

ОБЗОРЫ АКТУАЛЬНЫХ ПРОБЛЕМ

Топологические дефекты в активных жидких кристаллах

И.С. Арансон

Широкий класс неравновесных систем, состоящих из самодвижущихся объектов (агентов), часто называют активной материей. Наиболее представительными примерами являются взвеси плавающих микроорганизмов (бактерий, сперматозоидов или одноклеточных водорослей), искусственные каталитические наномоторы, коллоидальные самодвижущиеся янус-частицы, а также макроскопические стаи птиц, косяки рыб и даже толпы людей. Наиболее простой и изученной реализацией активной материи является взвесь микрорывцов типа мотильных микроорганизмов или автофорезных коллоидальных частиц. Жидкий кристалл, сильно структурированная анизотропная среда с локальным упорядочением молекул,掺杂ированный небольшим количеством активного компонента, становится интересным классом неравновесных материалов с новыми оптическими и механическими свойствами. Топологические дефекты, т.е. особенности в локальной ориентации молекул, играют важную роль в пространственно-временной организации таких активных жидких кристаллов. Представлен систематический обзор последних экспериментальных и теоретических достижений в области активных жидких кристаллов, при этом подчёркиваются связи с другими неравновесными физическими и биологическими системами.

Ключевые слова: микрорывцы, жидкие кристаллы, топологические дефекты, активная материя, коллективное движение

PACS numbers: 42.70.Df, **47.20.-k**, 47.63.Gd

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.2018.10.038433>

Содержание

1. Введение (955).
 - 1.1. Реализации активной материи. 1.2. Взаимодействия между активными частицами. 1.3. Лиотропные жидкие кристаллы. 1.4. Топологические дефекты.
 2. Обзор экспериментальных систем (958).
 - 2.1. Активный нематик. 2.2. Живой жидкий кристалл. 2.3. Цитоскелетные пробы подвижности, ползающие клетки и плавающие бактерии.
 3. Теоретические подходы (961).
 - 3.1. "Сухой" активный нематик. 3.2. Жидкие кристаллы с активным напряжением. 3.3. Живой жидкий кристалл. 3.4. Тактоиды в живом нематике.
 4. Заключение (972).
- Список литературы (973).

1. Введение

1.1. Реализации активной материи

Исследование активной материи — это быстро расширяющаяся область междисциплинарной науки, занимаю-

щаяся изучением коллективного и индивидуального поведения самодвижущихся (self-propelled) агентов [1–4]. Такие агенты, как живые, так и синтетические, могут различаться по природе, размеру или механизму движения. Примерами являются мотильные бактерии, одноклеточные водоросли или сперматозоиды [5–8], цитоскелетные биологические волокна и протеиновые молекулярные моторы [9–11], синтетические автофорезные коллоиды [12–14], а также рои насекомых [15], птичьи стаи [16], косяки рыб [17] и даже человеческие толпы [18].

Среди разнообразия неравновесных систем огромное внимание уделяется активным суспензиям, т.е. взвесям плавающих бактерий или синтетических наномоторов. Активные суспензии, вероятно, являются наиболее простыми и представительными реализациями активного вещества. Обширные экспериментальные и теоретические исследования, проведённые многими группами по всему миру, выявили возникновение коллективного поведения и "бактериальной турбулентности" [5, 6, 19–23], снижения эффективной вязкости [24, 25], активную кластеризацию [13], искусственный реотаксис (движение против течения) [26, 27] и многие другие явления, отсутствующие в равновесных коллоидных суспензиях [28]. Например, крупномасштабное коллективное движение в концентрированных бактериальных суспензиях, так называемая бактериальная турбулентность, характеризуется постоянно возникающими прерывистыми вихрями и струями с пространственным масштабом около 50 мкм. В отличие от турбулентности с высоким числом Рейнольдса, инерция жидкости в коллективном движении бактерий незначительна и соответствующее число Рейнольдса исчезающе мало, $Re \sim 10^{-3}$ [5, 6].

И.С. Арансон. Departments of Biomedical Engineering, Chemistry and Mathematics, Pennsylvania State University, University Park, Pennsylvania 16802, USA
E-mail: isa12@psu.edu, aronson@anl.gov

Статья поступила 7 июля 2018 г.,
после доработки 22 сентября 2018 г.

Общепринятая точка зрения состоит в том, что вышеуказанные явления возникают в результате совместных действий следующих фундаментальных физических механизмов: инъекции энергии в микроскопическом масштабе из-за автономного движения индивидуальных агентов, кратковременных стерических (т.е. жёстких) столкновений в пространстве и дальнедействующих гидродинамических взаимодействий. Другой важный механизм, влияющий на возникновение коллективного поведения, связан со случайным изменением ориентации отдельных микропловцов. Источником шума могут являться тепловые флуктуации. Кроме того, шум может быть вызван внутренними неравновесными механизмами, такими как случайные повороты бактерий (run-and-tumble behavior) [29], "кувырки" (flips) синтетических золото-платиновых наностержней, приводимых в движение катализом перекиси водорода [12, 30], или кинетикой случайного сворачивания молекулярных моторов [31].

Поскольку объём исследований активной материи стал чрезвычайно широким, а число экспериментальных и теоретических работ растёт в геометрической прогрессии, весьма затруднительно представить всеобъемлющий научный обзор этой области исследований [2, 3]. Любая обзорная статья устареет довольно быстро. Ввиду этого мы в основном ограничиваемся довольно конкретной, но достаточно представительной реализацией активной материи — так называемыми активными жидкими кристаллами [32, 33]. Эти материалы могут быть получены смешиванием цитоскелетных волокон (микротрубочек) с молекулярными моторами и уплот-

няющими агентами или комбинированием нетоксичного жидкого кристалла DSCG (динатрий-кромогликат, $C_{23}H_{14}Na_2O_{11}$, распространённый антиастматический препарат) с подвижными безвредными жгутиковыми (flagellated) бактериями *Bacillus subtilis* (рис. 1). Преимущество этой, казалось бы, сложной системы состоит в том, что она проста в приготовлении и экспериментальных измерениях, а также поддаётся строгому теоретическому описанию. Именно эту систему можно рассматривать как некий композитный материал, образованный хорошо известным равновесным жидким кристаллом, "возмущённым" небольшим количеством активной добавки.

В настоящей статье рассматриваются наиболее важные экспериментальные наблюдения и различные теоретические подходы к активным жидким кристаллам и связанным с ними системам.

1.2. Взаимодействия между активными частицами

С теоретической точки зрения взаимодействия между активными частицами можно разделить на два основных класса: изотропные, или скалярные, и анизотропные, такие как полярные, нематические и т.д. Крупномасштабные характеристики активных частиц с изотропными (скалярными) взаимодействиями могут эффективно описываться скалярным полем, например плотностью частиц. Простейшей реализацией является самосборка самодвижущихся твёрдых микродисков или сфер, называемых также активными броуновскими частицами [35–37]. В таких системах совместный эффект самоподвижности и изотропного отталкивания часто приводит к так называемому фазовому разделению, вызванному подавлением подвижности (Mobility Induced Phase Separation, MIPS) [38]. Простота самоподвижной системы микродисков позволяет сопоставить её с эффективной равновесной системой (см., например, работы [39, 40]). Динамика, демонстрируемая активными броуновскими частицами, часто качественно сходна с фазовой неустойчивостью и укрупнением, наблюдаемыми в значительно более простых гранулированных материалах, подверженных вибрации, т.е. в случае неупруго сталкивающихся макроскопических гранул [41–43].

Напротив, более сложные структуры (стержни, спирали и т.д.) благодаря нецентральному взаимодействию между анизотропными частицами порождают множество нетривиальных динамических коллективных состояний. Анизотропные стерические, гидродинамические или химические взаимодействия между самоподвижными протяжёнными объектами вызывают нетривиальные силы и моменты сил, которые приводят к сложной ориентационной динамике. Такое поведение иллюстрируется большим количеством примеров, в частности, оно характерно для подвижных бактерий в замкнутых двумерных системах [6, 19, 44, 45], самоподвижных биополимерных волокон [10, 11, 32], а также для гранулярных систем под действием вибрации [46, 47] и систем из самоподвижных гранулированных стержней [48]. Кроме того, желаемые взаимодействия между частицами могут быть созданы, например, путём синтеза пятнистых функциональных коллоидов [49, 50].

1.3. Лиотропные жидкие кристаллы

Жидкокристаллические материалы демонстрируют одновременно свойства твёрдого тела и жидкости: они

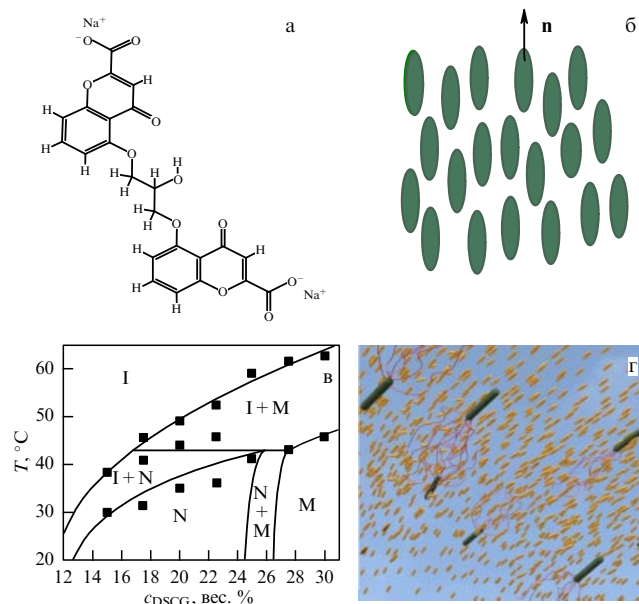


Рис. 1. (а) Двумерная химическая структура лиотропного жидкого кристалла DSCG. (б) В воде дискообразные молекулы DSCG стыкуются друг с другом и самособираются в стержнеобразные агрегаты. В нематической фазе молекулы приобретают усреднённую ориентацию, описываемую единичным вектором $\mathbf{n}$ (директором). (в) В зависимости от температуры и концентрации мезогенного материала DSCG стержнеобразные агрегаты формируют различные жидкокристаллические фазы: нематическую (N), изотропную (I) и колончатую (M). (Воспроизведено по разрешению правообладателя из работы [34] © Royal Society of Chemistry 2015.) (г) Живой жидкий кристалл, сформированный взвесью плавающих жгутиковых бактерий в лиотропном жидком кристалле.

могут течь, как жидкости, но их молекулы могут быть ориентированы, как в кристаллах. В результате жидкие кристаллы могут демонстрировать как вязкую, так и упругую реакции на деформации [51, 52]. Лиотропный жидкий кристалл образуется в результате растворения амфифильного мезогена в подходящем растворителе. При соответствующих условиях, налагаемых на концентрацию, температуру и давление, различные жидкокристаллические фазы образуются в результате самосборки полярных дискообразных молекул DSCG в линейные нанометровые агрегаты (так называемые хромоники) [53] (рис. 1а, б). В самой простой, нематической, жидкокристаллической фазе молекулы имеют средний ориентационный порядок, характеризуемый единичным вектором $\mathbf{n}$ (директором), но без какого-либо позиционного упорядочения. Поскольку "голова" и "хвост" такой молекулы неразличимы, направления $\mathbf{n}$ и $-\mathbf{n}$ полностью эквивалентны. Нематическая и изотропная фазы могут сосуществовать в определённом диапазоне температур и концентраций мезогена c_{DSCG} (рис. 1в). Дальнейшее увеличение концентрации мезогенного материала приводит к образованию более упорядоченной (и часто более вязкой) колончатой фазы.

Планиарная и гомеотропная ориентации. Существуют различные способы ориентации молекул жидкого кристалла. Ориентация называется планиарной или однородной, если стержнеобразные молекулы коллинеарны подложке. Напротив, если стержнеобразная молекула ориентирована перпендикулярно подложке, то такая ориентация называется гомеотропной. Существуют различные способы установления ориентации молекул DSCG, например посредством покрытия подложки тонкой плёнкой полиамида и аккуратной натирки её бархатной тканью в определённом направлении [33, 54]. Гомеотропной ориентации обычно достигают с помощью определённых поверхностно-активных веществ (детергентов). Например, чтобы реализовать гомеотропную ориентацию DSCG, стеклянные поверхности жидкокристаллической ячейки обрабатываются водным раствором, содержащим N-диметил-N-октадецил-3-аминопропилтриметоксисилилхлорид и серную кислоту [55, 56]. Гомеотропная ориентация может быть также создана путём выращивания монослоёв графена на тонких медных фольгах посредством химического осаждения из паровой фазы и последующего переноса их на стеклянную подложку [57].

1.4. Топологические дефекты

Особенности в поле ориентаций, или топологические дефекты, часто играют исключительно важную роль в пространственно-временной организации как равновесных, так и активных жидких кристаллов. С более общей точки зрения топологические дефекты являются устойчивыми образованиями, которые возникают, когда определённая симметрия (например, осевая) нарушается при фазовом переходе (см. обзор [58]).

1.4.1. Топологический заряд. В контексте нематических жидких кристаллов топологические дефекты являются точечными особенностями в поле директора $\mathbf{n}$ [51, 52]. В двумерном случае топологические дефекты характеризуются их топологическим зарядом k :

$$k = \frac{1}{2\pi} \oint_{\Gamma} \nabla \theta \cdot d\mathbf{l} = \frac{1}{2\pi} \oint_{\Gamma} d\theta, \quad (1)$$

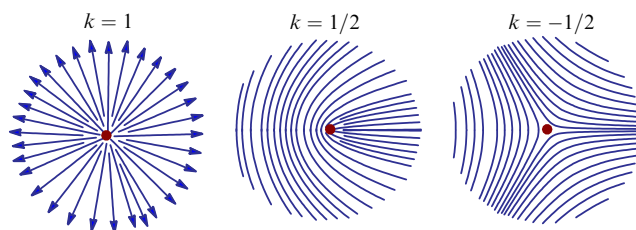


Рис. 2. Топологические дефекты для топологического заряда $k = 1$ (а), $1/2$ (б), $-1/2$ (в). Кругок в центре отображает положение особенности.

где θ — угол усреднённой ориентации молекул, $\mathbf{n} = (\cos \theta, \sin \theta)$, Γ — произвольный замкнутый контур, охватывающий точку особенности, $\mathbf{l}$ — элемент дуги вдоль контура Γ . Топологический заряд — величина, показывающая, сколько оборотов на 2π совершит вектор директора при обходе точки особенности.

Условие непрерывности подразумевает, что физические векторные поля (например, намагниченность или поляризация) допускают только целочисленные значения топологического заряда k . В нематических системах эквивалентность $\mathbf{n} \longleftrightarrow -\mathbf{n}$ допускает полуцелые топологические дефекты с $k = \pm 1/2$, или дисклинации (рис. 2). Симметрия отражения директора $\mathbf{n} \longleftrightarrow -\mathbf{n}$ делает описание нематика довольно громоздким. В свою очередь топологические дефекты в нематике часто описываются тензорным параметром порядка $\mathbf{Q}$, связанным с директором $\mathbf{n}$ через тензорное произведение:

$$\mathbf{Q} = q \left(\mathbf{nn} - \frac{\mathbf{I}}{d} \right). \quad (2)$$

Здесь $\mathbf{I}$ — единичная матрица, q — скалярная магнитуа параметра порядка, $d = 2, 3$ — размерность пространства системы. Таким образом, $\mathbf{Q}$ является симметричным бесшпуровым тензором. В ядре дефекта $q = 0$, а вдали от дефекта $q \rightarrow \text{const}$. Тензор $\mathbf{Q}$ инвариантен к отражению пространства $\mathbf{n} \rightarrow -\mathbf{n}$. В двух измерениях тензорный параметр порядка $\mathbf{Q}$ полностью эквивалентен комплексному параметру порядка $\psi = Q_{11} + iQ_{12}$. Это формально отображает двумерный нематик на класс систем физики твёрдого тела с комплексным параметром порядка, таких как сверхпроводники второго рода, сверхтекучий гелий ^4He , а также некоторые системы, демонстрирующие структурообразование [59]. Более того, динамика полуцелых дефектов (дисклинаций) становится формально эквивалентной движению вихрей Абрикосова, описываемых уравнением Гинзбурга–Ландау [60].

1.4.2. Активные дефекты. В равновесных однородных жидких кристаллах топологические дефекты появляются в результате фазового перехода. Более того, изолированные топологические дефекты остаются неподвижными, если пренебречь взаимодействием с границами. Если равновесие нарушается, то миграция топологических дефектов уменьшает свободную энергию и возвращает систему к равновесию. Ситуация оказывается более сложной в изначально неравновесных системах, таких как активные жидкие кристаллы. На основании симметрии можно утверждать, что если система является однородной, то отрицательные (т.е.

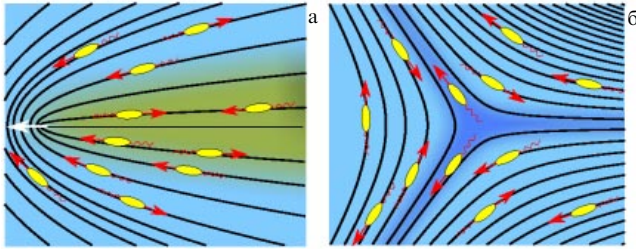


Рис. 3. Полуцелые дефекты в активных жидких кристаллах. Жгутиковые бактерии изображают распределение активности. (а) Заострённый ($k = 1/2$) дефект. Белая стрелка показывает направление движения. (б) Треугольный ($k = -1/2$) дефект. (Из работы [61] © American Physical Society (APS) 2017.)

треугольные) дефекты должны оставаться неподвижными ввиду симметричного распределения активного компонента, т.е. бактерий или микротрубочек и т.д. Напротив, положительные (или заострённые) дефекты должны двигаться самопроизвольно из-за несимметричного распределения активности [62–65] (рис. 3).

Таким образом, $1/2$ -дефекты превращаются в самодвижущиеся объекты, мигрирующие обычно в направлении заострённого конца (см. рис. 3). Вследствие взаимодействия с другими дефектами отрицательные дефекты также могут быть вовлечены в движение. Однако их типичная скорость остаётся значительно меньшей, чем у положительных дефектов [61].

Если активность системы относительно невелика, то динамику топологических $\pm 1/2$ -дефектов можно описать аналитически по аналогии с описанием квантовых вихрей в уравнении Гинзбурга–Ландау [59, 66]. При наличии слабого фазового (ориентационного) градиента $\nabla\theta_{\text{ext}}$ (например, из-за взаимодействия с другими дефектами или навязанного распределения директора) скорость дефекта $\mathbf{v}$ удовлетворяет следующему условию:

$$kR_{\pi/2}\mathbf{v}\left(\log\frac{v_0}{|\mathbf{v}|} + \alpha\frac{\hat{\mathbf{x}}\mathbf{v}}{|\mathbf{v}|^2}\right) = \nabla\theta_{\text{ext}}, \quad (3)$$

где константа $v_0 \approx 3,29$, $\hat{\mathbf{x}}$ — единичный вектор в направлении движения, параметр α зависит от активности системы, $k = \pm 1/2$ — топологический заряд, $R_{\pi/2}$ — матрица вращения по часовой стрелке на угол $\pi/2$ [63]. Для положительных дефектов $\alpha \neq 0$, для отрицательных — $\alpha = 0$. Таким образом, изолированный положительный дефект, согласно уравнению (3), приобретает скорость $v \log(v_0/v) = -\alpha$, т.е. $v \neq 0$, где $v = |\mathbf{v}|$. Соответственно, положительные дефекты становятся самодвижущимися объектами. Для отрицательных дефектов уравнение (3) даёт $v = 0$. В случае нескольких далеко разнесённых дефектов член $\nabla\theta_{\text{ext}} \approx \mathbf{R}/|\mathbf{R}|^2$, где $\mathbf{R}$ — расстояние между дефектами. Более того, можно показать, что противоположно заряженные дефекты притягиваются, а одинаково заряженные — отталкиваются.

Топологические дефекты значительно влияют на пространственно-временное поведение активных сред. Поскольку дефекты не могут появляться или исчезать самопроизвольно — противоположные дефекты создаются и уничтожаются попарно, они играют роль фундаментальных нелинейных возбуждений, которые определяют общую динамику активной среды.

2. Обзор экспериментальных систем

2.1. Активный нематик

Активный нематик относится к важному классу объектов живой активной материи, состоящих из немотильных, но в целом активных частиц с неполярным (т.е. нематическим) взаимодействием. Наиболее успешной реализацией активного нематика является смесь кинезиновых молекулярных моторов и цитоскелетных волокон — микротрубочек — в присутствии биологического "топлива" (аденозинтрифосфата — АТФ) и уплотняющего агента — полиэтиленгликоля (PEG) [32]. Смесь помещается в квазидвумерную камеру. Отдельные частицы (микротрубочки) являются полярными: они имеют различные плюс- и минус-концы. Однако в отсутствие активных кинезиновых молекулярных моторов эти частицы остаются неподвижными (демонстрируя только броуновскую диффузию). Динамика резко изменяется при введении топлива (АТФ): гидролиз молекул АТФ вызывает изменение конформации кинезиновых моторов, связанных с микротрубочками, и их движение по направлению к $+$ -концу. Более того, прикрепление активных кластеров кинезина к паре микротрубочек с противоположной полярностью приводит к относительному скольжению и общему смещению центров масс отдельных микротрубочек. Относительное скольжение вызывает так называемое активное напряжение (active stress) в окружающей среде и стимулирует самоорганизацию. Присутствие PEG способствует формированию пучков микротрубочек и возникновению жидкокристаллического (или нематического) порядка [32] (см. также обзор [68]).

2.1.1. Дальний порядок дефектов. Активные нематики демонстрируют intriguing сложное пространственно-временное поведение [32], дальний порядок топологических дефектов [69] и нетривиальную связь между топологией и активностью [67]. В зависимости от активности системы (т.е. от концентрации кинезиновых моторов и количества АТФ) система может проявлять турбулентные состояния и сложные структуры потоков с многочисленными дефектами (рис. 46). Динамика дефектов качественно согласуется с уравнением (3), по крайней мере, при небольших уровнях активности.

Казалось бы, можно ожидать, что турбулентный поток в активном нематике полностью разрушит все корреляции между топологическими дефектами. Тем не менее исследования, проведённые в работе [69], показали удивительно дальнее ориентационное упорядочение топологических дефектов на сантиметровых расстояниях, которые на несколько порядков превышают размер микротрубочки (около 5 мкм). При отслеживании нескольких тысяч дефектов в эксперименте наблюдалась долгоживущая неравновесная фаза, характеризующаяся дальним ориентационным порядком дефектов. Несколько схожие упорядоченные текстуры дефектов получены при моделировании на уровне огрублённых (крупнозернистых) частиц. Однако теоретическое понимание этого замечательного явления всё ещё не полностью достигнуто.

2.1.2. Активный нематик на искривлённых поверхностях.

Активный нематик может быть натянут не только на плоские подложки, но и на изогнутые поверхности, такие

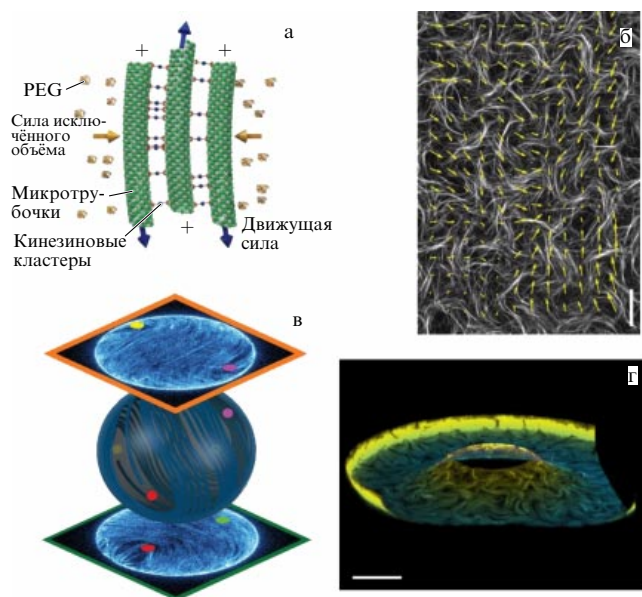


Рис. 4. (В цвете онлайн.) Дефекты в активных нематиках. (а) Иллюстрация основных микроскопических компонентов самособирающихся пучков микротрубочек и кинезина. Кластеры кинезина присоединяются к парам микротрубочек противоположной полярности и прилагают скользящие силы. PEG-полимеры содействуют формированию пучков микротрубочек за счёт эффекта исключённого объёма. (б) Крупномасштабный вид динамической активной сети из микротрубочек. Стрелками показано направление локальной скорости в пучке. Масштабный отрезок 80 мкм (рисунки а, б воспроизведены из работы [32] © Nature Springer 2012). (в) Иллюстрация динамики $\pm 1/2$ -дефектов в слое активного нематика, натянутого на поверхность сферического микропузырька. Изображение трёхмерного стека конфокальных срезов активного нематического пузырька. Положения дефектов $4\pi + 1/2$ показаны цветными кружками (два на верхней плоскости и два на нижней) (из работы [64] © American Association for the Advancement of Sciences 2014). (г) Конфокальное изображение активного нематического тороида. Для наглядности высота показана с помощью цвета. Масштабный отрезок 250 мкм (из работы [67] © Nature Springer 2018).

как сферические пузырьки или тороиды [64, 67]. В этом случае взаимодействие активности и топологии приводит к ряду нетривиальных эффектов. Существует фундаментальная математическая связь между количеством топологических дефектов и топологией поверхности. Для компактной (без границ) поверхности, такой как сфера или тор, теорема Пуанкаре–Хопфа утверждает, что полный топологический заряд N равен поверхностной эйлеровой характеристике¹ χ [70, 71]. Эйлерова характеристика для сферы равна двум, а для тора — нулю. Из теоремы Пуанкаре–Хопфа сразу следует, что нематическое покрытие сферы всегда будет содержать не менее четырёх дополнительных $+1/2$ -дефектов, тогда как суммарный топологический заряд тора всегда равен нулю.

Исследования активного нематика, натянутого на поверхность деформируемого сферического пузырька, выявили сложную пространственно-временную динамику полупространственных топологических дефектов (рис. 4в) [64].

¹ Эйлерова характеристика χ , которая является инвариантом топологической формы, определяется для поверхностей многогранников как $\chi = V - E + F$, где V, E, F — числа вершин, рёбер и граней соответственно. Для любого выпуклого многогранника $\chi = 2$.

В равновесных системах дефекты образуют, по существу, статические текстуры [72], тогда как в неравновесной ситуации наблюдалось множество динамических состояний. Недавние исследования показали, что для активного нематика на торе пары дефектов связываются и сегрегируют по-разному, в зависимости от знака гауссовой кривизны: положительные дефекты притягиваются к части области с положительной гауссовой кривизной, а отрицательные — к части области с отрицательной гауссовой кривизной (рис. 4г) [67].

2.2. Живой жидкий кристалл

Живой жидкий кристалл (ЖЖК) представляет собой композиционный материал, образованный взвесью микропловцов, таких как бактерии, в нетоксичном лиотропном жидком кристалле [33, 54, 57, 73, 74]. Этот материал может быть получен смешиванием высокоструктурированного синтетического жидкого кристалла с небольшим количеством "активной добавки" (т.е. бактерий). ЖЖК демонстрирует уникальные оптические и механические свойства, такие как: 1) направленное движение бактерий вдоль нематического директора; 2) визуализация бактериальных жгутиков нанометровой толщины (рис. 5а) [33]; 3) транспортировка и доставка груза по бактериальным траекториям [73, 75]; 4) динамическая самосборка бактериальных кластеров [54]; 5) вращательные и плавательные переходы [56] и т.д.

При более высоких концентрациях бактерий наблюдаются разнообразные коллективные эффекты, а именно: возникновение пространственно-временных колебаний директора, распространение топологических дефектов и появление турбулентно-подобных состояний [33] (рис. 5в, г). В более поздних исследованиях обнаружены явления захвата и транспорта бактерий в ядрах топологических дефектов (рис. 5а) [61], а также разделение топологических дефектов на изотропно-нематических интерфейсах [76].

Активные нематики (система скользящих микротрубочек) [32] и ЖЖК имеют много общего с точки зрения наблюдаемых динамических состояний и явлений. Тем не менее физические механизмы, управляющие самоорганизацией в этих системах, очень различны. Прежде всего, микропловцы, такие как бактерии, являются самоподвижными объектами. В результате инъекция энергии на микроскопическом масштабе обеспечивается вращением жгутиков бактерий, а не скольжением соседних микротрубочек. Кроме того, плавающие бактерии взаимодействуют с жидким кристаллом с помощью действующих гидродинамических и упругих сил.

2.2.1. Управление и манипулирование бактериальными траекториями.

Движение отдельных бактерий может контролироваться распределением директора. Например, бактерии вынуждены двигаться вдоль изотропно-нематических интерфейсов [33, 54]. Изотропная и нематическая фазы сосуществуют в определённом диапазоне температур и концентраций мезогена (рис. 1в). Изотропные области выглядят как удлинённые тёмные капли или "отрицательные тактоиды" (рис. 5б). Тактоиды ориентированы по общему нематическому директору [52, 53]. Тактоиды искажают распределение директора и влияют на траектории бактерий: вдали от тактоида бактерия плывёт по прямой линии. Вблизи тактоида бактерия отклоняется и следует за искажённым локальным дирек-

тором. После столкновения с тактоидом бактерия строго следует за изогнутым изотропно-нематическим интерфейсом и, наконец, уходит с острия.

Пространственно изменяющиеся текстуры директора могут быть созданы путём поверхностной ориентации (закрепления) директора [78, 79]. Для того чтобы зафиксировать желаемые распределения директора, ограничивающие пластины предварительно обрабатываются для наложения требуемой поверхностной ориентации прилегающего жидкого кристалла [78]. Процедура включает в себя покрытие пластин слоем светочувствительных молекул и последующее облучение линейно поляризованным пространственно изменяющимся светом. Светочувствительные молекулы ориентируются в соответствии с локальной поляризацией и форсируют переориентацию директора в объёме. Эта навязанная директором структура ориентирует бактерии в нужном направлении.

2.2.2. Активная турбулентность и топологические дефекты. Пространственно-временной хаос в активных системах (так называемая активная турбулентность) характеризуется, казалось бы, случайным возникновением и уничтожением пар топологических дефектов. Активная турбулентность возникает тогда, когда активность (например, концентрация бактерий) превышает определённый порог (рис. 5в, г). [33]. В отличие от гидродинамической турбулентности с высоким числом Рейнольдса, характеризующейся инерционным диапазоном и спектром Колмогорова [80], активная турбулентность

возникает при исчезающе малых числах Рейнольдса и, как правило, имеет единственный пространственный масштаб (около 50–100 мкм в случае ЖЖК).

В недавних экспериментальных и теоретических исследованиях ЖЖК обнаружено неожиданное явление: $+1/2$ -дефекты могут захватывать бактерии в свои ядра, в то время как $-1/2$ -дефекты выталкивают бактерии (рис. 5а) [61]. Этот эффект наиболее чётко выражен вблизи порога неустойчивости и начала активной турбулентности, когда скорость дефектов минимальна. Затем с увеличением концентрации бактерий он исчезает. Это явление непосредственно связано с распределением директора в ядре дефекта. Поскольку бактериальные траектории практически повторяют нематическую ориентацию и сходятся в ядре $+1/2$ -дефекта, бактерии, плывущие в направлении дефекта, накапливаются в ядре (рис. 3а). Соответственно, бактерии, плывущие в противоположном направлении, покидают дефект. Такое поведение бактерий приводит к общему увеличению концентрации вблизи ядра. В случае $-1/2$ -дефектов нематическая конфигурация выталкивает бактерии независимо от их ориентации (рис. 3б): бактерии выплывают из ядра дефекта, а бактерии, плывущие к дефекту, отклоняются.

2.3. Цитоскелетные пробы подвижности, ползающие клетки и плавающие бактерии

Существуют и другие системы, схожие с активными жидкими кристаллами, в частности с ЖЖК. Примеры включают в себя пробы подвижности (цитоскелетные микротрубочки или актиновые волокна, приводимые в

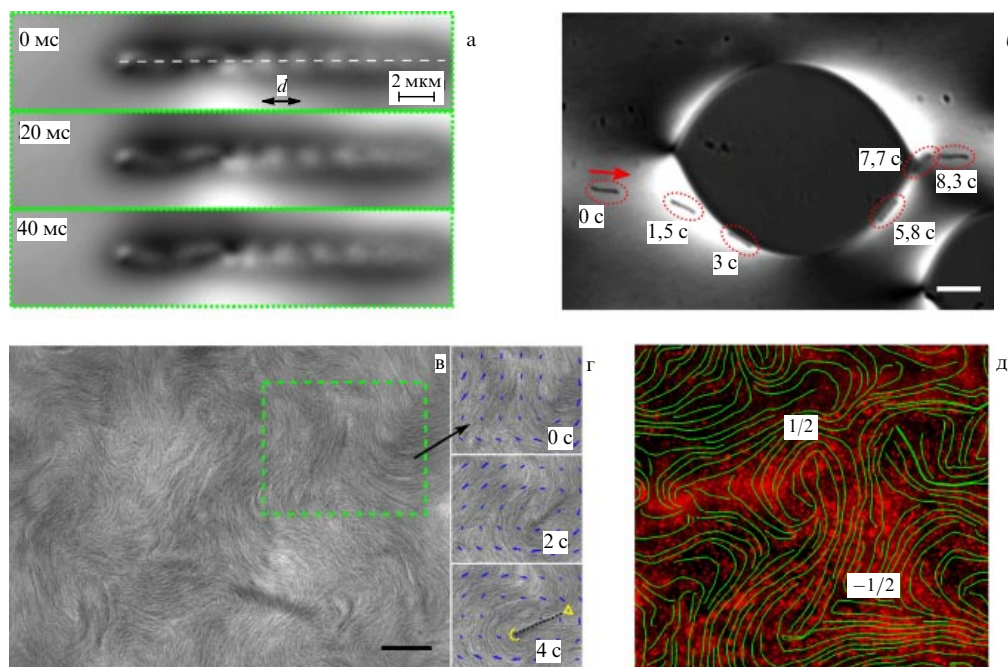


Рис. 5. (В цвете онлайн.) Живой жидкий кристалл. (а) Наблюдение вращающихся бактериальных жгутиков с помощью поляризационной микроскопии. Толщина жгутика около 24 нм. Последовательность снимков иллюстрирует вращение бактериальных жгутиков и встречное вращение бактериального тела, шаг жгутика $d \approx 2$ мкм. (См. также дополнительный фильм 1 на сайте <https://ufn.ru/articles/2019/>). (б) Траектория одиночной бактерии *Bacillus subtilis* вблизи тактоида в ЖЖК. Масштабный отрезок 10 мкм. (См. также дополнительный фильм 2.) (в) Полученные микроскопией светлого поля изображения, иллюстрирующие динамическую текстуру топологических дефектов, сформированных в отдельной свободной плёнке ЖЖК [33]. Бактерии ориентированы по локальному нематическому директору, как показано тонкими полосками. Масштабный отрезок 30 мкм. (См. дополнительный фильм 3.) (г) Последовательность снимков, иллюстрирующих разделение пары дислокаций в области, обозначенной зелёным прямоугольником на рис. в, синие стрелки показывают скорость жидкости. (Рисунки а–г воспроизведены из работы [33] © National Academy of Sciences 2014.) (д) Флуоресцентное изображение, показывающее распределение бактерий и ориентацию директора в свободной плёнке ЖЖК; отмечены два выбранных дефекта (из работы [61] © APS 2017).

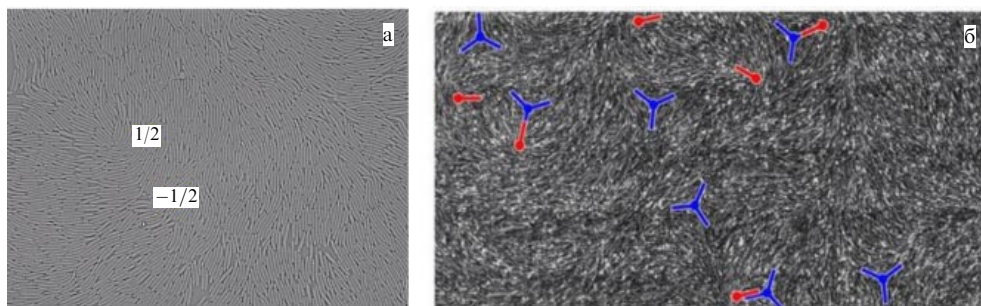


Рис. 6. (В цвете онлайн.) (а) Снимок, полученный микроскопией светлого поля, скользящих бактерий *Mucococcus xanthus*; указаны два дефекта (из лаборатории Арансона). (б) Крупномасштабное изображение колонии нервных клеток-предшественников. Показаны положительные дефекты $+1/2$ (красные) и отрицательные дефекты $-1/2$ (синие). (Из работы [77] © Nature Springer 2017.)

движение ковром из молекулярных моторов, закреплённым на субстрате) [10, 11, 81], ткани из живых подвижных клеток [77, 82, 83], колонии скользящих (или ползающих) бактерий, таких как миксобактерии [84, 85] (рис. 6). Например, обычные почвенные палочковидные бактерии *Mucococcus xanthus* проявляют различные формы самоорганизации в ответ на сигналы окружающей среды, например отсутствие еды. Миксобактерии движутся по субстрату (например, в чашке с агаром) со скоростью примерно $2-4 \text{ мкм мин}^{-1}$ и изменяют направление своего движения в среднем каждые 20 мин.

Монослой плотно упакованных скользящих бактерий имеет жидкокристаллическое упорядочение с динамическими текстурами топологических дефектов (рис. 6а). Активное нематическое упорядочение наблюдается также в колониях делящихся бактерий, заключённых в монослой [86]. В определённом пределе (эффективная диффузия из-за подвижности бактерий преобладает над адвекцией жидкости) плотные суспензии плавающих бактерий могут также рассматриваться как активная нематическая система [101].

Другим важным классом систем являются ткани из различных подвижных клеток, таких как нейроны-предшественники, эпителиальные, стволовые, раковые клетки [77, 82, 83]. Клетки в зависимости от своего типа и условий эксперимента могут мигрировать со скоростью порядка 1 мкм мин^{-1} . Сливающийся (т.е. почти плотно упакованный) монослой подвижных клеток проявляет локальное нематическое упорядочение, турбулентное поведение, а также наличие динамических текстур топологических дефектов (рис. 6б).

3. Теоретические подходы

Качественное понимание поведения активных нематических жидких кристаллов может быть достигнуто с помощью различных теоретических подходов, от моделирования движения индивидуальных частиц до описания огрублёнными статистическими и гидродинамическими методами. Даже неполный список включает в себя дискретные модели частиц [87, 88], феноменологические модели, основанные на гидродинамических методах [89, 90], и т.д. Вблизи порога возникновения нематического порядка асимптотическое упрощение вероятностного уравнения Больцмана для взаимодействующих частиц приводит к огрублённой модели типа Гинзбурга–Ландау [87, 91]. Кроме того, теоретическое описание, основанное на равновесной модели для жидких кристаллов

[51, 52, 92], дополненное феноменологическим "активным напряжением" вследствие взаимного скольжения микротрубочек, было введено в работах [62, 93–96]. Эти исследования позволили получить важную информацию о динамике аннигиляции дефектов, корреляциях скорости и возникновении "активной турбулентности". Однако осталось неясным, в какой степени "возмущённая" модель равновесных нематических жидких кристаллов может быть адаптирована для описания такой неравновесной системы, как активный нематик, и каким образом континуальные модели связаны с экспериментом [32], а параметры модели — с его условиями. В разделах 3.1–3.5 мы рассмотрим различные теоретические концепции, разработанные в ходе исследований активных нематиков.

3.1. "Сухой" активный нематик

Определённое понимание динамики активных жидких кристаллов может быть достигнуто путём изучения модельной системы удлинённых вибрирующих гранул, так называемого "сухого активного нематика" [91]. Являясь намного более простым, чем реальные активные жидкие кристаллы, "сухой" активный нематик демонстрирует, тем не менее, нетривиальное коллективное поведение и возникновение крупномасштабного пространственно-временного хаоса. Хаос проявляется в виде разрывов и пересоединений плотных упорядоченных ленточных структур с локальным нематическим порядком (нематические полосы) [87]. Очевидно, поскольку в "сухой системе" пренебрегается дальнедействующими гидродинамическими взаимодействиями между частицами, даже качественное согласие с экспериментами на активных жидких кристаллах [32, 33] не всегда может быть достигнуто.

3.1.1. Нематическая модель Вишека. Модель, подобная алгоритму Вишека для полярных самоподвижных точечных агентов [97], может быть адаптирована для описания активных нематиков [98]. В этой модели точечные частицы обладают нематической степенью свободы, ориентируясь согласно соседям в пределах определённого радиуса взаимодействия и случайным образом изменяя своё направление под действием внешней случайной силы. В двух пространственных измерениях алгоритм формулируется в терминах координат $\mathbf{x}_j^t$ и нематических директоров $\mathbf{n}_j^t \equiv (\cos \theta_j^t, \sin \theta_j^t)$ с углами $\theta_j^t \in [-\pi/2, \pi/2]$ для частиц с номерами $j = 1, \dots, N$. Все переменные обновляются асинхронно на дискретных

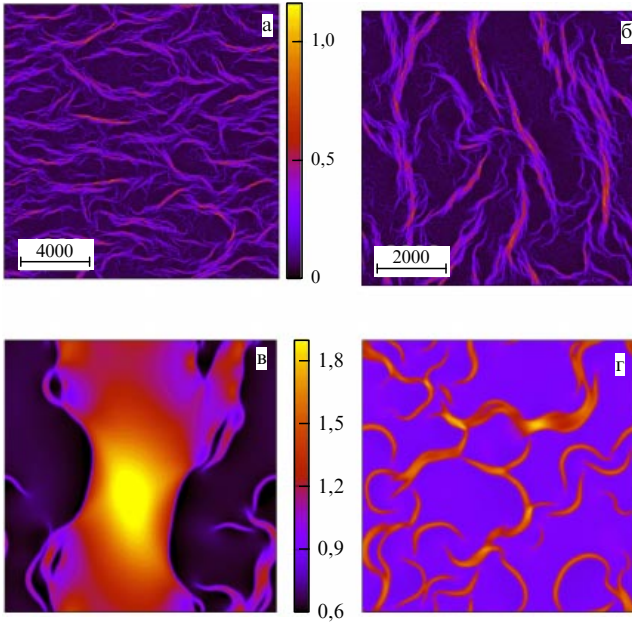


Рис. 7. (В цвете онлайн.) Иллюстрация пространственно-временного хаоса в "сухом" активном нематике. (а, б) Изображения огрублённой плотности в фазе "ленточного" хаоса, полученные из нематической модели Вишека, уравнения (4) при $L = 8192$ (а) и $L = 16394$ (б) для $v_0 = 0,3$, $\eta = 0,038$, $\rho_0 = 1/8$. Масштабные отрезки соответствуют безразмерным единицам уравнений (4). Изображения поля плотности, полученные из уравнений (7), (8) в хаотическом режиме при $L = 1600$ и $\rho_0 = 1$: (в) локализованный хаос ($\sigma = 0,26$), (г) полностью развитый хаос ($\sigma = 0,28$). (Из работы [87] © APS 2014.)

временных шагах в соответствии со следующим алгоритмом:

$$\theta_j^{t+1} = \frac{1}{2} \arg \left[\sum_{k \in V_j} \exp(i2\theta_k^t) \right] + \psi_j^t, \quad (4)$$

$$\mathbf{x}_j^{t+1} = \mathbf{x}_j^t \pm v_0 \hat{\mathbf{n}}_j^t,$$

где V_j — множество соседей частицы j в единичной окрестности, v_0 — скорость частицы. Функция $\exp(i2\theta_k^t)$ в уравнении (4) описывает нематическое (неполярное) взаимодействие между агентами: результат взаимодействия не зависит от изменения направления на противоположное: $\theta \rightarrow \theta + \pi$. Знак в правой части второго уравнения (4) выбирается случайно с равной вероятностью, для того чтобы гарантировать, что частицы не являются самодвижущимися на большом интервале времени. На каждом временном шаге частицы могут двигаться в противоположных направлениях с одинаковой вероятностью. В итоге независимые случайные углы $\psi_j^t \in [-\eta\pi/2, \eta\pi/2]$ получают из случайной величины $\eta \in [0, 1]$, выбираемой из равномерного распределения.

В достаточно большой системе, размером $L \gg 1$, при средней поверхностной плотности частиц, превышающей определённое среднее значение $\rho_0 = N/L^2$, уравнения (4) демонстрируют крупномасштабный пространственно-временной хаос (рис. 7а, б). Как видно из рис. 7, в динамике системы реализуется множество плотных изогнутых полос различной ориентации. Эти полосы изменяются в течение очень длительного времени: они могут удлиняться, сливаться и разделяться.

3.1.2. Непрерывная модель сухого активного нематика.

Дискретные уравнения (4) можно систематически свести к усреднённой континуальной модели активного нематика. Как показано в работе [91], упрощённые континуальные уравнения могут быть получены в простой контролируемой форме из уравнений (4), со всеми модельными коэффициентами, явно зависящими от средней плотности частиц $\rho_0 = N/L^2$ и уровня шума η . Эта континуальная модель имеет только два независимых параметра, оставшихся после масштабирования. При таком подходе предполагаются предел малой плотности и гипотеза молекулярного хаоса, которые позволяют получить уравнение Больцмана для одночастичной функции распределения $f(\mathbf{x}, \theta, t)$ [99, 100].

При разложении функции распределения f в ряд Фурье по θ ,

$$f(\mathbf{x}, \theta, t) = \frac{1}{\pi} \sum_{k=-\infty}^{k=\infty} \hat{f}_k(\mathbf{x}, t) \exp(-i2k\theta),$$

данный кинетический подход порождает иерархию связанных уравнений для гармоник Фурье $\hat{f}_k(\mathbf{x}, t) \times \exp(-i2k\theta)$. Эта иерархия бесконечного числа уравнений может быть усечена и замкнута при предположении диффузного скейлингового приближения и близости к порогу возникновения нематического порядка. Первый нетривиальный порядок даёт определяющее нематическое комплексное поле $Q \equiv \hat{f}_1$ нелинейное уравнение, которое совместно с уравнением непрерывности позволяет найти поле плотности $\rho \equiv \hat{f}_0$ [91]. Кроме того, компоненты нематического параметра порядка Q (ср. с уравнением (2)) связаны с комплексным полем Q следующим образом: $Q_{xx} = \text{Re } Q$, $Q_{xy} = \text{Im } Q$. Соответственно, $Q = Q_{xx} + iQ_{xy}$. Аналогичные уравнения могут быть также получены в определённом пределе из кинетической теории для бактериальных суспензий [101]:

$$\partial_t \rho = \frac{1}{2} \nabla^2 \rho + \frac{1}{2} \nabla \nabla : Q, \quad (5)$$

$$\partial_t Q = \mu(\rho) Q - \frac{\xi}{2} |Q|^2 Q + \frac{1}{2} \nabla^2 Q + \left(\nabla \nabla - \frac{1}{2} \nabla^2 \right) \frac{\rho}{2}. \quad (6)$$

Здесь $|Q|^2 = Q : Q$, символ ":" обозначает тензорную операцию свёртки, $\mu(\rho) = \mu'(\rho - \rho_t)$, коэффициенты переноса μ' , ρ_t и ξ — положительные константы, зависящие от уровня шума η . В этом контексте ρ_t — пороговая плотность ρ , соответствующая возникновению нематического порядка. Однако тензорные обозначения весьма громоздки. С практической точки зрения лучше иметь дело с уравнениями (5), (6), выраженными в терминах комплексного нематического параметра порядка $Q = Q_{xx} + iQ_{xy}$:

$$\partial_t \rho = \frac{1}{2} \Delta \rho + \frac{1}{2} \text{Re}(\nabla^* \nabla Q), \quad (7)$$

$$\partial_t Q = (\mu(\rho) - \xi |Q|^2) Q + \frac{1}{4} \nabla^2 \rho + \frac{1}{2} \Delta Q, \quad (8)$$

где $\nabla \equiv \partial_x + i\partial_y$, $\nabla^* \equiv \partial_x - i\partial_y$ — комплексные дифференциальные операторы, $\Delta \equiv \nabla \nabla^*$. Такая форма уравнений для "сухого" активного нематика напоминает уравнение Гинзбурга–Ландау, выведенное в контексте сверхпроводимости и сверхтекучести.

3.1.3. Нематические полосы. Уравнения (7), (8), несмотря на их кажущуюся сложность, допускают точное неоднородное решение в виде полосы нематического порядка с плотностью $\rho_{\text{band}} > \rho_s$ в окружении неупорядоченного газа с плотностью $\rho_{\text{gas}} < \rho_t$. Решение может быть выражено в простом аналитическом виде [91, 100]. Предполагая, что нематический порядок направлен вдоль оси x , для этого решения получаем $\rho = R_0(y) \equiv Q_0(y) + \rho_{\text{gas}}$ и

$$Q_0(y) = \frac{3(\rho_t - \rho_{\text{gas}})}{1 + a \cosh \left[\sqrt{4\mu'(\rho_t - \rho_{\text{gas}})} y \right]}, \quad (9)$$

где $a = \sqrt{1 - 9\zeta(\rho_t - \rho_{\text{gas}})/2\mu'}$, ρ_{gas} — константа, определяемая из сохранения полной массы [100]. Благодаря простому аналитическому виду решения в форме нематической полосы его устойчивость к длинноволновым периодическим возмущениям в направлении x с длиной волны k может быть исследована аналитически. Результаты анализа, подробно описанного в [87], показывают, что скорость возрастания возмущений λ всегда положительна, $\lambda \sim k^2 > 0$, так что решение в виде нематической полосы всегда неустойчиво. Однако в небольших системах неустойчивость может быть подавлена.

Численное решение уравнений (7), (8) в достаточно большой периодической области показало, что неустойчивость полосы изначально проявляется как периодическая модуляция в пространстве и времени, локализованная вдоль её границ, в соответствии с анализом линейной устойчивости. В итоге эта неустойчивость приводит к локализованному хаотическому поведению (рис. 7в). При дальнейшем увеличении размеров системы и времени интегрирования неустойчивость развивается в крупномасштабный пространственно-временной хаос (рис. 7г). Хаос проявляется в медленной динамике растягивающихся, сливающихся и распадающихся нематических полос.

Хотя в целом имеется хорошее качественное и даже полуколичественное соответствие между результатами дискретных и континуальных моделей сухих активных нематиков, согласие с экспериментальными данными довольно ограничено. "Сухая" активная нематическая аппроксимация описывает некоторые аспекты плотных бактериальных суспензий [101], колоний миксобактерий [84] и проб подвижности цитоскелета [10, 11], но она явно неприменима к экспериментам с активными жидкими кристаллами [32, 33]. Основные причины: приближение малой плотности (учёт только парных столкновений между частицами) и пренебрежение дальнедействующими гидродинамическими взаимодействиями.

3.2. Жидкие кристаллы с активным напряжением

Феноменологический подход к активному жидкому кристаллу разработан в серии работ [62, 65, 93–96, 102, 103]. В этих работах активный нематик описывается стандартными уравнениями гидродинамики жидких кристаллов [92], выраженными в терминах тензорного параметра порядка $\mathbf{Q}$ и дополненным членом, моделирующим активное напряжение. Эволюция параметра порядка $\mathbf{Q}$ и импульса $\rho\mathbf{u}$, где $\mathbf{u}$ — скорость жидкости, определяется следующими уравнениями:

$$(\partial_t + \mathbf{u}\nabla) \mathbf{Q} - \mathbf{S} = \mathbf{G}\mathbf{N}, \quad (10)$$

$$\rho(\partial_t + \mathbf{u}\nabla) \mathbf{u} = \nabla \Pi. \quad (11)$$

Здесь тензор $\mathbf{S}$ описывает обобщённый переносный член, $\mathbf{H}$ — молекулярное поле, Π — тензор полного напряжения, $\mathbf{G}$ — скорость релаксации. В двумерном случае молекулярное поле $\mathbf{H} = -\delta F/\delta \mathbf{Q} + 1/2 \text{tr}(\delta F/\delta \mathbf{Q})$ получается из вариации свободной энергии Гинзбурга–Ландау–де Жена, которая в двумерном случае имеет вид

$$F = \frac{K}{2} (\partial_k Q_{ij})^2 + \frac{a}{2} Q_{ij} Q_{ij} + \frac{c}{4} (Q_{ij} Q_{ij})^2, \quad (12)$$

где K — усреднённая упругая постоянная, a и c — материальные параметры. Полное напряжение Π включает в себя упругие, вязкие напряжения, а также напряжение Π^{act} , обусловленное активностью системы.

3.2.1. Активное напряжение. Активное напряжение возникает вследствие взаимного скольжения микротрубочек в присутствии молекулярных моторов и АТФ. В определённом приближении, используя аналогию с дипольным напряжением в суспензиях частиц, активное напряжение можно связать с параметром порядка $\mathbf{Q}$ [104, 105]:

$$\Pi^{\text{act}} = -\zeta \mathbf{Q}, \quad (13)$$

где ζ — коэффициент активности. Знак ζ зависит от типа активной системы. Например, для бактериальных систем (так называемых толкающих (pushers) или растягивающих) и скользящих пар микротрубочек $\zeta < 0$. Напротив, $\zeta > 0$ для таких "тягачей" (pullers), как одноклеточные водоросли (сжимающая система) [21, 106].

3.2.2. Трение с подложкой. Поскольку активные жидкие кристаллы характеризуются исключительно малыми числами Рейнольдса, инерционным членом $\rho(\partial_t + \mathbf{u}\nabla) \mathbf{u}$ в уравнении (11) можно пренебречь. Кроме того, активные жидкие кристаллы часто взаимодействуют с твёрдыми поверхностями или ограничивающими пластинами, что приводит к трению с подложкой. Следовательно, в линейном уравнении баланса импульса необходим соответствующий член с трением (11) [22, 94]. В простейшем случае трение с подложкой может быть представлено в следующем виде:

$$\nabla \Pi - \alpha \mathbf{u} = 0, \quad (14)$$

где константа α зависит, например, от толщины жидкокристаллической плёнки h , т.е. $\alpha \sim 1/h^2$.

Исследования, основанные на вышеуказанном подходе [62, 65, 93–96, 102, 103], предоставили ценную информацию об активных жидких кристаллах и даже качественно воспроизвели похожую феноменологическую картину (рис. 8). Например, численное решение уравнений (10), (14) воспроизвело пространственно-временные нематические текстуры с дефектами, напоминающими наблюдаемые в эксперименте. Наблюдалась также качественно аналогичная динамика дефектов: более быстрое движение положительных дефектов и более медленное — отрицательных. Более того, увеличение трения α привело к общему уменьшению характерного пространственного масштаба и возрастанию числа дефектов, по крайней мере качественно, в соответствии с экспериментом [107].

Однако есть и ограничения. Во-первых, неясно, в какой степени равновесная жидкокристаллическая модель соответствует далёкой от равновесия системе активно скользящих микротрубочек [32]. Во-вторых, выра-

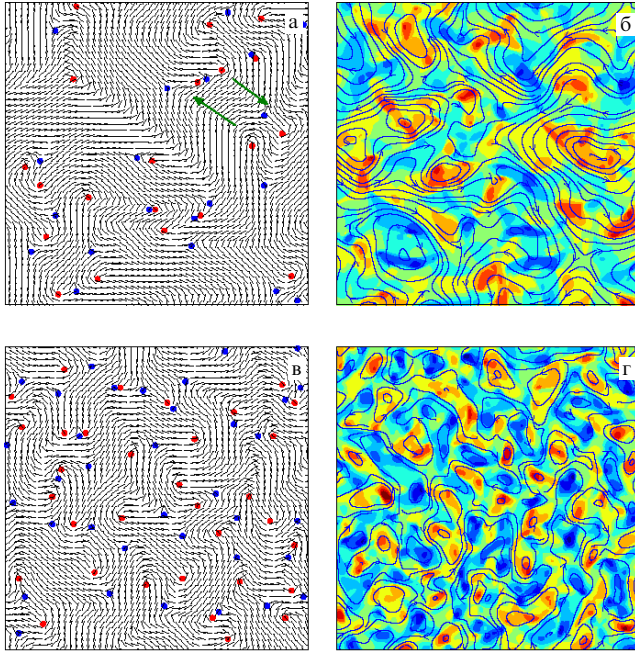


Рис. 8. (В цвете онлайн.) Эффект трения с подложкой в активных жидких кристаллах. (а, в) Поле директора с топологическими дефектами $\pm 1/2$ (отмечены красными и синими кружками соответственно). (б, г) Завихрённость, обозначенная цветовым кодом (от синего до красного), и поле скоростей, показанное кривыми со стрелками. Коэффициент трения $\alpha = 0$ на рис. а, б и $\alpha = 0,01$ на рис. в, г. Зелёные стрелки показывают направление движения для $+1/2$ -дефектов. (Из работы [94] © APS 2014.)

жение для активного напряжения (13) асимптотически строго для сильно разбавленной суспензии микропловцов [108]. Кроме того, неясно, как многочастичные взаимодействия в плотных суспензиях микротрубочек могут изменить выражение для активного напряжения.

3.2.3. Комплексная модель Свифта – Хозенберга. В дополнение к теории активных нематиков, описываемых довольно сложными уравнениями для жидких кристаллов (10), (11), было также исследовано несколько простых феноменологических моделей [109, 110], которые, в отличие от "сухих" активных нематических моделей, предназначены для описания относительно плотных фаз, характерных для активных жидких кристаллов. Например, в работе [110] использовалось обобщённое комплексное уравнение Свифта – Хозенберга, которое в безразмерном виде выражается как

$$\partial_t Q - D \operatorname{Re} \{ (\nabla^2 Q) + \nabla Q \nabla \} Q = \left(\frac{1}{4} - |Q|^2 \right) Q - \gamma \nabla^* \nabla Q - (\nabla^* \nabla)^2 Q. \quad (15)$$

Здесь D, γ — параметры модели, $\nabla = \partial_x + i\partial_y$. Подобные уравнения использовались в контексте нелинейной оптики, структурообразования [111] и бактериальной турбулентности [19]. Уравнение (15) демонстрирует коротковолновую неустойчивость однородного нематического состояния $Q = 1/2$ и антиполярное упорядочение топологических дефектов, аналогичное наблюдаемому в эксперименте [69]. Однако вывод этой модели из системы дискретных частиц может быть весьма сложной задачей.

Многие важные аспекты активных нематиков могут быть описаны моделированием ансамблей дискретных частиц [69, 88], включая активные нематики на сферической поверхности [112]. Моделирование методом дискретных частиц обычно занимает больше времени, чем моделирование методом усреднённых континуальных уравнений и, следовательно, позволяет описывать только сравнительно небольшие системы.

3.3. Живой жидкий кристалл

Поскольку плавающие бактерии являются самодвижущимися частицами, общие феноменологические модели активного нематика [62, 93–96] не могут быть непосредственно применены к ЖЖК. Более сложные и специализированные теоретические подходы, основанные на устоявшейся модели нематического жидкого кристалла [92] в сочетании с уравнениями эволюции концентрации для двух популяций самодвижущихся частиц, развиты в работах [61, 76]. Поскольку эксперименты проводятся в геометрии тонкой плёнки с масштабом возникающих структур, значительно превышающим толщину ячейки h , применяется усреднённое по глубине квазидвумерное описание.

Основные предположения модели следующие.

- *Приближение малой концентрации:* объёмная доля бактерий относительно мала и она не нарушает свойство жидкого кристалла. Это предположение обосновано чрезвычайно малой объёмной долей бактерий (порядка 0,2 %), необходимой для возникновения неустойчивости [33]. Континуальное описание справедливо до тех пор, пока длина волны возникающей структуры велика по сравнению с межбактериальным расстоянием, ~ 10 мкм.

- *Нематический контроль:* бактерии имеют тенденцию ориентироваться вдоль локального направления нематического директора $\mathbf{n} = (\cos \theta, \sin \theta)$, где $-\pi/2 \leq \theta < \pi/2$ — нематический угол. А именно, объект в форме стержня с планарным закреплением директора на поверхности, такой как бактерия, стремится ориентироваться вдоль локального директора $\mathbf{n}$ [113]. Ориентирование бактерий в соответствии с директором происходит на масштабе времени порядка 1 с, которое меньше характерного времени возникающего коллективного поведения.

- *Две бактериальные популяции:* в тонкой квазидвумерной ячейке бактерии, движущиеся в противоположных направлениях, могут проходить практически без столкновений на нескольких разных высотах. Таким образом, в каждой точке x, y присутствуют две популяции бактерий: c^+ и c^- , движущиеся в противоположных направлениях, $\mathbf{n}$ и $-\mathbf{n}$ (ср. с [84]).

Жидкий кристалл описывается стандартной моделью [92] для тензорного параметра порядка Q :

$$(\partial_t + \mathbf{u} \nabla) Q - S - \Gamma \mathbf{H} + \mathbf{F}_{\text{exter}} = 0. \quad (16)$$

Уравнение (16) аналогично уравнению для активного нематика (10), за исключением последнего члена, который описывает эффект ориентирующего внешнего поля $\mathbf{F}_{\text{exter}}$. В случае квазидвумерной тонкой ячейки эффективная сила возникает из-за поверхностного закрепления директора $\mathbf{n}$. Соответственно, уравнение для линейного баланса импульса также имеет вид (14). Однако, в отличие от параметров в случае активных нематиков, все материальные параметры в уравнении (16) соответствуют равновесному жидкому кристаллу (например, DSCG) и являются хорошо известными.

Однако существует отличие в реализации активного напряжения Π^{act} . Самоподвижная частица, такая как плавающая бактерия, является объектом, к которому приложена нулевая полная сила. В свою очередь такой объект воздействует на жидкость парой сил (диполь-силы (stresslet)) [114]. Распределение силовых диполей приводит к активному напряжению Π^{act} , которое в пределе малых плотностей можно выразить в виде [21, 115]

$$\Pi^{\text{act}} = -\Lambda c \left(\mathbf{pp} - \frac{\mathbf{I}}{2} \right), \quad (17)$$

где $\Lambda > 0$ — амплитуда силового диполя, созданного микрорывком, знак минус соответствует пловцам типа "толкачей", таких как бактерии, c — концентрация бактерий, $\mathbf{p} = (\cos \phi, \sin \phi)$ — единичный вектор в направлении движения. Динамика угла бактериальной ориентации ϕ описывается следующим уравнением релаксации:

$$\partial_t \phi = \frac{|\mathbf{Q}|}{\tau_0} \sin(2\theta - 2\phi) + D_r \nabla^2 \phi. \quad (18)$$

Первое слагаемое в правой части (18) описывает релаксацию угла бактериальной ориентации в направлении нематического угла θ со скоростью релаксации $1/\tau_0$ (следует обратить внимание на нематическую симметрию² $\theta \rightarrow \theta + \pi$). В однородной нематической фазе величина параметра порядка $|\mathbf{Q}| = \text{const}$. Последний член описывает диффузию ориентации с коэффициентом вращательной диффузии D_r . Здесь предполагается, что упругие эффекты в жидком кристалле доминируют над эффектами, связанными с ориентацией потоком жидкости. Это позволяет пренебречь эффектами адвекции и ориентацией сдвиговым потоком, как, например, в работе [21]. Однако это приближение нарушается в изотропной фазе, например, внутри нормальных тактоидов, где упругий член равен нулю и, соответственно, $|\mathbf{Q}| = 0$ (см. раздел 3.4.1).

3.3.1. Скорость релаксации угла. При выводе уравнения (18) предполагалось, что разность углов мала и релаксация к нематическому директору (из-за упругого восстанавливающего вращательного момента) считается пропорциональной разности углов $\theta - \phi$ (см. [116, 117]). Этот вращательный момент также должен удовлетворять нескольким ограничивающим условиям, например, при $\theta - \phi = \pi/2$ он должен исчезать. В уравнении (18) используется другая форма (синус разности углов), которая автоматически удовлетворяет требуемым ограничивающим условиям. Для типичного времени релаксации $\tau_0 \approx 1$ с бактериальная ориентация всегда совпадает с директором в нематической фазе, что делает разность $\theta - \phi$ очень малой. Поскольку для малых x $\sin x \approx x$, этот подход эквивалентен традиционному подходу, разработанному Брошаром и де Женом [117].

² Смысл выбора члена $\sin(2\theta - 2\phi)$ в уравнении (18) заключается в следующем. Поскольку $\theta - \phi$ — угловая переменная с периодом 2π , релаксация угла должна описываться периодической функцией, например синусом, т.е. главным членом в разложении типичной периодической функции.

Время релаксации τ_0 можно оценить из баланса упругого вращательного момента, стабилизирующего ориентацию, и вязкого вращательного момента $\Gamma_{\text{el}} + \Gamma_{\text{visc}} = 0$ с помощью аппроксимации бактерии стержнем длиной l и радиусом r . Стабилизирующий упругий момент, действующий на стержень, повернутый на угол $\alpha = \phi - \theta$, имеет вид $\Gamma_{\text{el}} = 4\pi K l \alpha / \ln(2l/r)$, где K — среднее значение упругой постоянной Франка [116]. Вязкий вращательный момент аппроксимируется следующим образом: $\Gamma_{\text{visc}} = \kappa \bar{\eta} \partial_t \alpha$, где $\bar{\eta}$ — эффективная вязкость сопротивления, зависящая от ориентации директора, $\kappa = \pi l^3 / [3(\ln(l/2r) - 1/2)]$ — коэффициент трения для вытянутого эллипсоида [118] с соотношением осей, равным приблизительно 7, как и у бактерии. Отсюда получаем оценку времени релаксации

$$\tau_0 \approx \frac{\bar{\eta} l^2}{12K} \frac{\ln(2l/r)}{\ln(l/2r) - 1/2}. \quad (19)$$

При типичных экспериментальных условиях для жидкого кристалла DSCG [119] мы имеем $\bar{\eta} = 4 - 5 \text{ кг м}^{-1} \text{ с}^{-1}$, $K = 15 \text{ пН}$ и $l = 5 \text{ мкм}$, $r = 0,4 \text{ мкм}$. В этом случае $\tau_0 \approx 1,0 - 1,5 \text{ с}$.

Поскольку время релаксации τ_0 относительно мало, бактерии быстро ориентируются согласно директору $\mathbf{n}$. Далее можно предположить, что вектор бактериальной ориентации $\mathbf{p}$ является либо сонаправленным ($\phi = \theta$) с нематической ориентацией $\mathbf{n}$, либо противоположенным ей ($\phi = \theta + \pi$). Это позволяет сделать замену $\mathbf{pp} \rightarrow \mathbf{nn}$ в выражении для активного напряжения (17).

3.3.2. Две популяции бактерий. Быстрое ориентирование бактерий по направлению (или против направления) нематического директора позволяет описать процесс переноса бактерий двумя связанными уравнениями адвекции–диффузии для концентраций $c^{\pm}$ бактерий, плавающих по направлению директора $\mathbf{n}$ (c^+) или против него (c^-):

$$\begin{aligned} \partial_t c^+ + \nabla(V_0 \mathbf{n} c^+ + \mathbf{v} c^+) &= -\frac{c^+ - c^-}{\tau} + D_c \nabla^2 c^+, \\ \partial_t c^- + \nabla(-V_0 \mathbf{n} c^- + \mathbf{v} c^-) &= -\frac{c^- - c^+}{\tau} + D_c \nabla^2 c^-. \end{aligned} \quad (20)$$

Здесь V_0 — скорость плавления бактерии (около $10 - 15 \text{ мкм с}^{-1}$), D_c — коэффициент диффузии, τ — время изменения направления (реверс). Это означает, что если бактерия меняет направление, то она или покидает популяцию (c^+), или присоединяется к ней (c^-). Для большинства экспериментальных условий время смены направления τ обычно достаточно велико по сравнению с временем ориентации бактерий τ_0 , порядка $30 - 60 \text{ с}$. Реверсы связаны с таким поведением бактерий, как "бег с кувырками" (run-and-tumble) [29]. Однако в жидких кристаллах бактерии могут двигаться только вдоль директора, поскольку любой поворот искажает структуру директора и увеличивает упругую энергию. Поэтому "бег с кувырками" подавляется — разрешены только реверсы: движения вперед и назад.

3.3.3. Фазовая диаграмма и анализ линейной устойчивости. Линейная устойчивость однородного ориентированного состояния, $c^+ = c^- = c_0/2$, $\mathbf{n} = (1, 0)$, к периодическим возмущениям вида $\sim \exp(\sigma(\mathbf{k})t + i\mathbf{k}\mathbf{x})$ может быть исследована.

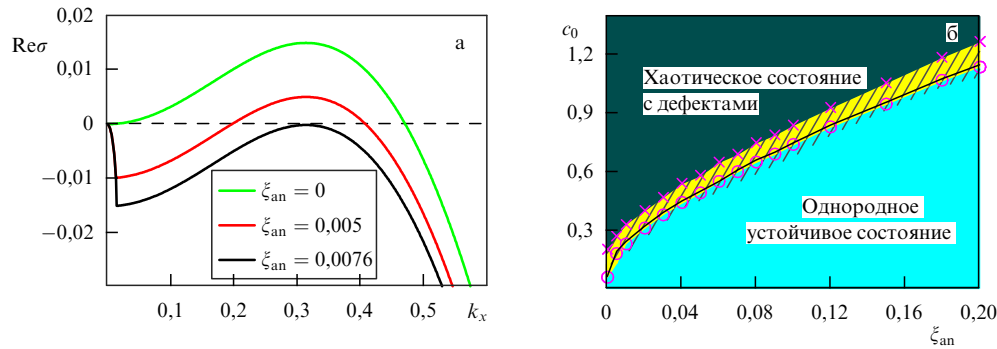


Рис. 9. (В цвете онлайн.) (а) Скорость роста $\text{Re}(\sigma(\mathbf{k}))$ как функция k_x ($k_y = 0$) линейных периодических волн в нематическом направлении $\mathbf{n} = (1, 0)$ для разных значений силы поверхностного закрепления ξ_{an} , $c_0 = 0.2$. (б) Фазовая диаграмма. Кругами и косыми крестами показаны результаты моделирования. Чёрная сплошная кривая обозначает предел линейной устойчивости, полученный аналитически. Устойчивые периодические возмущения директора существуют между состояниями с дефектами и однородным ориентированным состоянием (ярко-жёлтая полоса). Граница перехода получена постепенным увеличением средней концентрации c_0 немного возмущённого однородного ориентированного состояния. Штриховкой отмечена область гистерезиса, в которой не исчезающие дефекты сосуществуют с периодически волнообразными или однородными ориентированными состояниями. Время реверса $\tau = 66,6$ (соответствует примерно 20–30 с для условий эксперимента). (Из работы [61] © APS 2017.)

дована аналитически. Скорости роста возмущений $\sigma(\mathbf{k})$ с волновым числом $\mathbf{k}$ показаны на рис. 9а. Первоначально неустойчивость возникает для возмущений с волновым вектором, параллельным нематическому направлению, т.е. для продольных волн. Наиболее нестабильное волновое число k_{cr} на пороге неустойчивости в зависимости от силы поверхностного закрепления ξ_{an} определяется следующим аналитическим выражением:

$$k_{cr} = 2 \left(\frac{3E\gamma\xi_{an}}{h^2[2\Gamma + (\xi + 1)^2]} \right)^{1/4}, \quad (21)$$

где $E\gamma = \eta V_0 l / K$ — число Эриксона³, l — длина бактерии, K — средняя константа упругости (для условий эксперимента [33] $E\gamma \approx 3,75$), $\xi \approx 1$ — параметр аспектного отношения в теории Бериса–Эдвардса [92]. Нестабильность является длинноволновой без поверхностного закрепления директора, т.е. она имеет нулевое критическое волновое число на пороге. С возрастанием концентрации c критическое волновое число увеличивается. Однако поверхностное закрепление делает нестабильность коротковолновой с конечным критическим волновым числом k_{cr} (рис. 9а). Критическое волновое число k_{cr} увеличивается с возрастанием силы поверхностного закрепления как $k_{cr} \sim \xi_{an}^{1/4}$ на пороге.

Наиболее характерные присущие ЖЖК динамические режимы, описанные уравнениями (14), (16), (20), приведены на фазовой диаграмме (рис. 9б). При нулевом поверхностном закреплении ($\xi_{an} = 0$) система оставалась в стабильном однородном состоянии при концентрации, меньшей критической величины c_{cr} . Превышение концентрацией значения c_{cr} приводит к возникновению стабильных периодических волнообразных состояний, а затем — пространственно-временного хаоса. Как и в эксперименте [33], этот пространственно-временной режим характеризуется хаотическим движением, самопроизвольным зарождением/аннигиляцией топологических дефектов и генерацией потока в жидком кристалле (рис. 10а, г, ж). Это хаотическое поведение связано со

значительным накоплением бактерий в ядрах $+1/2$ -дефектов и выталкиванием бактерий из ядер $-1/2$ -дефектов (рис. 10г)⁴.

3.3.4. Пространственно-временной хаос, гистерезис и динамика дефектов. Переход к пространственно-временному хаосу сопряжён с существенным гистерезисом: однородно ориентированные и стационарно модулированные состояния сосуществуют с дефектами при одних и тех же значениях концентрации вблизи порога. Основной причиной гистерезиса является накопление бактерий в ядрах положительных дефектов, что в свою очередь увеличивает локальную активность системы (активное напряжение (см. уравнение (17)) пропорционально концентрации c). Рисунок 10б, д, з показывает стабильные конфигурации, характеризующиеся периодическими волнообразными искажениями нематика, который первоначально был ориентирован вдоль заданного направления. Эти возмущения также вызывают периодическую модуляцию концентрации бактерий c . Кроме того, установившееся нематическое распределение генерирует устойчивую периодическую структуру встречных потоков (рис. 10з). При дальнейшем увеличении концентрации c периодическая структура становится неустойчивой и уступает место состоянию с движущимися топологическими дефектами (рис. 10в, е, и). В отличие от дефектов в случае с нулевым поверхностным закреплением, в данном случае дефекты перемещаются преимущественно перпендикулярно общему направлению нематика (оси x).

Характеризация динамики дефектов представлена на рис. 11. Средние скорости дефектов $\bar{V}$ как функции средней концентрации c_0 показаны на рис. 11а. Скорость дефектов обоих типов возрастает почти линейно с увеличением концентрации c_0 . Скорость $+1/2$ -дефектов в пять раз выше, чем у отрицательных дефектов. В соответствии

³ Число Эриксона в жидких кристаллах характеризует отношение вязкого напряжения к упругому.

⁴ Все параметры в подписи к рис. 10 (так же как и в подписях к последующим рисункам) указаны в безразмерных (нормированных) единицах, соответствующих уравнениям (16)–(20). Длина нормирована на длину бактерии (5 мкм), скорость жидкости — на среднюю скорость плавания бактерий (15 мкм s^{-1}), время — на $1/3$ с (равное длине бактерии, делённой на скорость её плавания). Подробную информацию о нормировке можно найти в статье [61].

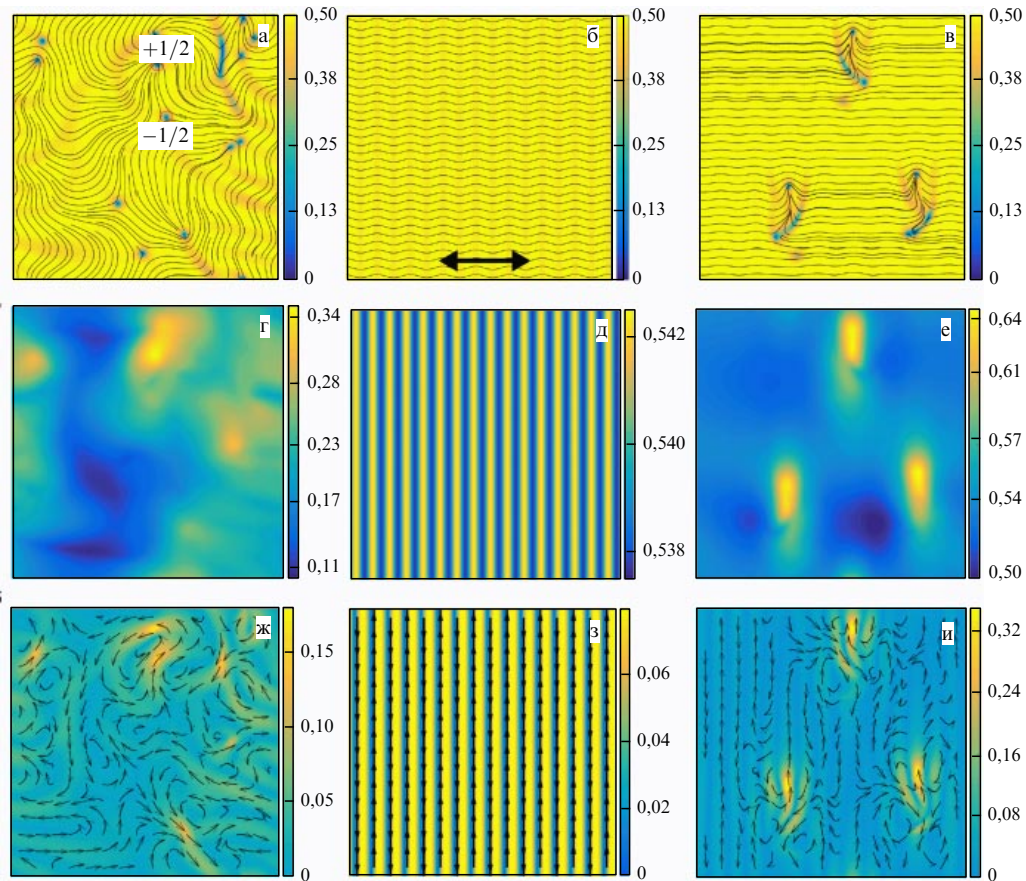


Рис. 10. Нематические ориентации и величины параметра порядка (а – в), поля концентрации (г – е), величины скорости потока с линиями тока (ж – и). На рисунках а, г, ж изображено состояние с дефектами для нулевого значения закрепления и средней концентрации $c_0 = 0,2$. Показаны некоторые топологические $\pm 1/2$ -дефекты. На рисунках б, д, з показана стабильная периодическая конфигурация со значением поверхностного закрепления $\xi_{an} = 0,05$ и $c_0 = 0,54$, т.е. около порога неустойчивости. Жирная чёрная стрелка указывает предписанную ориентацию директора, навязанную посредством поверхностного закрепления. Рисунки в, е, и иллюстрируют гистерезисное поведение: конфигурация с дефектами существует для тех же значений параметров ($\xi_{an} = 0,05$, $c_0 = 0,54$), что и на рис. б, д, з. Остальные параметры модели: $\tau = 66,6$, $D_c = 4$, $E\tau = 3,75$, $\Lambda = 1$, $\zeta = 0,2$, $\Gamma = 0,5$. (См. также дополнительные фильмы 4 – 6.) (Из работы [61] © APS 2017.)

с результатами прежних исследований [62, 63] изолированный $+1/2$ -дефект движется с постоянной скоростью, в то время как $-1/2$ -дефект неподвижен. Однако из-за взаимодействия с другими дефектами даже $-1/2$ -дефекты вовлекаются в движение положительными дефектами со скоростью, определяемой расстоянием между ними. Скорость дефектов практически не зависит от силы поверхностного закрепления ξ_{an} (закрепление определяет только направление движения).

Распределения скоростей дефектов $P(V)$ показаны на рис. 11б, в. Для высоких концентраций распределения $P(V)$ хорошо аппроксимируются законом Гаусса: $P(V) \sim \exp[-a_0(V - \bar{V})^2]$. Напротив, для более низких значений c и, соответственно, для меньших концентраций дефектов распределения лучше аппроксимируются растянутым экспоненциальным законом:

$$P(V) \sim \exp[-a_1(V - \bar{V})^\zeta],$$

с показателем $\zeta \approx 1,13$ для $-1/2$ -дефектов и $\zeta \approx 1,4$ для $+1/2$ -дефектов. Этого изменения можно ожидать ввиду различного поведения дефектов при разных концентрациях: движение дефекта эффективно рандомизируется при высоких концентрациях c (т.е. при высокой активности), что приводит к гауссову распределению. Напро-

тив, при низких концентрациях динамика дефекта состоит из длинных баллистических полётов и редких неупругих столкновений. Этот тип процессов часто демонстрирует негауссову статистику (см., например, [120, 121]).

Распределение концентраций, содержащее несколько движущихся дефектов $\pm 1/2$, показано на рис. 12 крупным планом. Рисунок 12а иллюстрирует накопление бактерий за ядром движущегося $+1/2$ -дефекта и их выталкивание из ядра $-1/2$ -дефекта.

Чтобы подтвердить это теоретическое предсказание, был проведён эксперимент на тонких плёнках живого жидкого кристалла (рис. 12б). В эксперименте флуоресцентный штамм бактерий *Bacillus subtilis* (рис. 5д) использовался для оценки локальных концентраций бактерий по интенсивности флуоресценции. Локальная нематическая ориентация в свою очередь была извлечена из ориентации бактерий. В целом, имеется хорошее качественное согласие: эксперимент подтвердил накопление бактерий в $+1/2$ -дефекте и их выталкивание из $-1/2$ -дефекта.

Относительная разность концентраций $\Delta c/c_0$, $\Delta c = c_m - c_0$, где c_m — максимальное или минимальное значение концентрации, уменьшается с увеличением средней концентрации c_0 или, соответственно, активнос-

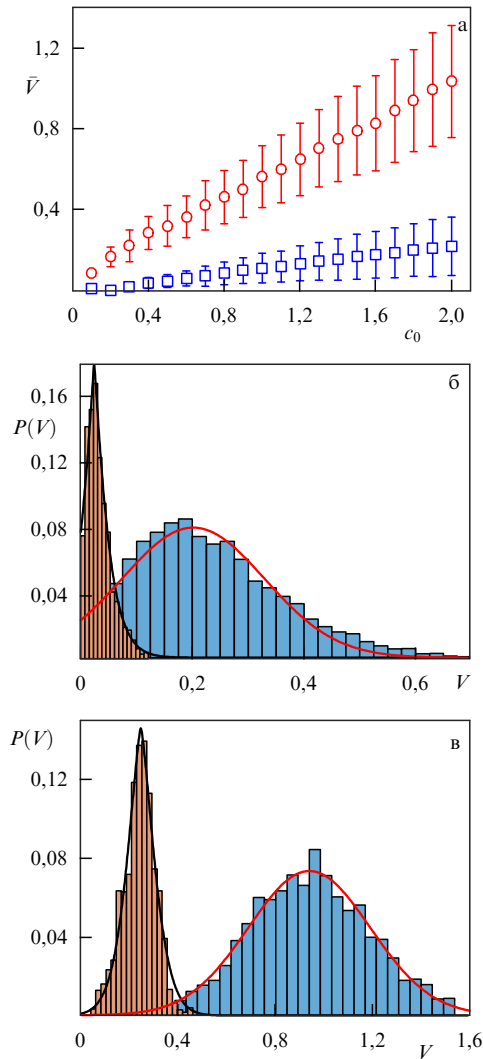


Рис. 11. (В цвете онлайн.) (а) Средняя скорость $\bar{V}$ $+1/2$ -дефектов (красные кружки) и $-1/2$ -дефектов (синие квадраты) как функция c_0 . Отрезки ошибок показывают стандартные отклонения скорости. Распределения скоростей для $-1/2$ -дефектов (б) и $+1/2$ -дефектов (в) при $\xi_{an} = 0$ и для $c_0 = 1,8$ (синий цвет) и $c_0 = 0,3$ (коричневый цвет). Красные сплошные кривые соответствуют распределению Гаусса, сплошные чёрные кривые — растянутые экспоненты. (Из работы [61] © APS 2017.)

ти системы. Явление накопления/обеднения исчезает в пределе очень высоких скоростей дефектов [61]. В этом случае динамика характеризуется частым рождением и уничтожением пар $\pm 1/2$ -дефектов. Поскольку соседние $\pm 1/2$ -дефекты вызывают противоположные тенденции в изменении концентрации, общий эффект становится размытым. Кроме того, быстро движущиеся дефекты накапливают меньше бактерий. Накопление (обеднение) также исчезает с уменьшением времени реверса бактерий τ .

3.4. Тактоиды в живом нематике

Для того чтобы описать тактоиды, т.е. нормальные включения, модель, сформулированная в разделе 3.3 в терминах уравнений (14), (16), (20), должна быть обобщена [76]. Основное отличие от вышеупомянутой модели заключается в том, что направление плавания бактерий $\mathbf{p}$ не обязательно совпадает с директором нематика $\mathbf{n}$, поскольку сам директор не определён в изотропной фазе.

3.4.1. Модель дуального нематика. В нематической области угол ориентации бактерий ϕ подчиняется уравнению (18). Тем не менее в нормальной области (например, внутри изотропного тактоида), где $|\mathbf{Q}| = 0$, член, ответственный за ориентацию, $|\mathbf{Q}| \sin(2\theta - 2\phi)$, обращается в нуль и ориентация бактерий в основном определяется диффузией. Поскольку упругие эффекты в жидких кристаллах обычно преобладают над ориентацией потоком жидкости, можно пренебречь вкладами от адвекции и ориентации сдвиговым течением, определяющими динамику бактерий в ньютоновской жидкости [21]. Ввиду разрывности угла уравнение (18) трудно решить численно. Чтобы обойти эту проблему, по аналогии с нематическим тензором $\mathbf{Q}$ можно ввести эволюционное уравнение для бесшпурного симметричного нематоподобного тензора $\mathbf{P} = q_p(\mathbf{p}\mathbf{p} - \mathbf{I}/2)$, построенного из единичного вектора бактериальной ориентации $\mathbf{p}$:

$$\partial_t \mathbf{P} = a_p \mathbf{P} - 4c_p |\mathbf{P}|^2 \mathbf{P} - \frac{\mathbf{F}_Q}{\tau_0} + D_t \nabla^2 \mathbf{P}. \quad (22)$$

Здесь a_p и c_p — константы, определяющие амплитуду $q_p = |\mathbf{P}|$, выбраны таким образом, чтобы выполнялось равенство $q_p = 1$ в однородном ориентированном ста-

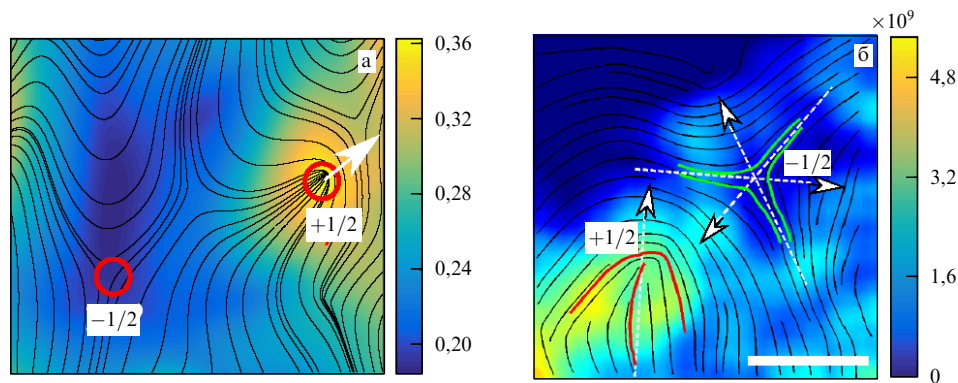


Рис. 12. (В цвете онлайн.) (а) Вычислительная модель: крупный план поля концентрации. Некоторые дефекты показаны красными кружками, стрелка указывает направление движения. (б) Эксперимент: распределение концентрации бактерий в области, содержащей два дефекта. Цветовая шкала представляет концентрацию бактерий, извлечённую из усреднённой интенсивности флуоресценции. Выделены два топологических дефекта ($1/2$ и $-1/2$). Белые линии показывают ориентацию дефектов. Масштабный отрезок 50 мкм. (Из работы [61] © APS 2017.)

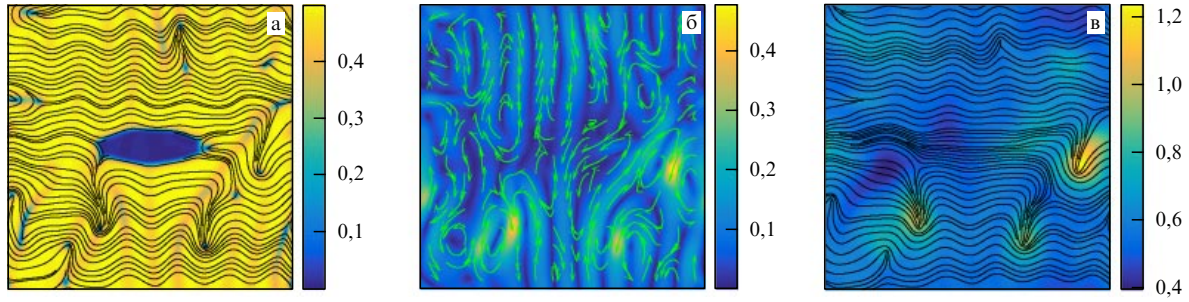


Рис. 13. Изотропные тактоиды в нематической жидкости. (а) Нематические контурные линии и величина параметра порядка. (б) Величина скорости жидкости с линиями тока. (в) Поле концентрации с бактериальными ориентационными контурными линиями для силы поверхностного закрепления директора $\xi_{\text{exter}} = 0,02$, сила закрепления на изотропно-нематическом интерфейсе (IN) $\xi_{\text{anch}} = 30$, концентрация $c_0 = 0,6$ (см. также дополнительный фильм 7.) (Из работы [76] © Institute of Physics 2018.)

ционарном состоянии⁵. Член $\mathbf{F}_Q$ ориентирует тензор $\mathbf{P}$ вдоль нематической ориентации, заданной тензором $\mathbf{Q}$. Здесь $\tau_0 \approx 1$ с — время ориентации, которое намного меньше, чем время реверса бактерий ($\tau \approx 60$ с) [61]. Ориентирующий член $\mathbf{F}_Q \sim \mathbf{Q}$ выбирается таким образом, чтобы он не изменял амплитуды тензора $\mathbf{P}$. В пределе $|\mathbf{P}| = \text{const}$ воспроизводится уравнение (18). Внутри тактоида $\mathbf{F}_Q$ исчезает и бактериальная ориентация становится независимой от $\mathbf{Q}$.

В свою очередь нематический тензор $\mathbf{Q}$ связан с тензором $\mathbf{P}$ выражением для активного напряжения (см. уравнение (17)). Решая уравнение (22), можно определить бактериальную ориентацию⁶ $\mathbf{P}$. Соответственно, в уравнениях (20) для бактериального транспорта нематический директор $\mathbf{n}$ должен быть заменён единичным вектором бактериальной ориентации $\mathbf{p}$.

В изотропно-нематической (IN) области сосуществования на фазовой диаграмме, приведённой на рис. 1в, тактоиды могут быть введены в уравнение свободной энергии Ландау–де Жена (12) через дополнительный член $\sim |\mathbf{Q}|^6$, подобно тому как это делается в теории среднего поля для фазовых переходов первого порядка [122]. Этот нелинейный член более высокого порядка обеспечивает локальную устойчивость как изотропных, так и нематических состояний. Описание может быть значительно упрощено для фиксированных изотропных доменов, полученных, например, локальным нагревом. Тогда коэффициент a перед квадратичным членом в свободной энергии Ландау–де Жена (12) можно сделать пространственно зависимым. Это вынуждает амплитуду параметра порядка в равновесии q быть положительной константой в нематике и нулём в изотропной фазе.

Для того чтобы ввести изотропный тактоид желаемой формы, заданный условием $f(x, y) = 0$, в уравнении (12) коэффициент a изменяется до отрицательного значения внутри тактоида, например, $a = -a_2$. Этому коэффициенту приписывается положительное значение вне тактоида, $a = a_1$ с быстрым, но непрерывным переходом на IN-границе:

$$a(x, y) = -\frac{a_1 + a_2}{2} \left[\tanh \left(-\frac{f(x, y)}{\delta} \right) + 1 \right] + a_1. \quad (23)$$

⁵ В отличие от аналогичных членов a и c в уравнении для свободной энергии $\mathbf{Q}$ (12), константы a_p и c_p используются только для контроля амплитуды q_p тензора $\mathbf{P}$ и не несут никакого физического смысла.

⁶ Как и нематический директор, $\mathbf{p}$ и $-\mathbf{p}$ эквивалентны, поскольку они извлекаются из симметричного бесшпурного тензора $\mathbf{P}$.

Здесь δ — ширина IN-интерфейса. Чтобы создать нематический тактоид, окружённый изотропной фазой, знак коэффициента a меняется на противоположный во всей вычислительной области. В этом упрощённом подходе форма тактоида предопределена функцией $f(x, y)$. Тем не менее некоторые локальные корректировки формы могут происходить вблизи дефектов поверхности, таких как буджумы (boojum) (рис. 13а). Может быть также рассмотрена более сложная модель двухфазной системы с возможностью эволюции формы [95].

Закрепление директора $\mathbf{n}$ на изотропно-нематическом интерфейсе может быть осуществлено через дополнительный поверхностный член $\mathbf{F}_{\text{anch}}$ с соответствующей силой закрепления ξ_{anch} . Этот член похож по форме на член $\mathbf{F}_{\text{exter}}$ в уравнении (16) [76]. Вектор $\mathbf{f}$ "лёгкого направления" вдоль изотропно-нематического интерфейса [53] получается из градиента амплитуды параметра порядка $\mathbf{f} \sim \nabla|\mathbf{Q}|$ (поскольку этот вектор перпендикулярен IN-интерфейсу). Это позволяет реализовать как планарную, так и гомеотропную ориентацию на IN-интерфейсе [76].

3.4.2. Зарядка тактоидов. Снимок изотропного тактоида в нематической фазе с планарным закреплением приведён на рис. 13. При достаточно низких концентрациях бактерий и сильном поверхностном закреплении (поверхностное закрепление предписывает общую нематическую ориентацию) наблюдался ориентационный режим с направлением нематика, параллельным направлению закрепления. Однако плоское изотропно-нематическое закрепление на поверхности тактоида заставляет нематическую ориентацию отклоняться от горизонтальной. При не слишком высоких концентрациях бактерий конфигурация характеризуется периодическими нематическими волнами из-за возникновения коротковолновой неустойчивости, характеризуемой уравнением (21) (рис. 10б). Взаимодействие закрепления директора на IN-границе и объёмной нематической ориентации приводит к несимметричной структуре потока вокруг тактоида [76]. При ещё более высоких концентрациях бактерий наблюдался хаотический режим с большим числом топологических дефектов (см. рис. 13). Дефекты заходят в тактоид и выходят из него случайным образом и временно искажают планарное закрепление на IN-границе.

Нематические тактоиды в изотропной фазе создаются изменением знака коэффициента Ландау–де Жена a во всей вычислительной области (см. уравнение (23)).

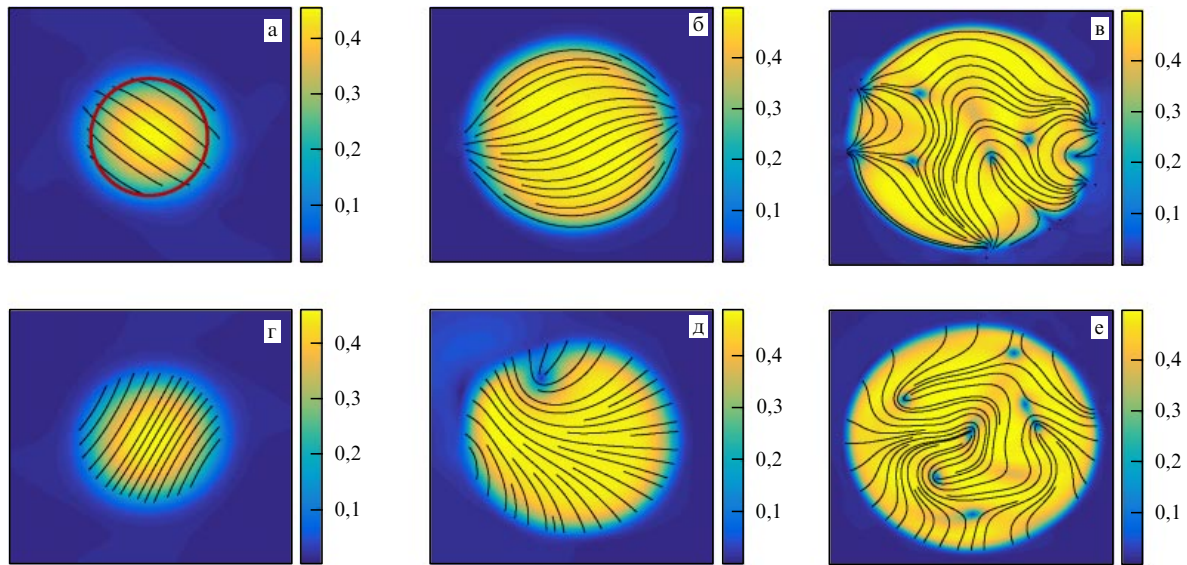


Рис. 14. Конфигурации нематического поля для фиксированной концентрации $c_0 = 0,6$ и различных размеров нематических тактоидов: планарное (а) и гомеотропное (г) IN-закрепление для $R = 30$, планарное (б) и гомеотропное (д) IN-закрепление для $R = 90$, планарное (в) и гомеотропное (е) IN-закрепление для $R = 240$. Поверхностное закрепление не было приложено, $\xi_{\text{exter}} = 0$, в то время как планарное IN-закрепление имело величину $\xi_{\text{anch}} = 30$. (Из работы [76] © Institute of Physics 2018.)

Различные нематические конфигурации для разных концентраций бактерий и размеров тактоидов как для планарного, так и для гомеотропного закрепления показаны на рис. 14. Эти конфигурации находятся в хорошем качественном согласии с экспериментальными данными [53]: при малых размерах тактоидов упругие силы преобладают над поверхностным закреплением, что соответствует почти ориентированной (невозмущённой) нематической конфигурации (рис. 14а, г). В случае больших размеров на поверхности тактоида имеется несколько особенностей (рис. 14б, д). Конфигурация в виде веретена (так называемая 2с-конфигурация) наблюдается для более крупного тактоида с планарной привязкой (рис. 14в). Конфигурации 2с с двумя положительными буждями (топологическими дефектами на нематико-изотропной границе) часто возникают в экспериментах [53, 123]. В то время как общая форма тактоида была заранее определена (диск), локальные корректировки формы наблюдались рядом с буждами. Для тактоидов ещё больших размеров наблюдаются конфигурации со многими дефектами как внутри тактоида, так и на его поверхности (рис. 14в, е).

Топологические дефекты, входящие в тактоид и выходящие из него, изменяют его общий топологический заряд и локальную концентрацию бактерий. Заряд может быть извлечён из полного вращения фазы (против часовой стрелки по контуру, охватывающему тактоид). Усреднённый по времени суммарный топологический заряд тактоида s_t и усреднённая относительная концентрация бактерий внутри тактоида c_t рассчитываются по всему периоду численного эксперимента. Зависимости топологического заряда s_t от поверхностного закрепления и концентрации бактерий c показаны на рис. 15а, б (планарное закрепление). Для небольших концентраций бактерий и сильного поверхностного закрепления топологические дефекты отсутствуют, а топологический заряд тактоида равняется нулю. Для более высоких концентраций в режиме с дефектами средний топологический заряд тактоида всегда отрицателен. Величина заряда с возрастанием концентрации бактерий сначала увеличивается, но затем насыщается и убывает. Заряд тактоида возрастает с увеличением поверхностного закрепления. Наблюдается также небольшое подавление относительной концентрации бактерий внутри тактоида.

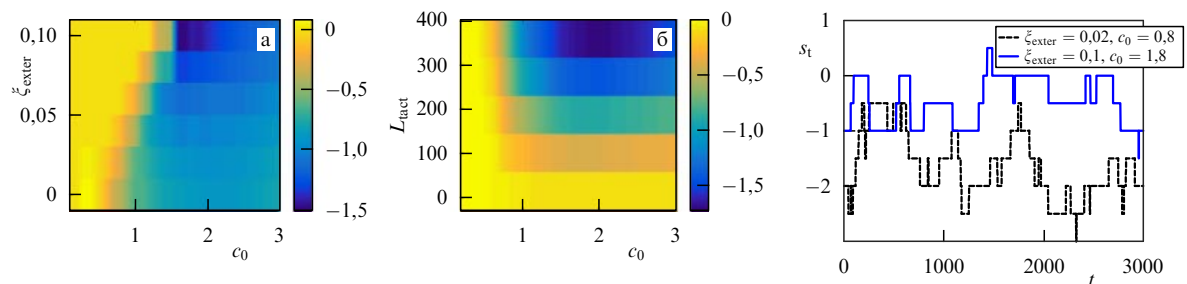


Рис. 15. Топологический заряд для изотропного тактоида в нематической среде с планарным IN-закреплением. (а) Заряд тактоида $\langle s_t \rangle$ в зависимости от силы поверхностного закрепления ξ_{exter} и средней концентрации бактерий c_0 . Размер тактоида фиксирован: $L_{\text{tact}} = 180$. (б) Заряд тактоида $\langle s_t \rangle$ как функция его размера L_{tact} и средней концентрации бактерий c_0 . Сила поверхностного закрепления фиксирована: $\xi_{\text{exter}} = 0,02$. (в) Зависимость s_t от времени для $c_0 = 0,8$, $\xi_{\text{exter}} = 0,02$ и $c_0 = 1,8$, $\xi_{\text{exter}} = 0,1$. (Из работы [76] © Institute of Physics 2018.)

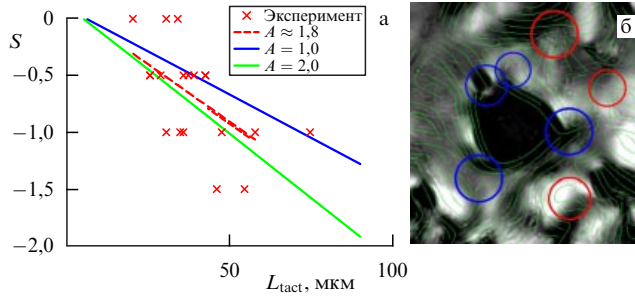


Рис. 16. (В цвете онлайн.) (а) Зависимость топологического заряда тактоида от его размера, полученная в результате эксперимента (кресты) и моделирования (сплошные кривые). Активность бактерий A , являющаяся произведением концентрации бактерий c_0 и магнитуды дипольных сил, извлекается из линейной аппроксимации (штриховая линия) экспериментальных данных. Концентрация бактерий в эксперименте составляла 5×10^9 ячеек на 1 см^3 . (б) Нематическая конфигурация вокруг одного тактоида в экспериментах. Положительные дефекты выделены красными кружками, отрицательные — синими. Отрицательные дефекты обрамляют IN-интерфейс, в то время как положительные дефекты присутствуют в объёме нематической фазы. (Из работы [76] © Institute of Physics 2018.)

Величина s_L возрастает почти линейно с увеличением размера тактоида.

Таким образом, плотность заряда, т.е. общий заряд, нормированный на длину тактоида, остаётся практически постоянной. Аналогичное поведение наблюдается и для тактоидов с гомеотропным изотропно-нематическим закреплением. В то время как средний заряд чётко определён, пока дефекты постоянно входят в тактоид и выходят из него, мгновенный топологический заряд s_L значительно колеблется со временем (рис. 15в).

3.4.3. Экспериментальная проверка. Процедуры подготовки образца ЖЖК и сбора данных описаны в серии работ [33, 61, 76]. Экспериментальная проверка была выполнена со штаммом 1085 подвижных бактерий *Bacillus subtilis*, помещённых в лиотропный жидкий кристалл DSCG (см. рис. 1). Микроскопические изображения были получены в режиме почти скрещенных поляризаторов, когда угол между поляризатором и анализатором был немного меньше $\pi/2$. Этот режим позволяет одновременно наблюдать за плавающими бактериями и тактоидами, которые видны как тёмные области (рис. 5б).

Топологические заряды 17-ти видимых тактоидов были определены суммированием топологических зарядов всех дефектов вокруг каждого тактоида. Анализ экспериментальных данных показывает, что суммарный топологический заряд возрастает с увеличением размера тактоида, подтверждая тем самым теоретическое предсказание (рис. 16а). Кроме того, эксперименты подтвердили, что отрицательные топологические дефекты обрамляют IN-интерфейс, тогда как положительные дефекты обнаруживаются в основном в объёме нематической фазы (рис. 16б).

3.4.4. Кинетическая теория зарядки. Появление спонтанного заряда у тактоида можно объяснить различными подвижностями дефектов в активных системах: $+1/2$ -дефекты подвижны, в то время как $-1/2$ -дефекты являются эффективно неподвижными и приводят в движение только движущимися положительными дефектами

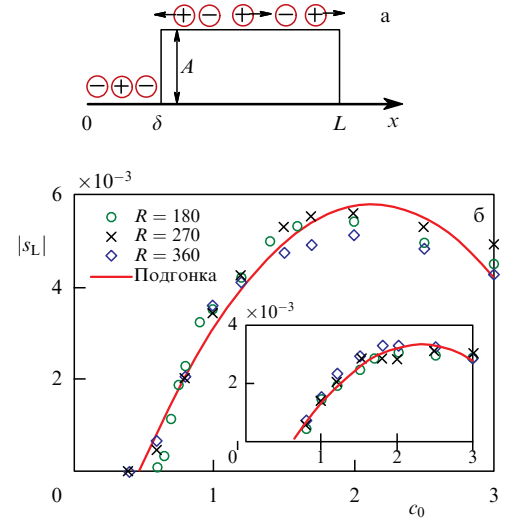


Рис. 17. (а) Схема одномерной системы, описываемой моделью Фоккера – Планка. (б) Величина топологической плотности заряда изотропного тактоида с планарным закреплением в зависимости от средней концентрации бактерий при трёх значениях размера R тактоида. На вставке — то же для изотропного тактоида с гомеотропным закреплением. (Из работы [76] © Institute of Physics 2018.)

[62, 63, 77]. Скорость $+1/2$ -дефектов как минимум в пять раз больше, чем скорость $-1/2$ -дефектов (рис. 11а). Чтобы войти в тактоид или покинуть его, дефекты должны преодолеть потенциальный барьер на изотропно-нематической границе раздела (рис. 17а). В целом, заряд увеличивается с возрастанием концентрации бактерий, поскольку концентрация дефектов сама по себе пропорциональна концентрации бактерий [61]. Тем не менее при очень больших концентрациях бактерий зарядка подавляется междефектным отталкивающим взаимодействием. Предложенный механизм напоминает спонтанную зарядку коллоидов в электролитах [124 – 126] за счёт протонирования коллоидных частиц и перехода подвижных протонов в раствор.

Эта гипотеза может быть дополнительно подтверждена упрощённым одномерным описанием Фоккера – Планка для функций распределения вероятностей P^+ и P^- для положений положительных и отрицательных дефектов (рис. 17а). В этом подходе предполагается, что дефекты взаимодействуют аналогично электрическим зарядам (дефекты с одинаковым топологическим зарядом отталкиваются, дефекты с противоположными зарядами притягиваются друг к другу), а сила взаимодействия уменьшается с увеличением расстояния как $1/x$. Поэтому на движение дефекта влияют два конкурирующих фактора: один из них обусловлен взаимодействием дефектов, а другой — наличием барьера на поверхности тактоида. Соответствующие уравнения Ланжевена для каждого отдельного дефекта можно записать в следующем виде:

$$\begin{aligned} \partial_t x_i^+ &= F'(x_i^+) + \mu \left(\sum_{j=0}^N \frac{1}{x_j^- - x_i^+} - \sum_{j=0, j \neq i}^N \frac{1}{x_j^+ - x_i^+} \right) + \xi^+, \\ \partial_t x_i^- &= F'(x_i^-) + \mu \left(\sum_{j=0}^N \frac{1}{x_j^+ - x_i^-} - \sum_{j=0, j \neq i}^N \frac{1}{x_j^- - x_i^-} \right) + \xi^-, \end{aligned} \quad (24)$$

где μ — магнитуа силы взаимодействия, $\xi^\pm$ — случайные силы с амплитудой $D^\pm$.

Суммы в (24) можно заменить интегралами от функций распределения плотности для положительных и отрицательных дефектов $P^\pm$: $\sum B_i = \int_0^\infty BP(x) dx$. В результате получим систему уравнений Фоккера – Планка для функций распределения плотности вероятностей $P^+(x, t)$ и $P^-(x, t)$:

$$\begin{aligned}\partial_t P^+(x, t) &= D^+ \partial_x^2 P^+ - \\ &- \partial_x \left[\left(-F'(x) + \mu \int_0^L \frac{P^+(x', t) - P^-(x', t)}{x - x'} dx' \right) P^+(x, t) \right], \\ \partial_t P^-(x, t) &= D^- \partial_x^2 P^- - \\ &- \partial_x \left[\left(-F'(x) + \mu \int_0^L \frac{P^-(x', t) - P^+(x', t)}{x - x'} dx' \right) P^-(x, t) \right].\end{aligned}\quad (25)$$

Здесь $D^\pm$ — коэффициенты диффузии дефектов, $D^+ \gg D^-$, μ — величина силы взаимодействия между дефектами, $F(x)$ описывает потенциальный барьер на IN-интерфейсе, L — общий размер системы. Коэффициент диффузии дефектов примерно пропорционален произведению скорости дефекта и длины его свободного пробега, которые в свою очередь зависят от концентрации бактерий. Описание движения дефекта как диффузионного процесса оправдано тем фактом, что при достаточно высоких концентрациях бактерий статистика дефектов может быть довольно точно аппроксимирована гауссовым распределением (рис. 11).

Асимптотическое решение для плотности заряда тактоида можно получить из стационарных уравнений (25) при предположении очень большой диффузии D^+ для положительных дефектов, т.е. когда сила взаимодействия дефектов $\mu \ll 1$:

$$\begin{aligned}S &= -P_0 \delta \left[\exp \frac{A}{D^-} - 1 \right] \times \\ &\times \left[1 - \frac{\mu \delta P_0 \exp(A/D^-)}{D^-} \left(\log \frac{L}{\delta} + 1 \right) \right].\end{aligned}\quad (26)$$

Здесь S — плотность топологических зарядов на тактоиде (число зарядов на единицу длины), P_0 — средняя плотность дефектов в системе (предполагается, что она пропорциональна концентрации бактерий c), δ — ширина IN-интерфейса, A — высота потенциального барьера.

Эта модель объясняет спонтанную отрицательную зарядку IN-интерфейса, если принять, что $A > 0$. Это сразу будет означать накопление отрицательного заряда для отрицательных тактоидов и наоборот. Величина заряда зависит от средней концентрации дефектов (или бактерий) в виде $^7 S \propto -C_0 P_0 + C_1 P_0^2$ с постоянными $C_0 > C_1 > 0$.

⁷ Плотность заряда уменьшается с увеличением размера системы как $S \propto -\log(L/\delta)$. Логарифмическое расхождение S с размером системы является следствием предположения о том, что сила взаимодействия между дефектами составляет $1/x$. Существуют различные способы регуляризовать это расхождение. Например, можно ввести экспоненциальную длину экранирования, аналогичную длине Дебая, из-за перераспределения дефектов [127].

Величина плотности топологического заряда, определяемая как отношение топологического заряда тактоида к его длине $|s_L|$, для разных размеров тактоидов и концентраций бактерий показана на рис. 176. Видно, что для изотропных и нематических тактоидов с планарным и гомеотропным закреплением на IN-интерфейсе плотность топологического заряда тактоида как функция концентрации практически не зависит от размера тактоида и она может быть аппроксимирована параболой в соответствии с предсказанием модели Фоккера – Планка (см. уравнение (26)).

4. Заключение

Мы представили краткий обзор роли топологических дефектов в пространственно-временной организации активных жидких кристаллов. Топологические дефекты, выступающие в качестве элементарных возбуждений, могут быть использованы для управления свойствами этих новых материалов. Безусловно, исследование топологических дефектов, в том числе их пространственно-временного поведения, позволяет глубже понять фундаментальные механизмы, регулирующие динамику активной материи. Кроме того, активные жидкие кристаллы могут представлять интерес с точки зрения их применения в качестве мягких адаптивных биоинспирированных материалов, реагирующих на воздействие различных физических и химических факторов, таких как свет, механический сдвиг, вещества, загрязняющие воздух, бактериальные токсины и т.д. (см. обзор [128]).

Помимо DSCG и других нетоксичных лиотропных жидких кристаллов (например, Sunset Yellow FCF $C_{16}H_{10}N_2Na_2O_7S_2$, пищевая добавка), многие биологические жидкости, такие как слизь (mucus) [129], растворы ДНК [130], взвеси вирусов [131], нередко обладают жидкокристаллическим порядком. Эти жидкости, особенно слизь, часто имеют непосредственное отношение к здоровью человека. Слизь играет важную роль в высших организмах — от предотвращения бактериальных и вирусных инфекций до содействия оплодотворению и защиты женского репродуктивного тракта. Поскольку анизотропия слизи и её неоднородность зависят от того, как прилагалось механическое напряжение, это влияет на подвижность бактерий нетривиальным образом [132].

В описанных выше примерах плавающие бактерии играли роль "активной добавки". Чисто синтетический аналог живого жидкого кристалла весьма желателен для многих технологических применений, таких как датчики. В принципе это можно сделать, заменив бактерии синтетическими микрочастицами, такими как каталитические золото-платиновые (AuPt) наностержни [12] или активными янус-частицами другого типа, например в виде платино-кремнеземных сфер [12]. К сожалению, химический состав лиотропных жидких кристаллов, как правило, несовместим с механизмом химического движения AuPt-наностержней. В дополнение к химическому механизму движения наностержни могут запитаться акустически с помощью ультразвука [134, 135]. Акустически возбуждённые наностержни могут быть легко перенесены в жидкокристаллическую среду. Однако пространственно неоднородное распределение интенсивности ультразвука делает управление движением наностержня довольно сложным. В отличие от химически или

акустически движущихся стержней, сферические януса-частицы могут приводиться в движение в жидких кристаллах благодаря явлению автоэлектрофореза под действием электрического поля [4, 136, 137].

До настоящего времени были исследованы только нематические активные жидкие кристаллы. Крайне интересным представляется исследование в дальнейшем более упорядоченных жидкокристаллических фаз, таких как смектики (слоистые) или холестерики (хиральные). Однако предварительные эксперименты показали, что бактерии не проявляют подвижности в смектических или холестерических жидких кристаллах, вероятно, из-за повышенной вязкости этих фаз.

Как отмечалось выше, точечные $\pm 1/2$ -топологические дефекты играют доминирующую роль в динамике активных нематических жидких кристаллов. Смектические жидкие кристаллы имеют, помимо точечных дефектов, текстуры более сложных особенностей, таких как фокальные конические домены (Focal Conical Domains — FCDs) и пластинчатые структуры. FCDs — это поверхности, линии кривизны которых являются окружностями [138]. Использование фокальных конических и пластинчатых доменов открывает возможность для управления активной материей путём структурирования поверхности [139] или с помощью магнитного поля [140]. Например, посредством взаимодействия активного нематика [32] со смектическим жидким кристаллом можно обратно превращать хорошо развитую активную турбулентность в высокоорганизованный поток жидких кристаллов под действием приложенного магнитного поля [140].

Благодарности. Данные исследования поддержаны Национальным фондом науки США (гранты DMR-1735700 и RNY-1707900).

Список литературы

1. Арanson И С *УФН* **183** 87 (2013); Aranson I S *Phys. Usp.* **56** 79 (2013)
2. Marchetti M C et al. *Rev. Mod. Phys.* **85** 1143 (2013)
3. Vicsek T, Zafeiris A *Phys. Rep.* **517** 71 (2012)
4. Lavrentovich O D *Current Opin. Colloid Interface Sci.* **21** 97 (2016)
5. Dombrowski C et al. *Phys. Rev. Lett.* **93** 098103 (2004)
6. Sokolov A, Aranson I S, Kessler J O, Goldstein R E *Phys. Rev. Lett.* **98** 158102 (2007)
7. Goldstein R E *Annu. Rev. Fluid Mech.* **47** 343 (2015)
8. Kantsler V et al. *eLife* **3** e02403 (2014)
9. Surrey T et al. *Science* **292** 1167 (2001)
10. Schaller V et al. *Nature* **467** 73 (2010)
11. Sumino Y et al. *Nature* **483** 448 (2012)
12. Paxton W F et al. *J. Am. Chem. Soc.* **126** 13424 (2004)
13. Palacci J et al. *Science* **339** 936 (2013)
14. Theurkauff I et al. *Phys. Rev. Lett.* **108** 268303 (2012)
15. Buhl J et al. *Science* **312** 1402 (2006)
16. Cavagna A et al. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **107** 11865 (2010)
17. Ward A J et al. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **105** 6948 (2008)
18. Karamouzas I, Skinner B, Guy S J *Phys. Rev. Lett.* **113** 238701 (2014)
19. Wensink H H et al. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **109** 14308 (2012)
20. Sokolov A, Aranson I S *Phys. Rev. Lett.* **109** 248109 (2012)
21. Saintillan D, Shelley M J *Phys. Rev. Lett.* **100** 178103 (2008)
22. Aranson I S et al. *Phys. Rev. E* **75** 040901(R) (2007)
23. Saintillan D, Shelley M J *Compt. Rend. Phys.* **14** 497 (2013)
24. Sokolov A, Aranson I S *Phys. Rev. Lett.* **103** 148101 (2009)
25. López H M et al. *Phys. Rev. Lett.* **115** 028301 (2015)
26. Palacci J et al. *Sci. Adv.* **1** e1400214 (2015)
27. Ren L et al. *ACS Nano* **11** 10591 (2017)
28. Löwen H *Phys. Rep.* **237** 249 (1994)
29. Berg H C, Brown D A *Nature* **239** 500 (1972)
30. Takagi D et al. *Phys. Rev. Lett.* **110** 038301 (2013)
31. Weber C A et al. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **112** 10703 (2015)
32. Sanchez T et al. *Nature* **491** 431 (2012)
33. Zhou S, Sokolov A, Lavrentovich O D, Aranson I S *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **111** 1265 (2014)
34. Zimmermann N et al. *Soft Matter* **11** 1547 (2015)
35. Schimansky-Geier L et al. *Phys. Lett. A* **207** 140 (1995)
36. Schweitzer F, Ebeling W, Tilch B *Phys. Rev. Lett.* **80** 5044 (1998)
37. Romanczuk P et al. *Eur. Phys. J. Spec. Top.* **202** 1 (2012)
38. Cates M E, Tailleur J *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **6** 219 (2015)
39. Solon A P et al. *Phys. Rev. Lett.* **114** 198301 (2015)
40. Nardini C et al. *Phys. Rev. X* **7** 021007 (2017)
41. Aranson I S, Tsimring L S *Rev. Mod. Phys.* **78** 641 (2006)
42. Aranson I S et al. *Phys. Rev. Lett.* **84** 3306 (2000)
43. Clerc M G et al. *Nature Phys.* **4** 249 (2008)
44. Peruani F et al. *Phys. Rev. Lett.* **108** 098102 (2012)
45. Zhang H P et al. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **107** 13626 (2010)
46. Narayan V, Ramaswamy S, Menon N *Science* **317** 105 (2007)
47. Aranson I S, Volfson D, Tsimring L S *Phys. Rev. E* **75** 051301 (2007)
48. Kudrolli A et al. *Phys. Rev. Lett.* **100** 058001 (2008)
49. Pawar A B, Kretzschmar I *Macromol. Rapid Commun.* **31** 150 (2010)
50. Bianchi E, Blaak R, Likos C N *Phys. Chem. Chem. Phys.* **13** 6397 (2011)
51. de Gennes P G, Prost J *The Physics of Liquid Crystals* (Intern. Ser. of Monographs on Physics, Vol. 83) (Oxford: Oxford Univ. Press, 1995)
52. Kléman M, Lavrentovich O D *Soft Matter Physics: an Introduction* (New York: Springer, 2007)
53. Kim Y-K, Shiyankovskii S V, Lavrentovich O D *J. Phys. Condens. Matter* **25** 404202 (2013)
54. Mushenheim P C et al. *Soft Matter* **10** 88 (2014)
55. Nazarenko V G et al. *Phys. Rev. Lett.* **105** 017801 (2010)
56. Zhou S et al. *New J. Phys.* **19** 055006 (2017)
57. Mushenheim P C et al. *Soft Matter* **11** 6821 (2015)
58. Mermin N D *Rev. Mod. Phys.* **51** 591 (1979)
59. Pismen L M *Vortices in Nonlinear Fields: From Liquid Crystals to Superfluids, from Non-equilibrium Patterns to Cosmic Strings* (Intern. Ser. of Monographs on Physics, Vol. 100) (New York: Oxford Univ. Press, 1999)
60. Abrikosov A A, Gorkov L P, Dzyaloshinski I E *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics* (North Chelmsford, MA: Dover Publ., 2012)
61. Genkin M M, Sokolov A, Lavrentovich O D, Aranson I S *Phys. Rev. X* **7** 011029 (2017)
62. Giomi L et al. *Phys. Rev. Lett.* **110** 228101 (2013)
63. Pismen L M *Phys. Rev. E* **88** 050502(R) (2013)
64. Keber F C et al. *Science* **345** 1135 (2014)
65. Thampi S P, Golestanian R, Yeomans J M *Europhys. Lett.* **105** 18001 (2014)
66. Bodenschatz E, Pesch W, Kramer L *Physica D* **32** 135 (1988)
67. Ellis P W et al. *Nature Phys.* **14** 85 (2018)
68. Needleman D, Dogic Z *Nature Rev. Mater.* **2** 17048 (2017)
69. DeCamp S J et al. *Nature Mater.* **14** 1110 (2015)
70. Kamien R D *Rev. Mod. Phys.* **74** 953 (2002)
71. Nelson D R *Nano Lett.* **2** 1125 (2002)
72. Pairam E et al. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **110** 9295 (2013)
73. Sokolov A, Zhou S, Lavrentovich O D, Aranson I S *Phys. Rev. E* **91** 013009 (2015)
74. Kumar A et al. *Mol. Cryst. Liquid Cryst.* **574** 33 (2013)
75. Trivedi R R et al. *Soft Matter* **11** 8404 (2015)
76. Genkin M M, Sokolov A, Aranson I S *New J. Phys.* **20** 043027 (2018)
77. Kawaguchi K, Kageyama R, Sano M *Nature* **545** 327 (2017)
78. Guo Y et al. *Adv. Mater.* **28** 2353 (2016)
79. Peng C et al. *Science* **354** 882 (2016)
80. Landau L D, Lifshitz E M *Fluid Mechanics* 2nd ed. (Amsterdam: Elsevier, 2013)
81. Köhler S, Schaller V, Bausch A R *Nature Mater.* **10** 462 (2011)
82. Saw T B et al. *Nature* **544** 212 (2017)
83. Malinverno C et al. *Nature Mater.* **16** 587 (2017)

84. Harvey C W, Alber M, Tsimring L S, Aranson I S *New J. Phys.* **15** 035029 (2013)
85. Wu Y et al. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **106** 1222 (2009)
86. Volfson D et al. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **105** 15346 (2008)
87. Ngo S et al. *Phys. Rev. Lett.* **113** 038302 (2014)
88. Gao T et al. *Phys. Rev. E* **92** 062709 (2015)
89. Ramaswamy S, Simha R A, Toner J *Europhys. Lett.* **62** 196 (2003)
90. Baskaran A, Marchetti M C *Phys. Rev. E* **77** 011920 (2008)
91. Bertin E et al. *New J. Phys.* **15** 085032 (2013)
92. Beris A N, Edwards B J *Thermodynamics of Flowing Systems: with Internal Microstructure* (Oxford Engineering Science Series, Vol. 36) (New York: Oxford Univ. Press, 1994)
93. Thampi S P, Golestanian R, Yeomans J M *Phys. Rev. Lett.* **111** 118101 (2013)
94. Thampi S P, Golestanian R, Yeomans J M *Phys. Rev. E* **90** 062307 (2014)
95. Blow M L, Thampi S P, Yeomans J M *Phys. Rev. Lett.* **113** 248303 (2014)
96. Giomi L *Phys. Rev. X* **5** 031003 (2015)
97. Vicsek T et al. *Phys. Rev. Lett.* **75** 1226 (1995)
98. Chaté H, Ginelli F, Montagne R *Phys. Rev. Lett.* **96** 180602 (2006)
99. Aranson I S, Tsimring L S *Phys. Rev. E* **71** 050901(R) (2005)
100. Peshkov A et al. *Phys. Rev. Lett.* **109** 268701 (2012)
101. Sokolov A, Rubio L D, Brady J F, Aranson I S *Nature Commun.* **9** 1322 (2018)
102. Thampi S P, Golestanian R, Yeomans J M *Phil. Trans. R. Soc. A* **372** 20130366 (2014)
103. Doostmohammadi A et al. *Nature Commun.* **7** 10557 (2016)
104. Hatwalne Y et al. *Phys. Rev. Lett.* **92** 118101 (2004)
105. Ramaswamy S *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **1** 323 (2010)
106. Hernandez-Ortiz J P, Stoltz C G, Graham M D *Phys. Rev. Lett.* **95** 204501 (2005)
107. Guillamat P et al. *Phys. Rev. E* **94** 060602(R) (2016)
108. Yan W, Brady J F *J. Fluid Mech.* **785** R1 (2015)
109. Putzig E et al. *Soft Matter* **12** 3854 (2016)
110. Oza A U, Dunkel J *New J. Phys.* **18** 093006 (2016)
111. Aranson I S, Kramer L *Rev. Mod. Phys.* **74** 99 (2002)
112. Zhang R et al. *Nature Commun.* **7** 13483 (2016)
113. Tasinkevych M et al. *Soft Matter* **10** 2047 (2014)
114. Kim S, Karrila S J *Microhydrodynamics: Principles and Selected Applications* (North Chelmsford, MA: Dover Publ., 2013)
115. Krieger M S, Spagnolie S E, Powers T *Soft Matter* **11** 9115 (2015)
116. Smith C J, Denniston C J. *Appl. Phys.* **101** 014305 (2007)
117. Brochard F, de Gennes P G *J. Physique* **31** 691 (1970)
118. Tirado M M, de la Torre J G *J. Chem. Phys.* **73** 1986 (1980)
119. Zhou S et al. *Soft Matter* **10** 6571 (2014)
120. van Zon J, MacKintosh F C *Phys. Rev. Lett.* **93** 038001 (2004)
121. Kohlstedt K et al. *Phys. Rev. Lett.* **95** 068001 (2005)
122. Landau L D, Lifshitz E M, Pitaevskii L *Statistical Physics Pt. 1* (Oxford: Pergamon Press, 1980)
123. Казначеев А В, Богданов М М, Тараскин С А *ЖЭТФ* **122** 68 (2002); Kaznacheev A V, Bogdanov M M, Taraskin S A *JETP* **95** 57 (2002)
124. Hiemstra T, Van Riemsdijk W H, Bolt G H *J. Colloid Interface Sci.* **133** 91 (1989)
125. Behrens S H, Grier D G *J. Chem. Phys.* **115** 6716 (2001)
126. Sapozhnikov M V, Tolmachev Y V, Aranson I S, Kwok W-K *Phys. Rev. Lett.* **90** 114301 (2003)
127. Israelachvili J N *Intermolecular and Surface Forces* (Burlington, MA: Academic Press, 2011)
128. Bukusoglu E et al. *Annu. Rev. Chem. Biomol. Eng.* **7** 163 (2016)
129. Viney C, Huber A E, Verdugo P *Macromolecules* **26** 852 (1993)
130. Smalyukh I I et al. *Phys. Rev. Lett.* **96** 177801 (2006)
131. Dogic Z, Fraden S *Current Opin. Colloid Interface Sci.* **11** 47 (2006)
132. Figueroa-Morales N, Dominguez-Rubio L, Ott T L, Aranson I S *Sci. Rep.* **9** 9713 (2019)
133. Ebbens S J, Howse J R *Soft Matter* **6** 726 (2010)
134. Wang W et al. *ACS Nano* **6** 6122 (2012)
135. Wang W et al. *Angew. Chem. Int. Ed.* **53** 3201 (2014)
136. Lavrentovich O D, Lazo I, Pishnyak O P *Nature* **467** 947 (2010)
137. Hernández-Navarro S et al. *Angew. Chem.* **126** 10872 (2014)
138. Kléman M J. *Physique* **38** 1511 (1977)
139. Guo W, Herminghaus S, Bahr C *Langmuir* **24** 8174 (2008)
140. Guillamat P, Ignés-Mullol J, Sagués F *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **113** 5498 (2016)

Topological defects in active liquid crystals

I.S. Aranson

Departments of Biomedical Engineering, Chemistry and Mathematics, Pennsylvania State University,
University Park, Pennsylvania 16802, USA
E-mail: isa12@psu.edu, aranson@anl.gov

A wide class of out-of-equilibrium systems comprised of interacting self-propelled agents is termed active matter. The most relevant examples include suspensions of microscopic swimming organisms (bacteria, sperm cells, or unicellular algae), synthetic catalytic nanomotors, colloidal self-propelled Janus particles, and even macroscopic bird flocks, fish schools, or human crowds. The simplest and most studied realization of active matter is a suspension of microscopic swimmers, such as motile microorganisms or self-phoretic colloids. A liquid crystal, a highly-structured anisotropic environment with local molecular ordering, "doped" by a small amount of active component yields an interesting class of non-equilibrium materials with novel optical and mechanical properties. Singularities of local molecular orientation, or topological defects, play an important role in the spatiotemporal organization of active liquid crystals. This study surveys the most recent experimental and theoretical advances in the field of active liquid crystals and highlights connections with other nonequilibrium physical and biological systems.

Keywords: microswimmers, liquid crystals, topological defects, active matter, collective motion

PACS numbers: 42.70.Df, **47.20.** – k, 47.63.Gd

Bibliography — 140 references

Received 7 July 2018, revised 22 September 2018

Uspekhi Fizicheskikh Nauk **189** (9) 955–974 (2019)

Physics – Uspekhi **62** (9) (2019)

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.2018.10.038433>

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNe.2018.10.038433>