

Abstract progetto di dottorato di ricerca in Fisica XXXII ciclo

Giuseppe Negro

Proposta di supervisor: Prof. Giuseppe Gonnella, Dott. Antonio Lamura.

11 dicembre 2016

In questo progetto vogliamo esaminare il comportamento di alcuni sistemi di materia soffice nell'ambito di una descrizione nel continuo, descrivendo la dinamica di evoluzione e il ruolo dell'idrodinamica. Tale approccio trascura gli effetti microscopici, ma tiene conto dell'esistenza di difetti topologici a scale intermedie (come per esempio le interfacce nelle miscele di fluidi e le disclinazioni nei cristalli liquidi), e l'accoppiamento di questi oggetti con il campo di velocità. Il progetto riguarderà lo studio della dinamica di transizione di fase dai casi più semplici di fluidi a singola componente con transizione liquido-vapore, ai casi di sistemi con più componenti, rilevanti nell'ambito della fisica della materia soffice e della materia attiva.

Nell'ambito della fisica della materia soffice, i sistemi a cui siamo interessati sono i cosiddetti *fluidi complessi*. Questi sono fluidi in cui atomi e molecole sono organizzati a formare strutture su scala mesoscopica. Alcuni esempi sono costituiti da emulsioni, cristalli liquidi e cristalli colloidali. Questi materiali sono molto suscettibili a perturbazioni esterne come stress, strain, campi elettrici o magnetici e fluttuazioni termiche.

Un'altra classe di sistemi che ha suscitato recentemente sempre maggior interesse da parte della comunità scientifica è costituita dalla materia attiva [3]. Un sistema è detto attivo quando i suoi costituenti sono in grado di assorbire energia, da serbatoi interni o dall'esterno, e dissiparla in attività come crescita, duplicazione, autopropulsione. Sospensioni di batteri[8] e gel attivi costituiscono alcuni esempi di sistemi di materia attiva. Anche in questo contesto l'emergere di fenomeni su scale più grandi di quella microscopica è estremamente frequente.

I sistemi sino ad ora citati hanno in comune il fatto che è conveniente descrivere l'enorme numero di gradi di libertà interagenti in termini di pochi campi coarse grained.

La descrizione dinamica nel continuo richiede la definizione di un modello termodinamico per il sistema in esame. Utilizzeremo un approccio à la Ginzburg-Landau in cui l'energia libera è espressa come una funzione polinomiale degli invarianti del parametro d'ordine rispetto al gruppo di simmetria del sistema. A partire da questo ricaviamo le forze termodinamiche (tensore di pressione e potenziale chimico) che sono inserite nelle equazioni di evoluzione dinamica. Le corrispondenti equazioni sono quella di Navier-Stokes, quella di continuità e quella per l'energia (se necessaria). Nel caso delle miscele fluide e dei cristalli liquidi bisogna considerare anche un ulteriore insieme di equazioni che descrivono l'evoluzione del parametro d'ordine, che può essere una quantità scalare, vettoriale o tensoriale, a seconda del sistema considerato e delle sue simmetrie.

Un approccio analitico, che risolve le equazioni di evoluzione, è possibile solo per sistemi e geometrie molto semplici. Diviene dunque essenziale sviluppare e adottare un approccio numerico. In particolare utilizzeremo i metodi Lattice Boltzmann (LBM)[5], già utilizzati per lo studio della dinamica di fluidi complessi e di cristalli liquidi [1, 2], approfondendo l'analisi specifica della dinamica di alcuni di essi. Questi metodi rappresentano tecniche computazionali moderne usate in fluidodinamica per la simulazione del campo di velocità e per lo studio degli effetti da esso generati. Essi sono costruiti a partire da particelle che si muovono tra i siti di un reticolo regolare secondo l'equazione del trasporto di Boltzmann discretizzata (LBE). L'interesse per questo tipo di studio risiede, dal punto di vista teorico, nel fatto che verrebbe presa in considerazione la dinamica di sistemi di non equilibrio, una cui caratterizzazione completa non è ancora raggiunta.

Durante il primo anno inizieremo lo sviluppo di metodologie numeriche per lo studio dei sistemi sopra descritti partendo dal considerare sistemi liquido-vapore. La dinamica della transizione di fase in questi sistemi è molto ricca in presenza di geometrie confinanti o campi esterni[6], e la sua caratterizzazione è rilevante per una grande classe di sistemi. In un recente lavoro[4] è stata sviluppata una formulazione bidimensionale di uno schema LBM

per un sistema liquido-vapore. Tale metodo è stato utilizzato per lo studio del fenomeno di separazione di fase e della dinamica di formazione di pattern per un fluido non ideale sottoposto a shear e ad un potenziale periodico.

- Calcolo degli esponenti che regolano la crescita dei domini in $d = 2$ per sistemi liquido-vapore a singola componente e per miscele di fluidi diversi.
- Estensione dello schema LBM al caso di tre dimensioni spaziali. Un netto miglioramento della modellizzazione per mezzo dei LBM si ottiene derivando la LBE su basi matematiche rigorose per mezzo di una proiezione di Gauss-Hermite della corrispondente equazione nel continuo[7].
- Studio della crescita di una goccia in condizioni di metastabilità, e analisi del regime di Rayleigh-Plesset. Parallelizzazione del codice.
- Studio degli esponenti di crescita dei domini delle due fasi in $d=3$.
- Caratterizzazione della morfologia delle due fasi e della dinamica della transizione di fase.

Come accennato nell'introduzione la materia attiva è un'area di ricerca di vastissimo interesse. La sua natura intrinsecamente di non equilibrio è alla base di una serie di comportamenti inaspettati come flussi spontanei[9] turbolenza in sospensioni di batteri[10] e separazione di fase guidata dalla motilità[11]. Mentre sistemi di materia attiva a singola componente sono stati ampiamente presi in considerazione, meno conosciuto è il comportamento di miscele composte da una componente attiva e una passiva. Gli studi finora condotti hanno mostrato che l'attività può guidare l'auto-aggregazione o creare gocce autopropulse e causare instabilità all'interfaccia tra le due componenti. Nello specifico verranno presi in considerazione sistemi denominati "exotic active emulsions", costituiti da miscele di fluido isotropo passivo e un fluido polare attivo, anche in presenza di un surfattante per favorire l'emulsificazione. L'interplay tra attività e termodinamica conduce a nuovi e interessanti fenomeni e alla formazione di pattern specifici nella separazione di fase. Per questi sistemi lo studio sarebbe così articolato

- Caratterizzazione delle differenti fasi.
- Dinamica della separazione di fase al variare dei parametri della simulazione.
- Studio della risposta a perturbazioni esterne, come per esempio la presenza di shear.
- Sistemi attivi in $d=3$.

Uno degli obiettivi degli anni successivi è la completa caratterizzazione del vasto repertorio di stati stazionari di non equilibrio nei sistemi di materia soffice in cui una delle componenti è attiva. Di enorme interesse è la possibilità di avere fenomeni di turbolenza a basso numero di Reynolds e la formazione di pattern caotici di velocità. L'interesse risiede nel fatto che comunemente regimi di turbolenza vengono generati per effetto di iniezione di energia a grandi scale e dissipazione a piccole scale con formazione di vortici. In questo caso il regime di turbolenza verrebbe generato su piccole scale, immettendo una singola goccia di fluido attivo in una matrice passiva, e la dissipazione avverrebbe a scale macroscopiche. L'enorme versatilità delle tecniche di calcolo numerico che si intende utilizzare consentirebbe lo studio del problema dell'interazione di gocce di cristallo liquido colesterico in ambiente isotropo, e il comportamento di tali sistemi sotto l'azione di campi elettrici e shear. Contestualmente verranno sviluppati algoritmi numerici per lo studio di questi sistemi in tre dimensioni spaziali.

Bibliografia

- [1] G. Gonnella, E. Orlandini, J. M. Yeomans, "Lattice Boltzmann simulations of lamellar and droplet phases", *Phys. Rev. E* 58, 480 (1998).
- [2] M. E. Cates, O. Henrich, D. Marenduzzo, K. Stratford, "Lattice Boltzmann simulations of liquid crystalline fluids: active gels and blue phases" *Soft Matter* 5, 3791-3800 (2009).
- [3] "Motility induced phase separation and coarsening in active matter", *Comptes Rendus Physique* 16, 316 (2015).
- [4] Coclite A., Gonnella G., Lamura A., Pattern formation in liquid-vapor systems under periodic potential and shear. *Phys. Rev. E*, Vol. 89, Issue 6, (2014).
- [5] S. Succi, "The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond", Clarendin Press, Oxford (2001).
- [6] Binder Horbach Vinck, *Soft matter*, 4, 1555, (2008).
- [7] Shan, Yuan, Chen, *Fluid mechanics*, 550, 413, (2006).
- [8] Wensinka et al. *PNAS*, 4, 109, 36, (2012).
- [9] R. A. Simha e Ramaswamy, *Phys. Rev. Lett.* 89, 058101 (2002).
- [10] C. Dombrowsky et al. *Phys. Rev. Lett* 93, 098103 (2004).
- [11] J. Palacci et al. *Phys. Rev. Lett* 105, 088304 (2010).