Li, C Renken, C A Mannella, J ML Selker, L Rangell, M J Bennett, and J Zha. The mitochondrial inner membrane protein mitofilin controls cristae morphology. *Molecular biology of the cell*, 16(3) :1543–1554, 2005.
- [2] Z A Almsherqi, T Landh, S D Kohlwein, and Y Deng. Cubic membranes : the missing dimension of cell membrane organization. *International review of cell and molecular biology*, 274 :275–342, 2009.
- [3] O Kahraman, N Stoop, and M M Müller. Fluid membrane vesicles in confinement. *New Journal of Physics*, 14(9) :095021, 2012.
- [4] O Kahraman, N Stoop, and M M Müller. Morphogenesis of membrane invaginations in spherical confinement. *EPL (Europhysics Letters)*, 97(6) :68008, 2012.
- [5] W Helfrich. Elastic properties of lipid bilayers : theory and possible experiments. *Zeitschrift für Naturforschung C*, 28(11-12) :693–703, 1973.
- [6] J Fierling, M M Müller, H Mohrbach, A Johner, and I M Kulić. Crunching biofilament rings. *EPL (Europhysics Letters)*, 107(6) :68002, 2014.
- [7] T Sanchez, IM Kulic, and Z Dogic. Circularization, photomechanical switching, and a supercoiling transition of actin filaments. *Physical review letters*, 104(9) :098103, 2010.
- [8] S Köster, D Steinhauser, and T Pfohl. Brownian motion of actin filaments in confining microchannels. *Journal of Physics : Condensed Matter*, 17(49) :S4091, 2005.

- [9] G-M Nam, N-K Lee, H Mohrbach, A Johner, and I M Kulić. Helices at interfaces. *EPL (Europhysics Letters)*, 100(2) :28001, 2012.
- [10] H Noguchi. Shape transitions of high-genus fluid vesicles. *EPL (Europhysics Letters)*, 112(5) :58004, 2015.
- [11] A Sakashita, M Imai, and H Noguchi. Morphological variation of a lipid vesicle confined in a spherical vesicle. *Physical Review E*, 89(4) :040701, 2014.
- [12] R De Pascalis, G Napoli, and S S Turzi. Growth-induced blisters in a circular tube. *Physica D : Nonlinear Phenomena*, 283 :1–9, 2014.
- [13] J Guven, J A Santiago, and P Vázquez-Montejo. Confining spheres within hyperspheres. *Journal of Physics A : Mathematical and Theoretical*, 46(13) :135201, 2013.
- [14] J Eggers. Nonlinear dynamics and breakup of free-surface flows. *Reviews of modern physics*, 69(3) :865, 1997.
- [15] C Isenberg. *The science of soap films and soap bubbles*. Courier Corporation, 1978.
- [16] R E Goldstein, H K Moffatt, A I Pesci, and R L Ricca. Soap-film möbius strip changes topology with a twist singularity. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 107(51) :21979–21984, 2010.
- [17] J C Wang. Dna topoisomerases. *Annual review of biochemistry*, 54(1) :665–697, 1985.
- [18] C Clementi, H Nymeyer, and J N Onuchic. Topological and energetic factors : what determines the structural details of the transition state ensemble and the route to intermediates for protein folding ? an investigation for small globular proteins. *Journal of molecular biology*, 298(5) :937–953, 2000.
- [19] G K Voeltz, M M Rolls, and T A Rapoport. Structural organization of the endoplasmic reticulum. *EMBO reports*, 3(10) :944–950, 2002.

- 
- [20] C A Mannella. Structure and dynamics of the mitochondrial inner membrane cristae. *Biochimica et Biophysica Acta (BBA)-Molecular Cell Research*, 1763(5) :542–548, 2006.
- [21] M Terasaki, T Shemesh, N Kasthuri, R W Klemm, R Schalek, K J Hayworth, A R Hand, M Yankova, G Huber, J W Lichtman, et al. Stacked endoplasmic reticulum sheets are connected by helicoidal membrane motifs. *Cell*, 154(2) :285–296, 2013.
- [22] J Guven, G Huber, and D M Valencia. Terasaki spiral ramps in the rough endoplasmic reticulum. *Physical review letters*, 113(18) :188101, 2014.
- [23] R Jahn and R H Scheller. Snares—Engines for membrane fusion. *Nature reviews Molecular cell biology*, 7(9) :631–643, 2006.
- [24] 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(1) :61–81, 1970.
- [25] E A Evans. Bending resistance and chemically induced moments in membrane bilayers. *Biophysical journal*, 14(12) :923, 1974.
- [26] P B S Kumar, G Gompper, and R Lipowsky. Modulated phases in multicomponent fluid membranes. *Physical Review E*, 60(4) :4610, 1999.
- [27] E Kreyszig. Differential geometry. 1991.
- [28] W H Press, S A Teukolsky, W T Vetterling, and B P Flannery. *Numerical recipes in C*, volume 2. Citeseer, 1996.
- [29] M Deserno, M M Müller, and J Guven. Contact lines for fluid surface adhesion. *Physical Review E*, 76(1) :011605, 2007.
- [30] U Seifert. Vesicles of toroidal topology. *Physical review letters*, 66(18) :2404, 1991.
- [31] F C Marques and A Neves. Min-max theory and the willmore conjecture. *arXiv preprint arXiv :1202.6036*, 2012.
- [32] M Mutz and D Bensimon. Observation of toroidal vesicles. *Physical Review A*, 43(8) :4525, 1991.

- [33] B Fourcade, M Mutz, and D Bensimon. Experimental and theoretical study of toroidal vesicles. *Physical review letters*, 68(16) :2551, 1992.
- [34] U Seifert, K Berndl, and R Lipowsky. Shape transformations of vesicles : Phase diagram for spontaneous-curvature and bilayer-coupling models. *Physical Review A*, 44(2) :1182, 1991.
- [35] F Jülicher, U Seifert, and R Lipowsky. Phase diagrams and shape transformations of toroidal vesicles. *Journal de Physique II*, 3(11) :1681–1705, 1993.
- [36] B Fourcade. Theoretical results on toroidal vesicles. *Journal de Physique II*, 2(9) :1705–1724, 1992.
- [37] M Kléman. Energetics of the focal conics of smectic phases. *Journal de Physique*, 38(12) :1511–1518, 1977.
- [38] M Abramowitz and I A Stegun. Handbook of mathematical functions : with formulas, graphs, and mathematical tables. 55, 1964.
- [39] E Abbena, S Salamon, and A Gray. *Modern differential geometry of curves and surfaces with Mathematica*. CRC press, 2006.
- [40] J Guven. Laplace pressure as a surface stress in fluid vesicles. *Journal of Physics A : Mathematical and General*, 39(14) :3771, 2006.
- [41] P Castro-Villarreal and J Guven. Axially symmetric membranes with polar tethers. *Journal of Physics A : Mathematical and Theoretical*, 40(16) :4273, 2007.
- [42] P Castro-Villarreal and J Guven. Inverted catenoid as a fluid membrane with two points pulled together. *Physical Review E*, 76(1) :011922, 2007.
- [43] J Guven and P Vázquez-Montejo. Force dipoles and stable local defects on fluid vesicles. *Physical Review E*, 87(4) :042710, 2013.
- [44] L Bouzar, F Menas, and M M Müller. Toroidal membrane vesicles in spherical confinement. *Physical Review E*, 92(3) :032721, 2015.
- [45] F Feng and W S Klug. Finite element modeling of lipid bilayer membranes. *Journal of Computational Physics*, 220(1) :394–408, 2006.

- [46] L Ma and W S Klug. Viscous regularization and r-adaptive remeshing for finite element analysis of lipid membrane mechanics. *Journal of Computational Physics*, 227(11) :5816–5835, 2008.
- [47] F Cirak, M Ortiz, and P Schroder. Subdivision surfaces : a new paradigm for thin-shell finite-element analysis. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 47(12) :2039–2072, 2000.
- [48] P Volino and N Magnenat-Thalmann. *Resolving surface collisions through intersection contour minimization*, volume 25. ACM, 2006.
- [49] O C Zienkiewicz and R L Taylor. *The finite element method for solid and structural mechanics*. Butterworth-heinemann, 2005.
- [50] M Hu, J J Briguglio, and M Deserno. Determining the gaussian curvature modulus of lipid membranes in simulations. *Biophysical journal*, 102(6) :1403–1410, 2012.
- [51] L Golubović. Passages and droplets in lamellar fluid membrane phases. *Physical Review E*, 50(4) :R2419, 1994.
- [52] D C Morse. Topological instabilities and phase behavior of fluid membranes. *Physical Review E*, 50(4) :R2423, 1994.
- [53] G Gompper and DM Kroll. Statistical mechanics of membranes : freezing, undulations, and topology fluctuations. *Journal of Physics : Condensed Matter*, 12(8A) :A29, 2000.
- [54] W Helfrich. Steric interaction of fluid membranes in multilayer systems. *Zeitschrift für Naturforschung A*, 33(3) :305–315, 1978.
- [55] H-P Hsu and P Grassberger. Polymers confined between two parallel plane walls. *The Journal of chemical physics*, 120(4) :2034–2041, 2004.
- [56] J Najafi, N Stoop, F Wittel, and M Habibi. Ordered packing of elastic wires in a sphere. *Physical Review E*, 85(6) :061108, 2012.
- [57] A Volodin, M Ahlskog, Eric Seynaeve, Christian Van Haesendonck, A Fonseca, and JB Nagy. Imaging the elastic properties of coiled carbon nanotubes with atomic force microscopy. *Physical review letters*, 84(15) :3342, 2000.

- [58] R Martel, H R Shea, and P Avouris. Rings of single-walled carbon nanotubes. *Nature*, 398(6725) :299–299, 1999.
- [59] S M Douglas, J J Chou, and W M Shih. Dna-nanotube-induced alignment of membrane proteins for nmr structure determination. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 104(16) :6644–6648, 2007.
- [60] F A Aldaye, P K Lo, P Karam, C K McLaughlin, G Cosa, and H F Sleiman. Modular construction of dna nanotubes of tunable geometry and single-or double-stranded character. *Nature nanotechnology*, 4(6) :349–352, 2009.
- [61] E D Sone, E R Zubarev, and S I Stupp. Semiconductor nanohelices templated by supramolecular ribbons. *Angewandte Chemie International Edition*, 41(10) :1705–1709, 2002.
- [62] C W Wolgemuth, Y F Inclan, J Quan, S Mukherjee, G Oster, and M Koehl. How to make a spiral bacterium. *Physical biology*, 2(3) :189, 2005.
- [63] H Mohrbach, A Johner, and I M Kulić. Tubulin bistability and polymorphic dynamics of microtubules. *Physical review letters*, 105(26) :268102, 2010.
- [64] P Venier, A C Maggs, M-F Carrier, and D Pantaloni. Analysis of microtubule rigidity using hydrodynamic flow and thermal fluctuations. *Journal of biological chemistry*, 269(18) :13353–13360, 1994.
- [65] D Chrétien, F Metoz, F Verde, E Karsenti, and RH Wade. Lattice defects in microtubules : protofilament numbers vary within individual microtubules. *The Journal of cell biology*, 117(5) :1031–1040, 1992.
- [66] C Lu, M Reedy, and H P Erickson. Straight and curved conformations of ftsz are regulated by gtp hydrolysis. *Journal of bacteriology*, 182(1) :164–170, 2000.
- [67] F van den Ent, L A Amos, and J LoËwe. Prokaryotic origin of the actin cytoskeleton. *Nature*, 413(6851) :39–44, 2001.
- [68] R Kamiya and S Asakura. Helical transformations of salmonella flagella in vitro. *Journal of molecular biology*, 106(1) :167–186, 1976.

- 
- [69] E Hasegawa, R Kamiya, and S Asakura. Thermal transition in helical forms of salmonella flagella. *Journal of molecular biology*, 160(4) :609–621, 1982.
- [70] H C Berg and R A Anderson. Bacteria swim by rotating their flagellar filaments. 1973.
- [71] X E Li, K C Holmes, W Lehman, H Jung, and S Fischer. The shape and flexibility of tropomyosin coiled coils : implications for actin filament assembly and regulation. *Journal of molecular biology*, 395(2) :327–339, 2010.
- [72] H Herrmann and U Aebi. Intermediate filaments : molecular structure, assembly mechanism, and integration into functionally distinct intracellular scaffolds. *Annual review of biochemistry*, 73(1) :749–789, 2004.
- [73] EH Egelman, N Francis, and DJ DeRosier. F-actin is a helix with a random variable twist. *Nature*, 298(5870) :131–135, 1982.
- [74] N S Gov and A Gopinathan. Dynamics of membranes driven by actin polymerization. *Biophysical journal*, 90(2) :454–469, 2006.
- [75] J X Tang, J A KaÈs, J V Shah, and P A Janmey. Counterion-induced actin ring formation. *European Biophysics Journal*, 30(7) :477–484, 2001.
- [76] B Nöding and S Köster. Intermediate filaments in small configuration spaces. *Physical review letters*, 108(8) :088101, 2012.
- [77] J O Tegenfeldt, C Prinz, Han Cao, S Chou, W W Reisner, Riehn, et al. The dynamics of genomic-length dna molecules in 100-nm channels. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 101(30) :10979–10983, 2004.
- [78] J Clemmens, H Hess, J Howard, and V Vogel. Analysis of microtubule guidance in open microfabricated channels coated with the motor protein kinesin. *Langmuir*, 19(5) :1738–1744, 2003.
- [79] R Bunk, J Klinth, L Montelius, I A Nicholls, P Omling, S Tågerud, and A Månsson. Actomyosin motility on nanostructured surfaces. *Biochemical and biophysical research communications*, 301(3) :783–788, 2003.

- [80] S Kudo, Y Magariyama, and S-I Aizawa. Abrupt changes in flagellar rotation observed by laser dark-field microscopy. 1990.
- [81] I M Kulić, H Mohrbach, R Thaokar, and H Schiessel. Equation of state of looped dna. *Physical Review E*, 75(1) :011913, 2007.
- [82] I M Kulić, H Mohrbach, V Lobaskin, R Thaokar, and H Schiessel. Apparent persistence length renormalization of bent dna. *Physical Review E*, 72(4) :041905, 2005.
- [83] JF Currie, JA Krumhansl, AR Bishop, and SE Trullinger. Statistical mechanics of one-dimensional solitary-wave-bearing scalar fields : Exact results and ideal-gas phenomenology. *Physical Review B*, 22(2) :477, 1980.
- [84] T Charitat and B Fourcade. Metastability of a circular o-ring due to intrinsic curvature. *The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems*, 1(3) :333–336, 1998.
- [85] S K Ghosh, K Singh, and A Sain. Effect of intrinsic curvature on semiflexible polymers. *Physical Review E*, 80(5) :051904, 2009.
- [86] O Kahraman, H Mohrbach, M M Müller, and I M Kulić. Confotronic dynamics of tubular filaments. *Soft matter*, 10(16) :2836–2847, 2014.
- [87] S Köster, H Stark, T Pfohl, and J Kierfeld. Fluctuations of single confined actin filaments. *Biophysical Reviews and Letters*, 2(02) :155–166, 2007.
- [88] L Le Goff, O Hallatschek, E Frey, and journal=Physical review letters volume=89 number=25 pages=258101 year=2002 publisher=APS Amblard, F. Tracer studies on f-actin fluctuations.
- [89] A Ott, M Magnasco, A Simon, and A Libchaber. Measurement of the persistence length of polymerized actin using fluorescence microscopy. *Physical Review E*, 48(3) :R1642, 1993.
- [90] F Gittes, B Mickey, J Nettleton, and J Howard. Flexural rigidity of microtubules and actin filaments measured from thermal fluctuations in shape. *The Journal of cell biology*, 120(4) :923–934, 1993.



- 
- [91] H Isambert, A C Venier, Pand Maggs, A Fattoum, R Kassab, D Pantaloni, and M Carlier. Flexibility of actin filaments derived from thermal fluctuations. effect of bound nucleotide, phalloidin, and muscle regulatory proteins. *Journal of Biological Chemistry*, 270(19) :11437–11444, 1995.
- [92] J Käs, H Strey, JX Tang, D Finger, R Ezzell, E Sackmann, and PA Janmey. F-actin, a model polymer for semiflexible chains in dilute, semidilute, and liquid crystalline solutions. *Biophysical journal*, 70(2) :609, 1996.
- [93] T Yanagida, M Nakase, K Nishiyama, and F Oosawa. Direct observation of motion of single f-actin filaments in the presence of myosin. 1984.
- [94] D Rivelino, C H Wiggins, RE Goldstein, and A Ott. Elastohydrodynamic study of actin filaments using fluorescence microscopy. *Physical Review E*, 56(2) :R1330, 1997.
- [95] O Kratky and G Porod. Recl trav chim 1949, 68, 1106.
- [96] Lev D Landau and EM Lifshitz. Statistical physics, part i, 1980.
- [97] N Saitô, K Takahashi, and Y Yunoki. The statistical mechanical theory of stiff chains. *Journal of the Physical Society of Japan*, 22(1) :219–226, 1967.
- [98] P Cifra. Differences and limits in estimates of persistence length for semi-flexible macromolecules. *Polymer*, 45(17) :5995–6002, 2004.
- [99] T Odijk. The statistics and dynamics of confined or entangled stiff polymers. *Macromolecules*, 16(8) :1340–1344, 1983.
- [100] B Alberts, D Bray, J Lewis, M Raff, K Roberts, J D Watson, and AV Grimstone. Molecular biology of the cell (3rd edn). *Trends in Biochemical Sciences*, 20(5) :210–210, 1995.
- [101] J Käs, H Strey, M Bärmann, and E Sackmann. Direct measurement of the wave-vector-dependent bending stiffness of freely flickering actin filaments. *EPL (Europhysics Letters)*, 21(8) :865, 1993.

- [102] AR Bausch and K Kroy. A bottom-up approach to cell mechanics. *Nature physics*, 2(4) :231–238, 2006.
- [103] T Pfohl, F Mugele, R Seemann, and S Herminghaus. Cover picture : Trends in microfluidics with complex fluids (chemphyschem 12/2003). *ChemPhysChem*, 4(12) :1273–1273, 2003.
- [104] IY Wong, ML Gardel, DR Reichman, Eric R Weeks, MT Valentine, AR Bausch, and DA Weitz. Anomalous diffusion probes microstructure dynamics of entangled f-actin networks. *Physical review letters*, 92(17) :178101, 2004.
- [105] Y Xia and G M Whitesides. Softlithographie. *Angewandte Chemie*, 110(5) :568–594, 1998.
- [106] E Delamarche, A Bernard, H Schmid, B Michel, and H Biebuyck. Patterned delivery of immunoglobulins to surfaces using microfluidic networks. *Science*, 276(5313) :779–781, 1997.
- [107] J Hendricks, T Kawakatsu, K Kawasaki, and W Zimmermann. Confined semi-flexible polymer chains. *Physical Review E*, 51(3) :2658, 1995.
- [108] K Binder and W Paul. Monte carlo simulations of polymer dynamics : Recent advances. *Journal of Polymer Science Part B : Polymer Physics*, 35(1) :1–31, 1997.
- [109] H-P Hsu and K Binder. Semi-flexible polymer chains in quasi-one-dimensional confinement : a monte carlo study on the square lattice. *Soft Matter*, 9(44) :10512–10521, 2013.
- [110] VA Ivanov, MR Stukan, M Müller, W Paul, and K Binder. Phase diagram of solutions of stiff-chain macromolecules : A monte carlo simulation. *The Journal of chemical physics*, 118(22) :10333–10342, 2003.
- [111] DT Seaton, SJ Mitchell, and DP Landau. Monte carlo simulations of a semi-flexible polymer chain : a first glance. *Brazilian journal of physics*, 36(3A) :623–626, 2006.

- [112] B Jayaram. On the acceptance ratio in monte carlo computer simulations. *Journal of Mathematical Chemistry*, 20(2) :395–397, 1996.

# Table des figures

1.1	Transition d'une membrane de topologie sphérique à la topologie toroïdale.	11
1.2	Illustration d'une courbure spontanée $C_0$ non nulle. . . . .	14
1.3	Paramétrisation en longueur d'arc des tores axisymétriques en coordonnées cylindriques $(\rho z)$ . . . . .	15
1.4	Coupes azimutales des tores libres axisymétriques. . . . .	23
1.5	Diagramme des phases du volume réduit $v_r$ en fonction de l'aire $a$ pour les solutions sans contact avec le confinement. . . . .	24
1.6	Observations in-vitro de membranes toroïdales pour différents volumes réduits [32]. . . . .	26
1.7	Diagramme des phases du volume réduit en fonction de l'aire des solutions confinées axisymétriques. . . . .	28
1.8	Énergies de courbure $e_b$ en fonction du volume réduit $v_r$ des branches limitant les différentes phases de la figure 1.7. . . . .	29
1.9	Diagramme des phases du volume réduit en fonction de l'aire des solutions confinées axisymétriques et non-axisymétriques. . . . .	46
1.10	Énergies de courbure $e_b$ en fonction du volume réduit $v_r$ des branches limitant les différentes phases de la figure 1.9. . . . .	47
1.11	Évolution d'une solution à volume réduit fixe $v_r = 0.7$ lorsque l'on augmente son aire $a$ . . . . .	48
1.12	Évolution d'une solution à volume réduit fixe $v_r = 0.6$ lorsque l'on augmente son aire $a$ . . . . .	50
1.13	Équilibre des forces de contact avec la simulation. . . . .	54

1.14	Variations de la densité de la force de contact $f_0$ et de l'énergie de courbure $e_b$ en fonction de l'aire $a$ pour un volume réduit $v_r = 0.7$ . . . . .	56
1.15	Illustration de l'influence de l'adhésion sur le diagramme des phases. . . . .	59
1.16	Évolution d'une solution à volume réduit $v_r = 0.6$ pour différentes valeurs de l'aire $a$ avec un coefficient d'adhésion $\omega = 1$ . . . . .	60
2.1	Angles d'Euler du squeelix. . . . .	67
2.2	L'amplitude de Jacobi $\text{am}(x m)$ en fonction de $x$ pour différentes valeurs de $m$ . . . . .	71
2.3	Squeelix de longueur infinie pour $m < 1$ avec (a) $L_{loop} \gg L_{cycle}$ , (b) $L_{loop} \approx L_{cycle}$ et (c) $L_{loop} \ll L_{cycle}$ . . . . .	73
2.4	Squeelix de longueur infinie avec $m = 1$ . . . . .	73
2.5	Squeelix de longueur infinie pour $m > 1$ avec (a) $m \gtrsim 1$ et (b) $m \gg 1$ . . . . .	74
2.6	Évolution de la forme d'un squeelix en ajoutant progressivement des twist-kinks pour $\gamma > 1$ . . . . .	81
2.7	Évolution de la forme d'un squeelix en ajoutant progressivement des twist-kinks pour $\gamma \lesssim 1$ . . . . .	82
2.8	Minimum global de l'énergie pour $\gamma < 1$ . . . . .	83
2.9	Formes du squeelix de longueur finie pour $m > 1$ . . . . .	86
2.10	Diagramme de l'énergie pour un squeelix de longueur $l$ avec $\omega_1 = \frac{20}{l}$ , $\omega_3 = \frac{20}{l}$ et $c = 1$ . . . . .	87
2.11	Zoom du diagramme 2.10 autour du minimum d'énergie global . . . . .	88
2.12	Graphes de l'angle de torsion en fonction de la longueur d'arc $\psi(s)$ pour le cas sans TK . . . . .	98
2.13	Graphes de l'angle de torsion en fonction de la longueur d'arc $\psi(s)$ pour le cas à 1 TK . . . . .	100
3.1	Représentation schématique de plusieurs filaments à longueurs de persistance $L_p$ différentes. . . . .	108
3.2	Fonctions de corrélation obtenues par simulation Monte-Carlo pour des chaînes semi-flexibles. . . . .	109

3.3	Zoom de la figure 3.2 . . . . .	110
3.4	Fonctions de corrélation expérimentales pour des actines confinées dans un canal [8] . . . . .	112
3.5	Fonctions de corrélation d'un squeelix ayant quelques TKs. . . . .	118
3.6	Fonctions de corrélation d'un squeelix ayant un grand nombre de TKs. . .	119
3.7	Images instantanées de simulation pour des squeelix ayant un grand nombre de TKs. . . . .	120