

Report attività secondo anno  
dottorato di ricerca in Fisica  
XXXII ciclo

Pasquale Digregorio  
Tutore: Prof. Giuseppe Gonnella

October 15, 2018

---

Durante il periodo relativo al secondo anno di corso del dottorato, è proseguito il lavoro di ricerca iniziato durante il primo anno, riguardante l'analisi delle caratteristiche termodinamiche di sistemi di materia attiva attraverso uno studio numerico basato su simulazioni di dinamica molecolare. Nella prima parte di questa relazione si riporta in sintesi una descrizione teorica generale del problema affrontato e un breve riepilogo dei risultati raggiunti nell'ambito del primo anno, sia per ragioni di completezza, sia perché l'attività del secondo anno consiste di una naturale prosecuzione di quanto già fatto e rappresenta un notevole progresso nel contesto dei risultati raggiunti. Il lavoro complessivo dei primi due anni, oltre ad aver consentito di raggiungere traguardi importanti nella comprensione del fenomeno fisico oggetto dello studio, offre la possibilità di porre nuovi interrogativi nella direzione di una descrizione più profonda e generale dei fenomeni di separazione di fase nei sistemi attivi.

Nei sistemi di cosiddetta *materia attiva* i componenti hanno la capacità di estrarre energia dall'ambiente o da un serbatoio interno e di dissiparla per compiere lavoro. Gli esempi più comuni di sistemi attivi appartengono al mondo dei sistemi viventi: in questo caso l'energia dei componenti è un'energia di natura chimica (prodotta da meccanismi biologici interni) e viene utilizzata per compiere normali attività vitali fra le quali la più interessante dal punto di vista di questo lavoro è il movimento. I sistemi attivi sviluppano comportamenti collettivi molto peculiari, strettamente connessi con la motilità dei loro costituenti, e che quindi sono del tutto assenti nei sistemi passivi. Lo studio dei sistemi attivi costituisce da qualche decennio un'attività di grande interesse [1, 2, 3, 4, 5]. Da una parte è interessante analizzare la fenomenologia dei comportamenti collettivi *innescati* dall'attività, che molto spesso conducono a nuovi stadi della materia che non hanno una controparte passiva [29, 30]. D'altra parte, 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. Inoltre, poiché la causa del non-equilibrio risiede al livello dei singoli costituenti e non nelle condizioni al contorno, la quantità di variabili in gioco non permette di fornire una descrizione complessiva dei fenomeni legati all'attività. Tuttavia 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.

Nell'ambito del nostro lavoro sono stati considerati modelli di materia attiva che appartengono alla classe dei cosiddetti modelli di *Active Brownian Particles* (ABP). Questi ultimi sono modelli che, come suggerisce il nome, hanno come oggetto della descrizione i singoli costituenti attivi della materia. La dinamica cui essi sono soggetti ha una componente di tipo stocastico che esprime l'interazione con l'ambiente. La scelta di questo tipo di

---

modellizzazione è adeguata ai fini dell'utilizzo di algoritmi di dinamica molecolare per gli studi numerici effettuati.

La relazione si articolerà come segue:

- descrizione generale del problema delle transizioni di fase in sistemi 2d con interazione a corto raggio
- presentazione dei due modelli di materia attiva oggetto dello studio numerico, dumbbell attive e dischi attivi, e loro caratteristiche principali;
- riepilogo dei risultati ottenuti per il sistema di dumbbell attive: diagramma di fase in relazione alle variabili significative del modello;
- studio numerico dello scenario di transizione di melting per il sistema di dischi con interazione repulsiva a corto raggio e modifiche a questo scenario con l'introduzione dell'attività nel modello. Analisi del diagramma di fase complessivo per i dischi autopropulsi;
- comparazione dei risultati ottenuti per i due sistemi e prospettive future.

Il lavoro numerico è stato effettuato grazie alle risorse di calcolo hpc del consorzio *Cineca*, di *ReCas* e di *Marenostrum* (Barcelona, Spain).

## **Transizione di melting per sistemi con interazione repulsiva a corto raggio in 2D**

Il modello di dischi rigidi in due dimensioni con sola interazione di volume escluso è sicuramente uno dei modelli più elementari e contemporaneamente uno dei più a lungo dibattuti nella fisica statistica. In particolare, risale a poco meno di un secolo fa l'intuizione, da parte di Peierls [10, 11] e Landau [12], che la natura delle transizioni di fase, anche per un sistema così semplice, fosse fortemente dipendente dal numero di dimensioni dello spazio entro cui il modello fosse definito. Grazie a queste intuizioni e ad una prova rigorosa, dovuta a Mermin e Wagner [15], che arrivò qualche decennio più tardi, sappiamo in particolare che questo tipo di sistemi non possono avere ordine posizionale a lungo raggio in dimensione  $d \leq 2$ .

Contemporaneamente, attorno allo stesso modello si sviluppava un dibattito altrettanto interessante a proposito dei risultati ottenuti dalle simulazioni numeriche. Un sistema di dischi rigidi fu infatti il primo sistema ad essere simulato per mezzo dei celebri algoritmi di Markov-chain Monte Carlo [13] e di dinamica molecolare [14]. Mentre nel primo caso non si riscontrava alcun traccia di una transizione di fase al variare della densità del sistema (unico parametro rilevante nel contesto di sistemi con sola interazione da

---

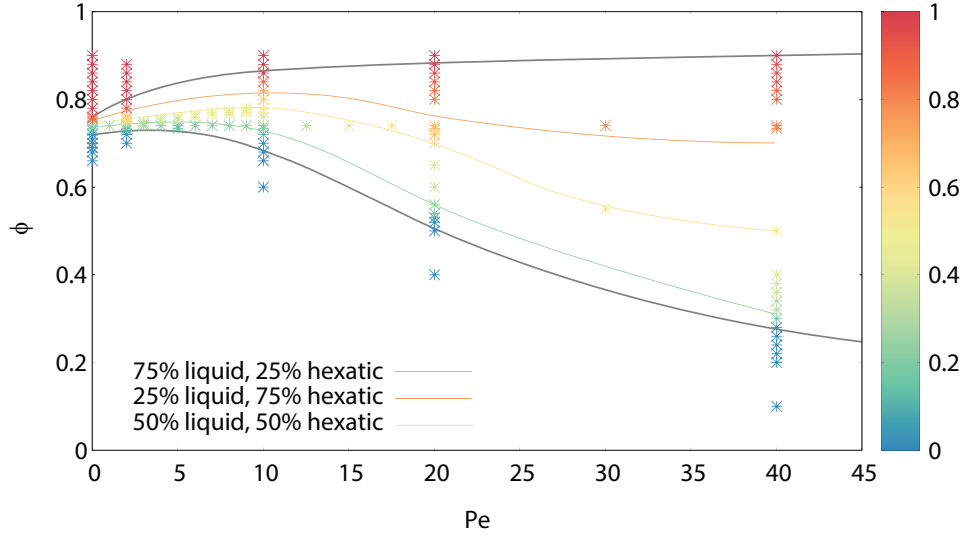
volume escluso), nel secondo invece si sosteneva vi fosse una transizione per i dischi rigidi da una fase liquida disordinata ad una ordinata.

Soltanto più di un decennio dopo, la possibilità di avere una transizione di fase per i dischi rigidi in 2d venne conciliata con la mancanza di ordine cristallino a lungo raggio, per mezzo della teoria dovuta ad Halperin, Nelson e Young [19, 20, 21, 22] per le transizioni di melting in 2d. Questa teoria era ispirata dai lavori di Kosterlitz, Thouless e Berezinskii (BKT) [16, 17, 18] sulle transizioni di fase in modelli di spin interagenti con simmetria continua (il più celebre dei quali è quello sul modello XY), e prevedeva che la fase cristallina per i sistemi hard-disks-like fosse caratterizzata da un ordine posizionale a *quasi lungo raggio*, ma da un ordine di tipo orientazionale a lungo raggio. Si chiarirà nel seguito di questa relazione cosa si intende per ordine di tipo orientazionale e si illustrerà quali quantità è necessario misurare per analizzare questo tipo di sistemi dal punto di vista delle orientazioni. La teoria di Halperin-Nelson inoltre prevedeva che, riducendo la frazione di superficie occupata dal sistema, vi fosse una prima transizione fra la fase cristallina appena descritta ed una fase cosiddetta *hexatica*, caratterizzata da ordine posizionale a corto raggio e ordine orientazionale a quasi lungo raggio. Riducendo la frazione di superficie ulteriormente, una seconda transizione avviene fra la fase hexatica e il liquido senza alcun tipo di ordine.

Solo molto recentemente questo problema, così a lungo dibattuto, ha trovato una soluzione che ha conciliato tutti i risultati teorici e sperimentali. I risultati di simulazioni numeriche molto precise [23] e le osservazioni sperimentali [24] concordano sul fatto che, mentre la natura della transizione fra la fase cristallina e quella hexatica è in accordo con le previsioni della teoria di KTHNY, la transizione fra l'hexatica e il liquido è una transizione del primo ordine, ed è caratterizzata dalla presenza di un intervallo finito di valori di frazione di superficie entro cui il sistema all'equilibrio mostra una coesistenza fra le due fasi.

## **Motility-induced phase separation e transizione KTHN in un sistema di dumbbells**

Nel contesto dello studio delle transizioni di fase di tipo Halperin-Nelson per sistemi di particelle autopropulse, il progetto di dottorato ha avuto inizio con un'analisi del diagramma di fase di un sistema di dumbbell attive [6, 7, 8, 9]. L'obiettivo di questa analisi era quello di mettere in relazione queste transizioni di fase con un fenomeno collettivo indotto dall'attività, presente per questo modello così come in moltissimi modelli di materia attiva, conosciuto con il nome di *Motility Induced Phase Separation* (MIPS), che consiste in una separazione macroscopica del sistema fra una fase gassosa disordinata e una densa e ordinata. Nel modello utilizzato le dumbbell sono



**Figure 1:** Diagramma di fase con le curve a ripartizione costante fra regioni liquide e regioni hexatiche. La curva nera rappresenta i limiti della regione di spazio delle fasi in cui si osserva separazione di fase. In rosso, giallo e verde sono indicate le linee con frazione costante di fase liquida e fase hexatica, con proporzioni riportate in figura. Queste linee sono interpolazioni dei dati delle simulazioni per i casi seguenti:  $Pe = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 12.5, 15, 17.5, 20, 30, 40$ .

molecole biatomiche che interagiscono secondo un'interazione a corto raggio puramente repulsiva e che sono autopropulse essendo soggette ad una forza attiva che agisce nella direzione dell'asse principale di ogni molecola, secondo uno dei due versi possibili fissato arbitrariamente. 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  $\delta$ -correlato. Si riportano di seguito le equazioni del moto di Langevin per le dumbbells:

$$\begin{aligned}
 m\ddot{\mathbf{r}}_i &= -\gamma\dot{\mathbf{r}}_i - \frac{\partial U_{FENE}}{\partial r_{i,i+1}} \hat{\mathbf{r}}_{i,i+1} - \sum_{j=0, j \neq i}^{2N} \frac{\partial U_{WCA}}{\partial r_{ij}} \hat{\mathbf{r}}_{ij} + F_{act}\hat{\mathbf{n}}_i + \boldsymbol{\eta}_i, \\
 m\ddot{\mathbf{r}}_{i+1} &= -\gamma\dot{\mathbf{r}}_{i+1} + \frac{\partial U_{FENE}}{\partial r_{i,i+1}} \hat{\mathbf{r}}_{i,i+1} - \sum_{j=0, j \neq i+1}^{2N} \frac{\partial U_{WCA}}{\partial r_{i+1,j}} \hat{\mathbf{r}}_{i+1,j} + F_{act}\hat{\mathbf{n}}_{i+1} + \boldsymbol{\eta}_{i+1}, \\
 \langle \eta_{i,a}(t) \rangle &= 0, \quad \langle \eta_{i,a}(t) \eta_{i,b}(t') \rangle = 2\gamma k_B T \delta_{ij} \delta_{ab} \delta(t - t') \quad a, b = x, y.
 \end{aligned} \tag{1}$$

Partendo dallo studio delle fasi termodinamiche e delle transizioni fra di esse nel limite di attività nulla, si è quindi esplorato lo spazio delle fasi del sistema rispetto agli unici due parametri significativi:

- 
- la frazione di superficie

$$\phi = 2N \frac{\sigma_d^2}{4S}, \quad (2)$$

dove  $\sigma_d$  è il diametro dei dischi che compongono le molecole e  $S$  la superficie disponibile per le  $N$  molecole del sistema;

- il cosiddetto *numero di Péclet*

$$\text{Pe} = \frac{2F_{act}\sigma_d}{(k_B T)} \quad (3)$$

che esprime un rapporto fra il lavoro della forza attiva e quello del bagno termico, ed rappresenta quindi una misura dell'attività delle molecole.

In particolare, lo studio condotto ha dimostrato che nel limite passivo esiste una transizione di fase del primo ordine fra un liquido e una fase hexatica, caratterizzata dalla presenza di una regione di coesistenza, entro un intervallo finito di frazioni di superficie. Si è evidenziato inoltre che aumentando l'attività la regione di coesistenza nel limite passivo si connette senza discontinuità alla regione della MIPS. In Figura 1 è rappresentato il risultato appena descritto.

Questa analisi, svoltasi quasi totalmente nel primo anno di dottorato, si è conclusa nel secondo anno con la pubblicazione di un lavoro per la rivista *Physical Review Letters* in data 29/12/2017 [25], di cui si allega una copia. Nel merito dello studio del sistema di dumbbell attive, durante il secondo anno si è svolto anche un accurato lavoro di raccolta e revisione del lungo studio portato avanti durante gli anni precedenti dal gruppo di ricerca del Prof. G. Gonnella, in collaborazione con la Prof.ssa L.F. Cugliandolo (Sorbonne Universités, Université Pierre et Marie Curie-Paris VI, Paris, FRANCIA) e il Dott. A. Suma (SISSA - Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati, Trieste e Institute for Computational Molecular Science, Temple University, Philadelphia, USA), in pubblicazione per la rivista *The European Physical Journal E* [34], di cui si allega una copia. Questo lavoro contiene inoltre tutti i risultati ottenuti durante il primo anno di dottorato e nuove analisi, riguardanti principalmente le proprietà cinetiche delle fasi aggregate, condotte in collaborazione con la Dott.ssa I. Petrelli (Dip. di Fisica, Università degli Studi di Bari).

## Il caso di dischi attivi e pressione attiva

Il risultato ottenuto attraverso lo studio di un sistema di dumbbell attive, come illustrato nella sezione precedente, costituisce un'interpretazione decisamente innovativa dei fenomeni di aggregazione indotti dall'attività e

in particolare della motility-induced phase separation. Infatti, nonostante altri lavori recenti propongano studi che si muovono nella stessa direzione, la totalità della letteratura che riguarda la MIPS stabilisce l'esistenza di un valore critico di attività come soglia per l'innescare dei meccanismi che conducono alla separazione di fase (si veda per esempio [31]). I nostri risultati invece, approfondendo il legame della separazione di fase attiva con la coesistenza nel limite passivo, stabiliscono che la regione di coesistenza sia connessa con continuità in tutto lo spazio dei parametri del sistema e che quindi non sia possibile osservare un valore di soglia per l'attività. Questo risultato inoltre è molto coerente con lo scenario della transizione solido-liquido del sistema attivo e del suo limite passivo.

Tuttavia, nonostante il modello delle dumbbell rappresenti un modello molto minimale di materia attiva cui possono ricondursi diversi risultati molto generali, dal punto di vista della motility-induced phase separation si osservano notevoli differenze fra dumbbell attive e dischi passivi. Queste differenze sono ovviamente legate alla forma dei costituenti che, nel caso delle dumbbell, favorisce l'aggregazione e la stabilità dei cluster in presenza di attività. Per questo motivo, al fine di indagare la generalità dei nostri risultati, abbiamo scelto di effettuare uno studio simile nel caso di dischi attivi. Le equazioni del moto di un sistema di dischi browniani attivi sono le seguenti:

$$\begin{aligned} m\ddot{\mathbf{r}}_i(t) &= -\gamma\dot{\mathbf{r}}_i(t) + \mathbf{F}_i(t) + \boldsymbol{\xi}_i(t) \\ \dot{\theta}_i(t) &= \eta_i(t), \quad i = 1, \dots, N \end{aligned} \quad (4)$$

dove

$$\begin{aligned} \langle \xi_{i,a}(t) \rangle &= 0, \quad \langle \xi_{i,a}(t) \xi_{j,b}(t') \rangle = 2\gamma k_B T \delta_{ij} \delta_{ab} \delta(t - t'), \\ \langle \eta_i(t) \rangle &= 0, \quad \langle \eta_i(t) \eta_j(t') \rangle = 2D_\theta \delta_{ij} \delta(t - t'). \end{aligned} \quad (5)$$

Si noti come, per ottenere la dinamica di dischi autopropulsi, vi sia la necessità di introdurre un ulteriore parametro nel modello, poiché i dischi non hanno una direzione privilegiata come le dumbbell. Questo è il motivo per cui si può pensare al modello di dumbbell attive come ad un modello ancora più fondamentale nell'ambito della descrizione di sistemi con componenti autopropulsi. Il lavoro numerico sul sistema di dischi è cominciato lo scorso anno ed è risultato stimolo per l'avvio di una collaborazione con il *Institute of Complex System* della Universitat de Barcelona (SPAIN). Questa collaborazione ci ha permesso innanzitutto di utilizzare, assieme alle risorse computazionali già a nostra disposizione, anche quelle del *Barcelona Super-computing Center (BSC)* e quindi ci ha consentito di esaurire il lavoro computazionale previsto in un tempo molto più breve di quanto stimato. Inoltre l'esperienza del Prof. I. Pagonabarraga e del Dott. D. Levis nell'ambito dello studio numerico dell'equazione di stato per sistemi di dischi autopropulsi [27, 31] ci ha permesso di implementare un'analisi quantitativa dell'equazione di stato per il nostro modello, che è ovviamente molto legata alle transizioni di fase del sistema. È noto infatti che, nell'ambito dei sistemi

passivi, è possibile ottenere informazioni significative sulle caratteristiche della transizione del primo ordine, e quindi sulle proprietà della regione di coesistenza che vi corrisponde, studiando l'andamento non monotono delle isoterme nel diagramma pressione-volume. La non monotonicità delle isoterme è un effetto dovuto alla presenza di un'energia libera di interfaccia (che quindi scompare nel limite termodinamico) quando le due fasi coesistono alla transizione [32].

Una definizione coerente di pressione nel caso dei nostri modelli, che possa essere utilizzata anche in presenza di una forza attiva e che possa restituire risultati significativi nello studio della transizione di fase in cui è coinvolta la motility-induced phase separation è illustrata di seguito. Manipolando una soluzione formale di 4 si ottiene la seguente equazione del viriale:

$$m\langle \dot{\mathbf{r}}_i(t)^2 \rangle = 2dD - \langle \mathbf{F}_i(t) \cdot \mathbf{r}_i(t) \rangle. \quad (6)$$

Nel caso in cui le simulazioni vengono effettuate utilizzando condizioni al bordo periodiche, nel viriale intervengono sia le forze fra le particelle reali, sia quelle fra le immagini periodiche di queste ultime. Per questo si scrive in generale:

$$\mathbf{F}_i = \sum_{j=1}^N \sum_{\mathbf{n}} \mathbf{F}_{ij}^{(\mathbf{n})}, \quad n_a \in \mathbb{Z}. \quad (7)$$

Dall'equazione del viriale 6 si ottiene una forma per la *pressione esterna*

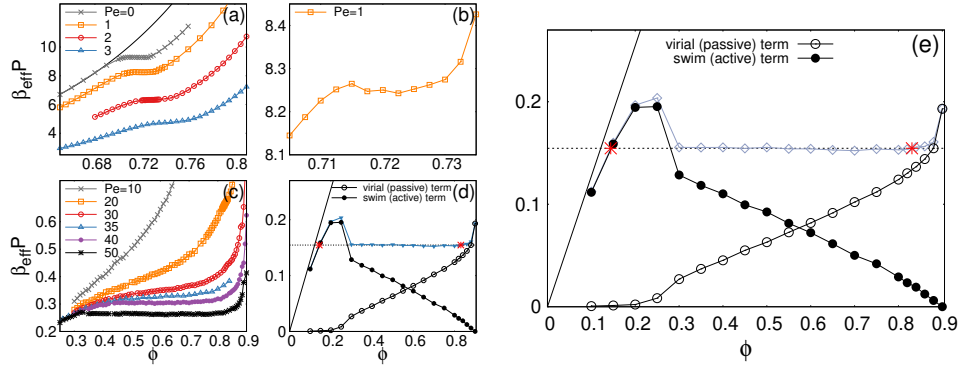
$$P_{ext} = \frac{N\gamma D}{V} - \frac{1}{2dV} \left\langle \sum_{i,j=1}^N \sum_{\mathbf{n}} \mathbf{F}_{ij}^{(\mathbf{n})}(t) \cdot \mathbf{n}L \right\rangle \quad (8)$$

e una forma per la *pressione interna*

$$P_{int} = \frac{1}{dV} \left\langle \sum_{i=1}^N m \dot{\mathbf{r}}_i^2(t) \right\rangle + \frac{1}{2dV} \left\langle \sum_{i,j=1}^N \sum_{\mathbf{n}} \mathbf{F}_{ij}^{(\mathbf{n})}(t) \cdot (\mathbf{r}_{ij}(t) - \mathbf{n}L) \right\rangle. \quad (9)$$

Queste formule ci hanno permesso di riprodurre il loop di Mayer-Wood in corrispondenza della transizione del primo ordine nel sistema di dischi passivi, e di estendere questa analisi in maniera sistematica a tutto lo spazio delle fasi. I risultati ottenuti sono riportati in Fig. 2(a,b,c,d). In Fig. 2(e) si mostra invece il procedimento quantitativo per mezzo del quale è stato possibile stabilire una relazione fra la misura della pressione nel sistema e la densità delle fasi nella regione di coesistenza, anche fuori dall'equilibrio termodinamico. Si può mostrare infatti che, nel caso in cui vi è separazione di fase, il plateau della pressione corrisponde proprio alla pressione di coesistenza, e quindi l'intersezione di questo con i due branch delle sue fasi pure identifica le densità di coesistenza sulla curva spinodale del sistema.





**Figure 2:** Equazione di stato per i dischi attivi. (a) Misure della pressione nel regime di bassa attività. La linea continua rappresenta un'espressione analitica del branch di bassa densità della pressione nel caso passivo. (b) Dettaglio dell'equazione di stato per  $Pe = 1$  nella regione di coesistenza. (c) Equazione di stato nel regime di attività intermedia. (d,e) Contributo di *swim* (simboli pieni) e contributo di interazione (simboli vuoti) alla pressione nel caso di  $Pe = 100$ . I simboli rossi indicano le densità delle singole fasi nella coesistenza.

Oltre allo studio della coesistenza, si è condotta anche un'analisi accurata dello schema di transizioni di fase di tipo Halperin-Nelson entro un ampio range dello spazio delle fasi. I risultati ottenuti sono riassunti nel diagramma di fase mostrato in Fig. 3. Come si può osservare, lo scenario presente nel limite passivo in cui, come descritto precedentemente, la transizione solido-hexatico è di tipo BKT mentre quella hexatico-liquido è una transizione del primo ordine, sopravvive entro un regime di piccole attività. Aumentando ancora la forza attiva si osserva un crossover da questo scenario ad uno in cui non vi è più alcuna regione di coesistenza fra liquido ed hexatico ma sopravvive una fase hexatica stabile e una fase solida.

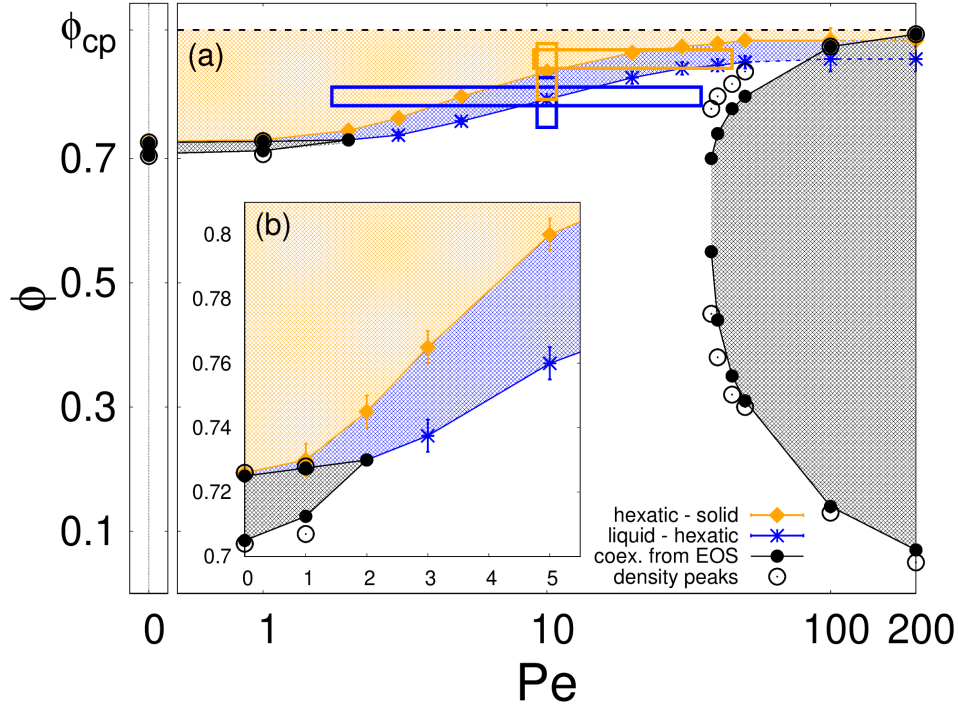
L'assenza di una regione di coesistenza è resa evidente dal fatto che l'equazione di stato diventa monotona e non vi è alcun loop di Mayer-Wood. La presenza di tre fasi stabili invece si evince dallo studio delle funzioni di correlazione orientazionali e posizionali, mostrate in Fig. 4. La fase hexatica è infatti caratterizzata da ordine posizionale di tipo *quasi-long range* che corrisponde ad un decadimento di tipo algebrico per la correlazione

$$g_6(r = |\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k|) = \langle \psi_6(\mathbf{r}_j) \psi_6(\mathbf{r}_k) \rangle / \langle \psi_6^2(\mathbf{r}_j) \rangle, \quad (10)$$

di  $\psi_{6j}$ , che è il parametro d'ordine hexatico locale ed è definito come segue:

$$\psi_6(\mathbf{r}_j) = N_j^{-1} \sum_{k=1}^{N_j} e^{i6\theta_{jk}} \quad (11)$$

dove con  $\theta_{jk}$  si sono indicate le orientazioni degli  $N_j$  primi vicini del  $j$ -esimo disco. La fase solida è invece caratterizzata da un ordine traslazionale di tipo *quasi-long range*, che corrisponde ad un decadimento algebrico della



**Figure 3:** Diagramma di fase per i dischi attivi nello spazio dei parametri  $Pe$ - $\phi$ . All'interno delle regioni colorate di grigio c'è coesistenza, in quelle colorate di blu il sistema è nella fase hexatica, in quella colorata in giallo il sistema è nella fase solida.

funzione di correlazione traslazionale

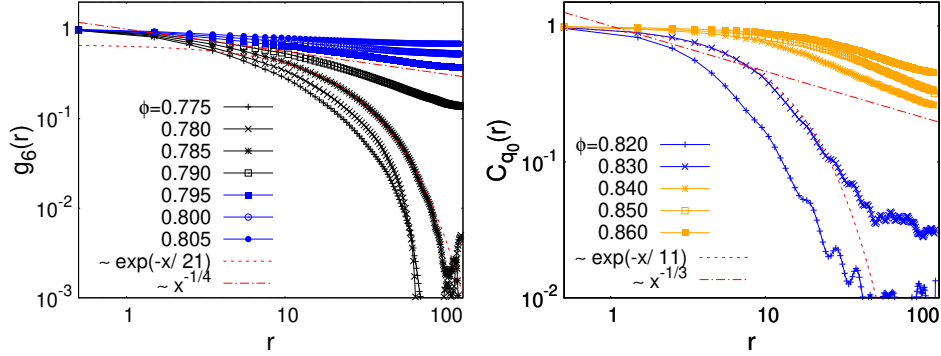
$$C_{q_0}(r) = \langle e^{iq_0 \cdot (r_i - r_j)} \rangle \quad (12)$$

in corrispondenza del primo picco  $q_0$  nello spazio reciproco.

Una discussione dettagliata su questi risultati è presente all'interno dell'articolo pubblicato per la rivista *Physical Review Letters* in data 31/08/2018 [33], di cui si allega una copia alla presente relazione.

## Conclusioni e prospettive

Come anticipato nell'introduzione a questa relazione, i risultati ottenuti applicando lo stesso tipo di analisi ai due sistemi di particelle autopropulse sono molto diversi fra loro. Nel sistema di dumbbell attive si osserva una separazione di fase macroscopica fra la fase liquida e quella hexatica per ogni valore finito di attività. Inoltre, al variare dell'attività, non vi sono discontinuità nella posizione della regione di coesistenza. Per i dischi si osserva invece che, nonostante la coesistenza fra liquido e hexatico è preservata per piccoli valori di attività, essa scompare per un ampio range



**Figure 4:** (a) Funzioni di correlazione orientazionale a fissato  $Pe=10$  per diversi valori di frazione di superficie, in corrispondenza della transizione liquido-hexatico. (b) Funzioni di correlazione traslazionale a fissato  $Pe=10$  per diversi valori di frazione di superficie, in corrispondenza della transizione hexatico-solido.

di valori di forza attiva, prima dell'insorgere della MIPS. Inoltre si osserva la sopravvivenza di tutte le fasi del sistema (liquida, hexatica, solida) per ogni valore di attività considerato.

Le differenze riscontrate per i suoi modelli, che pure hanno caratteristiche molto simili dal punto di vista della geometria delle loro fasi ordinate, pongono ulteriori interrogativi sulle caratteristiche rilevanti sia delle transizioni di fase dei sistemi bidimensionali in equilibrio termodinamico, sia dei fenomeni collettivi indotti dalla attività e sulla loro dipendenza dalla forma dei costituenti. Il lavoro del prossimo anno procederà quindi verso un tentativo di comprendere più a fondo da una parte le caratteristiche strutturali, meccaniche e dinamiche delle fasi attive di cui si conosce ancora molto poco, e dall'altra l'importanza della forma dei costituenti del sistema nella costituzione delle stesse fasi.

## Conferenze, scuole e collaborazioni esterne

- **TAU-ESPCI International Winter School on "Active Matter"**, Jan 28th - Feb 1st 2018, Tel-Aviv (ISRAEL).  
Invited speakers: Roy Beck (Tel Aviv University, Israel), Éric Clément (ESPCI, Paris, France), Olivier Dauchot (ESPCI, Paris, France), Vincent Démery (ESPCI, Paris, France), Luca Giomi (Leiden University, Netherlands), David Hu (Georgia Institute of Technology, USA), Jean-François Joanny (ESPCI, Paris, France), Yoav Lahini (Tel Aviv University, Israel), Alexander Leshansky (Technion, Israel), Ayelet Lesman (Tel Aviv University, Israel), Yael Roichman (Tel Aviv University, Israel), Olivia du Roure (ESPCI, Paris, France)
- **International Conference on Computer Simulation in Physics and**

---

**beyond**, September 24-27, 2018, Moscow (FEDERAZIONE RUSSIA).  
Presentazione di un contributo orale dal titolo "Melting transition and phase diagram of 2d active hard disks and dumbbells"

- **Erice Workshop on Self-Organization in Active Matter: from Colloids to Cells**, Oct 1-4, 2018, The Ettore Majorana Foundation and Centre for Scientific Culture, Erice (ITALY).  
Presentazione di un contributo orale dal titolo "Phase Coexistence in Two-dimensional Passive and Active Dumbbell Systems"
- Nell'ambito della collaborazione con il Prof. I. Pagonabarraga ed il Dott. D. Levis, di cui si è illustrato il contenuto scientifico e i risultati raggiunti all'interno della presente relazione, ho trascorso un periodo presso la sede del *Institute of Complex System* della Universitat de Barcelona (SPAIN) dal 9 Novembre al 15 Dicembre 2017.
- Ancora nell'ambito della stessa collaborazione, al fine di concludere la scrittura dell'articolo scientifico frutto della stessa, ho trascorso un altro periodo presso la sede del *Institute of Complex System* della Universitat de Barcelona (SPAIN) dal 16 Aprile al 5 Maggio 2018.
- Nell'ambito della collaborazione con la Prof.ssa L.F. Cugliandolo, con il fine di discutere della prosecuzione del lavoro di studio dei sistemi di particelle autopropulse, ho trascorso un periodo presso la sede del *Laboratoire de Physique Théorique et Hautes Energies, CNRS UMR 7589 Sorbonne Universités, Université Pierre et Marie Curie-Paris VI*, Paris (FRANCIA) dal 8 al 13 Ottobre 2018.

## Lista delle pubblicazioni

- L.F. Cugliandolo, P. Digregorio, G. Gonnella, A. Suma, *Phase Coexistence in Two-Dimensional Passive and Active Dumbbell Systems*, Phys. Rev. Lett., **119**, (2017)
- G. Negro, L.N. Carenza, P. Digregorio, G. Gonnella, A. Lamura, *Morphology and flow patterns in highly asymmetric active emulsions*, Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, **503**, (2018)
- P. Digregorio, D. Levis, A. Suma, L.F. Cugliandolo, G. Gonnella, I. Pagonabarraga, *Full Phase Diagram of Active Brownian Disks: From Melting to Motility-Induced Phase Separation*, Phys. Rev. Lett., **121**, (2018)
- I. Petrelli, P. Digregorio, L.F. Cugliandolo, G. Gonnella, A. Suma, *Active dumbbells: dynamics and morphology in the coexisting region*, arXiv, **1805.06683** (2018). Accepted on EPJE

---

# Bibliography

- [1] Ramaswamy S., Annual Review of Condensed Matter Physics **1** (2010)
- [2] Marchetti M.C., *et al.*, Rev. Mod. Phys. **85**, 1143–1189 (2013)
- [3] Vicsek T., Czirók A., Ben-Jacob E., *et al.*, Phys. Rev. Lett. **75**, 1226–1229 (1995)
- [4] Toner J., Tu Y., Ramaswamy S., Annals of Physics **318**, 170-244 (2005)
- [5] Vicsek T., Zafeiris A., Physics Reports **517**, 3–4 (2012)
- [6] Suma, A. and Gonnella, G. and Laghezza, G. and Lamura, A. and Mossa, A. and Cugliandolo, L. F., Phys. Rev. E **90**, 052130 (2014)
- [7] Suma, A. and Gonnella, G. and Marenduzzo, D. and Orlandini, E., EPL (Europhysics Letters) **108**, 56004 (2014)
- [8] Cugliandolo, L. F. and Gonnella, G. and Suma, A., Phys. Rev. E **91**, 062124 (2015)
- [9] Gonnella, G. and Lamura, A. and Suma, A., International Journal of Modern Physics C, **25**, 1441004, (2014)
- [10] Peierls R., Helvetica Physica Acta, **7**, suppl. 2, 81 (1934)
- [11] Peierls R., Annales de l’institut Henri Poincaré, **5**, 177 (1935)
- [12] Landau L. D., Zur Theorie der Phasenumwandlungen II. Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion, **11**, 545 (1937)
- [13] N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth, A.H. Teller , E. Teller, J.Chem.Phys. **21** (1953)
- [14] Alder B. J., Wainwright T. E., Phys. Rev., **127**, (1962)
- [15] Mermin N. D., Wagner H., Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966)
- [16] Kosterlitz J. M., Thouless D. J., J. Phys. C **6**, 1181 (1973)

- [17] Kosterlitz J. M., Thouless D. J., Progress in Low Temperature Physics, Vol. VII-B, p. 373 (1978)
- [18] Berezinskii V. L., Sov. Phys. JETP, **32**, 493 (1971)
- [19] Halperin B. I., Nelson D. R., Phys. Rev. Lett. **41**, 121 (1978)
- [20] Nelson D. R., Halperin B. I. Phys. Rev. B **19**, 2457 (1979)
- [21] Nelson D. R., Halperin B. I. Phys. Rev. B **21**, 5312 (1980)
- [22] Young A. P. Phys. Rev. B **19**, 1855 (1979)
- [23] Bernard, E. P., Krauth W., Phys. Rev. Lett. **107**, 155704 (2011)
- [24] Thorneywork A. L., Abbott J. L., Aarts D. G. A. L., Dullens R. P. A., Phys. Rev. Lett., **118**, 15 (2017)
- [25] Cugliandolo L. F., Digregorio P, Gonnella G., Suma A., Phys. Rev. Lett. **119**, 268002 (2017)
- [26] Solon A. P., Stenhammar J., Cates M. E., Kafri Y., Tailleur J., **arXiv** (2016)
- [27] Ginot F., Theurkauff I., Levis D., Ybert C., Bocquet L., Berthier L., Cottin-Bizonne C., Phys. Rev. X **5**, 011004 (2015)
- [28] Suma A., Cugliandolo L. F., Gonnella G., Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment **2016**, 054029 (2016)
- [29] Nguyen Thu Lam K., Schindler M., Dauchot O., New Journal of Physics **17**, 113056 (2015)
- [30] Nguyen Thu Lam K., Schindler M., Dauchot O., Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment **2015**, 10017 (2015)
- [31] Levis D., Codina J., Pagonabarraga I., Soft Matter, (2017)
- [32] Mayer J.E., Wood W.W., J. Chem. Phys. **42**, 4268 (1965)
- [33] Digregorio P., Levis D., Suma A., Cugliandolo L. F., Gonnella G., Pagonabarraga I., Phys. Rev. Lett. **121**, 098003 (2018)
- [34] Petrelli I., Digregorio P., Cugliandolo L. F., Gonnella G., Suma A. **arXiv:1805.06683** (2018)

# Phase Coexistence in Two-Dimensional Passive and Active Dumbbell Systems

Leticia F. Cugliandolo,<sup>1,2,\*</sup> Pasquale Digregorio,<sup>3</sup> Giuseppe Gonnella,<sup>3</sup> and Antonio Suma<sup>4</sup>

<sup>1</sup>*Sorbonne Universités, Université Pierre et Marie Curie–Paris VI,*

*Laboratoire de Physique Théorique et Hautes Énergies, 4 Place Jussieu, 75252 Paris Cedex 05, France*

<sup>2</sup>*Kavli Institute for Theoretical Physics, University of California at Santa Barbara, Santa Barbara, California 93106, USA*

<sup>3</sup>*Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Bari and INFN, Sezione di Bari, via Amendola 173, Bari I-70126, Italy*

<sup>4</sup>*SISSA–Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati, Via Bonomea 265, 34136 Trieste, Italy*

(Received 28 November 2016; revised manuscript received 13 June 2017; published 29 December 2017)

We demonstrate that there is a macroscopic coexistence between regions with hexatic order and regions in the liquid or gas phase over a finite interval of packing fractions in active dumbbell systems with repulsive power-law interactions in two dimensions. In the passive limit, this interval remains finite, similar to what has been found in two-dimensional systems of hard and soft disks. We did not find discontinuous behavior upon increasing activity from the passive limit.

DOI: 10.1103/PhysRevLett.119.268002

Interest in the behavior of 2D (and also 3D) macroscopic systems under continuous and homogeneous input of energy has been boosted by their connection with active matter [1–8]. This new type of matter can be realized in various ways. Systems of self-propelled particles constitute an important subclass, with natural examples such as suspensions of bacteria [9–11] and artificial ones made of Janus [12–14] or asymmetric granular [15] particles. In all these cases, the constituents consume internal or environmental energy and use it to displace. Very rich collective motion arises under these out of equilibrium conditions, and liquid, solid and segregated phases are observed [16–21]. In particular, in active Brownian particle systems, segregation, also called motility induced phase separation (MIPS), was claimed to occur only above a large critical threshold of the activity [19,22–25].

Besides, the behavior of passive disks is a classic theme of study in soft condensed matter. Recently, Bernard and Krauth argued that 2D melting of hard and soft repulsive disks occurs in two steps, with a continuous Berezinskii-Kosterlitz-Thouless transition between the solid and hexatic phases and a first-order transition between the hexatic and liquid phases, when density or packing fraction are decreased at constant temperature [26]. The hexatic phase has no positional order but quasi-long-range orientational order, while the solid phase has quasi-long-range positional and proper long-range orientational order. Liquid and quasi-long-range orientationally ordered zones coexist close to the liquid phase, within a narrow interval of packing fractions.

In this Letter, we study the phase diagram of a two-dimensional model of active purely repulsive dumbbells and show that it does not comply with the MIPS scenario. We prove that the phase separation found at high values of the activity continuously links, in the passive limit, to a finite coexistence region as the one predicted by Bernard and Krauth for 2D melting of hard and soft repulsive

disks [26]. There is no nonvanishing critical value of activity needed for segregation in this system, making the popular MIPS scenario at least not general.

The reason for choosing a dumbbell model is that many natural swimmers have an elongated shape, and a hard dimer is the simplest approximation of such anisotropy [27–29]. This geometry favors aggregation at intermediate densities and sufficiently strong activation [23,30–35]. In this limit, the evolution of an initial homogeneous phase occurs by nucleation and growth of clusters [31] and the system phase separates. At the other extreme, for sufficiently low densities and not so strong activity, particles form only very small clusters that do not coalesce [32,36,37]. The results in this Letter complement these two extreme limits. In the absence of activity, we confirm the

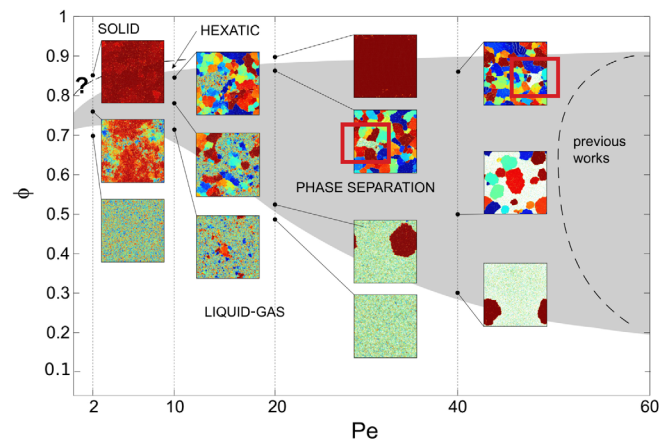


FIG. 1. The phase diagram and some representative local hexatic parameter maps. Note the red rectangular contours in the boxes at  $Pe = 20$  and  $Pe = 40$  that surround the disordered regions. The way in which the phase boundaries are determined is explained in the text and more details are given in the Supplemental Material [40].



# Morphology and flow patterns in highly asymmetric active emulsions

G. Negro<sup>a,\*</sup>, L.N. Carenza<sup>a</sup>, P. Digregorio<sup>a</sup>, G. Gonnella<sup>a</sup>, A. Lamura<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Dipartimento di Fisica, Università degli studi di Bari and INFN, Sezione di Bari, Via Amendola 173, 70126 Bari, Italy

<sup>b</sup> Istituto Applicazioni Calcolo, CNR, Via Amendola 122/D, 70126 Bari, Italy

## HIGHLIGHTS

- The morphology and the dynamics of an emulsion made of a polar active gel and an isotropic passive fluid is studied.
- We focus on the case of a highly off-symmetric ratio between the active and passive components.
- In absence of activity the stationary state is characterized by an hexatically ordered array of droplets.
- Small amount of activity favors the elimination of defects in the array of droplets.
- Rising activity new and interesting morphologies arises depending on whether the system is contractile or extensile.

## ARTICLE INFO

### Article history:

Received 4 November 2017

Received in revised form 16 February 2018

Available online 9 March 2018

## ABSTRACT

We investigate numerically, by a hybrid lattice Boltzmann method, the morphology and the dynamics of an emulsion made of a polar active gel, contractile or extensile, and an isotropic passive fluid. We focus on the case of a highly off-symmetric ratio between the active and passive components. In absence of any activity we observe an hexatic-ordered droplets phase, with some defects in the layout. We study how the morphology of the system is affected by activity both in the contractile and extensile case. In the extensile case a small amount of activity favors the elimination of defects in the array of droplets, while at higher activities, first aster-like rotating droplets appear, and then a disordered pattern occurs. In the contractile case, at sufficiently high values of activity, elongated structures are formed. Energy and enstrophy behavior mark the transitions between the different regimes.

© 2018 Elsevier B.V. All rights reserved.

## 1. Introduction

The capability of different systems of using energy taken from their environment to go out of thermal equilibrium, gives rise to a wealth of behaviors [1]. They range from swarming, self-assembly, spontaneous flows to other collective properties [2–5]. This boosted a deep interest in addressing their study in order to look for possible new physics, explore common features between different systems, and develop new strategies in designing synthetic devices and materials with smart properties.

Self-propelled objects represent a remarkable example of active matter. Starting from the seminal model of Vicsek [6] for swarms, it was later realized that common features can be traced in several systems at different scales promoting the introduction of statistical models able to describe such behaviors [7–10]. Another example of active matter, sharing

\* Corresponding author.

E-mail addresses: [giuseppe.negro@ba.infn.it](mailto:giuseppe.negro@ba.infn.it) (G. Negro), [l.carenza@studenti.uniba.it](mailto:l.carenza@studenti.uniba.it) (L.N. Carenza), [pasquale.digregorio@ba.infn.it](mailto:pasquale.digregorio@ba.infn.it) (P. Digregorio), [g.gonnella@ba.infn.it](mailto:g.gonnella@ba.infn.it) (G. Gonnella), [a.lamura@ba.iac.cnr.it](mailto:a.lamura@ba.iac.cnr.it) (A. Lamura).



# Full Phase Diagram of Active Brownian Disks: From Melting to Motility-Induced Phase Separation

Pasquale Digregorio,<sup>1</sup> Demian Levis,<sup>2,3,\*</sup> Antonio Suma,<sup>4,5</sup> Leticia F. Cugliandolo,<sup>6</sup>

Giuseppe Gonnella,<sup>1</sup> and Ignacio Pagonabarraga<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup>*Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Bari and INFN, Sezione di Bari, via Amendola 173, Bari, I-70126, Italy*

<sup>2</sup>*CECAM Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, Batochimie, Avenue Forel 2, 1015 Lausanne, Switzerland*

<sup>3</sup>*UBICS University of Barcelona Institute of Complex Systems, Martí i Franquès 1, E08028 Barcelona, Spain*

<sup>4</sup>*SISSA—Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati, Via Bonomea 265, 34136 Trieste, Italy*

<sup>5</sup>*Institute for Computational Molecular Science, Temple University, Philadelphia, Pennsylvania 19122, USA*

<sup>6</sup>*Sorbonne Université, Laboratoire de Physique Théorique et Hautes Energies, CNRS UMR 7589, 4 Place Jussieu, 75252 Paris Cedex 05, France*



(Received 25 May 2018; published 31 August 2018)

We establish the complete phase diagram of self-propelled hard disks in two spatial dimensions from the analysis of the equation of state and the statistics of local order parameters. The equilibrium melting scenario is maintained at small activities, with coexistence between active liquid and hexatic order, followed by a proper hexatic phase, and a further transition to an active solid. As activity increases, the emergence of hexatic and solid order is shifted towards higher densities. Above a critical activity and for a certain range of packing fractions, the system undergoes motility-induced phase separation and demixes into low and high density phases; the latter can be either disordered (liquid) or ordered (hexatic or solid) depending on the activity.

DOI: [10.1103/PhysRevLett.121.098003](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.121.098003)

Active materials are out-of-equilibrium systems in which the dynamics of their elements break detailed balance [1]. Examples can be found in living systems, e.g., the collective motion of large animal groups [2,3], bacteria swarming [4], and the formation of traveling fronts of actin filaments [5], as well as in synthetic ones, like self-propelled grains [6] or self-catalytic colloidal suspensions [7]. Despite such diversity, the emergence of activity-induced collective behavior is captured by minimal models that yield accurate descriptions and shed light on their universal character. A key example is the active Brownian particles (ABP) model, which considers spherical self-propelled particles with only excluded volume interactions [8–13]. A hallmark of active particle systems is that at high enough density and activity, self-propulsion triggers a motility-induced phase separation (MIPS) into a low-density gas in coexistence with a high-density drop [10–17], resembling the equilibrium liquid-gas transition but in the absence of cohesive forces and without a thermodynamic support [18,19].

Although active particles can in principle move in three dimensions (3D), in most experimental set-ups they are confined to two dimensions (2D). Most studies of 2D ABP focused on MIPS, and they have therefore been largely restricted to intermediate densities [10–19]. In contrast, their solidification, or melting, has received little attention [20–22], and the connection between the high Pe behavior

and the equilibrium physics as  $Pe \rightarrow 0$  has been, surprisingly, disregarded. In particular, the fate of 2D melting (with its intermediate hexatic phase) under active forces, has been investigated for dumbbell systems [23], where MIPS is continuously connected to the passive liquid-hexatic coexistence. This result shed new light on the very nature of MIPS, and it showed the importance of exploring the full phase diagram at high densities. In this Letter, we address this issue in the paradigmatic ABP model.

Melting in 2D is a fundamental problem that has remained elusive despite decades of intensive research [24,25]. The transition was initially claimed to be first order [26] and later argued to follow a different scenario, with an intermediate hexatic phase, separated by continuous transitions mediated by the unbinding of defects [27–29]. More recently, numerical simulations [30–32], followed by experiments on colloidal monolayers [33], clarified the picture. They indicate that melting of passive hard disks takes place in two steps: as the packing fraction is increased, a first-order transition between the liquid and hexatic phases occurs, followed by a continuous Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) transition between the hexatic and the solid. The hexatic phase exhibits quasi-long-range orientational order and short-range positional one, while the solid phase has quasi-long-range positional and long-range orientational order. Liquid and hexatic phases coexist close to the liquid phase, within a narrow interval of packing fractions.

# Active dumbbells: dynamics and morphology in the coexisting region

Isabella Petrelli<sup>1</sup>, Pasquale Digregorio<sup>1</sup>, Leticia F. Cugliandolo<sup>2</sup>, Giuseppe Gonnella<sup>1</sup>, Antonio Suma<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Bari and INFN, Sezione di Bari, via Amendola 173, Bari, I-70126, Italy

<sup>2</sup> Sorbonne Université, Laboratoire de Physique Théorique et Hautes Energies, CNRS UMR 7589, 4 Place Jussieu, 75252 Paris Cedex 05, France

<sup>3</sup> SISSA - Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati, Via Bonomea 265, 34136 Trieste, Italy and Institute for Computational Molecular Science, College of Science and Technology, Temple University, Philadelphia, PA 19122, USA

Received: date / Revised version: date

**Abstract.** With the help of molecular dynamics simulations we study an ensemble of active dumbbells in purely repulsive interaction. We derive the phase diagram in the density-activity plane and we characterise the various phases with liquid, hexatic and solid character. The analysis of the structural and dynamical properties, such as enstrophy, mean square displacement, polarisation, and correlation functions, shows the continuous character of liquid and hexatic phases in the coexisting region when the activity is increased starting from the passive limit.

**PACS.** 64.75.Xc Phase separation and segregation in colloidal systems – 47.63.Gd Swimming microorganisms – 87.18.Hf Spatiotemporal pattern formation in cellular populations – 66.10.C Diffusion and thermal diffusion

## 1 Introduction

We open this article with a description of a number of noticeable facts of active, but also passive, matter that have motivated our studies of an ensemble of self-propelled dumbbells in purely repulsive interaction confined to move in a two dimensional space.

### 1.1 Non-equilibrium dynamics under local bulk energy injection

*Active materials* are many-body systems composed of self-driven units that convert stored or ambient free energy into systematic movement. They are, typically, living systems, and the size of their elements range over many scales, from microorganisms or cells to birds or fish. Artificial realisations, sometimes easier to control in experiments, have also been designed and include self-propelled colloids [1, 2, 3, 4], nanorods [5], droplets [6, 7] and active gels made by cytoskeleton extracts in presence of molecular motors [8, 9] as well as vibrated mechanical walkers [10, 11, 12, 13].

From the point of view of physics, active materials are novel and very interesting objects of study. They are maintained out of equilibrium by the continuous injection of energy at a microscopic scale within the samples. The microscopic dynamics explicitly break detailed balance and, in consequence, no equilibrium theorem can be used as a

guideline to understand the macroscopic behaviour. Nevertheless, since the consumed energy is partly dissipated into the medium, different non-equilibrium steady states establish and they are still amenable to be studied with physics tools. Phase transitions between such steady states are possible even in low dimensional cases. The full characterisation of the dynamic phase diagram and the various phases is one of the issues that attracts physicists' attention.

### 1.2 Density, form, and dimensionality

The dynamics of systems as seemingly unrelated as flocks of birds, swarms of bacteria and vibrated rods share many features in common and, up to a certain extent, they can be treated within the common theoretical framework of active fluids or suspensions [14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24]. Different approaches aimed at a coarse-grained description based on general symmetry arguments are available but fluctuations and phase transitions have been especially analysed in the context of agent-based models. Although many papers study motion in the dilute limit, much less is known about the behaviour of *dense* ensembles subject to not so strong activity. In particular, the connection with the passive limit, and their own complex phases and phase transitions, have not been studied in so much detail.