

# Morphology And Dynamics of Phase Separation: From Simple to Active fluids

Relazione attività svolta durante il I anno  
Dottorato in fisica teorica XXXII ciclo  
Dip. di Fisica “M.Merlin” Bari  
Supervisor: Prof. Giuseppe Gonnella, Dot. Antonio Lamura

Giuseppe Negro

November 12, 2017

## 1 Introduzione

Scopo del progetto è lo studio della dinamica di transizione di fase in alcune importanti classi di sistemi fluidi. Partendo dal caso di fluido ad una singola componente vogliamo studiare la separazione di fase tra liquido e vapore e la legge di crescita dei domini delle due fasi, in un sistema raffreddato al di sotto del punto critico. Tale studio trova motivazione nel fatto che, come si preciserà meglio in seguito, questo sistema non è stato mai studiato in dimensione  $d = 3$ . Vogliamo poi considerare miscele di fluidi con una componente attiva, che rappresentano sistemi biologici o materiali biosintetici, e studiare nuovi meccanismi di autopropulsione. Il tratto caratterizzante dei sistemi attivi è rappresentato dal fatto che i costituenti sono in grado di assorbire energia, da serbatoi interni o dall'esterno, e dissiparla in attività come crescita, duplicazione, autopropulsione[1]. Essi costituiscono un campo di ricerca di enorme interesse, all'interfaccia tra fisica della materia soffice, meccanica statistica e biofisica.

Questo studio sarà condotto utilizzando metodi numerici Lattice Boltzmann (LB)[2], già utilizzati in passato per lo studio della dinamica di fluidi complessi.

Per tutti i sistemi in oggetto 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 risolva le equazioni di evoluzione, è possibile solo per sistemi e geometrie molto semplici. Diviene dunque essenziale sviluppare e adottare un approccio numerico. I metodi LB, in particolare, rappresentano tecniche computazionali moderne usate in fluidodinamica per la simulazione del campo di velocità e per lo studio degli effetti

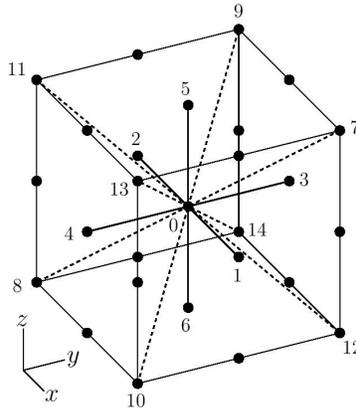


Figure 1: Rappresentazione delle velocità reticolari nella geometria utilizzata  $D3Q15$ .

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). 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 l'accoppiamento di questi oggetti con il campo di velocità.

Nell'ambito del progetto il primo anno è stato dedicato ai seguenti punti:

- Studio della separazione di fase tra liquido e vapore, in un sistema raffreddato al di sotto del punto critico, e determinazione delle leggi di crescita dei domini delle due fasi in dimensione  $d = 3$ . A tal fine è stato sviluppato e implementato uno schema specifico LB tridimensionale.
- Utilizzando una modellizzazione Liquido-Vapore, con l'aggiunta di un ulteriore campo atto a rappresentare la concentrazione di materiale attivo, si è sviluppato e studiato numericamente un modello per il meccanismo all'origine della motilità cellulare in assenza di substrato.
- Studio numerico della morfologia e della dinamica di miscele di fluidi in cui una delle due componenti è attiva.

## 2 Dinamica della separazione di fase Liquido Vapore in 3D

Quando un fluido, inizialmente in uno stato disordinato, viene istantaneamente raffreddato ad una temperatura al di sotto della linea spinodale<sup>1</sup>, in una regione di coesistenza tra due fasi, si formano domini delle due differenti fasi che crescono nel tempo. In tal caso la separazione di fase prende il nome di decomposizione spinodale.

Tipicamente la crescita di tali domini è un fenomeno di scala, ovvero esiste una singola lunghezza caratteristica  $l$  tale che la struttura dei domini appare la stessa durante l'evoluzione temporale, quando tutte le lunghezze sono riscalate rispetto a  $l$ . Quanto detto prende il nome di *ipotesi di scaling dinamico*[3], ed è supportata dai risultati di simulazioni numeriche e esperimenti per il fattore di struttura e le funzioni di correlazione. Tipicamente la taglia media dei domini  $l(t)$  cresce nel tempo

<sup>1</sup>curva nel diagramma temperatura-densità (o composizione per sistemi a più componenti) luogo dei punti caratterizzati da derivata seconda dell'energia libera di Gibbs nulla.

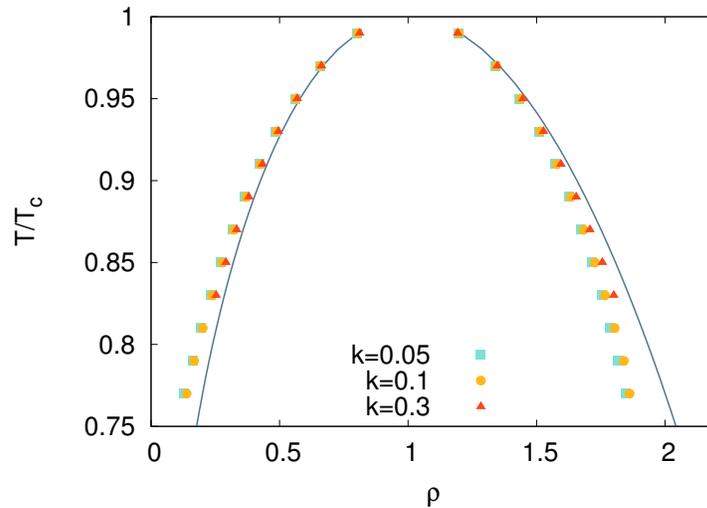


Figure 2: Diagramma di fase ottenuto numericamente per diversi valori del coefficiente  $k$ , che controlla la larghezza delle interfacce, e confronto con quello teorico ottenuto con la costruzione di Maxwell (curve continue).

secondo legge a potenza, con un esponente  $\alpha$  che dipende dalla morfologia, struttura dei domini, dimensione del sistema, presenza di effetti idrodinamici e numero di componenti del parametro d'ordine e se esso è conservato o meno.

Per le miscele binarie si possono distinguere tre differenti regimi [3], ognuno caratterizzato da uno specifico meccanismo fisico di crescita, la cui esistenza può essere dedotta analizzando le equazioni della dinamica, le equazioni di Navier-Stokes e l'equazione di evoluzione del parametro d'ordine, e assumendo che esista una sola lunghezza caratteristica rilevante:

- *Diffusivo*

Nelle fasi immediatamente successive ad un *quench*, i.e. una brusca diminuzione di temperatura, il meccanismo di crescita dei domini è la diffusione di molecole da domini più piccoli, a curvatura più grande, a domini più grandi con curvatura inferiore. Si può mostrare che l'esponente con cui i domini crescono nel tempo è in questo caso  $\alpha = 1/3$ .

- *Idrodinamico Viscoso*

Quando, durante il processo di separazione di fase, l'idrodinamica comincia ad essere rilevante ma le velocità sono piccole e variano poco nel tempo, si può assumere che il termine inerziale nelle equazioni di Navier-Stokes sia trascurabile. Imponendo quindi che le forze viscosive siano bilanciate da forze di interfaccia si trova, in questo regime  $\alpha = 1$  (come messo in evidenza per la prima volta da Siggia).

- *Idrodinamico Inerziale*

Per velocità più elevate, il fenomeno fisico rilevante diviene il bilancio tra le forze di interfaccia e le forze inerziali. Sotto queste assunzioni si trova  $\alpha = 2/3$ .

Il regime inerziale, per piccoli valori della viscosità, e il regime viscoso, per valori più alti della viscosità, sono stati osservati numericamente in un importante lavoro di Keadon et al. [4], per miscele binarie in 3D.

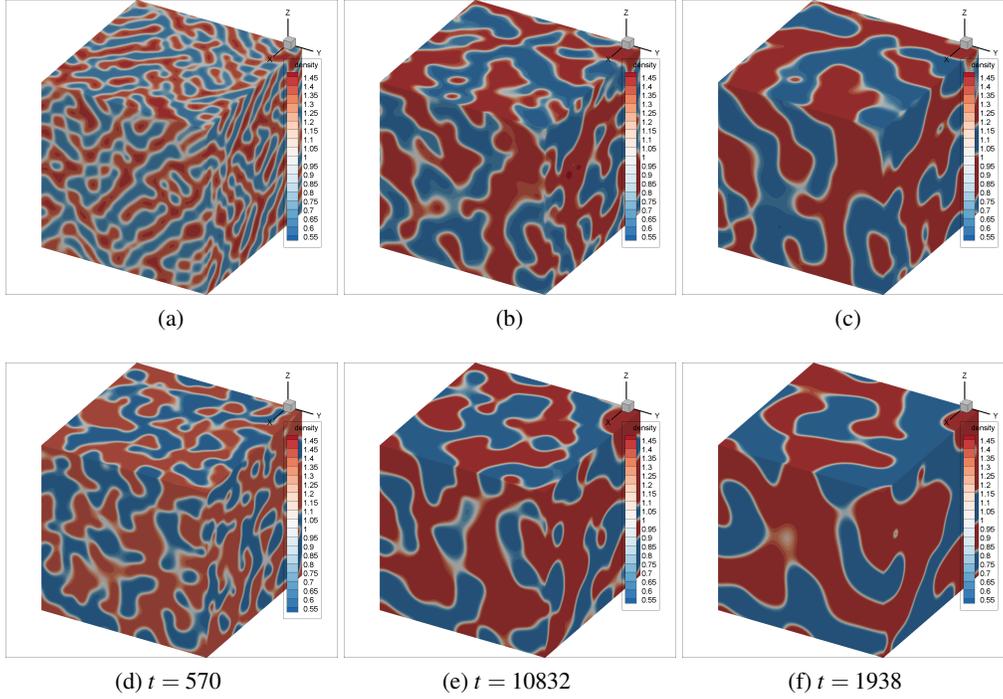


Figure 3: Snapshots della densità  $\rho$ , per un sistema di taglia  $L = 256$  e viscosità  $\eta = 3$  (a-c) e  $\eta = 1$  (d-f). Notiamo come la separazione di fase sia ritardata nel caso di viscosità più alta, e come i domini appaiano meno regolari.

Per sistemi a singola componente con separazione di fase Liquido-Vapore, in cui il parametro d'ordine è la densità  $\rho$ , che non è localmente conservata, non è noto quali debbano essere gli esponenti di crescita. I pochi risultati in letteratura riguardando solo sistemi 2D[5], e riportano l'esistenza di un regime inerziale, e di un regime caratterizzato da un esponente di crescita  $\alpha = 1/2$  per viscosità sufficientemente elevate.

Parte dell'attività di ricerca, durante il primo anno, è stata dedicata allo sviluppo e all'implementazione di uno schema LB per lo studio della separazione di fase liquido vapore in 3D.

L'approccio LB prevede una discretizzazione dello spazio fisico e delle velocità consentite a livello di ciascun sito reticolare, in base ad opportune proprietà geometriche. Nel caso specifico si è scelto un modello  $D3Q15$  (3 dimensioni spaziali e 15 velocità reticolari (Fig. 1)). L'evoluzione del fluido è definita a partire da un insieme discreto di  $N$  funzioni di distribuzione  $\{f_i\}$  ( $i = 0, \dots, N - 1$ ), che obbediscono alla equazione del trasporto di Boltzmann nell'approssimazione BGK:

$$f_i(\mathbf{r} + \mathbf{e}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{r}, t) = -\frac{\Delta t}{\tau} [f_i(\mathbf{r}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{r}, t)], \quad (1)$$

dove  $\mathbf{r}$  e  $t$  rappresentano coordinate spaziali e tempo, rispettivamente,  $\{\mathbf{e}_i\}$  ( $i = 0, \dots, N - 1$ ) è l'insieme delle velocità discrete,  $\Delta t$  è il *time step*, e  $\tau$  è il tempo di rilassamento che caratterizza il rilassamento verso e distribuzioni di equilibrio  $f_i^{eq}$ . La ricetta LB prevede che per le distribuzioni di equilibrio, e eventualmente anche per i termini di forza dell'equazione del trasporto se presenti, si effettui una espansione i cui coefficienti dovranno essere determinati in modo da ottenere le corrette equazioni della dinamica nel limite continuo. A tal fine si è scelto di sviluppare uno schema

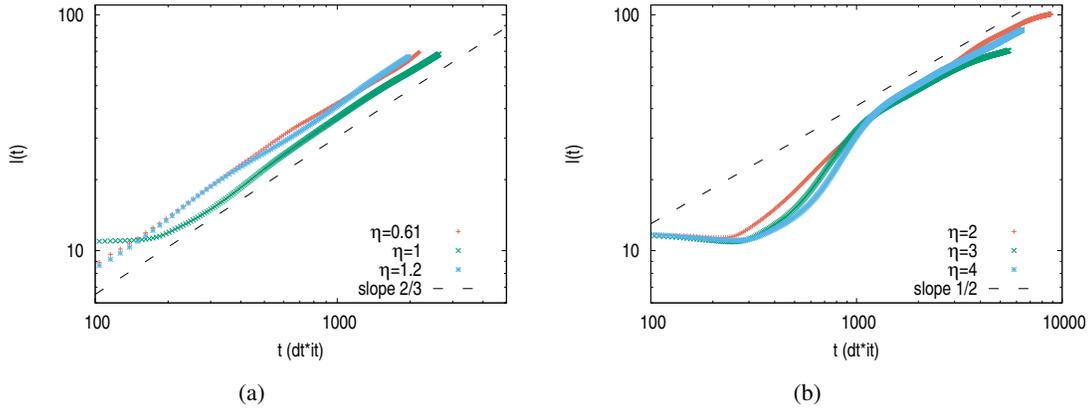


Figure 4: Taglia media dei domini in funzione del tempo, per un reticolo di taglia  $L = 256$ , per bassa viscosità **(a)** e viscosità più alta **(b)**. Nel caso di bassa viscosità gli andamenti appaiono consistenti con un esponente di crescita  $\alpha \simeq 2/3$  (retta tratteggiata in **(a)**), mentre nel caso di viscosità più alta gli andamenti suggeriscono un esponente  $\alpha \simeq 1/2$  (retta tratteggiata in **(b)**).

LB basato su una derivazione rigorosa della LBE per mezzo di una proiezione di Gauss-Hermite della corrispondente equazione nel continuo[6]. La dimensionalità del problema in esame ha anche reso necessario prendere in considerazione metodi di discretizzazione degli operatori differenziali diversi da quelli standard. La scelta ottimale è risultata essere quella della di operatori con errori di discretizzazione isotropi [7]. Alla fase di implementazione è seguita la fase di test del codice. Il diagramma di fase della separazione liquido-vapore è stato ricostruito numericamente e risulta essere consistente con quello teorico ottenuto attraverso la costruzione di Maxwell (Fig.2).

In figura 3 sono riportati alcuni snapshots della densità  $\rho$ , per un sistema di taglia  $L = 256$ , per viscosità  $\eta = 3$  (Serie superiore) e  $\eta = 1$  (Serie inferiore). I casi riportati fanno riferimento a due valori tipici, in *lattice units* (LU), di bassa e alta viscosità per il sistema in esame. Essi dipendono dal modello LB considerato e il massimo e il minimo  $\eta$  sono limitati dalla stabilità numerica del codice.

Notiamo come la separazione di fase sia ritardata nel caso di viscosità più alta, e che i domini appaiono meno regolari. Queste differenze si riflettono sull'andamento della taglia media dei domini  $l(t)$  nel tempo (Fig. 4). Questa è stata misurata come il primo momento del fattore di struttura della densità e sembra suggerire, per il momento, l'esistenza di due regimi: uno caratterizzato da un esponente  $\alpha = 2/3$  per bassi valori della viscosità (Fig.4a), e un regime di crescita con  $\alpha = 1/2$  (Fig.4b) per grandi valori della viscosità.

Il lavoro proseguirà su due strade. La prima prevede di considerare sistemi di taglia più grande,  $L \geq 512$ , per confermare quanto osservato finora ed eventualmente determinare se il regime  $\alpha = 1/2$  sia dovuto solo ad effetti di taglia finita. Si vuole inoltre determinare se sussista, su sistemi di taglia più grande, un regime viscoso per gli stessi valori di viscosità. A tal fine si cercherà di considerare uno schema LB più stabile in modo da poter considerare quench a temperatura più bassa rispetto a quelle che è possibile considerare con lo schema sin qui adottato. Per questa seconda linea di ricerca sussiste una collaborazione con il Prof. Sofonea, dell'università di Timisoara, esperto nell'ambito dello sviluppo ed implementazione di algoritmi LB su GPU.

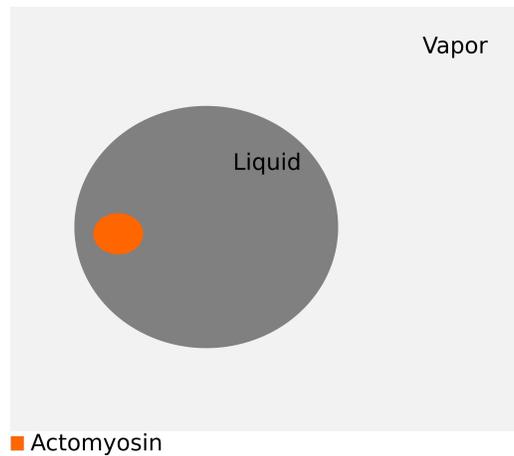


Figure 5: Sketch del sistema considerato.

### 3 Goccia di liquido attiva

Capire le regole che governano il moto di una cellula (o *cell motility*) è un problema affascinante in biofisica poiché il meccanismo che governa la motilità è puramente auto-organizzato[8]. Il meccanismo della cell-motility è anche di enorme interesse in campo biomedico, sia per il suo ruolo centrale nell'auto-assemblamento di tessuti nella crescita embrionale, necessaria per la rigenerazione di tessuti, sia per comprendere il meccanismo con cui le cellule formano metastasi nel cancro. Il cosiddetto *Crawling*, moto di una cellula su substrato[8], è stato ampiamente studiato sia dal punto di vista teorico sia numericamente. Al contrario, il moto di una cellula in bulk, ad esempio una cellula che si muove in un ambiente 3D o nella matrice extracellulare, necessita ancora di una completa comprensione e modellizzazione dal punto di vista teorico. Un ruolo fondamentale nella motilità cellulare è ricoperto dalla miosina. Essa è una proteina motrice, rintracciabile nelle cellule eucariotiche, responsabile del movimento basato sui filamenti di actina. Sia la contrazione della miosina che la polimerizzazione della actina contribuiscono al moto della cellula. In particolare la contrazione è la sola responsabile per la polarizzazione della cellula[9]. I risultati numerici riportati in letteratura fanno riferimento tutti a sistemi composti da una goccia di gel attivo polare il cui moto è dominato dall'instaurarsi di difetti nel campo di polarizzazione [10]. Tuttavia, recenti risultati sperimentali [11] suggeriscono che per alcuni tipi di cellule il moto può essere guidato esclusivamente dalla contrazione e dalla concentrazione di miosina presente.

Il nostro obiettivo è quello di sviluppare un modello per il moto cellulare che sia governato dalla sola contrazione della miosina, e che dunque sia isotropo e non prenda in considerazione la dinamica del campo di polarizzazione.

Partiamo quindi modellizzando la cellula come una goccia di liquido in equilibrio termodinamico con il vapore. Si è preso in considerazione questo sistema, e non ad esempio una miscela binaria, poiché ci aspettiamo che sia necessario che il fluido sia comprimibile perchè ci sia motilità guidata dalla contrazione. All'interno della goccia aggiungiamo una certa concentrazione di miosina (Fig. 5). Supponiamo che essa sia posizionata a sinistra nella cellula. La miosina è contrattile quindi 'spinge il flusso', ovvero crea un flusso maggiore a sinistra piuttosto che a destra e questo dovrebbe essere sufficiente a far muovere la cellula. Introduciamo quindi un campo scalare che rappresenta la miosina, che sia nullo all'esterno della cellula e valga 1 all'interno. La miosina crea contrazione, e

l'interplay tra contrazione e asimmetria dovrebbe generare il moto della cellula. La concentrazione di miosina deve essere considerata nell'equazione della pressione che quindi risulterà essere uguale a

$$p = p^w - \phi \zeta \quad , \quad (2)$$

dove  $p^w$  è la pressione di van der Waals

$$p^w = \frac{3\rho T}{3-\rho} - \frac{9}{8}\rho^2 \quad , \quad (3)$$

mentre  $\zeta$  è la contrattilità ( $\zeta < 0$ ).

Le equazioni che governano la dinamica del sistema sono le equazioni di Navier Stokes per la velocità e l'equazione di convezione-diffusione per l'evoluzione della concentrazione di miosina  $\phi$ :

$$\begin{cases} \rho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\nabla p + \eta \nabla^2 \mathbf{v} - \frac{2}{3} \eta \nabla(\nabla \cdot \mathbf{v}) \\ \frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi \mathbf{v}) = \Gamma \nabla^2 \left( \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \phi} \right) \end{cases} \quad (4)$$

Nell'equazione di Navier Stokes compare il gradiente della pressione e quindi la variazione di velocità è legata al gradiente di concentrazione di miosina.

Nell'equazione di convezione-diffusione, l'energia libera è data da

$$\mathcal{F} = \int d\mathbf{r} \quad \left\{ WD + \frac{a}{2} \phi^2 + k(\nabla \phi)^2 - b(\rho - \rho_{av}) \phi^2 + c\phi(\nabla \rho)^2 \right\} \quad . \quad (5)$$

Il termine WD indica la densità di energia libera di van der Waals. Il quarto e il quinto termine vengono introdotti per permettere che la miosina rimanga all'interno della cellula (i.e., goccia di liquido).

I risultati sin qui ottenuti suggeriscono che il meccanismo proposto, che impiega la contrazione della miosina all'interno della goccia di liquido per generare la motilità della stessa, sia sufficiente per il moto in assenza di substrato. I futuri sviluppi, su questa linea di ricerca, prevedono di considerare il moto di una goccia in 3D e il confronto tra simulazioni numeriche e esperimenti.

## 4 Studio della morfologia di una miscela attiva asimmetrica

In questa sezione verranno presentati i risultati riguardanti lo studio della morfologia e della dinamica di una emulsione attiva, asimmetrica nelle concentrazioni delle componenti attiva e passiva. L'attività di ricerca nel campo della materia attiva è stata principalmente focalizzata su sistemi a singola componente e in minor misura sul comportamento di miscele costituite da componenti attive e passive. Recenti studi su miscele binarie con una componente attiva hanno mostrato che l'attività può causare instabilità all'interfaccia tra le due componenti [12, 13]. Il modello che presentiamo costituisce una generalizzazione dei modelli citati nel fatto che l'emulsificazione della componente attiva è favorita dalla presenza di un surfattante aggiunto alla miscela. In questo modo si ottiene un sistema in cui è possibile controllare la quantità di materiale attivo disperso. Questo consente di controllare non solo l'intensità ma anche la distribuzione spaziale dell'input energetico, dovuto alla presenza dell'attività, nel sistema. Questo sostituisce un enorme progresso sia dal punto di

vista teorico che per l'ingresso di tali studi in ambito tecnologico, dando la possibilità di progettare nuovi materiali biosintetici, le cui caratteristiche e proprietà possono essere controllate da un singolo parametro.

Le variabili idrodinamiche del problema sono la densità del fluido  $\rho$ , la sua velocità  $\mathbf{v}$ , la concentrazione di materiale attivo  $\phi$ , e la polarizzazione  $\mathbf{P}$ , che determina l'orientazione media della componente attiva.

Le equazioni che governano l'evoluzione del sistema sono

$$\rho \left( \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \right) \mathbf{v} = -\nabla p + \nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}}^{total}, \quad (6)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi \mathbf{v}) = \nabla \cdot \left( M \nabla \frac{\delta F}{\delta \phi} \right), \quad (7)$$

$$\frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{P} = -\underline{\underline{\Omega}} \cdot \mathbf{P} + \xi \underline{\underline{D}} \cdot \mathbf{P} - \frac{1}{\Gamma} \frac{\delta F}{\delta \mathbf{P}}, \quad (8)$$

nel limite di fluido incompressibile. La prima è l'equazione di Navier Stokes dove  $p$  la pressione isotropica e  $\underline{\underline{\sigma}}^{total}$  è il tensore degli stress totale [14].

Le equazioni (7)-(8) governano l'evoluzione temporale del campo di concentrazione e della polarizzazione della componente attiva del fluido. Dato che la concentrazione di materiale attivo è una quantità localmente conservata la sua evoluzione temporale sarà dettata da una equazione di convezione-diffusione, Eq. (7), dove  $M$  è la mobilità,  $F$  un funzionale di energia libera che verrà definito a breve, e  $\delta F / \delta \phi$  il potenziale chimico. La dinamica del campo di polarizzazione segue invece una equazione di advezione-rilassamento, Eq. (8), derivante dalla teoria dei cristalli liquidi. Qui  $\Gamma$  rappresenta la viscosità rotazionale,  $\xi$  è una costante che controlla la forma delle particelle attive, (positiva per particelle rod-like e negativa per particelle disk-like),  $h = \delta F / \delta \mathbf{P}$  è il campo molecolare.  $\underline{\underline{D}} = (\underline{\underline{W}} + \underline{\underline{W}}^T) / 2$  e  $\underline{\underline{\Omega}} = (\underline{\underline{W}} - \underline{\underline{W}}^T) / 2$  rappresenta la parte simmetrica e anti-simmetrica del tensore gradiente del campo di velocità  $\underline{\underline{W}}_{\alpha\beta} = \partial_\beta v_\alpha$ , dove gli indici greci denotano le componenti cartesiane. Il tensore degli stress  $\underline{\underline{\sigma}}^{total}$  considerato nelle equazioni di Navier-Stokes del modello, Eq. (6), può essere suddiviso in un pezzo passivo di equilibrio ed in uno attivo di non equilibrio:

$$\underline{\underline{\sigma}}^{total} = \underline{\underline{\sigma}}^{passive} + \underline{\underline{\sigma}}^{active}. \quad (9)$$

La parte passiva rappresenta la risposta elastica dal soluto ed è a sua volta somma di tre termini:

$$\underline{\underline{\sigma}}^{passive} = \underline{\underline{\sigma}}^{viscous} + \underline{\underline{\sigma}}^{elastic} + \underline{\underline{\sigma}}^{interface}. \quad (10)$$

Il primo è un termine di stress viscoso che può essere scritto come  $\sigma_{\alpha\beta}^{viscous} = \eta (\partial_\alpha v_\beta + \partial_\beta v_\alpha)$  dove  $\eta$  è la viscosità di shear. Il secondo termine rappresenta lo stress elastico [14]:

$$\begin{aligned} \sigma_{\alpha\beta}^{elastic} = & \frac{1}{2} (P_\alpha h_\beta - P_\beta h_\alpha) - \frac{\xi}{2} (P_\alpha h_\beta + P_\beta h_\alpha) \\ & - \kappa \partial_\alpha P_\gamma \partial_\beta P_\gamma, \end{aligned} \quad (11)$$

Dove  $\kappa$  è la costante elastica del cristallo liquido e il parametro  $\xi$  dipende dalla geometria come già accennato. In più  $\xi$  stabilisce se il fluido tende ad allinearsi con il flusso ( $|\xi| > 1$ ) o fare tumbling ( $|\xi| < 1$ ) sotto shear. Il terzo termine deriva dalla teoria delle miscele binarie. Esso include il contributo dovuto all'interfaccia tra la fase attiva e passiva:

$$\sigma_{\alpha\beta}^{interface} = \left( f - \phi \frac{\delta F}{\delta \phi} \right) \delta_{\alpha\beta} - \frac{\partial f}{\partial (\partial_\beta \phi)} \partial_\alpha \phi. \quad (12)$$

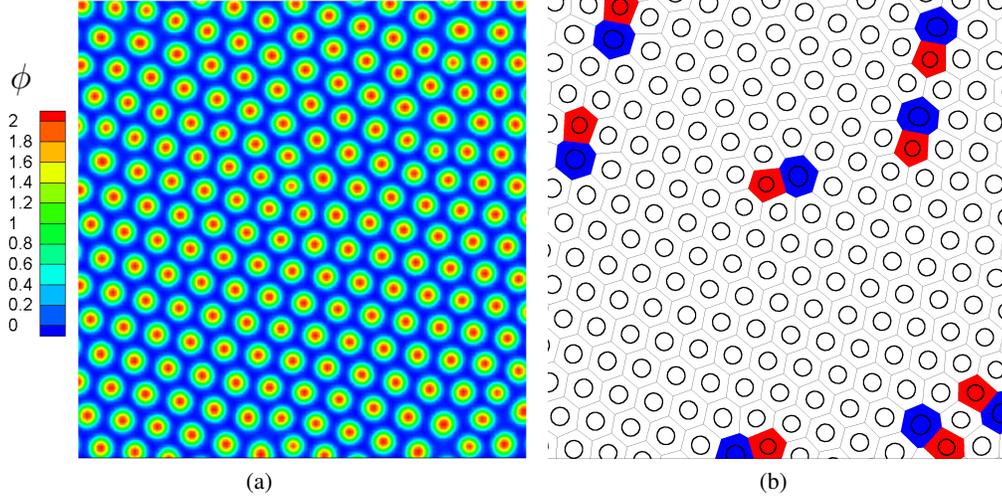


Figure 6: **(a)** Snapshot della concentrazione  $\phi$  per una configurazione stazionaria a  $\zeta = 0$ , per una porzione di taglia  $L = 128$ , di un sistema di taglia  $L = 256$ . **(b)** Tassellazione di Voronoi per la stessa configurazione in **(a)**.

Nell'ultima espressione  $f$  è la densità di energia libera. Il contributo attivo al tensore degli stress, è dato da [15, 16]

$$\sigma_{\alpha\beta}^{active} = -\zeta\phi \left( P_\alpha P_\beta - \frac{1}{3} |\mathbf{P}|^2 \delta_{\alpha\beta} \right), \quad (13)$$

dove  $\zeta$  è il parametro di attività che è positivo per sistemi extensile (pushers) e negativo per quelli contractile (pullers). Lo stress attivo guida il sistema fuori dall'equilibrio fornendo energia. In assenza di attività, le proprietà termodinamiche della miscela sono codificate nel seguente funzionale di energia libera che accoppia l'energia libera del modello di Landau-Brazowskii [17] all'energia libera di un cristallo liquido polare :

$$F[\phi, \mathbf{P}] = \int d\mathbf{r} \left\{ \frac{a}{4\phi_{cr}^4} \phi^2 (\phi - \phi_0)^2 + \frac{k}{2} |\nabla\phi|^2 + \frac{c}{2} (\nabla^2\phi)^2 - \frac{\alpha(\phi - \phi_{cr})}{2\phi_{cr}} |\mathbf{P}|^2 + \frac{\alpha}{4} |\mathbf{P}|^4 + \frac{\kappa}{2} (\nabla\mathbf{P})^2 + \beta\mathbf{P} \cdot \nabla\phi \right\}. \quad (14)$$

Il funzionale introdotto costituisce una generalizzazione dell'energia introdotta in [15], per una miscela binaria attiva.

Il primo termine, moltiplicato per la costante fenomenologica  $a > 0$ , descrive le proprietà di bulk della miscela, il secondo e il terzo determinano la tensione superficiale. Il termine di bulk è scelto in modo da avere una energia libera con due minimi, uno a  $\phi = 0$  corrispondente alla componente passiva, e l'altro in  $\phi \simeq \phi_0$ , corrispondente alla fase attiva. Nel nostro studio abbiamo considerato il caso di un miscela asimmetrica 10 : 90 nelle componenti attiva e passiva. In assenza di attività il sistema, nello stato stazionario, è caratterizzato dalla presenza di gocce disposte a formare un reticolo triangolare, con alcuni difetti nella disposizione (Fig. 6a), come può essere messo in evidenza guardando alla tassellazione di Voronoi (Fig. 6b). Essa stabilisce una partizione dello spazio in regioni chiuse per ogni centro di massa secondo la seguente regola: La regione associata alla  $i$ -esima

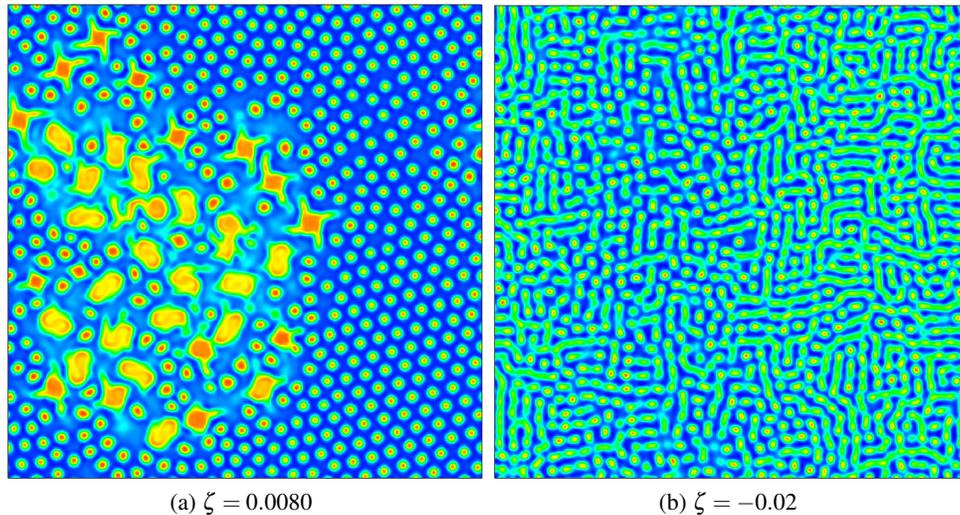


Figure 7: Snapshots del campo di concentrazione, per configurazioni stazionarie, di sistemi di taglia  $L = 256$  corrispondenti a  $\zeta = 0.0080$  (a) e  $\zeta = -0.013$  (b).

goccia contiene tutti i punti dello spazio che sono più vicini al suo centro di massa che a quello di tutte le altre gocce.

Il nostro studio, teso alla caratterizzazione della dinamica e della morfologia della emulsione in presenza di attività, ha messo in evidenza come piccoli valori di  $\zeta$ , l'attività procuri un progressivo ordinamento del sistema, tramite l'eliminazione dei difetti. Tuttavia all'aumentare dell'attività, il sistema subisce una forte alterazione dello stato d'equilibrio che è caratterizzato dalla formazione di nuove strutture: aster o gocce rotanti per sistemi extensile (Fig. 7a) e strutture elongate per sistemi contractile (Fig. 7b). La transizione tra i differenti regimi, sia nel caso extensile che contractile, è stato condotto quantitativamente attraverso l'analisi di osservabili idrodinamiche quali l'entropia e l'energia cinetica al variare dell'attività.

Lo studio, qui brevemente descritto, è oggetto di un lavoro sottomesso e allegato alla presente relazione.

## 5 Attività didattica e partecipazione a scuole e conferenze

Durante il primo anno di dottorato è stata svolta attività di supporto alla didattica nell'ambito del corso di *Meccanica statistica avanzata*, nello specifico per la parte riguardante la *Teoria del gruppo di rinormalizzazione in Meccanica Statistica*.

Come partecipazione a conferenze si riporta la seguente:

- **Flowing matter 2017**, Porto  
Dove si è contribuito presentando un poster.

Si è partecipato alle seguenti scuole:

- **FPSP 2018**: International summer school in Fundamental problems in Statistical Physics.

**Esami sostenuti:**

- C++ del Prof. Cafagna (Superato)
- Programming with Python Prof. Diacono (Superato)
- Inglese Prof. White (Superato)
- Progettazione europea Prof. D'orazio (Superato)
- Renormalization of field theories Prof. Defazio (Superato)
- Linear stability analysis Prof. Gonnella (Da sostenere)
- Interpolation Methods and techniques for Experimental Data Analysis Prof. Pompili (Superato)
- Processi di Levy Prof. Cufaro (Da sostenere)

## 6 Pubblicazioni

**Morphology and flow patterns in highly asymmetric active emulsions**, *G. Negro, L.N. Carenza, P. Digregorio, G. Gonnella, A. Lamura, sottomesso.*

Allegato alla presente relazione.

## References

- [1] M. C. Marchetti, J. F. Joanny, S. Ramaswamy, T. B. Liverpool, J. Prost, M. Rao, and R. A. Simha. Hydrodynamics of soft active matter. *Rev. Mod. Phys.*, 85:1143–1189, 2013.
- [2] S. Succi. *The Lattice Boltzmann Equation: For Fluid Dynamics and Beyond*. Numerical Mathematics and Scientific Computation. Clarendon Press, 2001.
- [3] A.J. Bray. Theory of phase-ordering kinetics. *Advances in Physics*, 43(3):357–459, 1994.
- [4] V M. Kendon, Jean-Christophe Desplat, P Bladon, and M E. Cates. 3d spinodal decomposition in the inertial regime. 83, 02 1999.
- [5] V. Sofonea, A. Lamura, G. Gonnella, and A. Cristea. Finite-difference lattice boltzmann model with flux limiters for liquid-vapor systems. *Phys. Rev. E*, 70:046702, Oct 2004.
- [6] XIAOWEN SHAN, XUE-FENG YUAN, and HUDONG CHEN. Kinetic theory representation of hydrodynamics: a way beyond the navier–stokes equation. *Journal of Fluid Mechanics*, 550:413–441, 2006.
- [7] Sumesh P. Thampi, Santosh Ansumali, R. Adhikari, and Sauro Succi. Isotropic discrete laplacian operators from lattice hydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, 234(Supplement C):1 – 7, 2013.
- [8] D. Bray. *Cell Movements: From Molecules to Motility*. Garland Pub., 2001.
- [9] Renaud Poincloux, Olivier Collin, Floria Lizárraga, Maryse Romao, Marcel Debray, Matthieu Piel, and Philippe Chavrier. Contractility of the cell rear drives invasion of breast tumor cells in 3d matrigel. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 108(5):1943–1948, 2011.
- [10] E. Tjhung, A. Tiribocchi, D. Marenduzzo, and M. E. Cates. A minimal physical model captures the shapes of crawling cells. *Nat. Commun.*, 6:5420, 2015.
- [11] Hansuli Keller, Alireza Dehghani Zadeh, and Peter Eggli. Localised depletion of polymerised actin at the front of walker carcinosarcoma cells increases the speed of locomotion. *Cell Motility and the Cytoskeleton*, 53(3):189–202, 2002.
- [12] E. Tjhung, D. Marenduzzo, and M. E. Cates. Spontaneous symmetry breaking in active droplets provides a generic route to motility. *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, 109(31):12381–12386, 2012.
- [13] M. L. Blow, S. P. Thampi, and J. M. Yeomans. Biphasic, lyotropic, active nematics. *Phys. Rev. Lett.*, 113:248303, 2014.
- [14] A. N. Beris and B. J. Edwards. *Thermodynamics of Flowing Systems*. Oxford Engineering Science Series. Oxford University Press, 1994.
- [15] E. Tjhung, M. E. Cates, and D. Marenduzzo. Nonequilibrium steady states in polar active fluids. *Soft Matter*, 7:7453–7464, 2011.
- [16] R. Aditi Simha and S. Ramaswamy. Hydrodynamic fluctuations and instabilities in ordered suspensions of self-propelled particles. *Phys. Rev. Lett.*, 89:058101, 2002.

- [17] S. A. Brazovskii. Phase transition of an isotropic system to a nonuniform state. *J. Exp. Theor. Phys.*, 41:85, 1975.