

МИКРОСКОПИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ АКТИВНОГО ПЕРЕХОДА ФРЕДЕРИКСА ВНУТРИ ТРЕХМЕРНОЙ НАНОСКОПИЧЕСКОЙ СФЕРИЧЕСКОЙ ОБЛАСТИ

*Л. В. Миранцев**

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

Поступила в редакцию 3 сентября 2025 г.,
после переработки 5 декабря 2025 г.
Принята к публикации 5 декабря 2025 г.

Ранее предложенная двумерная микроскопическая модель активных нематиков обобщена для активных нематиков внутри трехмерной ограниченной наноскопической сферической области. С помощью моделирования методами молекулярной динамики показано, что если величина самодвижущей силы активных нематических частиц меньше некоторого порогового значения, то ансамбль таких активных частиц внутри трехмерной наноскопической сферической области будет находиться в равновесном состоянии. Если же величина самодвижущей силы превысит эту критическую величину, то весь ансамбль перейдет в состояние вращения, т. е. произойдет так называемый активный переход Фредерикса. Определяются интервалы, в которых находятся пороговые значения самодвижущей силы для некиральных и киральных модельных активных частиц при условиях тангенциального и нормального зацепления директора на границах рассматриваемой наноскопической сферической области.

Ключевые слова: активный переход Фредерикса, активный нематик, трехмерная наноскопическая сферическая область, самодвижущая сила, нормальное и тангенциальное зацепление директора

DOI: 10.31857/S3034641X26010099

1. ВВЕДЕНИЕ

Активными системами являются естественные или искусственные системы, состоящие из элементов, не находящихся в состоянии термодинамического равновесия благодаря энергии, получаемой либо из окружающей среды, либо за счет внутренних химических процессов [1–5]. Примерами естественных активных систем являются живые существа (птицы, рыбы, бактерии и пр.) [6–8]. Активные системы также могут быть созданы искусственным путем из объектов, использующих световую или химическую энергию [9, 10].

Интересной особенностью активных систем является существование в них коллективного движения, при котором самодвижущиеся элементы образуют группы, которые движутся как единое целое в масштабах, значительно превышающих размеры

отдельных элементов. Поэтому активные естественные и искусственные системы являются объектами интенсивных экспериментальных и теоретических исследований.

Многие активные системы, например бактерии, можно рассматривать как ансамбли продолговатых частиц, напоминающих молекулы нематических жидких кристаллов, на которые действуют не только силы межчастичного взаимодействия, но и самодвижущие силы. Такие «активные нематики» имеют способность спонтанно менять ориентацию и течь в отсутствие внешних сил. В условиях пространственного ограничения активные нематики могут как находиться в неподвижном состоянии, так и демонстрировать хаотичное, периодическое, и даже циркулярное течения.

Сравнительно недавно было экспериментально обнаружено [11], что внутри трехмерных сферических капель активные нематики могут демонстрировать устойчивое неподвижное состояние. Однако внутри таких капель при увеличении их размеров или усилении активности нематика наблюдаются те-

* E-mail: mlv@ipme.ru

чения. Такой переход из неподвижного состояния в состояние течения был назван активным переходом Фредерикса по аналогии с пассивным переходом Фредерикса в обычных нематических материалах под действием внешних магнитных или электрических полей [12, 13]. Приведенное в работе [11] теоретическое описание активного перехода Фредерикса схоже с феноменологическими континуальными описаниями, развитыми в работах [4, 14–25]. Эти описания используют уравнения движения для тензорного нематического параметра порядка \mathbf{Q} и поля скоростей \mathbf{u} , и довольно непросто найти однозначную связь между параметрами, используемыми в этих описаниях, с геометрическими (размеры, форма и т. п.) и энергетическими характеристиками отдельных активных частиц. Кроме того, в этих описаниях используется полностью феноменологический параметр активности α причем активное напряжение в них пропорционально \mathbf{Q} . Из такой пропорциональности активного напряжения тензорному нематическому параметру порядка следует, что в отсутствие дальнего ориентационного порядка в среде в ней нет активности. В действительности, однако, активность частиц вызвана действием на них самодвижущих сил, т. е. является индивидуальным свойством отдельных частиц, которое не зависит от наличия дальнего ориентационного порядка в их ансамбле. Наконец, в работе [11] отмечалось, что экспериментально исследованные в ней капли были довольно большими (≥ 30 мкм), а в меньших каплях число микротубул, которые были образующими элементами в активной среде внутри капель, недостаточно велико для корректного использования вышеупомянутых континуальных подходов.

Сравнительно недавно в работе [26] нами была предложена двумерная (2D) микроскопическая модель активных нематиков, состоящих из продолговатых частиц, взаимодействующих друг с другом посредством изотропного потенциала типа Леннарда-Джонса и анизотропного потенциала Майера–Заупе. Кроме того, каждая такая модельная частица имеет «отросток», через который испускается струя вещества, образованная благодаря некоторой внутренней химической реакции. В случае некиральных частиц этот отросток находится у одного из концов частицы и направлен вдоль ее длинной оси, тогда как у киральных частиц такой отросток является боковым и образует некоторый угол с их длинной осью. В результате испускания такой струи в случае некиральных частиц возникает дополнительная реактивная самодвижущая сила \mathbf{f}_0 , направленная вдоль их длинных осей, а в случае

киральных частиц возникает не только самодвижущая сила \mathbf{f}_0 , но также и дополнительный момент \mathbf{m}_0 , приводящий к самовращению частиц относительно центра их масс. Используя эту модель, мы осуществили в работе [26] моделирование методами молекулярной динамики (MD) поведения ансамбля таких модельных активных нематических частиц внутри двумерной наноскопической круглой области при условиях тангенциального и нормального зацепления директора на ее границе. В результате было найдено, что внутри такой области наши киральные модельные частицы образуют структуры с пространственно-временным поведением, качественно схожим с поведением, предсказанным в работах [4, 14–16] на основе континуальных моделей активных нематиков. Наша микроскопическая модель также использовалась в MD-моделировании поведения как некиральных и киральных активных нематиков внутри двумерной кольцеобразной наноскопической области [27], так и двойных смесей пассивных (без самодвижущих сил) и активных нематиков и смесей активных нематиков с различной киральностью внутри круглой 2D-области [28], а также разбавленных активных нематиков внутри ограниченных 2D-областей различной формы [29, 30]. Это моделирование выявило, что в таких разбавленных пространственно-ограниченных 2D-ансамблях наших модельных киральных активных частиц образуются кластеры, демонстрирующие поведение круговых поплавков (circular swimmers). Поэтому представляется весьма интересным обобщить нашу двумерную микроскопическую модель активных нематических частиц на случай трехмерного (3D) пространства и использовать ее для MD-моделирования поведения таких частиц внутри сферических 3D-капель.

В настоящей работе мы приводим такое обобщение 2D-модели активных нематиков, использованной в наших предыдущих работах [26–30], и проводим с ее помощью MD-моделирование поведения ансамблей некиральных и киральных модельных частиц внутри ограниченной наноскопической сферической 3D-области при условиях тангенциального и нормального зацепления директора на ее границах. Показано, что если величина самодвижущей силы, действующей на активные нематические частицы, меньше некоторого порогового значения, ансамбль таких активных частиц внутри ограниченной наноскопической сферической 3D-области будет находиться в состоянии динамического равновесия. Если же величина самодвижущей силы превосходит эту пороговую величину, ансамбль наших модель-

ных частиц как единое целое перейдет в состояние вращения, т.е. произойдет так называемый активный переход Фредерикса. Определяются интервалы, содержащие эти пороговые значения для некиральных и киральных частиц при тангенциальном и нормальном зацеплении директора на границах наноскопической сферической области.

2. МОДЕЛЬ

Моделируется поведение активных нематиков внутри ограниченной наноскопической 3D-области с использованием 3D-модели активных частиц, изображенной на рис. 1, которая является обобщением 2D-модели, используемой в наших предыдущих работах [26–30].

На этом рисунке видно, что наша модельная частица имеет отросток C , из которого испускается струя D некоторого вещества, возникающая в результате химической реакции внутри частицы. Частица, показанная на рис. 1, является киральной, так как ее боковой отросток C , образующий полярный угол ϕ с ее длинной осью AB , нарушает ее зеркальную симметрию. В случае некиральной модельной частицы отросток C располагается вблизи ее конца и направлен вдоль длинной оси частицы. В результате струя D порождает только дополнительную самодвижущую силу \mathbf{f}_0 , направленную вдоль оси AB . В случае киральной частицы эта струя порождает не только реактивную самодвижущую силу \mathbf{f}_0 , но также и дополнительный момент \mathbf{m}_0 , приводящий к самовращению частицы относительно ее центра масс. Следует отметить, что некоторым реальным аналогом модельной частицы, изображенной на рис. 1, являются наночастицы [31], на поверхности которых происходят химические реакции их вещества с окружающей средой, приводящие к выделению продуктов реакции в окружающую среду и появлению реактивной самодвижущей силы. Фундаментальная разница между модельной 3D-частицей, изображенной на рис. 1, и модельными частицами в наших предыдущих работах [26–30], в которых рассматривается их поведение в 2D-пространстве, заключается в том, что в 3D-пространстве модельная частица может свободно вращаться вокруг своей длинной оси AB , вследствие чего азимутальный угол ψ , показанный на этом рисунке, может меняться от 0 до 2π . Ниже мы обсудим, к чему приводит такое вращение.

Как и в наших предыдущих работах [26–30], взаимодействия между модельными частицами описы-

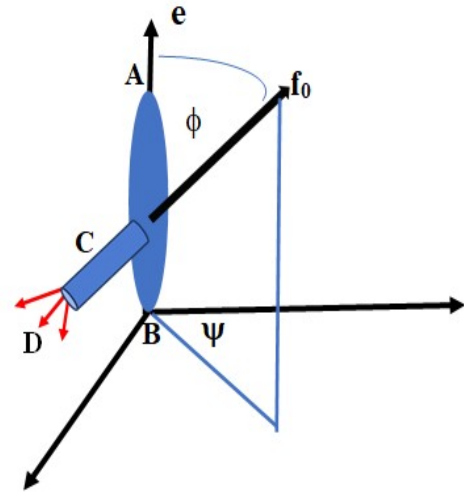


Рис. 1. Трехмерная модель активной нематической частицы: AB — ее длинная ось, \mathbf{e} — единичный вектор, направленный вдоль этой оси, C — боковой отросток частицы, D — струя, испускаемая из этого отростка, \mathbf{f}_0 — реактивная самодвижущая сила, возникающая в результате такого испускания, ϕ — полярный угол между силой \mathbf{f}_0 и длинной осью AB , ψ — азимутальный угол поворота силы \mathbf{f}_0 вокруг длинной оси частицы

ваются с помощью следующих изотропного потенциала Леннарда-Джонса и анизотропного потенциала Майера – Заупе:

$$U_{LJ}(r_{ij}) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right], \quad (1)$$

$$U_{anis}(r_{ij}, \theta_{ij}) = -\epsilon_{anis} \left[\frac{3}{2} \cos^2 \theta_{ij} - \frac{1}{2} \right] \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6. \quad (2)$$

Здесь r_{ij} — расстояние между центрами масс частиц i и j , θ_{ij} — угол между единичными векторами \mathbf{e}_i и \mathbf{e}_j , направленными вдоль их длинных осей (см. рис. 1), σ — характерный радиус взаимодействия, ϵ и ϵ_{anis} — константы соответственно изотропного и анизотропного взаимодействий. При $\epsilon_{anis} \geq 0$ анизотропный потенциал взаимодействия способствует параллельной ориентации длинных осей модельных частиц, а при $\epsilon_{anis} \leq 0$ — взаимно перпендикулярной ориентации этих осей. Как говорилось выше, наши модельные частицы имеют отросток, испускающий струю некоторого вещества, вследствие чего возникают реактивная самодвижущая сила \mathbf{f}_0 и дополнительный момент \mathbf{m}_0 , приводящий к самовращению частиц относительно их центра масс. Поскольку мы рассматриваем поведение ансамбля таких модельных частиц в 3D-пространстве, мы должны вычислить x -, y - и z -компоненты такой самодвижущей силы в трехмерной лабораторной системе ко-

ординат. Для этого можно воспользоваться следующим хорошо известным соотношением векторного анализа [32]:

$$(\mathbf{a} \cdot \mathbf{c})(\mathbf{b} \cdot \mathbf{d}) = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{d})(\mathbf{b} \cdot \mathbf{c}) + [\mathbf{a} \times \mathbf{b}] \cdot [\mathbf{c} \times \mathbf{d}]. \quad (3)$$

Далее мы подставляем в это соотношение самодвижущую силу \mathbf{f}_0 вместо вектора \mathbf{a} , единичный вектор \mathbf{e}_i вместо векторов \mathbf{b} и \mathbf{d} и ортогональные единичные векторы \mathbf{n}_x , \mathbf{n}_y и \mathbf{n}_z соответствующих координатных осей вместо вектора \mathbf{c} . Тогда с учетом того, что скалярное произведение $\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_i$ равно единице, скалярные произведения $\mathbf{f}_0 \cdot \mathbf{n}_x$, $\mathbf{f}_0 \cdot \mathbf{n}_y$, $\mathbf{f}_0 \cdot \mathbf{n}_z$ равны компонентам x , y , и z самодвижущей силы \mathbf{f}_0 в лабораторной системе координат, а скалярное произведение $\mathbf{f}_0 \cdot \mathbf{e}_i$, согласно рис. 1, равно $f_0 \cos \phi$, выражения в левой части соотношения (3) равны компонентам f_{0x} , f_{0y} и f_{0z} , а первые члены в правой части этого соотношения будут соответственно $f_0 e_x \cos \phi$, $f_0 e_y \cos \phi$ и $f_0 e_z \cos \phi$. Согласно рис. 1, компоненты содержащегося во втором члене правой части соотношения (3) векторного произведения $\mathbf{f}_0 \times \mathbf{e}$ должны быть пропорциональны произведениям $\sin \phi \cos \psi$ и $\sin \phi \sin \psi$. Как уже говорилось ранее, из-за возможности вращения наших модельных частиц вокруг своих длинных осей AB угол ψ может меняться от 0 до 2π . При этом потенциалы межчастичного взаимодействия (1) и (2) совершенно не зависят от этого угла. Тогда мы можем просто провести усреднение по углу ψ , которое обращает в нуль компоненты векторного произведения $\mathbf{f}_0 \times \mathbf{e}$ во втором члене правой части соотношения (3). Вследствие этого мы окончательно получаем следующие выражения для самодвижущей силы \mathbf{f}_0 , действующей на i -ю частицу в лабораторной системе координат:

$$\mathbf{f}_0 = f_0 \mathbf{e}_i \cos \phi. \quad (4)$$

Далее, поскольку дополнительный момент самовращения \mathbf{m}_0 , порождаемый самодвижущей силой \mathbf{f}_0 , должен быть пропорционален векторному произведению $\mathbf{f}_0 \times \mathbf{e}$, усреднение по углу ψ обращает в нуль также и его. Таким образом, в 3D-пространстве вследствие возможности вращения вокруг своих длинных осей наши киральные модельные частицы ($\phi \neq 0$) отличаются от некиральных ($\phi = 0$) только величинами x -, y -, и z -компонент самодвижущей силы \mathbf{f}_0 в лабораторной системе координат.

Рассматриваемая нами система состоит из 1566 модельных продолговатых частиц (см. рис. 1), заключенных внутри наноскопической сферической 3D-области радиусом 7σ . Ее границы образованы неподвижными «призрачными» (ghost) продолговатыми частицами, каждая из которых ориентирована

вдоль радиуса, проведенного из центра сферической области в точку расположения заданной призрачной частицы. Константа взаимодействия ϵ_{anis} для потенциала (2), описывающего анизотропное взаимодействие между модельными частицами, берется равной $\epsilon_{anis} = 0.25\epsilon \geq 0$. Изотропная часть взаимодействия между подвижными нематическими частицами и неподвижными призрачными частицами также описывается потенциалом (1) с константой взаимодействия ϵ , а анизотропное взаимодействие между этими частицами — потенциалом (2), но с константой взаимодействия ϵ_{anis} с абсолютной величиной 5ϵ . Такая большая по величине константа взаимодействия соответствует условиям сильного зацепления директора на границах рассматриваемой сферической области. Выбор знака этой константы взаимодействия зависит от выбора соответствующих условий зацепления директора. Для тангенциального зацепления мы берем эту константу отрицательной, а для нормального — положительной.

Трансляционное движение центра масс каждой подвижной i -й модельной частицы и вращение ее единичного ориентационного вектора \mathbf{e}_i описываются следующими классическими уравнениями движения:

$$\frac{\partial^2 \mathbf{r}_i}{\partial t^2} = \frac{\mathbf{F}_i}{m}, \quad \frac{\partial \mathbf{e}_i}{\partial t} = \boldsymbol{\omega}_i \times \mathbf{e}_i, \quad \frac{\partial \boldsymbol{\omega}_i}{\partial t} = \frac{\boldsymbol{\tau}_i}{I}. \quad (5)$$

Здесь \mathbf{f}_i — полная сила, действующая на i -ю частицу со стороны других частиц ограничивающей границы, а также самодвижущая сила, $\boldsymbol{\tau}_i$ — полный момент, действующий на нее, $\boldsymbol{\omega}_i$ — угловая скорость вращения вектора \mathbf{e}_i , m и I — масса и момент инерции частицы соответственно, которые считались равными единице в безразмерных MD-единицах [33]. Как и в наших предыдущих работах [26–30], MD-моделирование проводилось на NVT-ансамблях и на каждом временном шаге уравнения движения решались с помощью стандартного алгоритма, описанного в [33], а приведенная температура системы $k_B T / \epsilon$ (k_B — постоянная Больцмана) поддерживалась постоянной и равной 0.9 с помощью термостата, предложенного там же.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ MD-МОДЕЛИРОВАНИЯ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

MD-моделирование начинается с конфигурации ансамбля модельных частиц, изображенной на рис. 2. В этой конфигурации центры масс модельных частиц случайным образом распределены

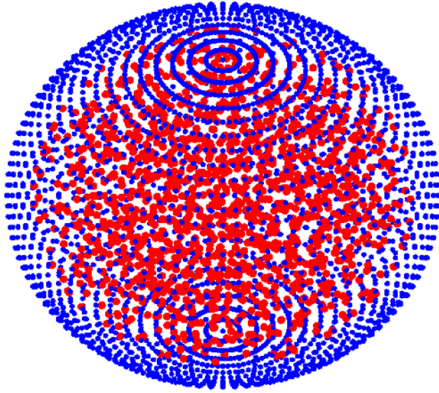


Рис. 2. Начальная конфигурация модельных активных нематических частиц внутри сферической 3D-области радиусом 7σ . Красные точки означают центры масс подвижных модельных частиц, синие — положения неподвижных прозрачных частиц, задающих условия зацепления директора на границах сферической области

внутри сферической области радиусом 7σ , а единичные векторы \mathbf{e}_i , определяющие ориентацию их длинных осей, направлены также случайным образом.

В результате мы получаем равновесные конфигурации пассивных ($f_0 = 0$) нематических частиц, изображенные на рис. 3. Как и ожидалось, они совершенно типичны для обычных пассивных нематиков внутри сферической области при условиях тангенциального и нормального зацепления директора на ее границах.

Затем мы включаем самодвижущую силу \mathbf{f}_0 и, стартуя из конфигураций, показанных на рис. 3, проводим MD-моделирование нашего ансамбля модельных частиц внутри вышеупомянутой сферической области при условиях тангенциального и нормального зацепления директора при различных значениях самодвижущей силы \mathbf{f}_0 и угла ϕ . Чтобы изучить динамику поведения этого ансамбля, мы выбираем группу частиц внутри некоторой сферической области (см. малые круги на рис. 3) радиусом R_0 , равным длине обрезания 3σ , который обычно используется в MD-моделировании систем с межчастичным взаимодействием, описываемым потенциалом Леннарда-Джонса. В процессе MD-моделирования мы следим за частицами из этой группы и вычисляем следующие величины: 1) положение ее центра масс

$$\mathbf{r}_c = \frac{1}{N_c} \sum_i \mathbf{r}_i,$$

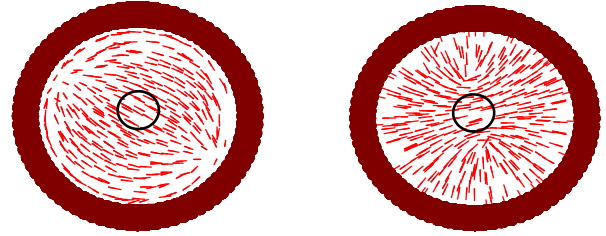


Рис. 3. Конфигурации пассивных ($f_0 = 0$) частиц, полученные из начальной конфигурации, изображенной на рис. 2, после MD-моделирования в течении 100000 временных шагов (1 временной шаг = 10^{-4} MD-ед. времени) при сильном тангенциальном (левая панель) и сильном нормальном (правая панель) зацеплении директора. Показаны мгновенные снимки модельных частиц (красные черточки), расположенных внутри центрального слоя сферической области толщиной 2σ , параллельного плоскости yz , в момент времени 10 MD-ед. времени. Закрашенные кольцеобразные области содержат неподвижные прозрачные частицы, обеспечивающие условия зацепления директора на границе сферической области. Малые круги внутри центральных слоев обозначают сферические области, содержащие выбранные группы частиц, находящиеся под наблюдением в течении дальнейшего моделирования

где суммирование ведется по всем N_c частицам, принадлежащим ей; 2) вектор средней ориентации

$$\mathbf{e}_c = \frac{1}{N_c} \sum_i \mathbf{e}_i$$

частиц из этой группы; 3) ее средний радиус

$$R(t) = \frac{1}{N_c} \sum_i |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_c|$$

и 4) средний порядок

$$S = \frac{1}{N_c(N_c - 1)} \sum_{i,j} \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j$$

внутри выделенной группы частиц.

На рис. 4 приведены временные зависимости угла Θ , который вектор \mathbf{e}_c образует с осью z , для некиральных ($\phi = 0$) и киральных ($\phi = \pi/4$) модельных частиц при условии тангенциального зацепления директора на границах сферической области для различных значений самодвижущей силы f_0 . Видно, что когда эта сила достаточно велика ($f_0 = 5$ MD-ед. силы), угол Θ растет со временем как для некиральных так и для киральных модельных частиц. Такой рост означает, что имеет место вращение внутри выбранной группы модельных частиц и, скорее всего, во всей рассматриваемой сферической области. Этот вывод может быть подтвержден приведен-

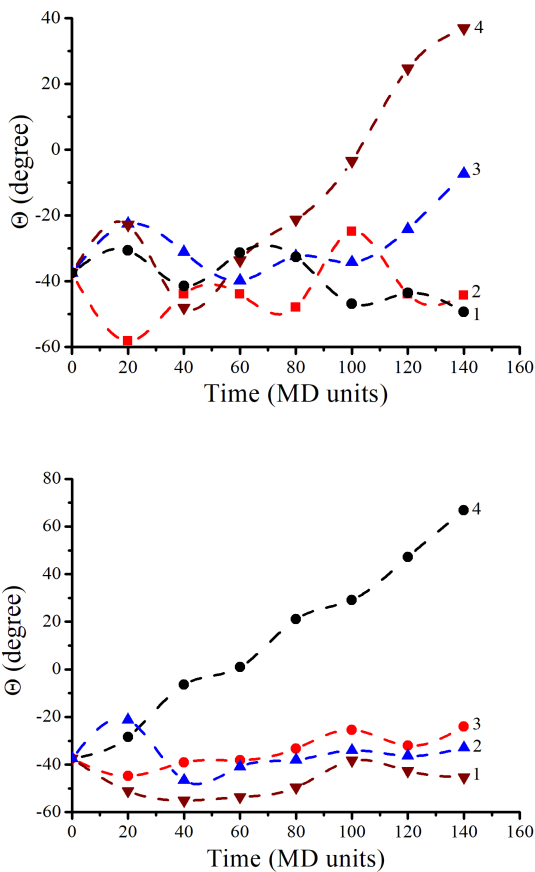


Рис. 4. Временные зависимости угла Θ между вектором средней ориентации \mathbf{e}_c внутри выделенной группы частиц и осью z при различных величинах самодвижущей силы f_0 при условии тангенциального зацепления директора на границах сферической области. Верхняя панель относится к некиральным ($\phi = 0$), а нижняя — к киральным ($\phi = \pi/4$) частицам. Время t отсчитывается с момента включения самодвижущей силы f_0 . Кривые 1, 2, 3, 4 соответствуют $f_0 = 1.5, 2, 3, 5$ MD-ед. силы

ными на рис. 5 мгновенными снимками некиральных ($\phi = 0$) модельных частиц (красные черточки), расположенных внутри центрального, параллельного плоскости yz слоя нашей сферической области толщиной 2σ , сделанные в моменты времени 60, 80 и 100 MD-ед. с момента включения самодвижущей силы $f_0 = 5$ MD-ед. силы. На этих снимках ясно видно вращение наших модельных частиц.

В то же время наши результаты показывают, что изменение вектора \mathbf{r}_c , который определяет положение центра масс вышеупомянутой выбранной группы частиц, в процессе MD-моделирования не превосходит величину порядка σ , т. е. характерный размер частиц, взаимодействующих посредством потенциа-

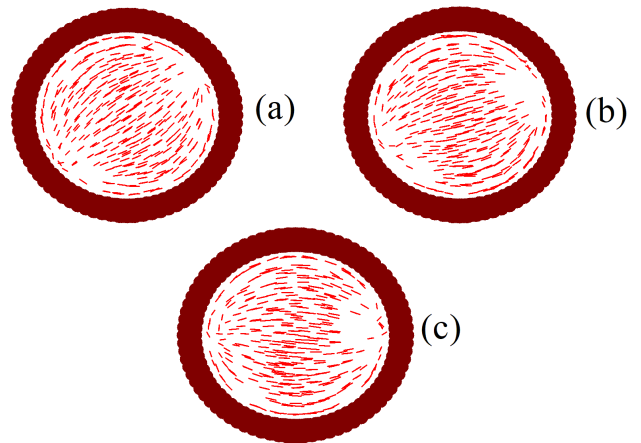


Рис. 5. Мгновенные снимки модельных некиральных ($\phi = 0$) частиц (красные черточки), расположенных внутри центрального, параллельного плоскости yz слоя рассматриваемой сферической области толщиной 2σ , сделанные при $f_0 = 5$ MD-ед. силы при тангенциальном зацеплении директора на ее границах в моменты времени 60 (а), 80 (b) и 100 (c) MD-ед. с момента включения самодвижущей силы f_0

ла Леннарда-Джонса. Кроме того, изменение среднего радиуса $R(t)$ области, занимаемой этой группой частиц, не превосходит несколько процентов, а средний порядок S внутри этой группы составляет величину не менее 0.8–0.9. Эти факты говорят о том, что в отличие от работы [11] здесь мы наблюдаем не течение внутри рассматриваемой наноскопической сферической области, а только вращение модельных частиц внутри нее под действием самодвижущих сил.

Из рис. 4 также следует, что в случае некиральных частиц ($\phi = 0$), когда f_0 составляет 1.5 или 2 MD-ед. силы (верхняя панель на рис. 4, кривые 1 и 2), мы не видим существенного роста угла Θ со временем, а наблюдаем только небольшие колебания относительно его начальной величины. И только при $f_0 = 3$ или 5 MD-ед. силы (там же, кривые 3 и 4) угол Θ заметно растет со временем. Схожее поведение имеет место и для киральных модельных частиц ($\phi = \pi/4$), но в этом случае мы видим рост угла Θ только при $f_0 = 5$ MD-ед. силы (нижняя панель на рис. 4, кривая 4), тогда как при $f_0 = 1.5, 2$ и 3 MD-ед. силы (там же, кривые 1–3) нет такого заметного роста угла Θ , а имеют место только небольшие флуктуации относительно его начальной величины. Это означает, что когда самодвижущая сила f_0 недостаточно велика, не существует вращения внутри вышеупомянутой группы модельных частиц и, скорее всего, во всей рассматриваемой сферической об-

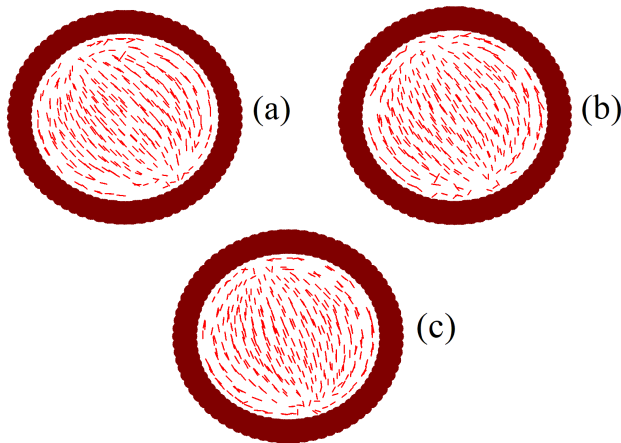


Рис. 6. Мгновенные снимки, аналогичные снимкам на рис. 5, но при $f_0 = 1.5$ MD-ед. силы

ласти. Этот вывод также может быть подтвержден мгновенными снимками (рис. 6) модельных частиц внутри того же самого центрального слоя, что и на рис. 5, но сделанными при $f_0 = 1.5$ MD-ед. силы.

На этих рисунках легко заметить, что вращение наших модельных частиц отсутствует, а наблюдаются только небольшие флуктуации относительно их некоторой устойчивой ориентации. Полученные результаты ясно говорят о том, что должно быть некоторое пороговое значение самодвижущей силы f_0 , ниже которого существует равновесное состояние рассматриваемой системы, а выше этого порогового значения ансамбль наших модельных частиц внутри наноскопической сферической области переходит в состояние вращения. На рис. 4 также видно, что при тангенциальном зацеплении директора на границах этой области эта пороговая величина самодвижущей силы для некиральных частиц лежит в интервале от 2 до 3 MD-ед. силы, тогда как для киральных частиц ($\phi = \pi/4$) пороговое значение силы f_0 находится в интервале от 3 до 5 MD-ед. силы. Этот результат можно качественно объяснить тем фактом, что в уравнениях (4)–(6) при одинаковой величине самодвижущей силы f_0 ее проекции на оси x , y , и z лабораторной системы отсчета для некиральных частиц ($\phi = 0$) в $\sqrt{2}$ раз больше, чем для киральных ($\phi = \pi/4$).

Аналогичные результаты получаются при MD-моделировании вышеупомянутого ансамбля модельных частиц при условиях нормального зацепления директора на границах наноскопической сферической области. Это легко можно видеть на рис. 7, верхняя панель которого демонстрирует временные зависимости угла Θ для некиральных ($\phi = 0$), а нижняя — для киральных ($\phi = \pi/4$) модельных час-

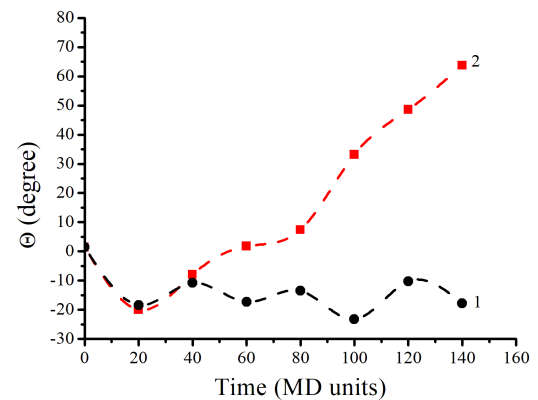
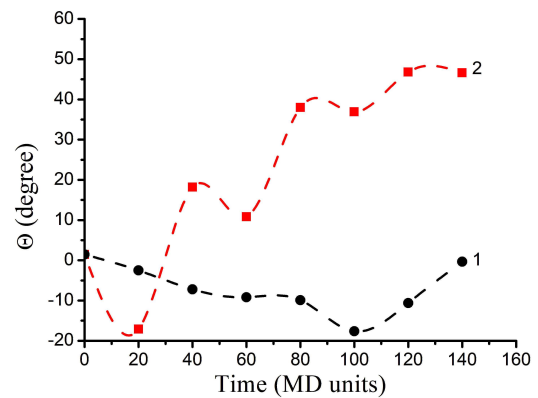


Рис. 7. Временные зависимости угла Θ при разных значениях самодвижущей силы f_0 в условиях нормального зацепления директора на границе наноскопической сферической области. Верхняя панель соответствует некиральным ($\phi = 0$), а нижняя — киральным ($\phi = \pi/4$) модельным частицам. На верхней панели кривая 1 соответствует $f_0 = 1.5$ MD-ед. силы, а кривая 2 — $f_0 = 3$ MD-ед. силы. На нижней панели кривая 1 соответствует $f_0 = 3$ MD-ед. силы, а кривая 2 — $f_0 = 5$ MD-ед. силы

тиц при условиях нормального зацепления директора при различных значениях самодвижущей силы f_0 . Из рисунка следует, что для некиральных частиц при $f_0 = 3$ MD-ед. силы угол Θ растет со временем (кривая 2 на верхней панели), а при $f_0 = 1.5$ MD-ед. силы (там же, кривая 1) мы не видим такого роста. Аналогичное поведение имеет место для киральных частиц (нижняя панель на рис. 7), но в этом случае при $f_0 = 3$ MD-ед. силы рост угла Θ не наблюдается, а при $f_0 = 5$ MD-ед. силы такой рост имеет место. Из этих рисунков следует, что при условиях нормального зацепления директора для некиральных модельных частиц пороговое значение самодвижущей силы f_0 находится в интервале от 1.5 до 3 MD-ед. силы, а для киральных частиц эта пороговая величина лежит в интервале от 3 до 5 MD-ед. силы.

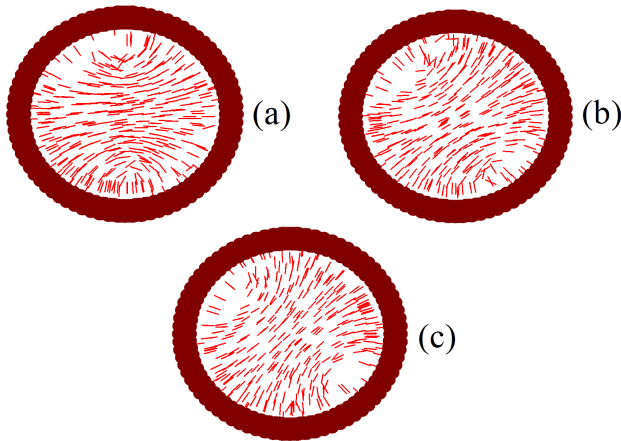


Рис. 8. Мгновенные снимки, аналогичные снимкам на рис. 5 и 6, но сделанные в условиях нормального зацепления директора на границе наноскопической сферической области при $f_0 = 3$ MD-ед. силы и $\phi = 0$

Такая разница также качественно может быть объяснена тем фактом, что в уравнениях (4)–(6) при одинаковой величине самодвижущей силы f_0 ее проекции на оси x , y и z лабораторной системы отсчета для некиральных частиц в $\sqrt{2}$ раз больше, чем для киральных. Из этих результатов также следует, что, как и в случае условий тангенциального зацепления директора, при нормальном зацеплении на границе нашей наноскопической сферической области достаточно слабая самодвижущая сила f_0 не может привести к вращению модельных частиц внутри вышеупомянутой выбранной группы, а следовательно, и к вращению внутри всей рассматриваемой сферической области. Если же величина этой самодвижущей силы превосходит некоторую пороговую величину, то она вызывает такое вращение.

Как и в случае тангенциального зацепления директора, справедливость этого вывода подтверждается мгновенными снимками (рис. 8) модельных частиц внутри центрального и параллельного плоскости yz слоя нашей сферической области толщиной 2σ , которые были получены для некиральных ($\phi = 0$) частиц при $f_0 = 3$ MD-ед. силы в моменты времени 60, 80, 100 MD-ед. На рис. 9 представлены аналогичные снимки, сделанные для тех же частиц, но при $f_0 = 1.5$ MD-ед. силы. На этих рисунках легко видеть наличие вращения наших модельных частиц при самодвижущей силе $f_0 = 3$ MD-ед. силы и отсутствие такого вращения при $f_0 = 1.5$ MD-ед. Далее, как и в случае тангенциального зацепления директора, результаты моделирования показывают, что и при условиях нормального зацепления изменение вектора \mathbf{r}_c , который определяет положение цен-

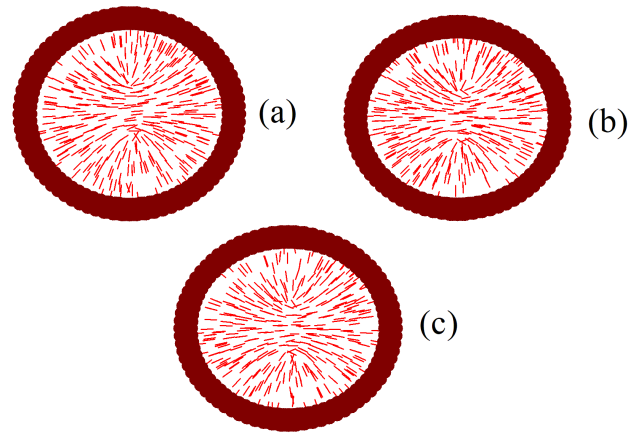


Рис. 9. Мгновенные снимки, аналогичные снимкам на рис. 8, но полученные при $f_0 = 1.5$ MD-единиц силы

тра масс выбранной группы частиц, в процессе MD-моделирования не превосходит величины порядка σ , а изменение среднего радиуса $R(t)$ области, занимаемой этой группой частиц, не превосходит несколько процентов, а средний порядок S внутри этой группы также равен 0.8–0.9. Эти результаты говорят о том, что и при условиях нормального зацепления директора на границах рассматриваемой сферической области самодвижущие силы вызывают только вращение модельных частиц внутри нее и не приводят к появлению течений. Эти результаты также показывают, что для некиральных частиц ($\phi = 0$) пороговая величина самодвижущей силы для возникновения такого вращения лежит в интервале от 1.5 до 3 MD-ед. силы, а для киральных частиц ($\phi = \pi/4$) в интервале от 3 до 5 MD-ед. силы. Качественное объяснение этого факта такое же, как и приведенное выше для случая тангенциального зацепления.

Все изложенные выше результаты позволяют нам сделать заключение, что они соответствуют не чему иному, как активному переходу Фредерикса внутри наноскопической сферической области, который достаточно хорошо описывается в рамках предложенной нами микроскопической 3D-модели активных нематических частиц.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе представлена микроскопическая модель активных некиральных ($\phi = 0$) и киральных ($\phi = \pi/4$) частиц, которая является обобщением нашей предыдущей двумерной модели [26–30] на случай трехмерного пространства. С помощью этой модели проводится MD-моделирование

поведения ансамбля активных некиральных и киральных частиц внутри наноскопической сферической 3D-области при условиях тангенциального и нормального зацепления директора на границах этой области. Результаты этого моделирования показывают, что когда самодвижущие силы f_0 , действующие на модельные частицы, достаточно слабы, ансамбль этих частиц внутри рассматриваемой сферической области находится в состоянии равновесия. Если же самодвижущие силы достаточно сильны, модельные частицы начинают вращаться. Таким образом, результаты нашего моделирования демонстрируют так называемый активный переход Фредерикса внутри рассматриваемой наноскопической области. Установлены интервалы, в которых должны находиться пороговые значения самодвижущих сил для некиральных и киральных частиц при условиях тангенциального и нормального зацепления директора. Следует отметить, что в отличие от работы [11] результаты нашего моделирования не демонстрируют наличия существенных трансляционных смещений модельных частиц, что означает отсутствие течений в рассматриваемой наноскопической сферической области. Такое отличие поведения нашего ансамбля модельных частиц от поведения активной среды в каплях, исследованных экспериментально в работе [11], можно объяснить тем фактом, что эти капли были макроскопическими радиусом не менее 30 мкм, тогда как мы моделировали поведение ансамбля, состоящего всего из 1566 активных модельных частиц. В связи с этим представляется весьма интересным провести экспериментальное исследование активного перехода Фредерикса в наноскопических каплях.

ЛИТЕРАТУРА

1. S. Ramaswamy, *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **1**, 323 (2010).
2. C. Bechinger, R. Di Leonardo, H. Lowen, 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. A. Cavagna and I. Giardina, *Ann. Rev. Condens. Matter Phys.* **5**, 183 (2014).
7. U. Lopez, J. Gautrais, I. D. Couzin, and G. Theraulaz, *Interface Focus* **2**, 693 (2012).
8. J. D. Partridge, *Appl. Environm. Microbiol.* **88**, e01853 (2022).
9. M. Rey, G. Volpe, and G. Volpe, *ACS Photonics* **10**, 1188 (2023).
10. A. Walther and A. H. E. Muller, *Chem. Rev.* **113**, 5194 (2013).
11. S. Alam, B. Najma, A. Singh, J. Laprade, G. Gajeshwar, H. G. Yevick, A. Baskaran, P. J. Foster, and G. Duclos, *Phys. Rev. X* **14**, 041002 (2024).
12. P. G. de Gennes, *The Physics of Liquid Crystals*, Oxford Univ. Press (1974) [П. де Жен, *Физика жидких кристаллов*, Мир, Москва (1977)].
13. L. M. Blinov, *Electro- and Magneto-Optics of Liquid Crystals*, Nauka, Moscow (1978), in Russian [Л. М. Блинов, *Электро- и магнитооптика жидких кристаллов*, Наука, Москва (1978)].
14. A. Doostmohammadi, M. F. Adamer, S. P. Thampi, and J. M. Yeomans, *Nat. Commun.* **7**, 10557 (2016).
15. D. Marenduzzo, E. Orlandini, M. E. Gates, and J. M. Yeomans, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 118102 (2007).
16. D. Marenduzzo, E. Orlandini, M. E. Gates, and J. M. Yeomans, *Phys. Rev. E* **76**, 031921 (2007).
17. I. Giomi, M. J. Bowick, X. Ma, and M. C. Marchetti, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 228101 (2013).
18. S. P. Thampi, R. Golestanian, and J. M. Yeomans, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 118101 (2013).
19. J. Prost, F. Julicher, and J. F. Joanny, *Nat. Phys.* **11**, 111 (2015).
20. E. J. Hemingway, P. Mishra, M. C. Marchetti, and S. M. Fielding, *Soft Matter* **12**, 7943 (2016).
21. M. M. Norton, P. Grover, M. F. Hagan, and S. Fraden, *Phys. Rev. Lett.* **125**, 178005 (2020).
22. A. Maitra and M. Lenz, *Nat. Commun.* **10**, 920 (2019).
23. L. Metselar, A. Doostmohammadi, and J. M. Yeomans, *J. Chem. Phys.* **150**, 064909 (2019).

24. S. Furthauer, M. Stempel, S. W. Grill, and F. Julicher, *Eur. Phys. J. E* **35**, 89 (2012).
25. D. Debarghya, A. Souslov, A. G. Abanov, and V. Vitelli, *Nat. Commun.* **8**, 1573 (2017).
26. L. V. Mirantsev, *Eur. Phys. J. E* **44**, 112 (2021).
27. E. J. L. de Oliveira, L. V. Mirantsev, M. L. Lyra, and I. N. de Oliveira, *J. Mol. Liq.* **377**, 121513 (2023).
28. L. V. Mirantsev, *JETP* **165**, 725 (2024) [Л. В. Миранцев, *ЖЭТФ* **165**, 718 (2024)].
29. L. V. Mirantsev, *JETP* **167** (2025) [Л. В. Миранцев, *ЖЭТФ*, 167, 132 (2025)].
30. M. L. Lyra, M. S. S. Pereira, L. V. Mirantsev, and I. N. de Oliveira, *Braz. J. Phys.* **55**, 234 (2025).
31. I. Santiago and F. Simmel, *Nanomaterials* **9**, 1680 (2019).
32. G. E. Hay, *Vector and Tensor Analysis*, Dover Publ. Inc., New York (1953).
33. M. P. Allen and D. J. Tildesly, *Computer Simulations of Liquids*, Clarendon Press, Oxford (1989).

Microscopic Description of Active Freedericksz Transition Inside Three-Dimensional Nanoscopic Spherical Region

L. V. Mirantsev

Institute for Problems in Mechanical Engineering
of the Russian Academy of Sciences
199178, St. Petersburg, Russia

Abstract

The previously proposed two-dimensional microscopic model of active nematic is generalized for active nematic inside a three-dimensional bounded nanoscopic spherical region. Using molecular dynamics simulations, it is shown that if the magnitude of the self-propelling force of active nematic particles is less than a certain threshold value, the ensemble of such active particles inside a nanoscopic spherical region will be in an equilibrium state. If the magnitude of the self-propelling force exceeds this critical value, the entire ensemble will transit to a state of rotation, i.e., the so-called active Freedericksz transition. The intervals in which the threshold values of the self-propelled force for non-chiral and chiral model active particles are located under conditions of tangential and normal anchoring at the boundaries of the considered nanoscopic spherical region are determined.

Keywords: active Freedericksz transition, active nematic, three-dimensional nanoscopic spherical region, self-propelling force, normal and tangential anchoring.