

I - Gels actifs nématiques ou polaires J. Prost, F. Julicher

Dans ce cours je veux dériver les équations hydrodynamiques pour un gel actif polaire ou nématique. La différence avec la matière active "sèche" du chapitre précédent est que la quantité de mouvement est conservée. Il y a donc une variable hydrodynamique supplémentaire reliée au champ de vitesse (qui est indépendant de la polarisation $\vec{p}$).

L'exemple que j'ai en tête est celui du cytosquelette des cellules qui est formé de filaments d'actine interagissant avec des moteurs moléculaires. Les moteurs moléculaires consomment de l'énergie (sous forme d'ATP) et créent des contraintes dans le gel d'actine en tirant sur lequel. Ces contraintes ont un caractère contractile.

Nous allons supposer que le gel est proche de l'équilibre et utiliser la procédure introduite par Onsager pour les systèmes au voisinage de l'équilibre. Les détails des calculs sont donnés dans l'article de référence C. Marletti et al. *Rev. Mod. Phys.* (2013)

Nous supposons que le système actif n'a qu'un type de constituants (effectif). Nous commençons par identifier les variables hydrodynamiques qui sont associées aux quantités conservées et aux modes lents. Il y a 3 quantités conservées :

- densité $n = \frac{N}{V}$, équation de conservation $\frac{\partial n}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$

- quantité de mouvement $\vec{g} = n m \vec{v}$ où m est la masse des constituants. Equation de conservation - Equation de Navier Stokes.

$\frac{\partial \vec{g}}{\partial t} - \vec{\nabla} \cdot \vec{\sigma}^t = 0$ le flux de quantité de mouvement est en tenseur

- $\vec{\sigma}_{\alpha\beta}^t = -\vec{\sigma}_{\alpha\beta}^e + n m v_\alpha v_\beta$. La deuxième terme est le tenseur de

Reynolds en mécanique des fluides. C'est en terme inertiel qui est négligeable dans la limite des faibles nombres de Reynolds que nous utilisons.

Rq: L'énergie n'est pas conservée

Comme dans le cours précédent nous définissons la polarisation $\vec{P}$ en moyennant les orientations locales des constituants. Seules les 2 composantes de l'orientation de $\vec{P}$ sont des modes mous le module de $\vec{P}$ est une variable rapide. Dans la suite nous supposons un alignement très fort $|\vec{P}|=1$ et nous considérons un gel nématique où $\vec{P}$ est le directeur (local)

1. Production d'entropie

Nous considérons un système à une température T , c'est à dire en contact avec un réservoir de chaleur à température T avec lequel il échange de l'énergie. La variation d'entropie totale du système est $dS = dS + dS_R$. Le réservoir est à l'équilibre thermodynamique et $dS_R = \frac{dU_R}{T} = -\frac{dU}{T}$ ou dU est la variation d'énergie interne du système. Pour toute transformation $dS_t \geq 0$

$$dS_t = -\frac{dF}{T} \text{ où l'énergie libre est } F = U - TS \quad \text{Nous allons calculer } TS = T - T \frac{dF}{dT} = T \frac{dS_t}{dT}$$

La différentielle de l'énergie libre est $dF = \mu dN - V \bar{h} d\vec{P}$. μ est le potentiel chimique et $\bar{h} = -\frac{\delta F}{\delta \vec{P}}$ est le champ conjugué à la polarisation. L'énergie cinétique par unité de volume est $E_c = \frac{1}{2} \vec{g} \cdot \vec{g}$

la variation d'énergie libre est :

$$\frac{dF}{dt} = \int d\vec{r} \left\{ \mu \frac{\partial n}{\partial t} - \bar{h} \frac{\partial \vec{P}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \vec{v} \cdot \vec{g} \right) \right\}$$

2. Thermodynamique des systèmes nématiques ou polaires

L'énergie "libre" d'un système nématique dont le directeur est $\vec{P}$ avec $|\vec{P}|=1$ a été obtenue par Frank en utilisant des arguments de symétrie et en la développant au deuxième ordre en $\vec{\nabla} \vec{P}$

$$F = \int d\vec{r} \left\{ \frac{K_1}{2} (\vec{\nabla} \vec{P})^2 + \frac{K_2}{2} (\vec{P} \cdot \vec{\nabla} \times \vec{P})^2 + \frac{K_3}{2} [\vec{P} \times (\vec{\nabla} \times \vec{P})]^2 \right\}$$

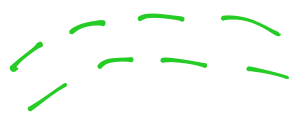
+ $F_0(n, T)$. C'est l'énergie libre utilisée pour le système nématique



splay
divergence



twist
torsion



bend
curvature

A deux dimensions, il n'y a pas de terme de twist. Si les 2 constantes de Frank K_1 et K_2 sont égales. On peut écrire l'énergie en fonction du gradient de l'angle d'orientation de $\vec{n}$ 

$$F = \frac{1}{2} K \int d\vec{r} (\vec{\nabla} \theta)^2$$

Le champ orientational est $\vec{n} = - \frac{\delta F}{\delta \vec{n}}$. Pour prendre en compte la contrainte que $|\vec{n}| = 1$, on peut introduire en multipliant le Lagrange h_0 et ajouter à l'énergie un terme $- \frac{h_0}{2} \int \vec{n}^2 d\vec{r}$. A deux dimensions si les constantes de Frank sont égales la composante du champ perpendiculaire à $\vec{n}$ est $h_{\perp} = K \nabla^2 \theta$.

L'énergie n'a pas de terme linéaire en $\vec{n}$ à cause de la symétrie du rémétique $\vec{n} \rightarrow -\vec{n}$. Pour un système polaire on peut ajouter un terme $h \vec{\nabla} \cdot \vec{n}$. Ce terme est un terme de surface si h est constant mais peut devenir important si h varie avec $\vec{r}$ (à cause d'une dépendance en $\vec{r}$ ou m).

Dans un système qui n'est pas isotrope, la contrainte n'est pas symétrique. La différence $\sigma_{\alpha\beta}^t - \sigma_{\beta\alpha}^t$ est un couple qui agit sur le fluide actif. En utilisant la conservation du moment cinétique pour un système actif polaire ou rémétique, on montre que la contrainte antisymétrique totale est $\sigma_{\alpha\beta}^a = \frac{1}{2} (p_{\beta} h_{\alpha} - p_{\alpha} h_{\beta})$, elle se dépend que du champ transverse $h_{\perp}$.

Si le système est chiral, l'invariance par rotation doit être examinée plus en détail et ce résultat n'est plus vrai. Il peut y avoir une contrainte active antisymétrique **S. Fuchtauer, F. Jülicher**

3. Flux et forces, symétrie de renversement du temps.

Un système actif consomme de l'énergie. Pour avoir la production d'entropie totale, il faut prendre en compte cette énergie consommée. Une cellule consomme de l'ATP. Chaque molécule d'ATP consommée produit une énergie libre $\Delta\mu$ ($\approx 25 kT$), on appelle Σ le taux de consommation de l'ATP par unité de volume. Pour prendre en compte cette énergie il faut rajouter $-\int \Sigma \Delta\mu d\vec{r}$ à la variation d'énergie libre et donc $+\int \Sigma \Delta\mu d\vec{r}$ à la production d'entropie.

En utilisant les lois de conservation, en intégrant par parties et en utilisant la relation de Gibbs-Duhem⁽⁴⁾ on peut écrire :

$$T\dot{S} = \int d\vec{r} \left\{ \sigma_{\alpha\beta} \dot{\sigma}_{\alpha\beta} + P_{\alpha} \dot{h}_{\alpha} + 2\Delta\mu \Sigma \right\}$$

$\sigma_{\alpha\beta}$ est la contrainte symétrique "déviateur" $\sigma_{\alpha\beta}^t = \sigma_{\alpha\beta} - P\delta_{\alpha\beta}$ + $\sigma_{\alpha\beta}^a$ (1) et $N_{\alpha\beta}$ le tenseur de gradient de cisaillement $N_{\alpha\beta} = \frac{1}{2}(\partial_{\alpha} v_{\beta} + \partial_{\beta} v_{\alpha})$. Parler du tenseur d'Einstein

$\vec{P}$ et la dérivée rotationnelle de $\vec{r}$ $\vec{P} = \frac{\partial \vec{r}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla) \vec{r} + \vec{\omega} \times \vec{r}$ où $\vec{\omega}$ est la rotation locale dans le fluide $\frac{\partial}{\partial t} \vec{\omega} = \frac{1}{2}(\nabla \times \vec{v})$

En suivant Onsager chaque terme de la production d'entropie doit être écrit comme le produit d'une force par un flux. Pour identifier les contributions dissipatives et réactives (élastiques) à la production d'entropie, nous notons aussi la signature de chaque force par renversement du temps

force $N_{\alpha\beta}$
 h_{α}
 $\Delta\mu$

signature par
 renversement du temps -1
 $+1$
 $+1$

flux $\sigma_{\alpha\beta} = \sigma_{\alpha\beta}^t + \sigma_{\alpha\beta}^a$
 $P_{\alpha} = P_{\alpha}^t + P_{\alpha}^d$
 $\Sigma = \Sigma^t + \Sigma^d$

Dans la théorie d'Onsager, les flux dépendent linéairement des forces. Chaque flux a une composante de même signature que sa force conjuguée qui est dissipative et une composante de signature opposée qui est

réactive. Pour construire la relation flux-force (l'équation constitutive) on écrit la relation la plus générale possible compatible avec la symétrie. Le seul vecteur est $\vec{j}$ et il y a deux tenseurs possibles $\delta_{\alpha\beta}$ (identité) et $q_{\alpha\beta} = h_{\alpha} j_{\beta} + h_{\beta} j_{\alpha} - \frac{1}{2} \delta_{\alpha\beta} j_{\gamma} j_{\gamma}$

5 - Liquide nématique (ou polaire) actif

Par simplicité nous considérons un fluide actif incompressible $\partial_{\gamma} v_{\gamma} = 0$. Nous décomposons la contrainte $\sigma_{\alpha\beta}$ en une partie diagonale $\sigma \delta_{\alpha\beta}$ qui peut être ajoutée à la pression qui est un multiplicateur de Lagrange et une composante de trace nulle $\tilde{\sigma}_{\alpha\beta}$ ($\tilde{\sigma}_{\gamma\gamma} = 0$)

a - Flux dissipatif

$$\underline{P}_{\alpha}^d = \frac{h_{\alpha}}{\gamma_s} + \lambda \Delta \mu j_{\alpha} \quad \text{car } h_{\alpha} \text{ et } \Delta \mu \text{ ont la même dimension } +1$$

$$\underline{Q}_{\alpha}^d = \lambda \Delta \mu + \lambda h_{\alpha} j_{\alpha}$$

$$\tilde{\sigma}_{\alpha\beta}^d = 2\eta \sigma_{\alpha\beta}$$

La matrice des coefficients est symétrique (relation d'Onsager)

b - Flux réactifs

$$\underline{\tilde{\sigma}}_{\alpha\beta}^r = -\sum \Delta \mu q_{\alpha\beta} + \frac{\gamma_s}{2} \left[h_{\alpha} j_{\beta} + h_{\beta} j_{\alpha} - \frac{2}{3} j_{\gamma} h_{\gamma} \delta_{\alpha\beta} \right]$$

$$\underline{P}_{\alpha}^r = -\gamma_s v_{\alpha\beta} j_{\beta}$$

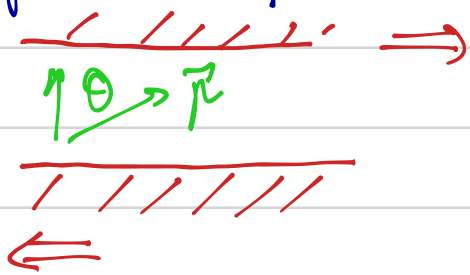
$$\underline{Q}_{\alpha}^r = \sum q_{\alpha\beta} v_{\alpha\beta}$$

$$Rq \quad \dot{S} = \int d\vec{r} \left\{ \tilde{\sigma}_{\alpha\beta}^d v_{\alpha\beta} + \underline{Q}_{\alpha}^d h_{\alpha} \right\} \quad \text{les composantes réactives des flux ne contribuent pas à la dissipation}$$

5. Sens physique des coefficients de transport

γ_s et ν_s existent pour des liquides nématiques. γ_s est une viscosité

de notation comme pour des systèmes actifs sur un substrat. v_1 caractérise l'alignement de $\vec{\tau}$ par l'écoulement



$$\cos 2\theta = \frac{1}{\gamma_1} \quad (\text{pas d'état stationnaire si } |\gamma_1| < 1)$$

Le réel effet actif est la contrainte active $-S \Delta \mu q_{\alpha\beta}$. Ce n'est pas une pression (plutôt une différence de contrainte normale). Elle est contractile si $S < 0$ et contracte le système dans la direction de $\vec{\tau}$ et le dilate dans la direction transverse. Elle est extensible si $S > 0$. Dans une cellule $S < 0$ et $|S| \Delta \mu \approx 100 \text{ Pa}$. $S \rightarrow S + \gamma_1 \gamma_2 \lambda$

Si $|\vec{\tau}| = 1$ on peut en redéfinissant S toujours choisir $\lambda = 0$ et le champ actif ne joue aucun rôle.

Rq Stricto sensu la viscosité devrait être un tenseur $\sigma_{\alpha\beta} = \eta_{\alpha\beta}^{\gamma\delta} \sigma_{\gamma\delta}$

La forme la plus générale est $\sigma_{\alpha\beta} = \eta \sigma_{\alpha\beta} + \eta_1 \mu_\alpha \mu_\gamma \sigma_{\gamma\beta}$

$$+ \eta_2 \mu_\alpha \mu_\beta \sigma_{\gamma\delta} \mu_\gamma \mu_\delta \quad \eta_{\alpha\beta}^{\gamma\delta} = \eta \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + \eta_1 \mu_\alpha \mu_\gamma \delta_{\beta\delta} + \eta_2 \mu_\alpha \mu_\beta \mu_\gamma \mu_\delta$$

Pour un système compressible il y aurait 5

viscosités indépendantes Écrire les équations constitutives

6. Généralisations de la théorie

- Viscoélasticité, modèle de Maxwell $\frac{D\sigma_{\alpha\beta}}{Dt} + \frac{1}{\tau} \sigma_{\alpha\beta} = \mathcal{L} E v_{\alpha\beta}$
 τ est le temps de relaxation et E le module de cisaillement. (2)

Les équations constitutives pour un système actif sont

$$\left(1 + \tau \frac{D}{Dt}\right) \left[\sigma_{\alpha\beta} + 5\Delta\mu q_{\alpha\beta} - \frac{V_3}{2} (\mu_\alpha h_\beta + \mu_\beta h_\alpha - \frac{2}{3} \sigma_{\alpha\beta} \mu_\gamma h_\gamma) \right] =$$

$$\frac{D\mu_\alpha}{Dt} = \frac{1}{\gamma_3} \left(1 + \tau \frac{D}{Dt}\right) h_\alpha - V_3 N_{\alpha\beta} \mu_\beta$$

Rq Dans une théorie hydrodynamique stricte à temps long le système est liquide. Nous avons aussi supposé que les deux temps de relaxation sont égaux. Avec la visco-élasticité, nous allons plus loin que l'hydrodynamique stricte.

- Systèmes polaires Pour un système à 1 composant la procédure d'Onsager se génère pas de terme polaire. Elle est invariante par la symétrie $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$. Le terme actif polaire le plus simple est de rajouter comme sur un substrat $\frac{D\vec{r}}{Dt} \rightarrow \frac{D\vec{r}}{Dt} + \lambda_1 (\vec{r} \cdot \vec{\nabla}) \vec{r} \Delta\mu$

- Systèmes à plusieurs composants polaire

On appelle ρ_0 et ρ_1 les densités des 2 composants (0 est le solvant) la densité totale est $\rho = \rho_1 + \rho_0$. La vitesse du centre de masse est $\rho \vec{v} = \rho_0 \vec{v}_0 + \rho_1 \vec{v}_1$

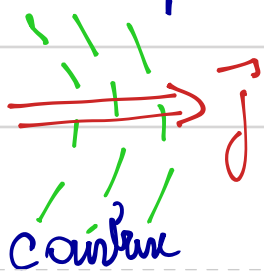
Les flux des deux constituants sont $\vec{j}_0 = \rho_0 \vec{v}_0$ et $\vec{j}_1 = \rho_1 \vec{v}_1$. On écrit $\vec{j}_0 = \rho_0 \vec{v} + \vec{j}$ et $\vec{j}_1 = \rho_1 \vec{v} - \vec{j}$

Le flux relatif $\vec{j} = \alpha \vec{r} - \gamma \vec{\nabla} \mu$ $\alpha = \rho_1 V_r$ est relié à la vitesse spontanée des particules actives. Ce terme est polaire

Une théorie détaillée est donnée dans A. Cellan-Jones et F. Jülicher New Journal of Physics 2011

- Chiralité : Il y a une composante active de la rotation dans le fluide et donc de la contrainte anisotrope

- Ordre nématique : Le flux actif est $j^\alpha = \gamma \partial_\beta Q_{\alpha\beta}$



La courbure définit un vecteur



Equations constitutives d'un gel actif incompressible

$$\sigma_{\alpha\beta} = 2\eta \sigma_{\alpha\beta} - \zeta \Delta \mu g_{\alpha\beta} + \frac{V_1}{2} \left[(h_\alpha p_\beta + p_\alpha h_\beta) - \frac{2}{3} \delta_{\alpha\beta} p_\gamma h_\gamma \right]$$

$$P_\alpha = \frac{h_\alpha}{V_1} - V_1 \sigma_{\alpha\beta} p_\beta + 2 \Delta \mu p_\alpha$$

$$\mathcal{L} = \mathcal{L} \Delta \mu + \mathcal{L} h_\alpha p_\alpha + \zeta g_{\alpha\beta} \sigma_{\alpha\beta}$$

(1) tenseur d'Ericksen $\sigma_{\alpha\beta}^E$ remplace la pression à l'ordre 2 en $\vec{\nabla} \vec{r}$

(2) Détailler le comportement à temps court (solide) et à temps long (liquide)

Il faudrait aussi définir la dérivée corrélationnelle

$$\frac{D}{Dt} \sigma_{\alpha\beta} = \frac{\partial}{\partial t} \sigma_{\alpha\beta} + \vec{U} \cdot \vec{\nabla} \sigma_{\alpha\beta} + \omega_{\alpha\gamma} \sigma_{\gamma\beta} + \omega_{\beta\gamma} \sigma_{\alpha\gamma} + A_{\alpha\beta}$$

5 termes

$A_{\alpha\beta} \sim \sigma_{\alpha\gamma} \mu_{\gamma\beta} + \dots$ non linéarité réactionnelle

(3) Attention à ne pas confondre $\mathcal{L}$ (taux de consommation de l'ATP) et $\bar{\mathcal{L}}$

(4) Relation de Gibbs-Duhem $dP = n d\mu + h d\vec{r}$

$$-\partial_\beta \sigma_{\alpha\beta}^E = n \partial_\alpha \mu + h_\gamma \partial_\alpha p_\gamma$$

(5) On peut éliminer h_γ $P_\alpha p_\alpha = 0$ $h_{11}/V_1 = V_1 \sigma_{\alpha\beta} p_\alpha p_\beta$

$$\text{et } \sigma_{\alpha\beta} = 2\eta \sigma_{\alpha\beta} + \gamma \frac{V_1^2}{1} \left[p_\alpha p_\beta p_\gamma p_\delta \sigma_{\gamma\delta} - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} V_1 \sigma_{\gamma\delta} p_\delta p_\gamma \right]$$

h_n aie donc une nécessité anisotrope