

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI BARI

DIPARTIMENTO INTERATENEO DI FISICA

“Michelangelo Merlin”

LIVIO NICOLA CARENZA



REPORT I ANNO

In questo report presenterò la attività di ricerca portata avanti durante il primo anno di dottorato presso il Dipartimento di Fisica dell’Università degli Studi di Bari. La mia ricerca è incentrata sullo studio della *Soft Matter* (materia soffice) e della Materia Attiva. La ricerca in quest’ambito è di grande impatto su svariati fronti: dalle applicazioni tecnologiche, fino alla ricerca in ambito biologico e risulta inoltre rilevante per problemi teorici e matematici che rimangono tuttora insoluti. Nel seguito presenterò lo stato dell’arte nei diversi ambiti del mio lavoro e riasumerò i risultati ottenuti in questo anno. La parte finale sarà invece dedicata all’esposizione dei metodi numerici ad all’implementazione computazionale di cui ho fatto uso negli studi numerici.

Introduzione La materia soffice è un affascinante ambito della Fisica che si occupa di studiare materiali e sostanze *soffici*. Numerose definizioni sono state proposte per circostanziarne l’ambito, ma nessuna di queste è stata accettata universalmente a causa della vastità della materia. Ciononostante è utile includervi materiali le cui proprietà macroscopiche e mesoscopiche siano fortemente influenzate da fluttuazioni termiche e forze agenti localmente. Il successo di tale materia è dovuto al fatto che esempi di materia soffice possono essere trovati ovunque in natura cosiccome nella vita quotidiana. In generale la Materia Soffice studia sospensioni colloidali (latte, gelatine, aerogel, schiume...), miscele in presenza di surfattanti e tensioattivi e sistemi polimerici come ad esempio i cristalli liquidi. Le loro proprietà sono principalmente dovute all’organizzazione collettiva dei costituenti elementari ed alle loro mutue interazioni. La materia attiva invece può essere definita come la controparte *attiva* della materia soffice. In tal caso i costituenti elementari di questo genere di sistemi sono capaci di liberare energia nelle proprie vicinanze o far lavoro sull’ambiente circostante, portando il sistema lontano dall’equilibrio termodinamico. Molti estratti cellulari o sistemi viventi esibiscono proprietà attive

(automotilità, clustering...): gli esempi più comuni sono rappresentati dai banchi di pesce o dagli stormi di uccelli, ma estratti di citoscheletro o proteine dalle capacità motrici, cosiccome batteri in coltura esibiscono comportamenti collettivi complessi su scale mesoscopiche.

Sperimentalmente la ricerca nell'ambito della materia soffice e della materia attiva è prevalentemente incentrata nella ricerca e nello sviluppo di nuovi materiali, come ad esempio i materiali biomimetici, capaci di modificare le loro proprietà macroscopiche a seconda degli stimoli esterni e delle condizioni ambientali. Studi teorici in tale ambito sono quindi necessari per una comprensione completa dei meccanismi sottostanti e delle proprietà dinamiche e collettive.

Al fine di fornire una descrizione macroscopica dei fenomeni reversibili ed irreversibili che governano le proprietà dinamiche e d'equilibrio di questo genere di sistemi, i metodi classici della meccanica statistica falliscono a causa del fatto che sistemi soffici evolvono spesso in condizioni di non equilibrio (basti pensare alla dinamica di rilassamento di un gel o alla crescita dei domini di una emulsione di acqua ed olio) o sono addirittura lontani dall'equilibrio termodinamico, come nel caso dei sistemi attivi. Tali proprietà di non-equilibrio possono tuttavia essere descritte attraverso la teoria idrodinamica di Onsager, adattata alla descrizione della dinamica dei costituenti interni.

Il testo è organizzato come segue: nella prossima sezione presenterò i risultati ottenuti nello studio di cristalli liquidi colesterici, quindi mi concentrerò nei paragrafi successivi sulle caratteristiche principali di un'emulsione composta da due fluidi, di cui uno attivo con proprietà polari e l'altro passivo isotropo e presenterò i risultati relativi allo studio dei fenomeni di turbolenza mesoscopica che si verificano in tale genere di sistemi. Nella sezione conclusiva mi concentrerò sui metodi numerici e sull'implementazione computazionale di cui ho fatto uso per integrare le equazioni che descrivono la dinamica dei sistemi qui presentati.

Cristalli liquidi colesterici I cristalli liquidi (LC) sono uno stato della materia aventi proprietà intermedie tra quelle di un liquido e quelle di un solido: ad esempio sistemi di cristallo liquido sono capaci di fluire come fluidi ma le molecole polimeriche di cui sono composti preservano una struttura cristallina: in generale infatti queste sono lunghe catene di polimeri che quando si trovano in sospensione in un fluido tendono ad orientarsi nella direzione del loro asse; si dice in tal caso che la fase di LC esibisce *ordine nematico*. I LC sono materiali otticamente attivi, capaci di interagire con i campi elettromagnetici alterandone la polarizzazione, e per tale ragione giocano un ruolo fondamentale nella progettazione di dispositivi ottici, come ad esempio i display. In certe circostanze l'ordine direzionale può essere localmente perso, a causa di particolari condizioni al bordo o del confinamento della fase di cristallo liquido in geometrie opportune. In tal caso si ha la formazione di un *difetto topologico*. Le proprietà ottiche di un LC dipendono fortemente dalla presenza e dalla tipologia di difetti topologici presenti nel bulk della fase di cristallo liquido.

Un'importante tipologia di LC è rappresentata dalla mesofase *colesterica*: in tale regime, ottenibile a seconda della natura chimica del LC in un definito range di temperature o tramite l'aggiunta di una componente chirale alla miscela, gli assi delle molecole pur mantenendo l'ordine direzionale si organizzano in strutture elicoidali alterando le proprietà ottiche del sistema in virtù della formazione di complessi difetti topologici.

Sotto la supervisione del prof. Gonnella e con la collaborazione del prof. Orlandini, ho adattato un codice Lattice Boltzmann al fine di simulare in 3d gocce di cristallo liquido colesterico (CLC) e studiarne le proprietà di rilassamento e le strutture di difetto al variare dell'intensità del potere colesterico dell'elica (passo dell'elica) e del tipo di ancoraggio delle molecole alla superficie della goccia. A causa delle elevate risorse computazionali necessarie allo studio numerico

di tali sistemi in geometrie tridimensionali, studi precedenti avevano tralasciato di accoppiare alla dinamica della fase di LC all'idrodinamica del fluido sottostante. Nell'ambito di tale studio abbiamo inizialmente replicato, includendo l'idrodinamica, i risultati di studi precedenti a stiamo studiando ora situazioni in cui l'idrodinamica risulta fondamentale per le proprietà di rilassamento del sistema; un risultato rilevante è stato ottenuto analizzando il processo di merging di due gocce di cristallo liquido colesterico, in cui abbiamo evidenziato la formazione di stati di difetto metastabili che permangono in seguito al merging delle droplet.

Tale studio risulta rilevante a livello teorico, in quanto mostra per la prima volta numericamente l'influenza dell'idrodinamica sulla fase di LC, e da un punto di vista applicativo, in quanto definisce una procedura per la formazione di gocce di LC aventi complesse strutture ottiche.

Emulsioni attive Recenti ricerche nell'ambito della materia attiva hanno portato alla luce la possibilità di confinare i costituenti attivi in geometrie semplici (al Dogic Lab presso la Brandeis University sono state prodotte gocce ricche di microtubuli a partire da un'emulsione di acqua ed olio). Tale possibilità spiana la strada all'utilizzo di questo genere di materiali per un certo numero di applicazioni, come ad esempio la produzione di nuovi materiali biomimetici. In quest'ambito ho collaborato sotto la supervisione del prof. Gonnella, con il prof. Marenduzzo, il prof. Orlandini, il dott. Tiribocchi, il dott. Bonelli per studiare un innovativo modello capace di descrivere il comportamento di un'emulsione composta da una componente attiva polare ed una attiva isotropa. Il nostro obiettivo è stato quello di confinare il comportamento attivo in una delle due componenti dell'emulsione. A tal fine abbiamo fatto uso della teoria di Landau-Brazovskii, per ottenere una fase lamellare nel limite passivo, accoppiata all'energia libera di Landau-de Gennes per determinare le proprietà di equilibrio della polarizzazione. Introducendo l'attività

attraverso un termine *attivo* nell'equazione di Navier-Stokes abbiamo scoperto che la dinamica dell'emulsione risulta estremamente sensibile alla variazione del parametro di attività: al variare del segno di questo parametro abbiamo ottenuto il totale ordinamento della fase lamellare per sistemi contrattili, mentre nel caso di sistemi estensili l'ordine lamellare viene perso a favore della formazione di gocce rotanti. I risultati di questo studio sono attualmente in fase di pubblicazione su Scientific Reports (Nature). Variando la concentrazione di materiale attivo, rendendo tale componente minoritaria la fase lamellare lascia il posto ad un reticolo di gocce di materiale attivo. In assenza di attività la miscela si organizza in maniera esatica, con la presenza di dislocazioni. Bassi valori di attività favoriscono l'ordinamento del reticolo di gocce, mentre per valori di attività più intensi, le gocce si uniscono creando strutture rotanti. I risultati sono stati pubblicati su Physica A (Negro, Carenza, Di Gregorio, Gonnella, Lamura). In questo ambito ho contribuito alla scrittura di una review dedicata all'utilizzo di metodi numerici Lattice Boltzmann per studiare la materia attiva, attualmente in fase di sottomissione presso EPJ.

Turbolenza Attiva Sulla scia di numerosi lavori numerici e sperimentali, con il prof. Gonnella ed il prof. Biferale ho intrapreso uno studio sistematico dei pattern turbolenti che abbiamo identificato negli studi presentati nel paragrafo precedente. I fenomeni di turbolenza sono usualmente associati ad un elevato valore del numero di Reynolds, tuttavia nei sistemi attivi è frequente identificare strutture turbolente su scale micrometriche. Il fenomeno della turbolenza attiva risulta dal connubio di due differenti processi: contrariamente a quanto avviene nei sistemi passivi, l'iniezione di energia nel sistema si verifica su scale piccole, della dimensione tipica dei costituenti elementari; questo provoca che l'energia introdotta nel sistema su piccole scale si propaghi, procurando un accumulo di energia su scale macroscopiche (cascata inversa di energia). Congiuntamente i

fenomeni viscosi comportano che l'energia venga dissipata su piccole scale (cascata diretta di energia). Questi due comportamenti si accoppiano in maniera non triviale generando strutture *turbolente* nel flusso che assume proprietà differenti a seconda dell'intensità del parametro d'attività. Presenterò i risultati ottenuti nell'ambito della turbolenza attiva alla conferenza annuale dell'APS (divisione di fluidodinamica) che avrà luogo ad Atlanta nel Novembre p.v.

3D numerical implementation. Al fine di risolvere le equazioni dinamiche abbiamo fatto uso di un algoritmo Lattice Boltzmann ibrido, in cui l'idrodinamica viene risolta tramite un particolare schema predictor-corrector, mentre le equazioni di evoluzione dei parametri d'ordine (concentrazione e polarizzazione/tensore nematico) vengono trattate con un schema alle differenze finite. Le problematiche computazionali in termini di risorse di calcolo (nello specifico i lunghi tempi di simulazione) sono state trattate facendo uso di metodi di calcolo ad alte prestazioni. In particolare ho parallelizzato tramite MPI il codice per simulare i cristalli liquidi in geometrie tridimensionali. Questo ha reso possibile effettuare svariate simulazioni di durata di circa tre anni di CPU.