

Dottorando: Digregorio Pasquale
Tutore: Prof. Giuseppe Gonnella



Sistemi di particelle attive

Proprietà stazionarie e cinetiche

Sommario

- Introduzione ai sistemi di particelle attive e obiettivi del progetto di ricerca
- Modello delle dumbbell attive e risultati ottenuti
- Prospettive secondo e terzo anno

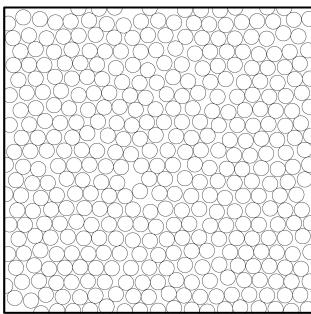
Introduzione ai sistemi di materia attiva

I sistemi di materia attiva sono sistemi **non in equilibrio** i cui costituenti estraggono energia dall'ambiente esterno e la utilizzano per muoversi.

- Questi sistemi mostrano fenomeni peculiari di **aggregazione** assenti nei sistemi passivi
- ***Motility-induced phase separation*** (MIPS)

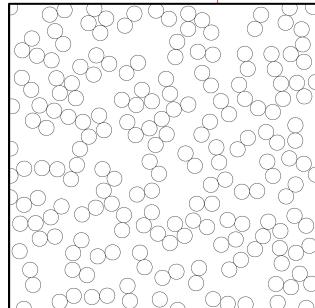
Obiettivi del lavoro

- Studiare lo scenario di tipo **Kosterlitz-Thouless-Halperin-Nelson** (KTHN) per le transizioni di fase del sistema passivo
- Studiare in particolare le caratteristiche della transizione del primo ordine fra liquido e **fase hexatica**
- Osservare l'evoluzione dello scenario in presenza di attività



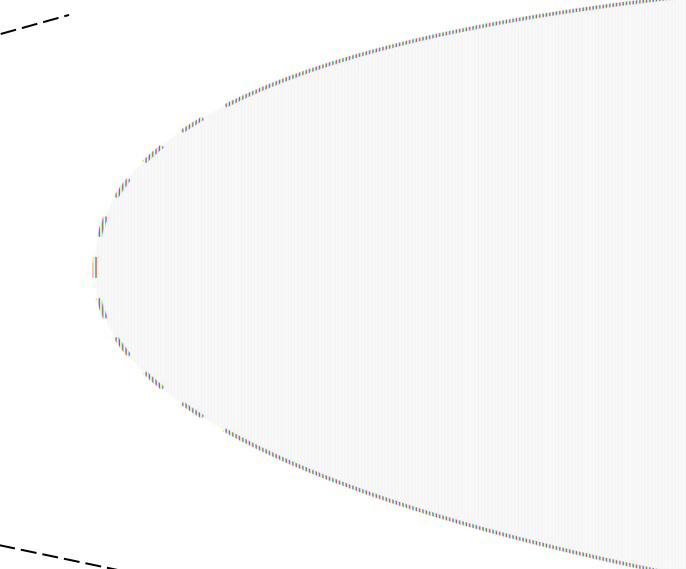
ϕ

?



hogeneous
ie

~ 50



Pe

Obiettivi del lavoro

- Studiare lo scenario di tipo **Kosterlitz-Thouless-Halperin-Nelson** (KTHN) per le transizioni di fase del sistema passivo
 - Studiare in particolare le caratteristiche della transizione del primo ordine fra liquido e **fase hexatica**
 - Osservare l'evoluzione dello scenario in presenza di attività
- Studio complessivo del **diagramma di fase** delle dumbbell

Modello di Active Brownian Dumbbells

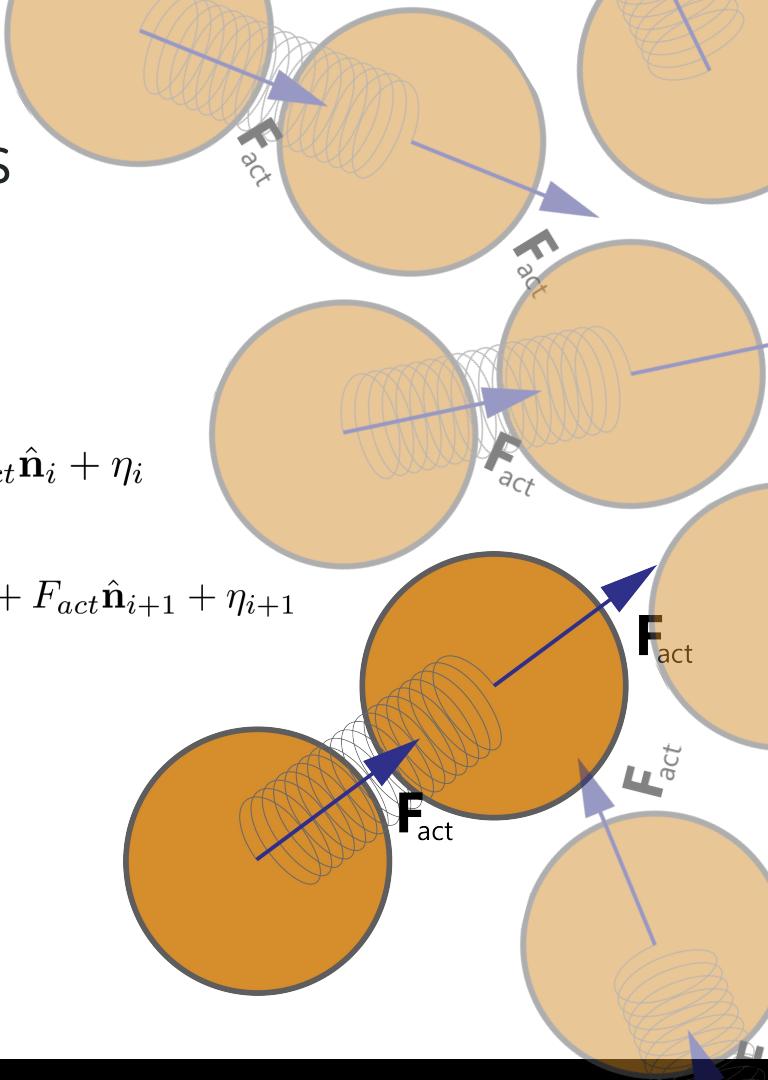
- Equazione di Langevin

$$m\ddot{\vec{r}}_i = -\gamma \dot{\vec{r}}_i - \frac{\partial U_{FENE}}{\partial r_{i,i+1}} \hat{\vec{r}}_{i,i+1} - \sum_{j=0, j \neq i}^{2N} \frac{\partial U_{WCA}}{\partial r_{ij}} \hat{\vec{r}}_{ij} + F_{act} \hat{\mathbf{n}}_i + \eta_i$$

$$m\ddot{\vec{r}}_{i+1} = -\gamma \dot{\vec{r}}_{i+1} + \frac{\partial U_{FENE}}{\partial r_{i,i+1}} \hat{\vec{r}}_{i,i+1} - \sum_{j=0, j \neq i+1}^{2N} \frac{\partial U_{WCA}}{\partial r_{i+1,j}} \hat{\vec{r}}_{i+1,j} + F_{act} \hat{\mathbf{n}}_{i+1} + \eta_{i+1}$$

- Parametri del modello

$$\phi = \frac{2N\pi(\sigma/2)^2}{S}, \quad \text{Pe} = 2F_{act} \frac{\sigma}{(k_B T)}$$

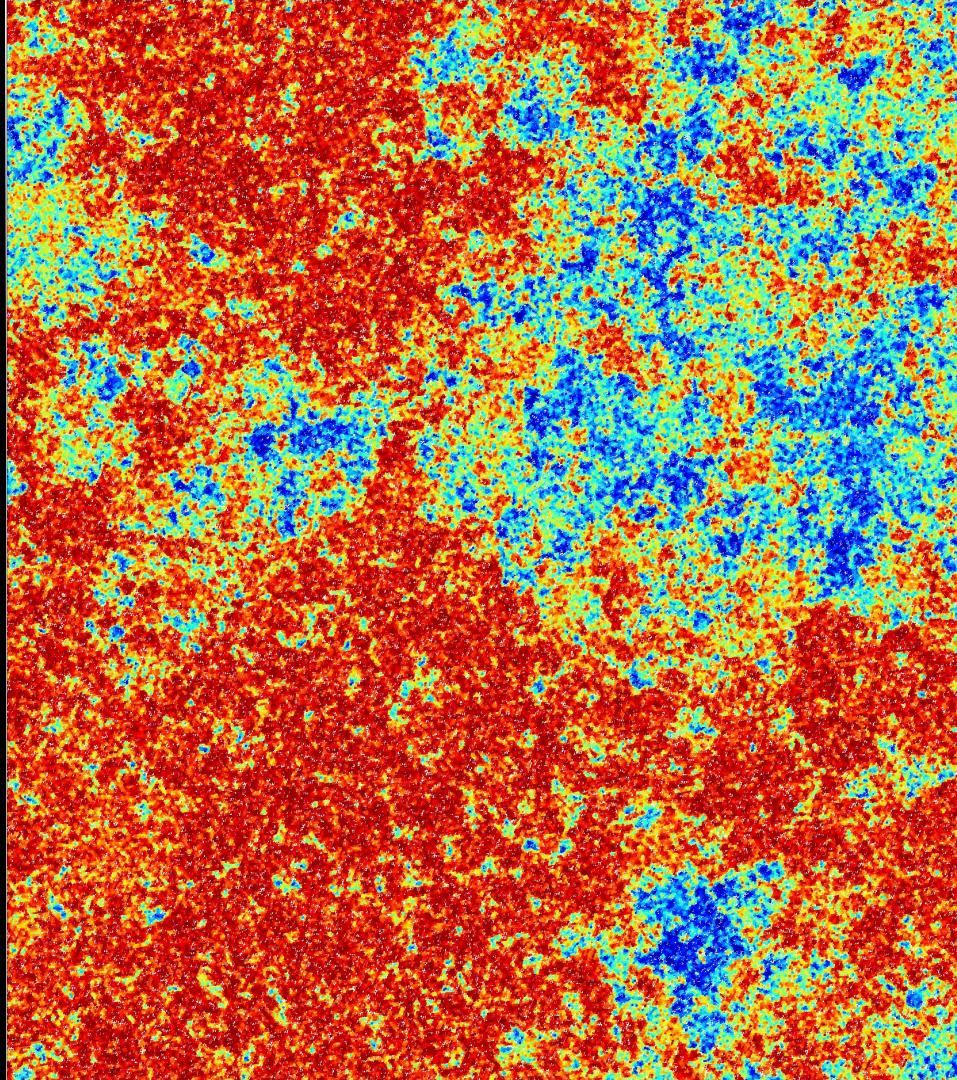
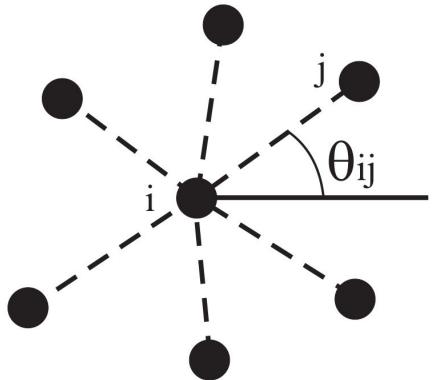


Risultati delle simulazioni

Quantità calcolate

- Parametro hexatico locale

$$\psi_6(\mathbf{r}_i) = \frac{1}{n_i} \sum_{j=1}^{n_i} e^{6\theta_{ij}(\mathbf{r}_i)}$$



Quantità calcolate

- Parametro hexatico globale

$$\Psi_6 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \psi_{6,i}$$

$$\Gamma_6 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \psi_{6,i}$$

- Frazione di superficie locale

$$\phi_i = \frac{S_i^{(bead)}}{S_i^{(cell)}} = \frac{\pi(\sigma/2)^2}{S_i^{(cell)}}$$

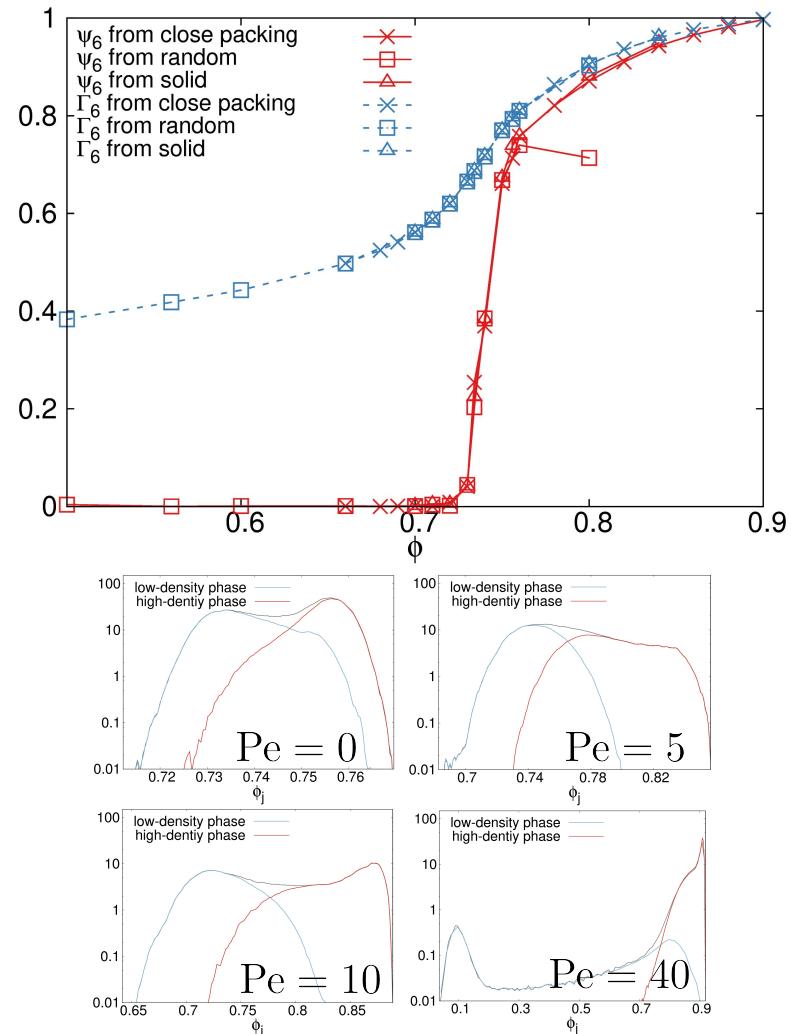
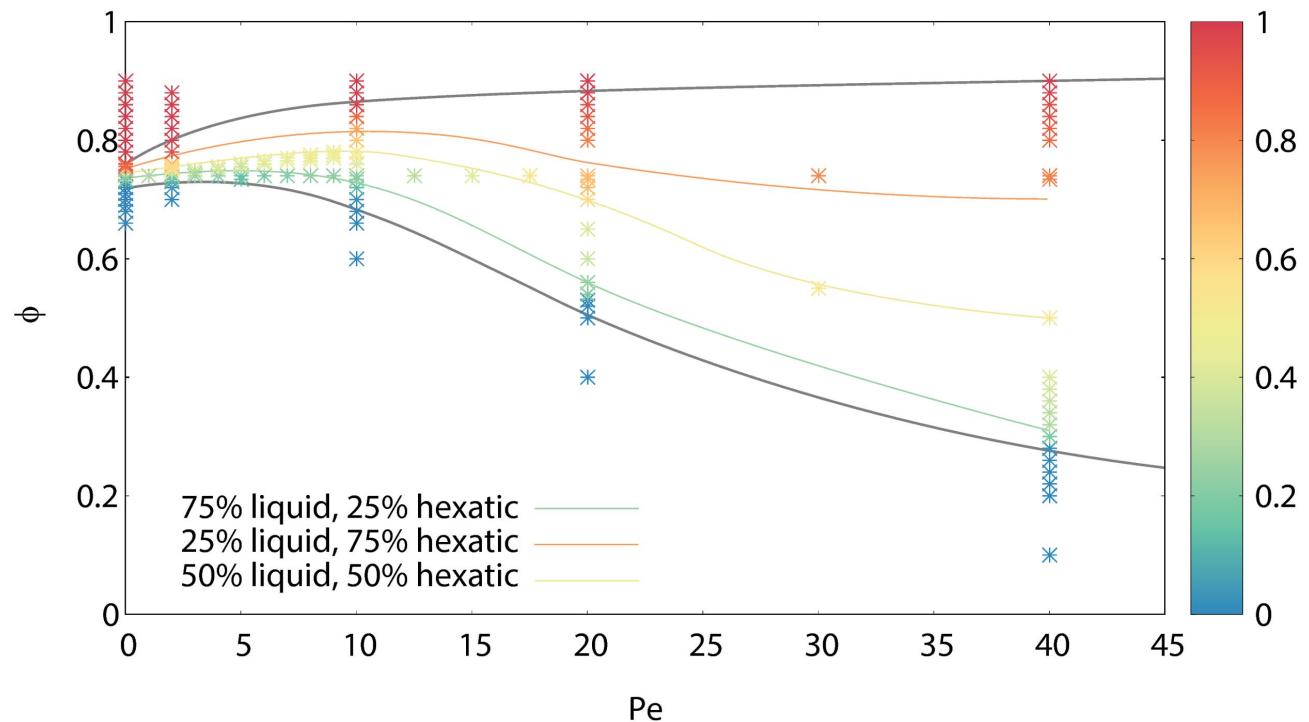


Diagramma di fase



Conclusioni

- Conferma dello scenario KTHN e Krauth-Bernard sulla transizione di fase per le dumbbell passive
- La separazione di fase non avviene soltanto a causa dell'attività
- La regione di coesistenza nel limite passivo è connessa con continuità alla regione della *motility-induced phase separation*

Prospettive: Dischi browniani attivi

- Equazioni di Langevin per i dischi attivi

$$m\ddot{\mathbf{r}}_i(t) = -\gamma\dot{\mathbf{r}}_i(t) + \mathbf{F}_i(t) + \xi_i(t),$$

$$\dot{\theta}_i(t) = \eta_i(t), \quad i = 1, \dots, N$$

- Teorema del viriale e pressione nei dischi

$$P_{ext} = \frac{N\gamma D}{V} - \frac{1}{2dV} \sum_{i,j=1}^N \sum_{\mathbf{n}} \mathbf{F}_{ij}^{(\mathbf{n})}(t) \cdot \mathbf{n}L$$

$$P_{int} = \frac{1}{dV} \sum_{i=1}^N m\dot{\mathbf{r}}_i^2(t) + \frac{1}{2dV} \sum_{i,j=1}^N \sum_{\mathbf{n}} \mathbf{F}_{ij}^{(\mathbf{n})}(t) \cdot (\mathbf{r}_{ij}(t) - \mathbf{n}L)$$

Un parametro in più rispetto alle dumbbell:

Le dumbbell sono un modello più fondamentale per la costruzione di oggetti autopropulsi!

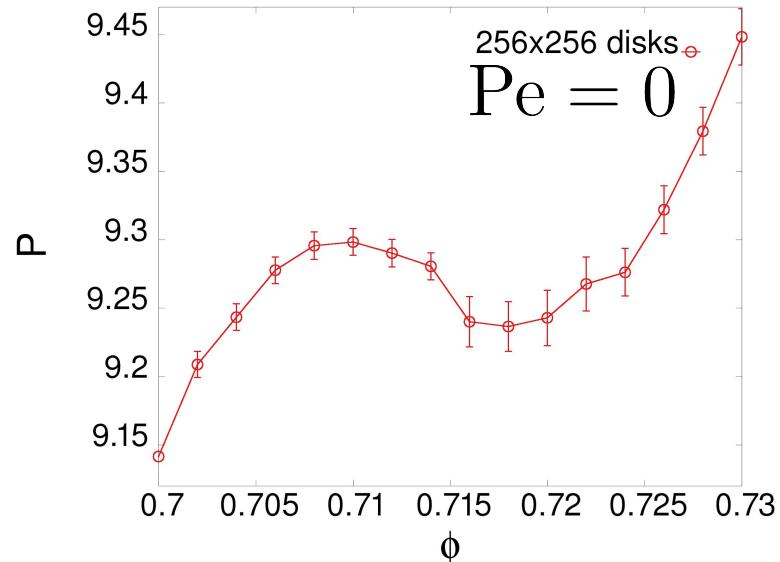
Prospettive: Pressione attiva e Loop di Mayer-Wood

- Teorema del viriale e pressione nei dischi

$$m\langle \dot{\mathbf{r}}_i(t)^2 \rangle = 2dD - \langle \mathbf{F}_i(t) \cdot \mathbf{r}_i(t) \rangle$$

$$P_{ext} = \frac{N\gamma D}{V} - \frac{1}{2dV} \left\langle \sum_{i,j=1}^N \sum_{\mathbf{n}} \mathbf{F}_{ij}^{(\mathbf{n})}(t) \cdot \mathbf{n}L \right\rangle$$

$$P_{int} = \frac{1}{dV} \left\langle \sum_{i=1}^N m\dot{\mathbf{r}}_i^2(t) \right\rangle + \frac{1}{2dV} \left\langle \sum_{i,j=1}^N \sum_{\mathbf{n}} \mathbf{F}_{ij}^{(\mathbf{n})}(t) \cdot (\mathbf{r}_{ij}(t) - \mathbf{n}L) \right\rangle$$



Grazie per l'attenzione
