

A TERMÉSZET MOTORJAI: AKTÍV ANYAGOK

Julia Mary Yeomans
University of Oxford, Nagy-Britannia

Az aktív anyagok, mint például baktériumok, molekuláris motorok és önhajtású koloidok a kémiai energiát folyamatosan konvertálják mechanikai munkává. A sűrű, aktív anyagok, a sejtrétegektől a madár-rajokig, önszerveződő módon bonyolult mintázatokká állnak össze. A természet ezen motorjai nemcsak komplexek, hanem hatékonyak is, így nanogépek készítéséhez meríthetünk belőlük ötleteket.

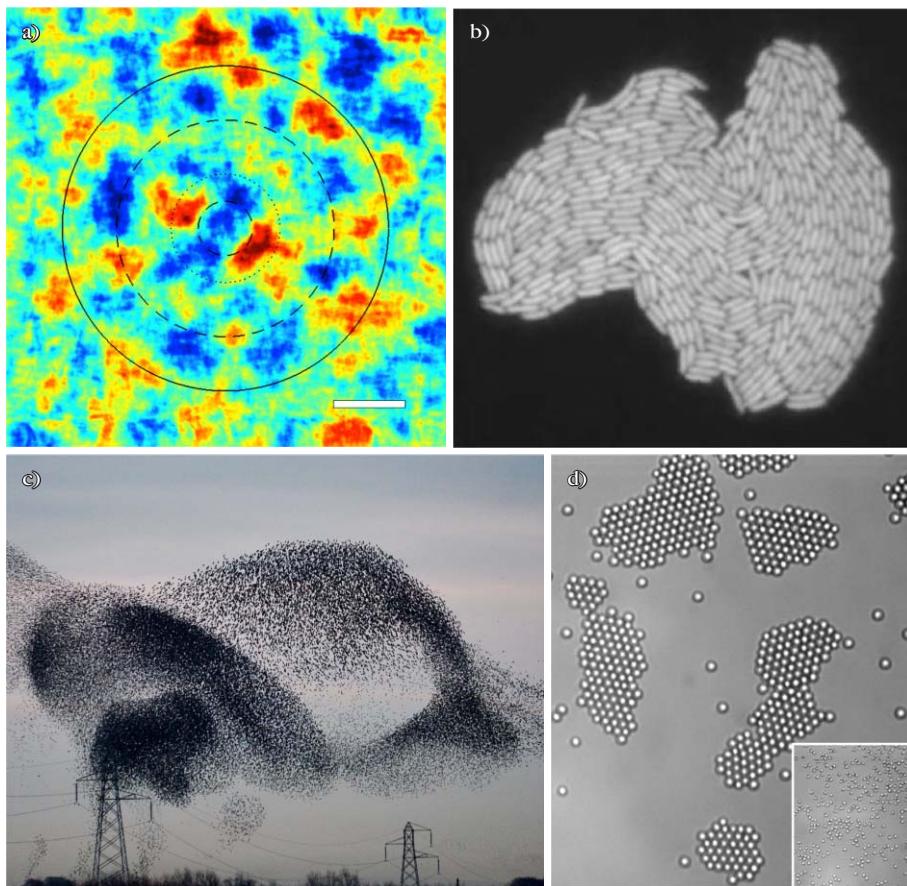
Az aktív részecskék a hőmérsékleti egyensúlyon kívül működnek. Környezetüktől energiát vonnak el, amit mozgásra vagy munkára fordítanak [1, 2]. Közismert biológiai példák az úszó baktériumok és a kúszó sejtek. Talán kevésbé közismertek a motorfehérjék, mint például a miozin és a kinezin, amelyek a sejt motorjai (lásd a *Motorfehérjék* című kis írást). Sőt, számos aktív rendszer már mesterségesen is létrehozható.

Ez utóbbiak gyakran koloidok, amelyeket fényrel, vagy helyi koncentrációgradienssel lehet hajtani. Az aktív anyag a fizikusok számára azért érdekes, mert hőmérsékleti egyensúlyon kívül létezik, és így tesztelési lehetőséget biztosít a nemegyensúlyi statisztikus fizika elméletei számára. Továbbá az aktív rendszerek nagyon hatékony motorokká fejlődtek, így annak megértése, hogy miként állnak össze és hogyan működnek, új technológiákat is inspirálhat.

A cikk eredeti címe: *Nature's Engines: Active Matter*. Megjelent 2017-ben az *Europhysics News*-ban (48. kötet, 2. szám, 21–25. oldalak). Fordította *Somfai Ellák*. A szerző engedélyével közöljük.



Julia Mary Yeomans az Brit Királyi Akadémia tagja, a University of Oxford fizikaprofesszora. Jelenlegi érdeklődési területe a mikroszkopikus úszó részecskék, aktív rendszerek, folyadékkristályok és a folyadékok strukturált felületekkel való kölcsönhatása.

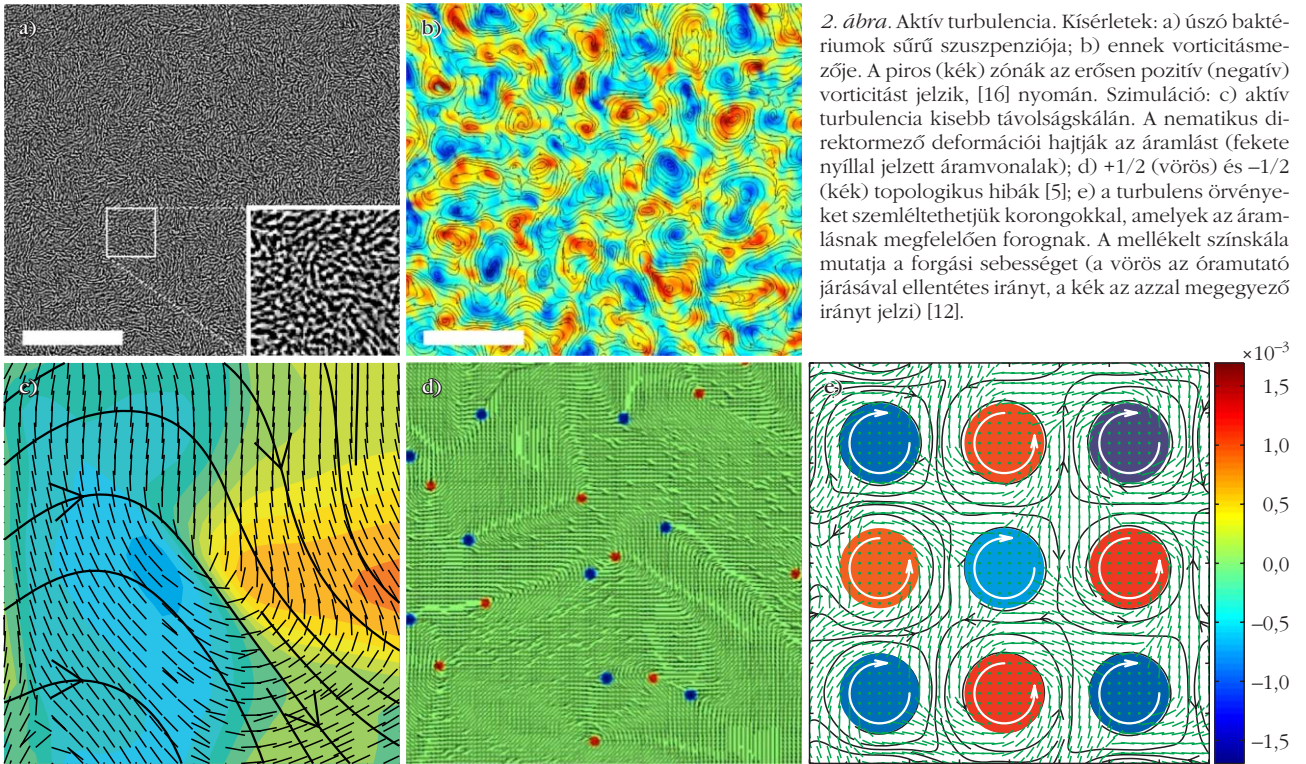


1. ábra. Aktív anyagok: a) epitelsejtek áramlási mezeje: a színek a vorticitást mutatják az óramutató járásával egyező (kék), illetve ellenkező irányban (vörös) [15]; b) növekedő E-coli baktériumkolónia; c) seregélyek rajzása; d) fény által aktiválható koloidok a fény hatására fürtökbe szerveződnek, viszont a fény kikapcsolásakor széteszlanak (jobb alsó sarok) [14].

Mi történik az energiával, amikor az aktív részecskék együtt mozognak?

Gyakori viselkedési mód a csoportosulás. A híg koloidok Brown-mozgást végeznek, és nem rendeződnek. Amikor azonban aktívvá válnak, tehát sebességükben egyszerre van jelen ballisztikus és Brown-komponens is, csoportokká aggregálódnak, amint ez az 1.d ábrán látható. Ezt olyan elméletek magyarázhatják, amelyek feltételezik, hogy a részecskék sebessége sűrűségüktől függ [3]. A madarak repülő rajokba szerveződése (vagy halrajok kialakulása, lásd folyóiratunk címlapján), mint például a seregélyrajok csodálatos mintázatai, még mindig nem teljesen ismert (1.c ábra).¹

¹ Nemzetközi viszonylatban is jelentős *Vicsek Tamás* kutatócsoportjának hozzájárulása a kollektív mozgás vizsgálatához, mint például a részecskealapú *Vicsek*-modell, amelyben az egyes részecskék sebességük irányát a környezetük átlagsebességéhez igazítják [4]. (S.E.)



2. ábra. Aktív turbulencia. Kísérletek: a) úszó baktériumok sűrű szuszpenziója; b) ennek vorticitásmézője. A piros (kék) zónák az erősen pozitív (negatív) vorticitást jelzik, [16] nyomán. Szimuláció: c) aktív turbulencia kisebb távolságskálán. A nematikus direktormező deformációi hajtják az áramlást (fekete nyíllal jelzett áramvonalak); d) $+1/2$ (vörös) és $-1/2$ (kék) topologikus hibák [5]; e) a turbulens örvényeket szemléltethetjük korongokkal, amelyek az áramlásnak megfelelően forognak. A mellékelt színskála mutatja a forgási sebességet (a vörös az óramutató járásával ellentétes irányt, a kék az azzal megegyező irányt jelzi) [12].

A baktériumok hossza néhány mikron, mozgásukra jellemző Reynolds-szám nagyon kicsi, tipikusan 10^{-4} nagyságrendű. Ez bőven a viszkózus áramlás tartományában van, amelyet lineáris egyenletek írnak le: érvényes az időtükrözési szimmetria, és nehéz a keveredés. Így meglepetést okozott, amikor *Domborowski* és munkatársai megmutatták, hogy a baktériumok sűrű, két dimenziós rétegében az áramlási mező turbulensnek tűnik [5]. Örvények és keskeny áramlási sugarak alakulnak ki, amelyek karakterisztikus mérete körülbelül 5-10-szerese az egyes baktériumokénak (2.a-b ábra).

Aktív turbulenciát mostanára jónéhány hosszúságskálán észlelték [6]. Egy példa erre a mikrotubulusok és a kétfejú kinezin motorfehérjék szuszpenziója (*Motorfehérjék* című kis írás). A molekuláris motorok két mikrotubulus között hidat alkotnak, összetartják őket, amelyek így mikrotubulus-nyalábokat alkotnak. Ezen motorok irányítottak: nyomvonaluk mentén egy határozott irányban haladnak. Ennek következtében azok a motorfehérjék, amelyek ellentétes irányítású mikrotubulusokat kötnek össze, szétolják azokat, ami a nyalábok meghosszabbodását eredményezi. A megnyúló nyalábok a térbeli kényszerek hatására kihajlanak, amely turbulens áramlást eredményez. Sűrű sejtrétegek, mint például epitelsejtek, amelyek a testüregeket és a szervek felszínét borítják, szintén aktívak; ez a sejtek mozgásában és osztdadásában is megmutatkozik. Egyre több bizonyíték mutatja, hogy ezen sejtrétegekben szintén tapasztalható a vorticitás, amely az aktív turbulencia jellegzetessége (1.a ábra).

Az aktív turbulencia jellegzetességei különböző rendszerekben is megmutatkoznak; az egyik legnyilvánvalóbb ilyen tulajdonság az erősen örvényes és

időben változó áramlási kép. Habár a részletek még kidolgozatlanok, az aktív turbulencia forrása már ismeretes. Newton törvényeihez kell visszanyúlnunk: amikor egy aktív részecske mozog, erőt gyakorol a környező folyadékra. A részecskék önállóan mozognak, nem egy külső tér hatására, így az erők, illetve a forgatónyomatékok lokális összege nulla kell legyen. Ezt mutatja a 3.c ábra a kinezin motorfehérjék esetére: ezek egyenlő nagyságú és ellentétes irányú erőt gyakorolnak a szomszédos mikrotubulusokra. A dipólus jellegű erők nematikus szimmetriával rendelkeznek, amely jól ismert a folyadékkristályok világából (lásd a *Nematikus folyadékkristályok és topologikus hibák* című kis írást). Ennek következtében az aktív részecskék, vagy a molekuláris motorok által keltett távoli áramlási mező szintén nematikus szimmetriával rendelkezik.

Szimmetriatulajdonságaik miatt a passzív nematikus folyadékkristályok jó kiindulópontot jelentenek a sűrű, aktív anyagok leírására, amelyekre emiatt aktív, nematikus anyagokként is hivatkoznak. A folytonos közegek mozgásegyenleteiben a szimmetriáknak meghatározó szerepe van, így az aktív nematikus anyagok mozgásegyenletei nagyon hasonlóak a passzív nematikus anyagokéhoz. Az egyetlen különbség, hogy az aktivitás következtében a feszültségtenzorban egy extra tag jelenik meg. Mivel a mozgásegyenletekben a feszültségtenzor deriváltja szerepel, az aktivitás irányának vagy nagyságának térbeli inhomogenitása hozzájárul az áramlások generálásához.

A feszültségtenzor aktivitásból származó járuléknak lényeges tulajdonsága, hogy a nematikus rendezettség ellen hat [7]. A tökéletes nematikus rendtől

való legkisebb fluktuáció olyan nyíró áramlásokat gerjeszt, amely növeli a fluktuáció amplitúdóját. Ez instabillá teszi a nematikus rendezettséget, és végül aktív turbulenciához vezet. A 2.c ábra a nematikus direktor mezőjének (a részecskék haladási irányának, illetve a mikrotubulusok irányának) szimulációját mutatja aktív turbulencia állapotában. A nematikus rendezettség erősen deformált, a kialakuló mechanikai feszültségek turbulens sebességet gerjesztenek, amelyben örvényes és nyálabszerű áramlási elemek is fellelhetők.

A topologikus hibák a passzív folyadékkristályok egyik legkarakterisztikusabb velejárói (*Nematikus folyadékkristályok és topologikus hibák* című kis írás). Keresztezett polarizátorok közé téve jellegzetes, szép képeket eredményeznek, de az alkalmazások terén általában kellemetlenek, mert rontják a folyadékkristály kijelzők hatékonyságát. A topologikus hibák energetikailag kedvezőtlenek, és idővel eltávoznak a

passzív nematikus anyagokból. Az aktív rendszerekben azonban jelentősen hozzájárulnak az energia-egyensúlyhoz.

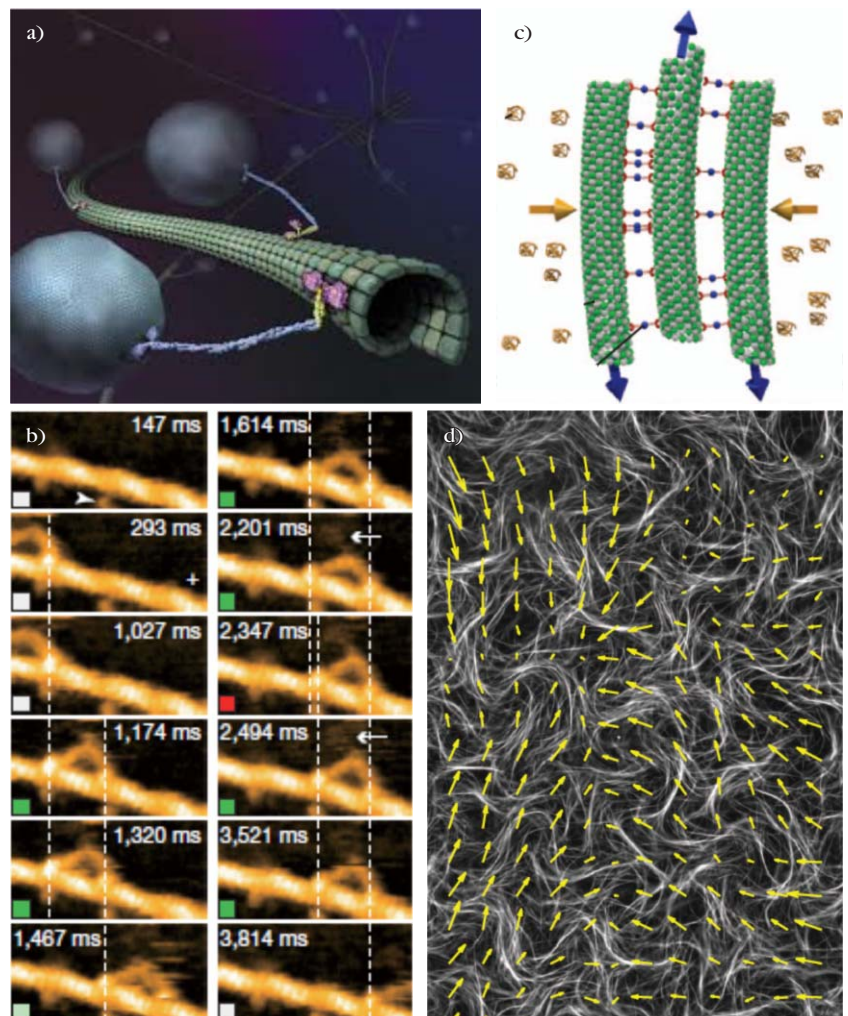
Az erősen deformált nematikus rendszerekben a rugalmas energia és az aktív áramlás átlépheti a topologikus hibapárok keletkezésének energiaküszöbét. A hibapárok – mobilitásuknak köszönhetően – elszökhetnek egymás vonzó teréből, a nematikus mező torzulása hajtja a topologikus hibák mozgását. A $+1/2$ jelzésű, üstökös alakú hiba esetén ezen erők nincsenek egyensúlyban, ez elmozdítja azt a $-1/2$ ikerhibától, és végül egy másik $-1/2$ topologikus hibával annihilálódik. Így stacionárius állapotban a topologikus hibapárok folytonosan keletkeznek, eltávolodnak egymástól és (általában) egy másik párral annihilálódnak. Ahogy eltávolodnak egymástól, visszaáll a nematikus rendezettség, amely a nyírási áramlások fluktuációjára szintén instabil, így végül kialakul az aktív turbulencia stacionárius állapota.

Motorfehérjék

Az állatoknak – a gépekhez hasonlóan – motorra van szükségük. A molekuláris motorok, mint például a miozin és a kinezin, a sejt motorjai. Ezek a folyamatok olyan széles skálájáért felelősek, mint például az izom összehúzódása, a baktériumok ostorának forgatása, sejtek kúszása, valamint a DNS RNS-be kódolása és nagy molekulák mozgatása.

A motorfehérjék néhány tíz nm nagyságúak, és az erősen fluktuáló, zsúfolt sejt környezetben kell működniük. Ahhoz, hogy a mikroszkopikus szélviharokkal megbírkózzanak, a sejt belüli transzportért felelős motorproteinek, mint például a kinezin, mikrotubulusokhoz kapcsolódnak. A mikrotubulust alkotó tubulin önszerveződő módon, szükség szerint összeáll vagy lebomlik, ami így egy időben fejlődő vágányhálózatot alkot. A motorok a járásra emlékeztető módon közlekednek a mikrotubulusokon. A hátsó fej ATP hatására elenged, és többnyire az első fej túloldalán csatlakozik újra. Ezek a parányi motorok fehérjéket tartalmazó kis hólyagokat

és membránzacskókat hordoznak, valamint ők felelősek a kromoszómák sejtosztódás előtti elrendezéséhez.



3. ábra. Motorfehérjék: a) szemléltető ábra a kinezin mikrotubuluson történő mozgásáról. Animált változatát a Youtube-on láthatjuk: *Inner life of a cell*; b) nagy sebességű atomierő-mikroszkóp felvételek, az egymást követő felvételek a miozinejek aktinszálon történő mozgását mutatják; c) mikrotubulusok, amelyeket kétféle kinezinmotorok kötnek össze [17]; d) molekuláris motorok által hajtott (fehér) mikrotubulus-nyálábok, a sárga nyilak a sebességet mutatják [18].

Nematikus folyadékkristályok és topologikus hibák

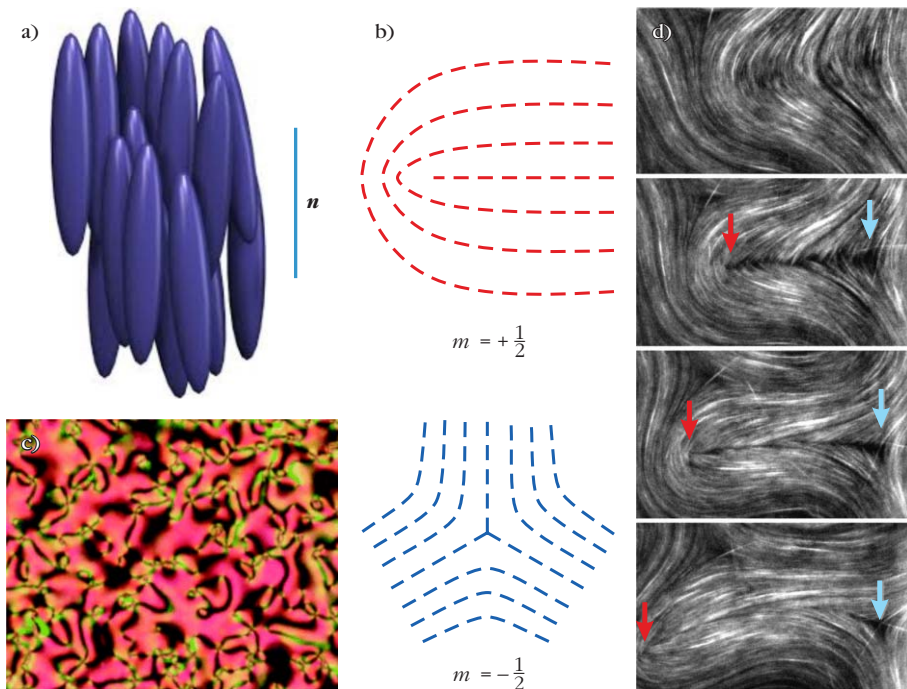
Hosszú, vékony molekulák vagy kolloidok nematikus fázist képezhetnek, amelyet a részecskék irányításának hosszú távú rendezettsége jellemez (4. a ábra) [13]. E fázisban a hosszúkás részecskék átlagosan azonos irányba mutatnak, amelyet az úgynevezett direktor rendparaméter ír le. A direktor egy „fej nélküli” vektor, követve a nematikus molekulák fej-farok szimmetriáját. A nematikus anyagok stabilitását az az entrópiánövekmény adja, amely abból származik, hogy a párhuzamosan álló rudacskáknak több helyük van mozogni. Fontos megjegyezni, hogy a részecskék középpontjai térben nem rendezettek, az ugyanis kristályos állapotot jelentene.

A nematikus folyadékkristályok elasztikus folyadékok. Képesek folyani, de olyan deformációnak, amely tönkretenné a rudacska orientációs rendezettségét, ellenállnak.

A nematikus szimmetria magában hordozza a topologikus hibák lehetőségét. Ezek a nematikus rendezettség olyan hi-

bái, amelyeket a direktormező lokális megváltoztatásával nem lehet helyrehozni. A 4. b ábra mutatja a kétdimenziós nematikus anyagokban a leggyakoribb, $m = +1/2$ -del és $m = -1/2$ -del jelölt topologikus hibákat. Tökéletes nematikus anyagban nem fordulhatnak elő izolált topologikus hibák, mert energiájuk végtelen lenne. A hibák a különböző direktorirányítású tartományok között párokban keletkeznek, amikor a nematikus folyadékkristály-fázis kialakul. A $+1/2$ és a $-1/2$ hibák az elektromos töltésekhez hasonlóan vonzzák és lassan kioltják egymást.

4. ábra. Topologikus hibák: a) nematikus fázis, a részecskék átlagos irányítását jelölő \mathbf{n} direktorral írjuk le; b) topologikus hibák, jelölésükre az $m = +1/2$ és az $m = -1/2$ topologikus töltést használjuk; c) topologikus hibapár keletkezése mikrotubulusok és kinezinmotorok aktív szuszpenziójában, [18] nyomán; után; d) nematikus folyadékkristály keresztetett polarizátorok között: a mintázatok a nematikus rendezettség topologikus hibáinak következménye.



A 4. c ábra mutatja, amint egy topologikus hibapár keletkezik és eltávolodik egymástól a mikrotubulus – molekuláris motor szuszpenzióban. Érdekes jelenség, amelynek magyarázatát jelenleg még nem ismerjük, hogy vékony aktív rétegekben a $+1/2$ topologikus hibák maguk is nematikusan rendeződnek: az üstökösök csóváinak iránya tipikusan párhuzamos vagy antipárhuzamos egymással [8].

A baktériumokat, sejteket és molekuláris motorokat tekinthetjük a természet „mérnöki” csodáinak. Tervezési elveik megértése és utánzása kezd valóságos tudományos törekvéssé válni. Összehasonlításként: a motor, amely a baktérium ostorszerű farkát (flagellum) hajtja 35 nm átmérőjű, és proteinek bonyolult, önszerveződően kialakult rendszeréből áll. A sejtmembránon átpumpált protonáramot használja arra, hogy a mintegy 10 μm hosszúságú ostort percenként körülbelül 1000-szer forgassa. A legkorszerűbb mesterséges nanomotorok 100 nm széles és 400 nm hosszú mágneses spirálok, amelyeket külső mágneses tér hajt hasonló frekvenciával [9].

Újabbban többen javasolták, hogy miként lehetne az aktív turbulencia energiáját megcsapolni [10–12]. A baktériumokat egy keskeny, egyenes vagy kör alakú, a sebességörvények mérettartományába eső átmérőjű csatornába zárva a turbulencia helyett állandó áramlás figyelhető meg, amely mikropropellereket hajthat. A mikrotubulus-kinezin turbulenciája úgy kontrollálható, hogy az aktív folyadékréteg mellé passzív folyadékkristályt helyezünk. Ez utóbbi rendezettsége anizotróp sűrűségi erőt gyakorol az aktív szuszpenzióra, amely a kijelölt irányba korlátozza az áramlást. Szimulációk segítségével megmutatták, hogy az aktív anyag felhasználható mikroszkopikus fogaskerekek hajtására (2. e ábra) – ez szélerőmű-telepek mikroszkopikus, baktériumok által hajtott változatához vezethet?

Irodalom

1. M. C. Marchetti, J. F. Joanny, S. Ramaswamy, T. B. Liverpool, J. Prost, M. Rao, R. A. Simha: Hydrodynamics of soft active matter. *Rev. Mod. Phys.* 85 (2013) 1143.
2. S. Ramaswamy: The Mechanics and Statistics of Active Matter. *Ann. Rev. of Cond. Mat. Phys.* 1 (2010) 323.

3. M. E. Cates, J. Tailleur: Motility-Induced Phase Separation. *Ann. Rev. of Cond. Mat. Phys.* 6 (2015) 219.
4. T. Vicsek, A. Czirók, E. Ben-Jacob, I. Cohen, O. Shocket: Novel Type of Phase Transition in a System of Self-Driven Particles. *Phys. Rev. Lett.* 75 (1995) 1226.
5. C. Dombrowski, L. Cisneros, S. Chatkaew, R. E. Goldstein, J. O. Kessler: Self-concentration and large-scale coherence in bacterial dynamics. *Phys. Rev. Lett.* 93 (2004) 098103.
6. S. P. Thampi, J. M. Yeomans: Active turbulence in active nematics. *Eur. Phys. J. Spec. Top.* 225 (2016) 651.
7. R. A. Simha, S. Ramaswamy: Hydrodynamic fluctuations and instabilities in ordered suspensions of self-propelled particles. *Phys. Rev. Lett.* 89 (2002) 058101.
8. S. J. Decamp, G. S. Redner, A. Baskaran, M. F. Hagan, Z. Dogic: Orientational order of motile defects in active nematics. *Nature Materials* 14 (2015) 1110.
9. K. E. Peyer, L. Zhang, B. J. Nelson: Bio-inspired magnetic swimming microrobots for biomedical applications. *Nanoscale* 5 (2013) 1259.
10. H. Wioland, F. G. Woodhouse, J. Dunkel, R. E. Goldstein: Ferromagnetic and antiferromagnetic order in bacterial vortex lattices. *Nature Physics* 12 (2016) 341.
11. P. Guillamat, J. Ignés-Mullol, F. Sagués: Patterning active materials with addressable soft interfaces. arXiv:1511.03880.
12. S. P. Thampi, A. Doostmohammadi, T. N. Shendruk, R. Golestanian, J. M. Yeomans: Active micromachines: microfluidics powered by mesoscale turbulence. *Sci. Adv.* 2 (2016) e1501854.
13. P. G. de Gennes, J. Prost: *The Physics of Liquid Crystals*. Oxford University Press (1995).
14. J. Palacci, S. Sacanna, A. P. Steinberg, D. J. Pine, P. M. Chaikin: Living crystals of light-activated colloidal surfers. *Science* 339 (2013) 936.
15. N. S. Rossen, J. M. Tarp, J. Mathiesen, M. H. Jensen, L. B. Oddershede: Long-range ordered vorticity patterns in living tissue induced by cell division. *Nat. Commun.* 5 (2014) 5720.
16. H. H. Wensink, J. Dunkel, S. Heidenreich, K. Drescher, R. E. Goldstein, H. Lowen, J. M. Yeomans: Mesoscale turbulence in living fluids. *PNAS* 109 (2012) 14308.
17. N. Kodera, D. Yamamoto, R. Ishikawa, T. Ando: Video imaging of walking myosin V by high-speed atomic force microscopy. *Nature* 468 (2010) 72.
18. T. Sanchez, D. T. N. Chen, S. J. DeCamp, M. Heymann, Z. Dogic: Spontaneous motion in hierarchically assembled active matter. *Nature* 491 (2012) 431.

SZEGREGÁCIÓ NYÍRT, SZEMCSÉS KEVERÉKEKBEN

Gillemot Katalin, Somfai Ellák, Börzsönyi Tamás
MTA Wigner FK, Szilárdtest-fizikai és Optikai Intézet

A szemcsés anyagok szegregációs jelenségei a mindennapi életben is könnyen megfigyelhetők [1–4]. A műzlisdobozt rázogatva a felszínre ügyeskedhetjük a kedvenc falatokat, vagy a sóderdombok alsó peremén láthatjuk a nagyobb kavicsok felhalmozódását. Az élelmiszeripari, gyógyszergyártási folyamatokban nagyon fontos, hogy az anyagok öntése, keverése során ne váljanak szét az alkotóelemek, azaz minden do-

bozba, tablettába mindegyik komponensből a megfelelő mennyiség kerüljön. Más esetekben épp a keverékek szétválasztása a feladat, amit sokkal gyorsabban érhetünk el, ha jól ismerjük az anyagban rázás vagy folyás során lejátszódó szegregációs folyamatokat. Ebben a munkában a lassú nyíró áramlás közben megfigyelhető szegregációs jelenségeket írjuk le.

Ha egy szemcsés anyagot (például a kristálycukrot a zacskóban) nyírásnak tesszük ki, akkor az anyag térfogata kicsit növekszik, amit Reynolds-tágulásnak nevezünk. Ezt szemléletesen úgy képzelhetjük el, hogy a deformáció során az egymás mellett lévő szemcsék akkor tudnak túljutni a szomszédon, ha kicsit eltávolodnak egymástól (*1.a ábra*). Az úgynevezett hengeres, osztott aljú, nyíró cellában (*1.b ábra*) a szemcsés réteg alatt egy tányér van, amelynek forgatásával az anyag – egy bizonyos tartományban – folyamatosan deformálódik, ez a pirossal/sötéttel jelölt nyírási zóna. Egy röntgentomográfiás felvétel (*1.c ábra*) segítségével láthatóvá tehetjük a térkitöltés csökkenésének mértékét, ami 10% körülnek adódik [5].

A cikk az Eötvös Loránd Fizikai Társulat szegedi Vándorgyűlésén, 2016. augusztus 26-án elhangzott előadás alapján készült.



Gillemot Katalin mérnök-fizikus, poszt-doktori kutató. Diplomáját a BME-n, PhD fokozatát a Lancasteri Egyetemen szerezte. 2014 és 2016 között az MTA Wigner Fizikai Kutatóközpontban MTA poszt-doktor, jelenleg a Bécsi Egyetemen poszt-doktori kutató. Érdeklődési területe a szemcsés anyagok folyási jelenségeinek numerikus vizsgálata, valamint ezek geológiai applikációja.



Somfai Ellák fizikus, az MTA doktora, tudományos tanácsadó. Diplomáját az ELTE-n, PhD fokozatát a University of Michiganon szerezte. 2013 óta dolgozik az MTA Wigner Fizikai Kutatóközpontban. Érdeklődési területe a statisztikus fizikai rendszerek és komplex folyadékok numerikus modellezése, az utóbbi időben elsősorban a szemcsés anyagok vizsgálatával foglalkozik.



Börzsönyi Tamás fizikus, tanulmányait (diploma, PhD) az ELTE-n végezte. Jelenleg az MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont tudományos főmunkatársa, a Részben Rendezett Rendszerek kutatócsoport vezetője. Kutatásaiban a szemcsés anyagok és a komplex folyadékok (szuszpenziók, folyadékkristályok) folyási jelenségeit és fázisátmeneteit vizsgálja.