

ПОВЕДЕНИЕ ТИПА КРУГОВЫХ МИКРОПОПЛАВКОВ АКТИВНЫХ НЕМАТИКОВ В ОГРАНИЧЕННЫХ ДВУМЕРНЫХ ОБЛАСТЯХ РАЗЛИЧНОЙ ФОРМЫ

*Л. В. Миранцев**

*Институт проблем машиноведения Российской академии наук
199178, Санкт-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 28 июля 2024 г.,
после переработки 28 июля 2024 г.
Принята к публикации 23 октября 2024 г.

С помощью ранее предложенной молекулярной модели активных нематиков, согласно которой, в дополнение к изотропному Леннарда-Джонса и анизотропному Майера – Заупе межчастичным взаимодействиям, активные продолговатые частицы подвержены самодвижущим силам и моментам, нами проведено моделирование методами молекулярной динамики поведения ансамблей этих частиц внутри двумерных ограниченных областей различной формы (круг, кольцо, квадрат) при нормальном и тангенциальном сцеплении частиц на их границах. Показано, что при достаточно небольших плотностях числа частиц в таких ансамблях образуются кластеры, демонстрирующие поведение типа круговых поплавков, у которых направление вращения по часовой стрелке или против часовой стрелки определяется хиральностью отдельных активных частиц. Также установлено, что векторы средней ориентации частиц таких кластеров и скорости движения их центров масс вращаются синхронно в одном направлении.

DOI: 10.31857/S0044451025030137

1. ВВЕДЕНИЕ

Активными системами являются естественные или искусственные неравновесные системы, состоящие из объектов, получающих энергию либо извне, либо за счет внутренних химических процессов [1–5]. Таковыми системами являются живые существа (птицы, рыбы, бактерии и пр.), а также системы, созданные искусственным путем из объектов, использующих световую или химическую энергию. Важнейшей особенностью активных систем является их способность к коллективному движению, в котором группы самодвижущихся частиц движутся как единое целое в масштабах, значительно превышающих размеры отдельных частиц. Изучение механизма и динамики таких коллективных движений имеет большую важность для исследования природных систем в широком интервале масштабов. Поэтому активные естественные и искусственные системы являются объектами интенсивных экспериментальных и теоретических исследований.

Последние двадцать лет один из видов активных систем, а именно микропоплавки (microswimmers), является объектом особого интереса. Естественными примерами микропоплавков являются бактерии *E. Coli* и белые кровяные тельца [6], сперматозоиды [7] и др. Кроме того, также было представлено множество искусственных микропоплавков [8–19]. Такие микропоплавки могут быть использованы в таких практических применениях, как доставка лекарств внутри живых тканей, локализация загрязнений в почвах, создание приборов на основе микрочипов [20–23].

Если самодвижущая сила микропоплавка действует вдоль направления его движения, то он будет двигаться по прямой линии. Однако микропоплавки могут быть несимметричными, вследствие чего направления действия самодвижущей силы и его движения могут не совпадать [24]. Это приводит к хиральному движению микропоплавка, т. е. к круговому движению в двух измерениях или геликоидальному движению в трех измерениях. Такие микропоплавки называются круговыми микропоплавками (circular microswimmers). Существует множество примеров хиральных микропоплавков. Напри-

* E-mail: mlv@ipme.ru

мер, бактерии *E. Coli* и сперматозоиды демонстрируют геликоидальное движение в трех измерениях, которое становится двумерным круговым движением вблизи ограничивающих поверхностей [25–31]. Искусственные микропоплавки могут также иметь хиральные траектории движения, если они изготовлены несимметричными [7, 32].

Многие активные системы, например суспензии бактерий, можно рассматривать как ансамбли частиц, имеющих продолговатую форму. Такие системы напоминают нематические жидкие кристаллы, молекулы которых не только взаимодействуют посредством анизотропных межмолекулярных потенциалов, но также испытывают действие самодвижущих сил. Таким образом, такие активные нематики можно описывать в рамках доступных в настоящее время теорий жидких кристаллов. Имеется несколько успешных теоретических описаний активных нематиков [4, 33–40], включающих также хиральные нематики [41–44], состоящие из частиц с нарушенной симметрией «лево–право». Эти описания, которые являются совершенно феноменологическими, используют уравнения движения тензора ориентационного порядка \mathbf{Q} и поля скоростей течения \mathbf{u} , и довольно сложно найти однозначные соотношения между параметрами, фигурирующими в этих уравнениях, и геометрическими (размер, форма и др.) и энергетическими характеристиками отдельных активных частиц. Другое описание движения активных хиральных частиц [7, 32] базируется на системе уравнений Ланжевена, которые помимо самодвижущих сил используют трансляционный D_T и вращательный D_R коэффициенты диффузии, а также угловую скорость Ω , которая является следствием вращательного момента, действующего на частицу. Хотя такой подход позволяет описать хиральное движение микропоплавок, он также является абсолютно феноменологическим.

Сравнительно недавно в работе [45] нами была предложена микроскопическая модель активных нематиков, состоящих из продолговатых частиц, взаимодействующих друг с другом посредством изотропного потенциала Леннарда-Джонса и анизотропного потенциала типа Майера–Заупе. Кроме того, каждая частица имеет небольшой отросток, через который в результате химической реакции испускается некоторое вещество. В случае нехиральных частиц этот отросток располагается в одном из концов частицы и направлен вдоль ее длинной оси (см. рис. 1 *a*), тогда как хиральные частицы имеют аналогичный отросток, образующий некоторый угол с ее длинной осью (см. рис. 1 *b*). В результате

в случае нехиральной частицы испускание вещества из вышеупомянутого отростка приводит к появлению только реактивной самодвижущей силы \mathbf{f}_0 , направленной вдоль ее длинной оси, тогда как в случае хиральной частицы испускание вещества из ее отростка приводит к появлению не только реактивной самодвижущей силы \mathbf{f}_0 , но и момента $\boldsymbol{\tau}_0$, приводящего к самовращению частицы относительно ее центра масс. С помощью этой модели мы осуществили молекулярно-динамическое (MD) моделирование поведения такого модельного активного нематика внутри двумерной (2D) области, имеющей форму круга при различных граничных условиях. При этом было найдено, что описанный выше модельный активный хиральный нематик образует структуры с пространственно-временным поведением, качественно схожим с поведением, предсказанным в предыдущих работах [4, 33–44] на основе феноменологических континуальных моделей активных нематиков. Предложенная нами модель также была успешно использована в MD-моделировании поведения нехиральных и хиральных активных нематиков внутри наноскопической 2D-области, имеющей форму кольца [46], и в MD-моделировании поведения бинарных смесей пассивных (без самодвижущих сил) и активных нематиков и смесей активных нематиков с различной хиральностью внутри наноскопической двумерной круглой области [47]. Главное преимущество предложенной нами микроскопической модели перед феноменологическими моделями [4, 7, 32–44] заключается в том, что действие самодвижущей силы на активную хиральную частицу автоматически приводит к появлению действующего на нее вращающего углового момента. Таким образом, она может быть весьма подходящей для описания поведения круговых поплавок.

В настоящей работе с помощью упомянутой выше микроскопической модели активных нематиков нами было проведено MD-моделирование систем, состоящих из нехиральных и хиральных активных частиц внутри наноскопических 2D-областей различной формы (круг, кольцо, квадрат) при условиях нормального и тангенциального сцепления на границах. В отличие от наших предыдущих работ [45, 47], в которых рассматривались системы с достаточно большой плотностью числа частиц, плотность числа частиц в рассматриваемых здесь системах много меньше. Показано, что внутри всех трех 2D-областей хиральные активные частицы таких систем образуют кластеры, демонстрирующие поведение типа круговых поплавок, причем направление их вращения по часовой стрелке или против часовой

стрелки определяется хиральностью образующих их частиц. Также установлено, что векторы средней ориентации частиц кластеров и скорости центров их масс вращаются синхронно в одном направлении.

2. МОДЕЛЬ

Для частиц активного нематика были использованы модель активной нехиральной частицы (рис. 1 *a*) и модель активной хиральной частицы (рис. 1 *b*). В первом случае отросток C расположен в одном из концов частицы (в точке B) и направлен вдоль ее длинной оси AB . В случае хиральной активной частицы этот отросток расположен сбоку. В обоих случаях из отростков испускается струя D некоторого вещества благодаря некоторой химической реакции внутри частицы, в результате чего возникают самодвижущая реактивная сила f_0 , направленная в случае нехиральной частицы вдоль ее длинной оси AB , в случае хиральной частицы образующая угол ϕ с ее длинной осью, а также дополнительный вращающий момент τ_0 относительно центра массы частицы. Подробное описание потенциалов взаимодействия частиц, самодвижущих сил и уравнений движения приводится в работе [47].

3. РЕЗУЛЬТАТЫ MD-МОДЕЛИРОВАНИЯ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Нами было проведено MD-моделирование ансамблей активных модельных частиц внутри 2D-областей, имеющих форму круга с радиусом 24σ , кольца с внутренним радиусом 14σ и внешним радиусом 24σ , а также квадрата со стороной 32σ . Эти ансамбли содержали 897, 586, и 526 частиц и имели приблизительно одинаковую среднюю 2D-плотность числа частиц $0.5\sigma^{-2}$, которая была почти в два раза меньше плотности числа частиц в нашей предыдущей работе [47]. Граничные условия для рассматриваемых ансамблей модельных частиц задавались с помощью так называемых призрачных (ghost) частиц, образующих слой толщиной 2σ на границах 2D-областей. Эти частицы считались неподвижными и в случае круглой ограничивающей области ориентированными так, что их единичные векторы e были направлены вдоль радиуса, проведенного из центра области в точку расположения данной призрачной частицы. В случае кольцеобразной ограничивающей области на ее внутренней и внешней круглых границах единичные векторы e призрачных частиц были направлены вдоль соответствующих радиусов, про-

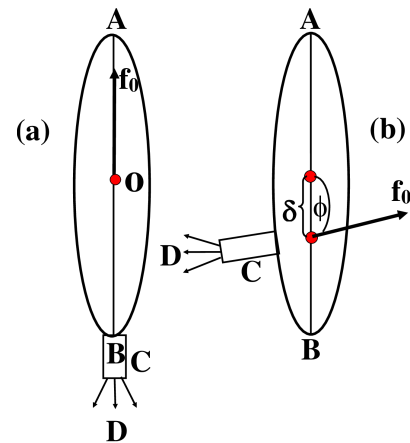


Рис. 1. Модели нехиральной (*a*) и хиральной (*b*) частиц активного нематика, используемые в нашем MD-моделировании. AB — длинная ось частиц, O — их центр массы, C — отросток, обеспечивающий способность частиц к самодвижению (боковой отросток обеспечивает ее хиральность), D — некая струя, выбрасываемая из этого отростка, вследствие которой создается самодвижущая реактивная сила f_0 . В случае хиральной частицы она приложена к точке O_1 и направлена под углом ϕ к длинной оси частицы, δ — расстояние между точкой приложения силы f_0 и центром масс частицы

веденных из общего центра в точки расположения призрачных частиц. В случае квадратной ограничивающей области единичные векторы e призрачных частиц были направлены вдоль нормалей к сторонам квадрата. Мы использовали граничные условия, соответствующие сильному тангенциальному или нормальному сцеплению на ограничивающих поверхностях. В первом случае призрачные частицы индуцируют ориентацию частиц нематика, направленную вдоль касательной к границе, а во втором случае — вдоль нормали, проведенной в заданную точку. Для обеспечения сильного тангенциального сцепления константа взаимодействия ϵ_2 между частицами нематика и границы ограничивающей области (т. е. призрачными частицами) считалась равной -5ϵ , а для сильного нормального сцепления мы брали $\epsilon_2 = 5\epsilon$. Мы также считали, что ϵ , σ_2 , σ , m , I и δ просто равны 1 в безразмерных MD-единицах [48]. Во всех случаях наше моделирование стартовало из начальных конфигураций (рис. 2), в которых частицы хаотично располагались внутри ограничивающих областей и имели произвольные ориентации своих длинных осей.

Прежде всего, нами было проведено MD-моделирование поведения активного нематика внутри описанных выше ограничивающих 2D-

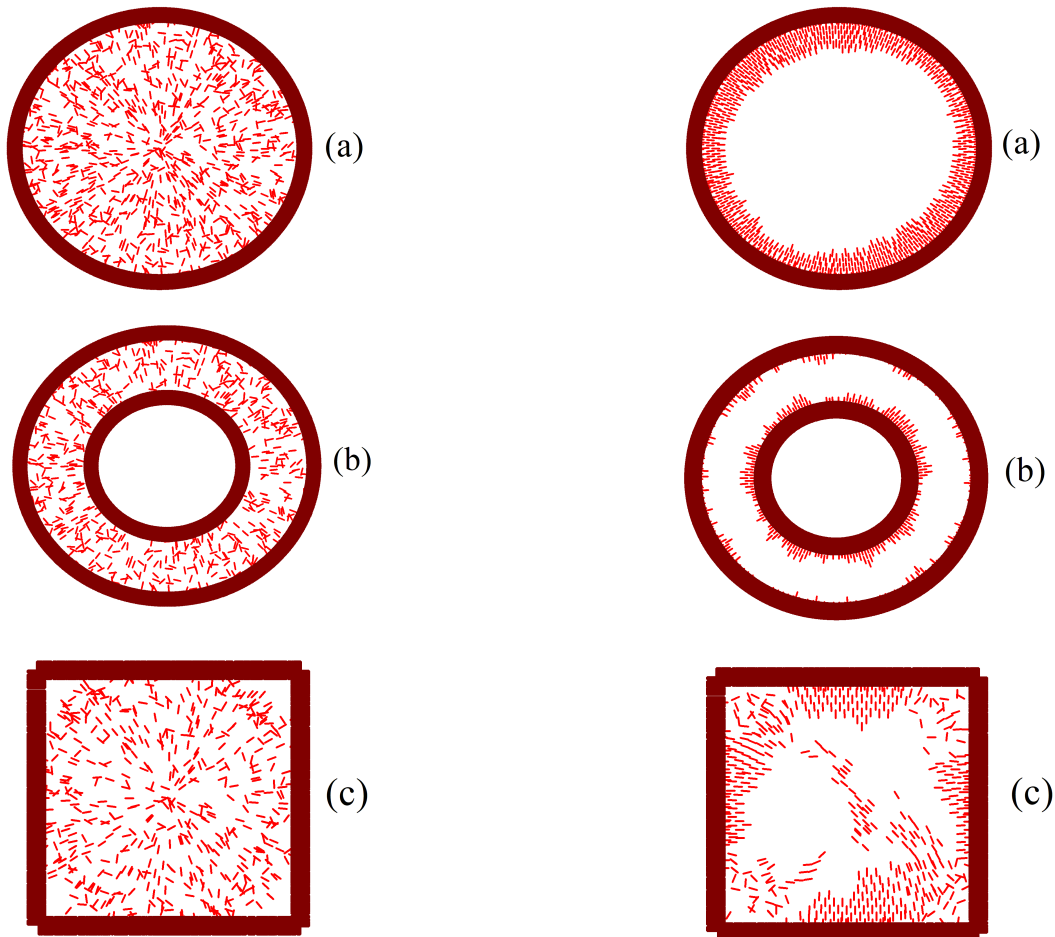


Рис. 2. Начальные конфигурации для MD-моделирования поведения активных нематиков внутри круглой (a), кольцеобразной (b), и квадратной (c) 2D-областей. Черточки — активные модельные частицы, границы содержат прозрачные частицы

областей в случае нехиральных модельных частиц с достаточно большой самодвижущей силой $f_0 = 10$ MD-единиц и с нулевым углом ϕ при сильных нормальном и тангенциальном сцеплениях на границах. Полученные таким образом конфигурации модельных активных частиц в момент $t = 100$ MD-единиц времени показаны на рис. 3 в случае сильного нормального сцепления и на рис. 4 в случае сильного тангенциального сцепления. Видно, что при сильном нормальном сцеплении внутри всех трех ограничивающих областей нехиральные активные частицы сосредоточены в основном вблизи ограничивающих поверхностей (особенно наглядно это видно на рис. 3a в случае круглой ограничивающей области). Что касается случаев

Рис. 3. Конфигурации активных модельных нематиков, состоящих из нехиральных ($f_0 = 10$, $\phi = 0$) частиц внутри круглой (a), кольцеобразной (b) и квадратной (c) 2D-областей при сильном нормальном граничном сцеплении в момент $t = 100$ MD-единиц времени

круглой ограничивающей области нехиральные частицы сосредоточены в основном в двух больших кластерах (см. рис. 4a), между которыми мы видим довольно разреженное хаотичное распределение частиц. Внутри кольцеобразной ограничивающей области мы видим довольно плотное распределение частиц вблизи круглых ограничивающих поверхностей и их хаотичное разреженное распределение между ограничивающими поверхностями (см. рис. 4b). Наконец, внутри квадратной ограничивающей области мы видим практически полное сосредоточение активных нехиральных частиц вблизи одного из углов этой области (см. рис. 4c). Чтобы изучить динамику поведения наших модельных частиц в приведенных выше ограничивающих 2D-областях мы выбрали группы частиц внутри

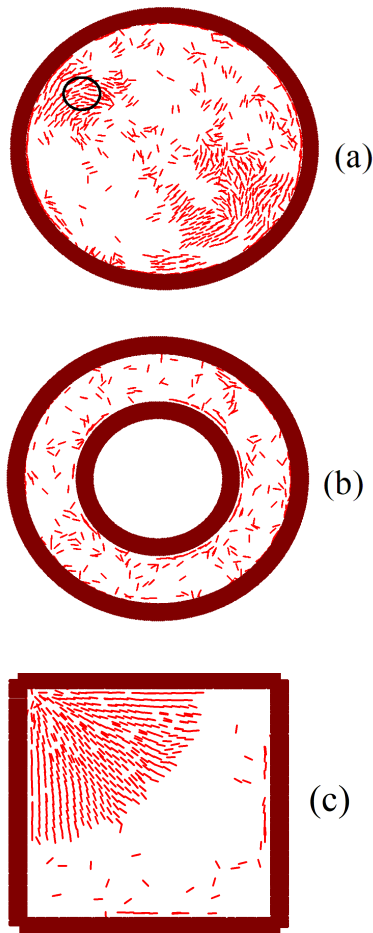


Рис. 4. Конфигурации активных модельных нематиков, состоящих из нехиральных ($f_0 = 10$, $\phi = 0$) частиц внутри круглой (a), кольцеобразной (b), и квадратной (c) 2D-областей при сильном тангенциальном граничном сцеплении в момент $t = 100$ MD-единиц времени. Круг внутри окружности радиусом 3σ содержит выделенные частицы, за которыми ведется наблюдение в интервале 20 MD-единиц времени, начиная с момента $t = 100$ MD-единиц

некоторых окружностей радиусом $R_0 = 3\sigma$ (см. круг на рис. 4 a), равным длине обрезания, обычно используемой в MD-моделировании систем с межчастичным взаимодействием, описываемым потенциалом Леннарда-Джонса [48]. Затем в течение 20 MD-единиц времени мы следили за отдельными частицами, первоначально (при $t = 100$ MD-единиц времени) находившимися внутри таких окружностей, а также за центрами масс этих частиц. Мы также следили за средним радиусом таких групп $R(t) = (1/N_c) \sum_i |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_c|$, где \mathbf{r}_c — радиус-вектор центра масс частиц группы, а также за векторами их средней ориентации $\mathbf{e}_c = (1/N_c) \sum_i \mathbf{e}_i$ и скорости их центра масс $\mathbf{V}_c = (1/N_c) \sum_i \mathbf{v}_i$,

где \mathbf{v}_i — трансляционная скорость i -й частицы. Во всех этих формулах суммирование ведется по всем N_c частицам группы. Наше моделирование показало, что в случаях сильного нормального сцепления на границах ограничивающих областей (см. рис. 3) центры масс выбранных таким образом групп активных нехиральных частиц и отдельные нехиральные частицы мало мобильны и их перемещения в течение времени наблюдения находятся в интервале $(10^{-2} - 10^{-1})\sigma$. Это качественно можно объяснить тем фактом, что в случае сильного нормального сцепления на границах большинство активных нехиральных частиц расположено вблизи этих границ (см. рис. 3). Что касается случая сильного тангенциального сцепления, то здесь ситуация несколько иная. На рис. 5 показаны траектории перемещения в течение 20 MD-единиц времени центра масс нехиральных активных частиц внутри круга на рис. 4 a (кривая 1 на рис. 5) и трех произвольно выбранных частиц, находящихся внутри этого круга в момент $t = 100$ MD-единиц времени (кривые 2–4 на рис. 5). Видно, что, в отличие от случая сильного нормального сцепления, центр масс этой группы частиц и произвольно выбранные частицы из этой группы в течение 20 MD-единиц времени проходят достаточно большой путь (примерно от 31σ до 44σ), но их траектории абсолютно нерегулярны и похожи на траектории простого броуновского движения. Рисунок 6 демонстрирует временную зависимость среднего радиуса $R(t)$ выбранной группы частиц. Видно, что в течение 20 MD-единиц времени этот радиус увеличивается примерно в 6 раз по сравнению с начальным значением R_0 . Это значит, что выбранная группа активных нехиральных частиц быстро теряет свою компактность.

Следует отметить, что результаты, полученные для активных нехиральных частиц внутри ограничивающей круглой 2D-области, качественно совпадают с аналогичными результатами для активных нехиральных частиц внутри кольцеобразной и квадратной ограничивающих областей.

Теперь перейдем к рассмотрению поведения активных хиральных нематиков внутри вышеупомянутых ограничивающих 2D-областей. На рис. 7 показаны полученные в результате нашего MD-моделирования конфигурации модельных активных хиральных ($f_0 = 10$, $\phi = \pi/2$) частиц в момент $t = 100$ MD-единиц времени внутри круглой, кольцеобразной и квадратной областей в случае сильного нормального сцепления. Легко видеть, к каким существенным изменениям в этих configura-

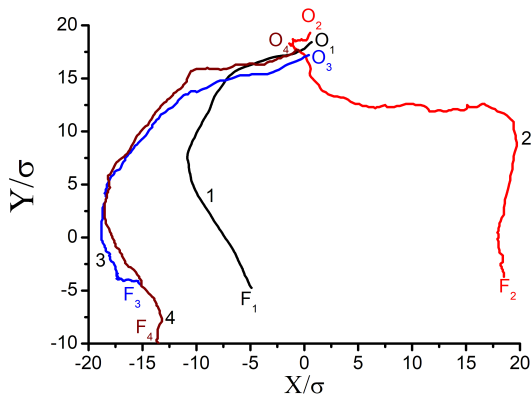


Рис. 5. Траектории центра масс (кривая 1) группы активных нехиральных частиц ($f_0 = 10, \phi = 0$), первоначально ($t = 100$ MD-единиц времени) расположенных внутри круга на рис. 4 а, и траектории трех произвольно выбранных частиц из этой группы (кривые 2–4) в течение последующих 20 MD-единиц времени. O_i и F_i — начальные и конечные точки траекторий

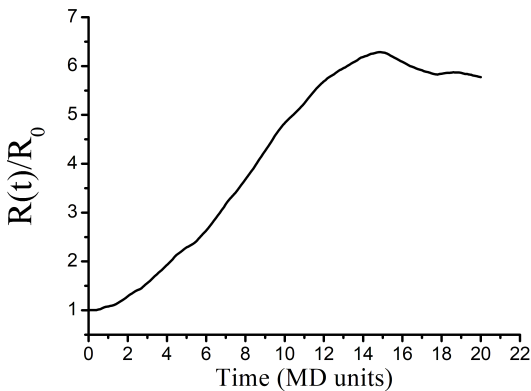


Рис. 6. Временная зависимость в течение 20 MD-единиц времени среднего радиуса $R(t)$ группы активных нехиральных ($f_0 = 10, \phi = 0$) модельных частиц, первоначально ($t = 100$ MD-единиц времени) расположенных внутри круга на рис. 4 а

циях привело появление хиральности, т.е. нарушения симметрии право-лево, у активных модельных частиц. Помимо частиц, расположенных как и в случаях отсутствия хиральности (см. рис. 3) вблизи границ, активные хиральные частицы образуют компактные кластеры, отделенные друг от друга разреженным пространством. Что касается динамического поведения как отдельных частиц, принадлежащих этим кластерам, так и кластеров в целом, то оно отличается от аналогичного поведения

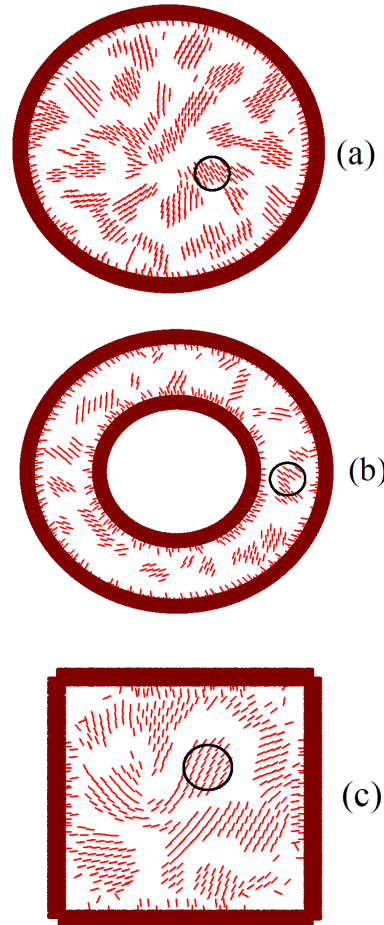


Рис. 7. Конфигурации активных модельных нематиков, состоящих из хиральных ($f_0 = 10, \phi = \pi/2$) частиц внутри круглой (а), кольцеобразной (b) и квадратной (с) 2D-областей при сильном нормальном граничном сцеплении в момент $t = 100$ MD-единиц времени. Небольшие круги внутри ограничивающих областей радиусом 3σ содержат выделенные частицы, за которыми ведется наблюдение в течение 20 MD-единиц времени

в случае отсутствия хиральности совершенно замечательным образом. На рис. 8 показаны траектории центров масс групп активных хиральных частиц, заключенных первоначально (при $t = 100$ MD-единиц времени) внутри малых кругов на рис. 7 радиусами $R_0 = 3\sigma$, по которым они движутся в течение 20 MD-единиц времени. На рис. 8 видно, что во всех трех ограничивающих областях центры масс выделенных групп частиц движутся по близким к круговым траекториям против часовой стрелки. На рис. 9 показаны траектории движения трех произвольно выбранных активных хиральных частиц из группы частиц внутри малого круга на рис. 7 а, которые они описывают также в течение временного интервала

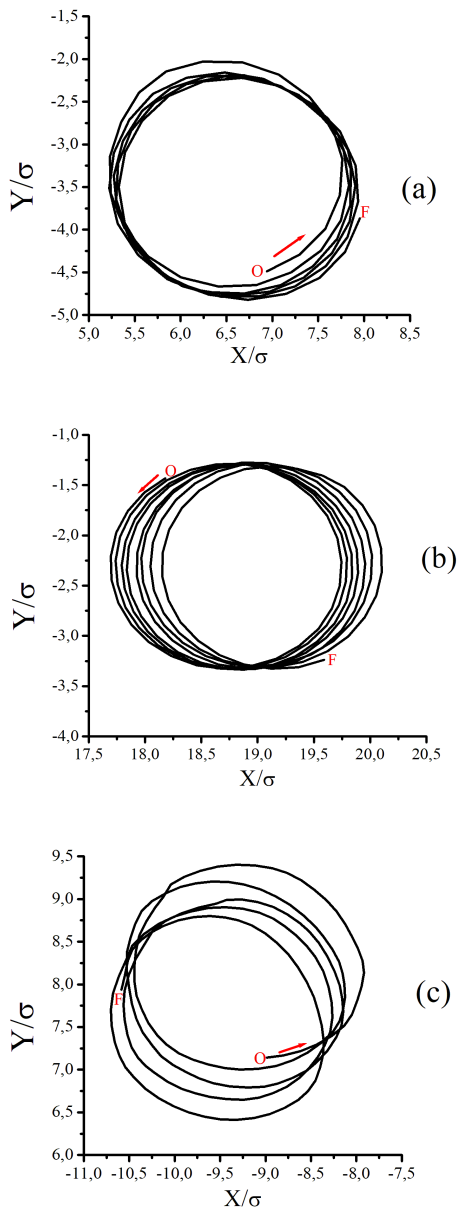


Рис. 8. Траектории центров масс групп активных хиральных частиц ($f_0 = 10$, $\phi = \pi/2$), заключенных первоначально (при $t = 100$ MD-единиц времени) внутри малых кругов радиусами $R_0 = 3\sigma$, по которым они движутся в течение временного интервала 20 MD-единиц внутри круглой (a), кольцеобразной (b) и квадратной (c) ограничивающих областей. O — начальные точки траекторий, F — их конечные точки. Красные стрелки показывают направление движения

20 MD-единиц. На рис. 9 ясно видно, что эти частицы, как и центр масс их группы, вращаются против часовой стрелки по траекториям, близким к круговым. При этом за время слежения за частицами выбранной группы (рис. 7 a) в течение временно-

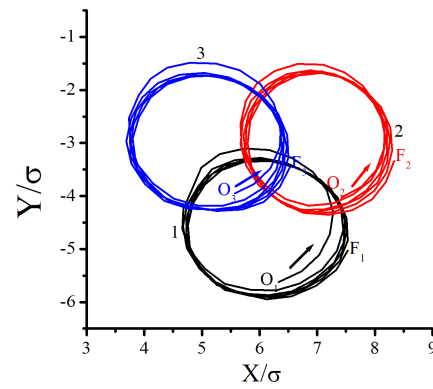


Рис. 9. Траектории трех произвольно выбранных активных хиральных частиц ($f_0 = 10$, $\phi = \pi/2$) заключенных первоначально (при $t = 100$ MD-единиц времени) внутри малого круга радиусом $R_0 = 3\sigma$ внутри круглой ограничивающей области, по которым они движутся в течение временного интервала 20 MD-единиц. $O_{1,2,3}$ — начальные точки траекторий, $F_{1,2,3}$ — их конечные точки. Стрелки указывают направления движения

го интервала 20 MD-единиц средний радиус группы испытывает колебания с амплитудой 1–2% от первоначальной величины (см. рис. 10). Следовательно, можно считать, что компактность группы почти сохраняется.

Как уже говорилось, мы также следили за векторами средней ориентации \mathbf{e}_c частиц описанных выше выделенных групп и скорости их центра масс \mathbf{V}_c . Рисунок 11 демонстрирует временные зависимости в интервале 20 MD-единиц времени углов Φ и Ψ , которые векторы \mathbf{e}_c и \mathbf{V}_c для группы частиц внутри малого круга на рис. 7 a образуют с осью x . На рис. 11 видно, что оба угла меняются во времени линейно и периодически одновременно, причем кривые их временных зависимостей почти идеально параллельны друг другу. Это значит, что векторы средней ориентации \mathbf{e}_c и скорости \mathbf{V}_c центра масс выделенной группы частиц вращаются синхронно в одном направлении, причем также против часовой стрелки. Действительно, на рис. 11 видно, что углы Φ и Ψ сначала растут от некоторых значений до 2π , затем резко уменьшаются до нуля (начало нового оборота), затем снова растут до 2π и т. д. Следует также отметить, что разница между этими углами не зависит от времени и равна примерно $\pi/2$, т. е. оба вектора вращаются с постоянной разностью фаз.

Следует отметить, что аналогичные результаты в случае сильного тангенциального сцепления качественно совпадают с результатами, полученными для случая сильного нормального сцепления. Кроме

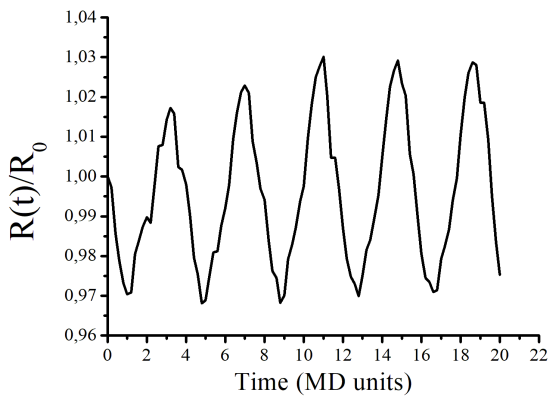


Рис. 10. Временная зависимость среднего радиуса $R(t)$ группы активных хиральных ($f_0 = 10$, $\phi = \pi/2$) частиц, заключенных первоначально (при $t = 100$ MD-единиц времени) внутри малого круга радиусом $R_0 = 3\sigma$ внутри круглой ограничивающей области (рис. 7 а) в течение временного интервала 20 MD-единиц

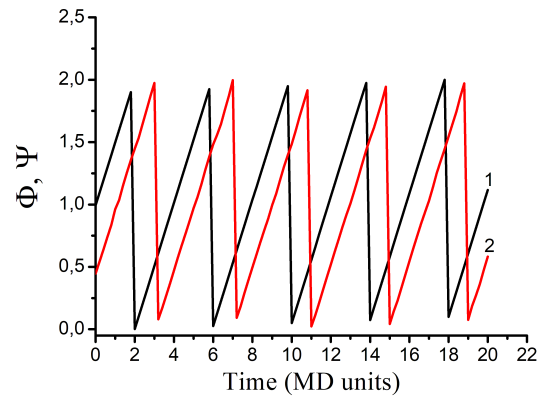


Рис. 11. Временные зависимости углов Φ и Ψ для группы активных хиральных частиц ($f_0 = 10$, $\phi = \pi/2$), заключенных первоначально (при $t = 100$ MD-единиц времени) внутри малого круга радиусом $R_0 = 3\sigma$ внутри круглой ограничивающей области (рис. 7 а) в течение временного интервала 20 MD-единиц. Кривая 1 — Φ , кривая 2 — Ψ

того, результаты, полученные для кольцеобразной и квадратной ограничивающих областей (рис. 7 б, в), также качественно идентичны результатам, полученным для круглой ограничивающей области.

Итак, мы получили, что при угле $\phi = \pi/2$ центры масс выделенных групп активных хиральных частиц во всех трех ограничивающих областях и отдельные произвольно выбранные частицы из этих групп движутся по почти круговым траекториям, т. е. ведут себя как круговые поплавки, причем во всех случаях движутся против часовой стрелки. Также против часовой стрелки вращаются векторы средней ориентации \mathbf{e}_c и скорости \mathbf{V}_c центров масс выделенных групп частиц на рис. 7. Нетрудно видеть на рис. 1 б, что при любом положительном угле ϕ , в частности $\phi = \pi/2$, самодвижущая сила порождает дополнительный момент вращения относительно центра масс хиральной частицы, направленный именно против часовой стрелки. Отсюда можно предположить, что при отрицательном угле ϕ , например $\phi = -\pi/2$, когда самодвижущая сила создает вращающий момент, направленный по часовой стрелке, центры масс выделенных групп активных хиральных частиц и отдельные частицы будут двигаться по круговым траекториям по часовой стрелке, и также по часовой стрелке будут вращаться векторы средней ориентации \mathbf{e}_c и скорости \mathbf{V}_c центров масс выделенных групп частиц. Результаты нашего MD-моделирования полностью подтвердили это предположение.

На рис. 12 а показана конфигурация, которую образуют активные хиральные частицы ($f_0 = 10$, $\phi = -\pi/2$) внутри ограничивающей квадратной области при сильном нормальном сцеплении на ее границах. Как и в случае $f_0 = 10$ и $\phi = \pi/2$, помимо частиц, сосредоточенных у границ внутри этой ограничивающей области, существуют компактные кластеры. Однако динамика их поведения совершенно другая. На рис. 12 б и 12 с ясно видно, что как центр масс выделенной группы частиц внутри малого круга на рис. 12 а, так и произвольно выбранные частицы из этой группы движутся по траекториям, близким к круговым, но не против, а по часовой стрелке. Также по часовой стрелке синхронно вращаются векторы средней ориентации \mathbf{e}_c и скорости \mathbf{V}_c центра масс выделенной группы частиц. Действительно, на рис. 12 д видно, что оба угла, Φ и Ψ , сначала уменьшаются от некоторых конечных значений до нуля, потом испытывают резкий скачок до 2π (начинается новый оборот), затем снова уменьшаются до нуля, потом снова скачок до 2π и т. д.

Таким образом, мы приходим к выводу, что в рамках нашей модели не только отдельные активные хиральные частицы, но и их целые группы и, по видимому, целые кластеры могут двигаться по траекториям в форме круга, т. е. являются круговыми поплавками внутри ограничивающих 2D-областей различной формы и при разных условиях сцепления на границах. При этом направление такого кругового движения полностью определяется направлением вращения активных частиц вокруг их цен-

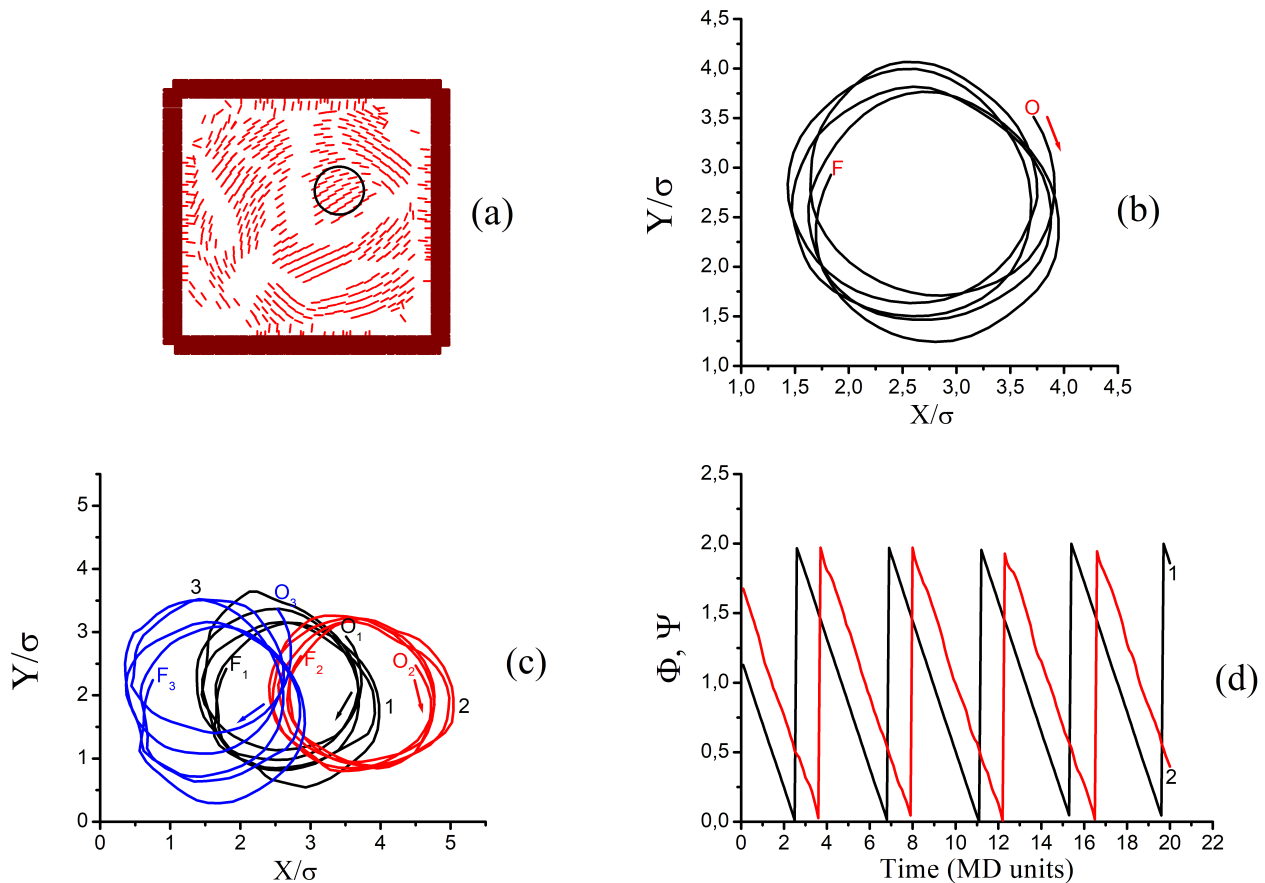


Рис. 12. *a* — Конфигурация активных модельных нематиков, состоящих из хиральных частиц ($f_0 = 10$, $\phi = -\pi/2$) внутри квадратной 2D-области при сильном нормальном граничном сцеплении в момент $t = 100$ MD-единиц времени. Небольшой круг внутри ограничивающей области содержит выделенные частицы, за которыми ведется наблюдение в течение 20 MD-единиц времени. *b* — Траектория центра масс группы выделенных активных хиральных частиц при $f_0 = 10$, $\phi = -\pi/2$ в течение времени наблюдения. *O* — начальная точка траектории, *F* — ее конечная точка. *c* — Траектории трех произвольно выбранных частиц из выделенной группы. Стрелки на рис. *b* и *c* указывают направления движения. *d* — Временные зависимости углов Φ и Ψ для выделенной группы активных хиральных частиц при $f_0 = 10$, $\phi = -\pi/2$. Кривая 1 — Φ , кривая 2 — Ψ

тра масс под действием самодвижущей силы, которое, в свою очередь, определяется знаком угла ϕ , т. е. их хиральностью. Этот результат находится в полном согласии с результатами экспериментальной работы [32], посвященной исследованию движения искусственных микропоплавков, имеющих асимметричную форму в виде буквы L. Если такие поплавки имели боковой отросток с правой стороны, то они двигались по кругу против часовой стрелки, а если отросток был с левой стороны, то происходило круговое движение по часовой стрелке. Основное отличие настоящей работы от работ других авторов, посвященных движению круговых поплавков, заключается в том, что в последних рассматривалось круговое движение отдельных активных частиц. Наша

работа показывает, что целые группы частиц могут демонстрировать такое движение и его направление по или против часовой стрелки полностью определяется направлением вращения отдельных частиц относительно их центра масс под действием самодвижущей силы. По-видимому, это имеет место благодаря принятому в модели анизотропному межчастичному взаимодействию типа Майера–Заупе, которое заставляет частицы выстраиваться параллельно друг другу. Представляется весьма интересным осуществить экспериментальную проверку приведенных здесь результатов в не очень плотных суспензиях бактерий или активных коллоидов, способных к образованию кластеров с довольно разреженным пространством между ними.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представлены результаты MD-моделирования поведения ансамблей нехиральных и хиральных активных модельных нематиков с 2D-плотностью около $0.5\sigma^{-2}$, ограниченных наноскопическими 2D-областями, имеющими форму круга, кольца и квадрата с нормальными и тангенциальными граничными условиями сцепления. Модельные нематики состоят из продолговатых частиц, взаимодействующих друг с другом, а также с неподвижными прозрачными частицами, образующими границы, посредством изотропного потенциала Леннарда-Джонса, а также анизотропного потенциала тина Майера – Заупе. Кроме того, продолговатые частицы имеют также отростки, испускающие струю некоторого вещества, возникающую благодаря некоторой химической реакции. У нехиральных активных частиц этот отросток находится вблизи их конца и направлен вдоль длинной оси частиц, тогда как хиральные активные частицы имеют такой же отросток сбоку, и он при этом образует угол ϕ с длинной осью. В результате в случае нехиральных частиц испускание вышеупомянутой струи приводит к появлению дополнительной реактивной самодвижущей силы \mathbf{f}_0 , направленной вдоль длинных осей частиц, тогда как в случае хиральных частиц на них действуют и самодвижущая сила \mathbf{f}_0 , и угловой момент $\boldsymbol{\tau}_0$, приводящий к самовращению частиц относительно их центров масс. Проведенное на основе этой модели наше MD-моделирование показало, что при нормальном сильном сцеплении на границах активные нехиральные частицы ($f_0 = 10$, $\phi = 0$) независимо от формы ограничивающей 2D-области располагаются вблизи границ, тогда как при тангенциальном сильном сцеплении на границах некоторые частицы образуют довольно большие кластеры, а другие хаотично распределены в разреженном пространстве между ними. Для изучения динамики наших активных частиц мы выбирали группы частиц внутри некоторых кругов радиусом $R_0 = 3\sigma$, равным длине обрезания, используемой в MD-моделировании систем с межчастичным взаимодействием, описываемым короткодействующим потенциалом Леннарда-Джонса, и затем в течение 20 MD-единиц времени следили за отдельными частицами, изначально находившимися внутри этих кругов, а также за центрами масс этих частиц. Наше MD-моделирование выявило, что при сильном нормальном граничном сцеплении как центры масс выбранных групп нехиральных активных частиц,

так и отдельные случайно выбранные частицы из этих групп малоподвижны и в течение времени наблюдения проходят путь порядка $(10^{-2}-10^{-1})\sigma$. При тангенциальном сильном сцеплении как центры масс выбранных групп нехиральных частиц, так и случайно выбранные частицы из этих групп проходят за 20 MD-единиц времени довольно большой путь (от 31σ до 44σ), но их траектории абсолютно нерегулярны и похожи на траектории простого броуновского движения.

Мы также моделировали поведение активных хиральных частиц ($f_0 = 10$ и $\phi = \pi/2$) внутри круглой, кольцеобразной и квадратной ограничивающих 2D-областей при сильных нормальном и тангенциальном граничных сцеплениях. Было выявлено, что при упомянутой выше 2D-плотности частиц активные хиральные частицы внутри всех рассмотренных ограничивающих областей не только располагаются вблизи границ, но и образуют небольшие кластеры, разделенные разреженным пространством. Что касается динамики поведения отдельных частиц и даже их групп внутри таких кластеров, она отличается от динамики поведения нехиральных частиц радикальным образом. Во всех рассмотренных ограничивающих 2D-областях при нормальном и тангенциальном сильных сцеплениях на границах как центры масс вышеупомянутых выделенных групп внутри кластеров, так и произвольно выбранные частицы из этих групп в течение времени наблюдения движутся вдоль траекторий, близких к круговым, против часовой стрелки. Такое поведение совпадает с экспериментально наблюдаемым поведением естественных [25–31] и искусственных [7, 32] хиральных микроплавок. Главная особенность полученных результатов заключается в том, что круговые траектории движения, полученные в нашем MD-моделировании, присущи не только отдельным активным хиральным частицам, но и их группам. Кроме того, было выявлено, что векторы средней ориентации выделенных групп частиц внутри кластеров и скорости их центров масс вращаются синхронно также против часовой стрелки. Также было найдено, что в случае активных частиц с противоположной хиральностью ($f_0 = 10$ и $\phi = -\pi/2$) центры масс выделенных групп частиц внутри кластеров, отдельные частицы из этих групп, а также векторы средней ориентации внутри групп и скорости их центров масс вращаются по часовой стрелке. Была найдена связь между направлениями таких вращений и угловыми моментами вращения отдельных хиральных частиц относительно их центра масс, созданными самодвижущими силами. При угле $\phi = \pi/2$ само-

движущая сила создает момент вращения хиральной частицы относительно ее центра масс против часовой стрелки, а при угле $\phi = -\pi/2$ — по часовой стрелке. Таким образом, круговое движение отдельных хиральных частиц и их целых групп полностью определяется знаком их хиральности. Это полностью согласуется с результатами экспериментальной работы [32], посвященной исследованию движения искусственных микроплавок, имеющих асимметричную форму в виде буквы L.

В заключение следует отметить, что было бы, на наш взгляд, интересно сравнить полученные здесь результаты с данными экспериментов на не очень плотных суспензиях бактерий или активных коллоидах, способных к образованию кластеров с довольно разреженным пространством между ними.

ЛИТЕРАТУРА

1. S. Ramaswamy, *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **1**, 323 (2010).
2. C. Bechinger, R. Di Leonardo, H. Löwen, C. Reichardt, G. Volpe, and G. Volpe, *Rev. Mod. Phys.* **88**, 045006 (2016).
3. A. Doostmohammadi, J. N. Ignes-Mullol, J. M. Yeomans, and F. Sagues, *Nat. Commun.* **9**, 3246 (2018).
4. M. M. Norton, A. Baskaran, A. Opathalage, B. Langeslay, S. Fraden, A. Baskaran, and M. F. Hagan, *Phys. Rev. E* **97**, 012702 (2018).
5. S. P. Thampi, A. Doostmohammadi, T. N. Shendruk, R. Golestanian, and J. M. Yeomans, *Sci. Adv.* **2**, e1501854 (2016).
6. H. Berg, *E. Coli in Motion*, Springer Verlag, New York (2004).
7. M. Mijalkov and G. Volpe, *Soft Matter* **9**, 6376 (2013).
8. R. F. Ismagilov, A. Schwartz, N. Bowden and G. M. Whitesides, *Angew. Chem.* **114**, 674 (2002).
9. W. F. Paxton, A. Sen, and T. E. Mallouk, *Chem. Eur. J.* **11**, 6462 (2005).
10. J. Vicario, R. Eelkema, W. R. Browne, A. Meetsma, R. M. La Crois, and B. L. Feringa, *Chem. Commun.* **34**, 3936 (2005).
11. R. Golestanian, T. B. Liverpool, and A. Ajdari, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 220801 (2005).
12. J. R. Howse, R. A. L. Jones, A. J. Ryan, T. Gough, R. Vafabakhsh, and R. Golestanian, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 048102 (2007).
13. D. Pantarotto, W. R. Browne, and B. L. Feringa, *Chem. Commun.* **10**, 1533 (2008).
14. P. Tierno, R. Golestanian, I. Pagonabarraga, and F. Sagues, *J. Phys. Chem. B.* **112**, 16525 (2008).
15. A. Ghosh and P. Fischer, *Nano Lett.* **9**, 2243 (2009).
16. A. Snezhko, M. Belkin, I. S. Aranson, and W.-K. Kwok, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 118103 (2009).
17. S. J. Ebbens and J. R. Howse, *Soft Matter* **6**, 726 (2010).
18. G. Volpe, I. Buttinoni, D. Vogt, H.-J. Kummerer, and C. Bechinger, *Soft Matter* **7**, 8810 (2011).
19. I. Buttinoni, G. Volpe, F. Kümmel, G. Volpe, and C. Bechinger, *J. Phys.: Condens. Matter* **24**, 284129 (2012).
20. D. B. Weibel, P. Garstecki, D. Ryan, W. R. DiLuzio, M. Mayer, J. E. Seto, and G. M. Whitesides, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **102**, 11963 (2005).
21. R. M. Ford and R. W. Harvey, *Adv. Water Resour.* **30**, 1608 (2007).
22. C. D. Chin, V. Linder, and S. K. Sia, *Lab Chip.* **7**, 41 (2007).
23. W. Yang, V. R. Misko, K. Nelissen, M. Kong, and F. M. Peeters, *Soft Matter* **8**, 5175 (2012).
24. S. van Teeffelen and H. Löwen, *Phys. Rev. E* **78**, 020101 (2008).
25. W. R. Di Luzio, L. Turner, M. Mayer, P. Garstecki, D. B. Weibel, H. C. Berg, and G. M. Whitesides, *Nature* **435**, 1271 (2005).
26. E. Lauga, W. R. DiLuzio, G. M. Whitesides, and H. A. Stone, *Biophys. J.* **90**, 400 (2006).
27. B. M. Friedrich and F. Julicher, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 068102 (2009).
28. L. Lemelle, J.-F. Palierne, E. Chatre, and C. Place, *J. Bacteriol.* **192**, 6307 (2010).
29. R. Di Leonardo, D. Dell'Arciprete, L. Angelani, and V. Iebba, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 038101 (2011).
30. T.-W. Su, L. Xue, and A. Ozcan, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **109**, 16018 (2012).
31. P. Denissenko, V. Kantsler, D. J. Smith, and J. Kirkman-Brown, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **109**, 8007 (2012).

32. F. Kümmel, B. ten Hagen, R. Wittkowski, I. Buttinoni, R. Eichhorn, G. Volpe, H. Löwen, and C. Bechinger, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 198302 (2013).
33. A. Doostmohammadi, M. F. Adamer, S. P. Thampi, and J. M. Yeomans, *Nat. Commun.* **7**, 10557 (2016).
34. D. Marenduzzo, E. Orlandini, M. E. Gates, and J. M. Yeomans, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 118102 (2007).
35. D. Marenduzzo, E. Orlandini, M. E. Gates, and J. M. Yeomans, *Phys. Rev. E* **76**, 031921 (2007).
36. I. Giomi, M. J. Bowick, X. Ma, and M. C. Marchetti, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 228101 (2013).
37. S. P. Thampi, R. Golestanian, and J. M. Yeomans, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 118101 (2013).
38. J. Prost, F. Julicher, and J. F. Joanny, *Nat. Phys.* **11**, 111 (2015).
39. E. J. Hemingway, P. Mishra, M. C. Marchetti, and S. M. Fielding, *Soft Matter* **12**, 7943 (2016).
40. M. M. Norton, P. Grover, M. F. Hagan, and S. Fraden, *Phys. Rev. Lett.* **125**, 178005 (2020).
41. A. Maitra and M. Lenz, *Nat. Commun.* **10**, 920 (2019).
42. L. Metselar, A. Doostmohammadi, and J. M. Yeomans, *J. Chem. Phys.* **150**, 064909 (2019).
43. S. Furthauer, M. Strepel, S. W. Grill, and F. Julicher, *Eur. Phys. J. E* **35**, 89 (2012).
44. D. Debarghya, A. Souslov, A. G. Abanov, and V. Vitelli, *Nat. Commun.* **8**, 1573 (2017).
45. L. V. Mirantsev, *Eur. Phys. J. E* **44**, 112 (2021).
46. E. J. L. de Oliveira, L. V. Mirantsev, M. L. Lyra, and I. N. de Oliveira, *J. Mol. Liq.* **377**, 121513 (2023).
47. Л. В. Миранцев, *ЖЭТФ* **165**, 718 (2024).
48. M. P. Allen and D. J. Tildesly, *Computer Simulations of Liquids*, Clarendon Press, Oxford (1989).