

Abstract progetto di ricerca
dottorato di ricerca in Fisica, XXXII ciclo

Pasquale DiGregorio

13 dicembre 2016

Il termine *materia attiva* viene utilizzato per individuare una vasta classe di sistemi in cui i componenti hanno la capacità di estrarre energia dall’ambiente o da un serbatoio interno e di dissiparla per muoversi. Questa caratteristica permette ai *sistemi attivi* di assumere comportamenti molto peculiari, che sono strettamente connessi con la motilità dei loro costituenti, e che quindi sono del tutto assenti nei sistemi passivi [1].

Lo studio dei sistemi attivi costituisce da qualche decennio un’attività di grande interesse. Da una parte è interessante analizzare la fenomenologia dei comportamenti collettivi “innescati” dall’attività, inoltre la sfida dal punto di vista teorico di trovare una descrizione esaustiva per i sistemi di materia attiva è ancora oggetto di intenso dibattito. Nell’ambito della meccanica statistica, l’obiettivo della modellizzazione dei sistemi attivi trova interesse nel fatto che essi siano sistemi *intrinsecamente* fuori dall’equilibrio termodinamico. Esistono numerosi modelli per la descrizione della materia attiva che, sebbene a livello fenomenologico, forniscono gli strumenti adeguati alla comprensione delle caratteristiche peculiari di questi sistemi. Questi modelli si possono distinguere in tre categorie, che si differenziano fra di loro a seconda della scala caratteristica della descrizione.

- Nei modelli *macroscopici* vengono individuate poche variabili macroscopiche (per esempio densità e velocità) che soddisfano determinate equazioni di campo, selezionate da opportune prescrizioni di simmetria e da vincoli legati alle leggi conservazione soddisfatte. Questi modelli forniscono una descrizione coarse-grained del sistema e trascurano sia la dinamica dei singoli costituenti, sia l’interazione dei costituenti con l’ambiente.
- I modelli *microscopici* al contrario si pongono l’obiettivo di descrivere, nell’ambito della fluidodinamica, le interazioni del sistema con l’ambiente. Essi forniscono una descrizione dettagliata dei meccanismi microscopici caratteristici della motilità dei costituenti.
- Un’altra vasta classe di modelli *intermedi* ha come oggetto della descrizione i singoli costituenti attivi. La dinamica cui essi sono soggetti ha una componente di tipo stocastico che esprime l’interazione con l’ambiente.

L’attività del progetto di ricerca è incentrata sullo studio numerico di alcuni sistemi di materia attiva, attraverso simulazioni di *dinamica molecolare*.

In particolare l’attività parte da uno studio preliminare, condotto durante l’attività di tesi magistrale, sui meccanismi di aggregazione e di separazione di fase in un sistema bidimensionale di dumbbell attive, molecole biatomiche che interagiscono secondo un’interazione a corto raggio puramente repulsiva e che sono autopropulse attraverso una *forza attiva* che agisce nella direzione dell’asse principale di ogni molecola. Nell’ambito del nostro studio numerico il sistema di dumbbell attive viene descritto attraverso l’uso di equazioni stocastiche in cui la scala di riferimento è quella della singola particella, ed il bagno termico è δ -correlato. Sulla base di numerosi studi precedenti [3, 4, 5, 6] la separazione di fase del sistema attivo è stata messa in relazione alle fasi del sistema passivo all’equilibrio termodinamico.

Le transizioni di fase nei sistemi bidimensionali passivi con interazione a corto raggio hanno caratteristiche peculiari. Alcuni noti risultati stabiliscono che i sistemi bidimensionali non possono formare cristalli con correlazione a lungo raggio, ma possono tuttavia esistere in una fase di equilibrio ordinata [7]. Il meccanismo alla base delle transizioni ordine/disordine

nei sistemi bidimensionali viene descritto in maniera formale nell'ambito della teoria delle transizioni di fase topologiche[8, 9].

Alcuni recenti risultati mostrano che per sistemi bidimensionali di dischi con potenziale repulsivo a corto raggio la transizione liquido/solido al variare della frazione di superficie avviene in due step, con una transizione continua di tipo BKT fra il solido e la fase *hexatic*, ed una transizione del primo ordine fra la fase hexatic e il liquido [10]. La fase hexatic non ha ordine posizionale ma possiede un ordine orientazionale di tipo *quasi-long-range*, la fase solida è caratterizzata da ordine posizionale di tipo *quasi-long-range* e ordine orientazionale a lungo raggio. La transizione liquido/hexatico del primo ordine è caratterizzata da un intervallo di valori di frazione di superficie in cui regioni di con ordine orientazionale a lungo raggio (fase hexatic) coesistono con la fase liquida.

Lo studio numerico condotto durante l'attività di tesi e proseguito negli ultimi mesi ha evidenziato un legame fra la regione di coesistenza nel sistema passivo e la fase separata del sistema attivo. In particolare, l'intervallo di valori di frazione di superficie entro cui si realizza la coesistenza all'equilibrio si modifica *con continuità* introducendo l'attività[11]. Questo risultato costituisce una novità nell'ambito dello studio del meccanismo della cosiddetta *motility-induced phase separation*[2] e rappresenta una direzione interessante nella comprensione del fenomeno. Rimangono tuttavia molti aspetti da approfondire nell'ambito di questo scenario. Alcuni di questi sono riportati di seguito e costituiscono gli obiettivi del primo anno del progetto di dottorato.

- Studiare più approfonditamente il limite passivo del sistema di dumbbell e confrontare i risultati ottenuti con altri sistemi con interazione repulsiva a corto raggio, per esempio dischi o rod. Il fine è quello di indagare a fondo il rapporto che esiste fra il fenomeno dell'aggregazione nel sistema attivo e le caratteristiche dello stato di equilibrio ordinato nei vari sistemi passivi.
- Condurre uno studio termodinamico nel sistema passivo al fine di individuare con precisione il carattere delle fasi e delle transizioni di fase. Studiare le proprietà di scaling dell'energia libera, l'andamento della pressione al variare della frazione di superficie e l'andamento delle funzioni di correlazione in riferimento ai vari tipi di ordine del sistema.
- Estendere le osservazioni termodinamiche al caso del sistema attivo, con il duplice obiettivo di comprendere più a fondo le proprietà del sistema attivo e di approfondire i recenti risultati sulla *termodinamica generalizzata* al caso di sistemi non in equilibrio[12, 13].

Nei successivi due anni del dottorato, il progetto proseguirà con i seguenti obiettivi:

- studio delle proprietà cinetiche nei sistemi di materia attiva, descrizione del dinamica di coarsening con studio delle leggi di crescita dei domini hexatici e degli effetti di campi esterni (per esempio di shear) sul coarsening;
- studio della dinamica dei *tracer* nel sistema attivo al fine di indagare il comportamento dei coefficienti di trasporto nelle diverse fasi del sistema [14];
- studio degli effetti della fluidodinamica del bagno sui fenomeni collettivi e sulle caratteristiche cinetiche del sistema.

Bibliografia

- [1] Vicsek T., Zafeiris A., *Physics Reports* **517**, 3–4 (2012)
- [2] Cates E., Tailleur J., *Annual Review of Condensed Matter Physics* **6** 219-244 (2015)
- [3] Suma, A. and Gonnella, G. and Laghezza, G. and Lamura, A. and Mossa, A. and Cugliandolo, L. F., *Phys. Rev. E* **90**, 052130 (2014)
- [4] Suma, A. and Gonnella, G. and Marenduzzo, D. and Orlandini, E., *EPL (Europhysics Letters)* **108**, 56004 (2014)
- [5] Cugliandolo, L. F. and Gonnella, G. and Suma, A., *Phys. Rev. E* **91**, 062124 (2015)
- [6] Gonnella, G. and Lamura, A. and Suma, A., *International Journal of Modern Physics C*, **25**, 1441004, (2014)
- [7] Mermin N. D., Wagner H., *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1133 (1966)
- [8] Kosterlitz J. M., Thouless D. J., *J. Phys. C* **6**, 1181 (1973)
- [9] Halperin B. I., Nelson D. R., *Phys. Rev. Lett.* **41**, 121 (1978)
- [10] Bernard, E. P., Krauth W., *Phys. Rev. Lett.* **107**, 155704 (2011)
- [11] Cugliandolo L. F., Digregorio P., Gonnella G., Suma A., **arXiv** (2016)
- [12] Solon A. P., Stenhammar J., Cates M. E., Kafri Y., Tailleur J., **arXiv** (2016)
- [13] Ginot F., Theurkauff I., Levis D., Ybert C., Bocquet L., Berthier L., Cottin-Bizonne C., *Phys. Rev. X* **5**, 011004 (2015)
- [14] Suma A., Cugliandolo L. F., Gonnella G., *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* **2016** 054029 (2016)