

# AKTIVNO ZVIJANJE POLIMEROV IN FILAMENTOV

ANA FLACK

Fakulteta za matematiko in fiziko  
Univerza v Ljubljani

V članku je predstavljeno zvijanje filamentov in polimerov v viskozni tekočini. Osredotoča se na model elastične palice oziroma polimera, ki mu na enem koncu vsiljujemo vrtenje okrog njegove osi, na drugem koncu pa je prost. Najprej so definirani karakteristični časi in dolžine, ki nam povejo nekaj osnovnih informacij o tem pojavu. V nadaljevanju so s pomočjo principa virtualnega dela izpeljane enačbe za silo in navor, ki delujeta na elastično palico, ki je torzijsko in upogibno obremenjena. Nato so izpeljane enačbe gibanja za takšno palico, ki se giblje v viskozni tekočini. Iz enačb gibanja je določena kritična frekvenca pri kateri nastopi nestabilnost in vrtenje palice okrog njene osi preide v zvijanje. Nato so predstavljeni še rezultati numeričnih simulacij, ki razkrijejo, da pri frekvencah višjih od kritične obstaja še drugo stabilno stanje zvijanja palice in da je kritična frekvenca odvisna od začetnega upogiba palice. Na koncu je predstavljen eksperiment, pri katerem so opazovali gibanje morskih bakterij z bičkom, pri katerih je nestabilnost bička vzrok za spremembe smeri.

## ACTIVELY TWISTED POLYMERS AND FILAMENTS

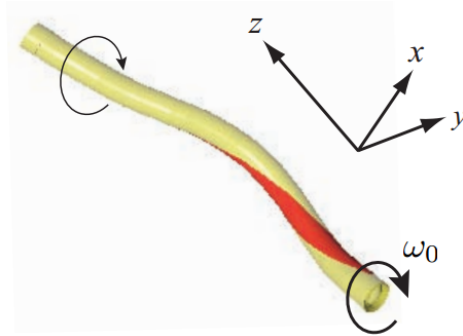
This article deals with twist dynamics of rotationally driven semiflexible polymers and filaments in a viscous fluid. The core of this article is a simple model that consist of uniform elastic rod that is forced to axially rotate about one fixed end and is free at the other end. At the beginning characteristic times and lengths for such motion are estimated. Through the principle of virtual work the derivation of equations for force and torque acting on such rod is explained. The meaning of equations of motion is examined and the critical frequency where twirling-whirling transition occurs is determined. Characteristic of motion after transition are presented with the help of numerical simulation results. To stress the importance of such dynamics an experiment that deals with motion of bacteria who change direction due to the instability of their flagella is reviewed.

### 1. Uvod

V članku je obravnavano aktivno zvijanje polimerov in filamentov, ki so primer neravnovesne mehke snovi. Filament je tridimenzionalen objekt čigar presek je mnogo manjši od njegove dolžine [1]. Ker so polimeri dolge molekule, jih lahko obravnavamo kot filamente. Njihovo zvijanje je pomemben del mnogih bioloških procesov kot sta na primer prepisovanje in podvojevanje verige DNK [2] ter gibanje bakterij [3]. Poleg tega dolge tanke elastične strukture igrajo pomembno vlogo v teoriji polimerov in tekočih kristalov [4], opisu vrtničnih niti v hidrodinamiki [5], modeliranju nastajanja sončevih peg [6] ter opisu segrevanja zunanje sončeve atmosfere [7].

Zanimanje za lastnosti elastičnih palic, na katere delujejo zunanje sile in navori, sega že v osemnajsto stoletje, ko se je s tem ukvarjal Euler [8]. Danes pa je zanimivo predvsem razumevanje časovnega razvoja gibanja filamentov in njihove nestabilnosti, posebej zanimiva je povezava z biologijo. Trenutne eksperimentalne metode omogočajo opazovanje in manipulacijo posamezne molekule, kar omogoča boljše razumevanje hidrodinamskih, termodinamskih in elastomehanskih vplivov [2].

Članek se osredotoča na model elastične palice oziroma filamenta v viskozni tekočini, ki mu na eni strani vsiljujemo vrtenje, na drugem pa je prost, kar je prikazano na sliki 1. Prvi, ki so se ukvarjali s tem problemom so bili Wolgemuth, Powers in Goldstein leta 2000 [9], ki so uporabili teorijo tankih teles za analizo majhnih torzijskih in upogibnih deformacij. Pokazali so, da obstaja kritična frekvenca za prehod med vrtenjem in zvijanjem. Lim in Peskin [10] sta kasneje pokazala, da stanje zvijanja ni stabilno in zato obstaja še tretji režim gibanja palice. Wada in Netz sta leta 2006 [2] analizirala povezavo med termodinamskimi, hidrodinamskimi in elastičnimi vplivi na prehod med vrtenjem in zvijanjem. S pomočjo numeričnih simulacij sta pokazala, da termične fluktuacije znižajo kritično frekvenco prehoda.



**Slika 1.** Shematski prikaz modela, ki je sestavljen iz elastične palice v viskozni tekočini, ki ji na enem koncu vsiljujemo vrtenje s frekvenco  $\omega_0$ , na drugem koncu pa je prosta. [11].

V članku so zapisane enačbe gibanja, iz njih je izračunana kritična frekvenca pri kateri se zgodi prehod med zvijanjem in vrtenjem. Na podlagi numeričnih simulacij je opisano, kaj se dogaja s filamentom, ko preide v stanje zvijanja. Za konec je kot primer iz narave, pri katerem so nestabilnosti filamenta ključnega pomena, predstavljen eksperiment, v katerem so opazovali gibanje morskih bakterij z enim bičkom.

## 2. Karakteristične dolžine in časi

### 2.1 Vztrajnostna dolžina

Za oceno vpliva termičnih fluktuacij na obnašanje filamentov uvedemo značilne dolžine pri katerih termični vplivi postanejo nezanemarljivi. Torzijska vztrajnostna dolžina  $l_t$  in upogibna vztrajnostna dolžina  $l_p$  nam povesta koliko se filament v termodinamskem okolju upira torziji oziroma upogibu [11]. Če je njego dolžina daljša, se bo filament lažje deformiral, zato bodo termični vplivi pomembnejši [12]. Upogibno vztrajnostno dolžino polimera z upogibno konstanto  $A$  lahko ocenimo kot dolžino pri kateri upogibna energija filamenta, ki je upognejen v lok z enim radianom postane primerljiva s  $k_B T$  [12]

$$\begin{aligned} k_B T &\sim A/l_p, \\ l_p &\sim \frac{A}{k_B T}. \end{aligned} \quad (1)$$

Podobno ocenimo torzijsko vztrajnostno dolžino polimera s torzijskim koeficientom  $C$  kot

$$l_t \sim \frac{C}{k_B T}. \quad (2)$$

Za različne filamente se vrednosti razpenjajo med nekaj nano- do nekaj milimetrov. Za DNK je  $l_p \approx 50nm$  in  $l_t \approx 75 - 100nm$  pri fizioloških koncentracijah soli [11].

### 2.2 Viskozne relaksacije raztega, upogiba in torzije pri elastičnih palicah

Na skalah filamentov in polimerov, ki so med nanometri in nekaj deset mikrometri, je njihova dinamika določena z ravnovesjem med elastično napetostjo in viskozno silo okoliške tekočine. Zato lahko privzamemo režim z nizkim Reynoldsovim številom, kjer popolnoma zanemarimo vztrajnost tekočine in Reynoldsovo število postavimo na nič,  $Re = 0$  [11]. V takšnem režimu tok opišemo s Stokesovo enačbo [16]

$$0 = -\nabla p + \eta \nabla^2 \mathbf{v}, \quad (3)$$

kjer  $\eta$  predstavlja viskoznost,  $p$  tlak in  $\mathbf{v}$  hitrost. Enačba izhaja iz Navier-Stokesove enačbe, pri kateri zanemarimo člene, ki opisujejo vztrajnost tekočine, in upoštevamo, da je tok nestisljiv, torej hitrostno polje zadostuje enačbi  $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$ . Zato, da lahko primerjamo dinamične lastnosti premikajočih se palic in polimerov v takšni tekočini, uvedemo karakteristične relaksacijske čase za razteg, upogib in torzijo. Karakteristični časi za razteg, torzijo in upogib palice z dolžino  $L$ , radijem  $a$ , Youngovim elastičnim modulom  $E$ , torzijskim koeficientom  $C$  in upogibnim koeficientom  $A$  znašajo [11]:

$$\tau_{\text{razteg}} \sim \left(\frac{L}{a}\right)^2 \frac{\eta}{E}, \quad \tau_{\text{upogib}} \sim \frac{\eta L^4}{A} \sim \left(\frac{L}{a}\right)^4 \frac{\eta}{E} \quad \text{in} \quad \tau_{\text{torzija}} \sim \frac{\eta a^2 L^2}{C}. \quad (4)$$

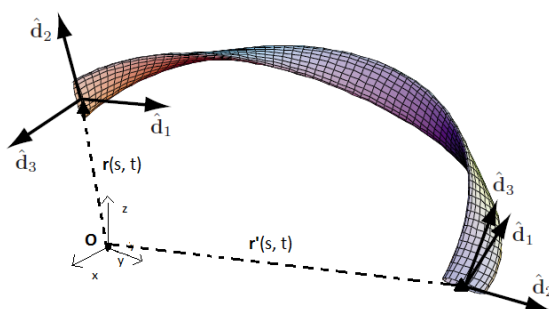
Oceno za karakteristične čase dobimo tako, da primerjamo silo, ki je potrebna za deformacijo in viskozno silo, ki vrača palico v začetno stanje. Če primerjamo značilne čase in upoštevamo, da je  $A \sim Ea^4$  ter  $C \sim A$  [8], ugotovimo, da [11]

$$\frac{\tau_{\text{razteg}}}{\tau_{\text{upogib}}} \approx \left(\frac{a}{L}\right)^2 \quad \text{in} \quad \frac{\tau_{\text{torzija}}}{\tau_{\text{upogib}}} \approx \left(\frac{a}{L}\right)^2. \quad (5)$$

Ker imamo opravka s filamenti in polimeri, katerih radij preseka je mnogo manjši kot njihova dolžina, sta ti dve razmerji zelo majhni in tipično znašata okrog  $10^{-6}$  [12]. To pomeni, da je karakteristični čas raztega dosti krajši od upogibnega karakterističnega časa. Zato lahko polimer, pri katerem opazujemo upogib, obravnavamo kot neraztegljiv. Opazimo tudi, da je torzijski karakteristični čas majhen v primerjavi z upogibnim in je primerljiv z časom raztega. Kljub temu je v navadi, da filamentu pripišemo torzijsko in upogibno prostostno stopnjo, raztezno pa zanemarimo. To lahko upravičimo s tem, da je vzrok za torzijo in razteg v večini primerov drug fizikalni proces [11].

### 3. Globalni opis deformacije filameta

Filament je tanka palica, katere dolžina je mnogo večja od njenega preseka, zato jo lahko opišemo kot krivuljo v prostoru, ki predstavlja središčne točke filameta. Naj  $\mathbf{r} = \mathbf{r}(s, t) : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^3$ , predstavlja krivuljo v prostoru parametrizirano z naravnim parametrom  $s$ , ki je ločna dolžina. Za vsak  $t$  in  $s$  določimo lokalni ortonormiran sistem  $\{\mathbf{d}_1, \mathbf{d}_2, \mathbf{d}_3\}$ , kjer so  $\mathbf{d}_i, i = 1, 2, 3$  direktorji [1], kar je prikazano na sliki 2. Če s črtico označimo odvod po  $s$ , je  $\mathbf{d}_3(s, t) = \mathbf{r}'(s, t)$  in je tangenti vektor na krivuljo pri določenem  $s$ . Vektorja  $\mathbf{d}_2$  in  $\mathbf{d}_3$  izberemo tako, da razpenjata ravnino pravokotno na  $\mathbf{d}_3$  in sta torej v ravnini preseka. Definiramo ju tako, da velja  $\mathbf{d}_3 = \mathbf{d}_1 \times \mathbf{d}_2$  [1]. Oblika filameta



Slika 2. Izbira direktorjev, ki opisujejo filament v prostoru. Prirejeno po[12].

je določena z orientacijo materialnega koordinatnega sistema pri vsakem  $s$ . Prav tako lahko obliko filameta opišemo s tem, kako hitro se lokalni koordinatni sistem vrti, ko potuje vzdolž filameta. Med dvema bližnjima točkama spremeni za majhno rotacijo

$$\frac{\partial \mathbf{d}_i}{\partial s} = \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{d}_i, \quad (6)$$

kjer je  $\boldsymbol{\Omega} = \Omega_1 \mathbf{d}_1 + \Omega_2 \mathbf{d}_2 + \Omega_3 \mathbf{d}_3$ . Infitezimalne rotacije so določene s tem, ko izberemo direktorje, kajti  $\Omega_1 = \frac{\partial \mathbf{d}_2}{\partial s} \cdot \mathbf{d}_3$ .  $\Omega_2$  in  $\Omega_3$  dobimo s ciklično permutacijo indeksov.  $\Omega_1$  in  $\Omega_2$  podajata ukrivljenost filameta,  $\Omega_3$  pa je komponenta vzdolž tangente in podaja kako hitro se presek vrti okrog  $\mathbf{d}_3$ , ko se premikamo vzdolž krivulje [12].

Zgornja izbira direktorjev je zelo podobna Frenet-Serretovemu trirobu, s to razliko, da je Frenet-Serretov opis manj splošen, saj je smer  $\mathbf{d}_1$  in  $\mathbf{d}_2$  že določena s smerjo normale in binormale in ju ne moremo izbrati tako, da ustrezata glavnima osema preseka filameta [1]. Če zgornji opis primerjamo s Frenet-Serretovimi enačbami

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{\mathbf{t}}}{\partial s} &= \kappa \hat{\mathbf{n}}, \\ \frac{\partial \hat{\mathbf{n}}}{\partial s} &= -\kappa \hat{\mathbf{t}} + \tau \hat{\mathbf{b}}, \\ \frac{\partial \hat{\mathbf{b}}}{\partial s} &= -\tau \hat{\mathbf{n}}, \end{aligned} \tag{7}$$

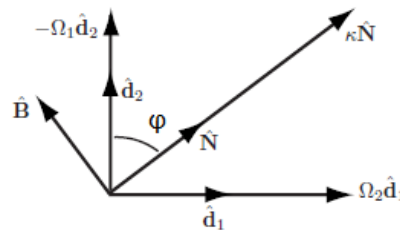
kjer je  $\mathbf{t}$  vektor normale,  $\mathbf{b}$  vektor binormale,  $\mathbf{n}$  normalni vektor,  $\kappa$  ukrivljenost (hitrost vrtenja tangente okrog binormale) in  $\tau$  torzija (hitrost vrtenja normale okrog tangente), ugotovimo, da je [12]

$$\kappa^2 = \Omega_1^2 + \Omega_2^2 \tag{8}$$

in

$$\Omega_3 = \frac{d\phi}{ds} + \tau, \tag{9}$$

kjer je  $\phi$  kot med  $\mathbf{d}_2$  in normalo, kot je razvidno iz slike 3. Ko obravnavamo palice, ki so ravne, če



**Slika 3.** Bazni vektorji materialnega in Frenet-Serretovega koordinatnega sistema v ravnini preseka filameta. Prirejeno po [12].

na njih ne deluje nobena sila, lahko  $\Omega_1$  in  $\Omega_2$  interpretiramo kot napetosti povezane z upogibom,  $\Omega_3$  pa je povezana s torzijskimi napetostmi [12].

#### 4. Sila in navor

Da lahko opišemo spreminjanje oblike filameta s časom, moramo poznati navor in silo, ki delujeta na vsak njegov del. To lahko izračunamo s principom virtualnega dela, ki pravi, da je delo, ki ga opravijo vse sile in navori pri virtualnih premikih telesa iz ravnovesja enako nič [12]. Najprej zapišemo funkcional elastične energije. Ker je elastična energija povezana le z deformacijami, jo lahko izrazimo z napetostmi v palici  $\Omega_i$ . V okviru linearne teorije elastičnosti, ima funkcional elastične energije obliko [8]

$$E = \int_0^L e(\Omega_1, \Omega_2, \Omega_3) ds - \int_0^L \Lambda(s) ds, \tag{10}$$

kjer je za filament z upogibnim modulom  $A$  in torzijskim modulom  $C_3$  gostota elastične energije

$$e = \frac{A}{2}(\Omega_1^2 + \Omega_2^2) + \frac{C}{2}\Omega_3^2. \quad (11)$$

Lagrangev multiplikator  $\Lambda(s)$ , lahko razumemo kot lokalno napetost v palici, ki zagotavlja lokalno neraztegljivost [11]. Da bomo lahko izračunali navor in silo, moramo najprej izraziti variacije napetosti  $\delta\Omega_i$  kot funkcijo variacij  $\delta\mathbf{r}$  in  $\delta\phi$ , pri čemer  $\delta$  označuje virtualne premike. Pri tem moramo biti previdni, saj večina variacij  $\mathbf{r}$ , povzroči razteg, mi pa obravnavamo neraztegljive palice. Zaradi tega omejimo variacijo tako, da se ohranja ločna dolžina palice  $\delta ds = 0$ [11][12].

Izkaže se [11][12], da je zveza med variacijami  $\delta\Omega_i$  in  $\delta r$ ,  $\delta\phi$  enaka

$$\delta\Omega_1 = (\delta\phi)\Omega_2 - 2\Omega_1\mathbf{d}_3 \cdot \frac{\partial(\delta\mathbf{r})}{\partial s} - \mathbf{d}_2 \cdot \frac{\partial^2(\delta\mathbf{r})}{\partial s^2}, \quad (12)$$

$$\delta\Omega_2 = -(\delta\phi)\Omega_1 - 2\Omega_2\mathbf{d}_3 \cdot \frac{\partial(\delta\mathbf{r})}{\partial s} + \mathbf{d}_1 \cdot \frac{\partial^2(\delta\mathbf{r})}{\partial s^2}, \quad (13)$$

$$\delta\Omega_3 = \frac{\partial(\delta\phi)}{\partial s} + (\Omega_1\mathbf{d}_1 + \Omega_2\mathbf{d}_2) \cdot \frac{\partial(\delta\mathbf{r})}{\partial s} - \Omega_3\mathbf{d}_3 \cdot \frac{\partial(\delta\mathbf{r})}{\partial s}. \quad (14)$$

Zgornje enačbe nam povedo, da torzijska deformacija in upogib palice nista neodvisna. Če palico zasukamo okrog lokalne tangente za  $\delta\phi$  se spremenijo vse tri komponente  $\boldsymbol{\Omega}$ , vseeno pa se ohranja ukrivljenost palice  $\kappa = \sqrt{\Omega_1^2 + \Omega_2^2}$ . Če palico upognemo za  $\delta\mathbf{r}$ , se spremeni torzijska napetost  $\Omega_3$  samo, če je palica upognjena, saj v enačbi za  $\Omega_3$  nastopa odvod spremembe upogiba palice.

Princip virtualnega dela pravi, da je sprememba energije zaradi virtualnih premikov enaka nič. Spremembo energije lahko razdelimo na prispevek, ki ga dobimo zaradi variacije središčnih točk za  $\delta\mathbf{r}$  in na tistega zaradi variacije kota  $\delta\phi$ . Ker je gostota proste energije le funkcija komponent napetostnega vektorja  $\boldsymbol{\Omega}$ , lahko zapišemo

$$\delta E = (\text{robni pogoji}) - \int_0^L ds \mathbf{f}(s) \delta \mathbf{r}(s) - \int_0^L ds m_3(s) \delta \phi(s), \quad (15)$$

Če delujemo z  $\delta$  na enačbo 10 vidimo, da je sprememba energije enaka

$$\delta E = \int \delta(ds) e(\Omega_\alpha) + \int ds M_\alpha \delta \Omega_\alpha. \quad (16)$$

V ta izraz lahko vstavimo enačbe 12, 13, 14 in integriramo. Tako dobimo izraz za  $\delta E$ , ki ima takšno obliko kot enačba 15. Če primerjamo obe enačbi, lahko preberemo, kako sta sila in navor v palici odvisna od napetosti  $\Omega_i$  [11]

$$\mathbf{F} = -A\mathbf{r}^{(3)} + C[\Omega_3(\mathbf{r}' \times \mathbf{r}'')] - \Lambda\mathbf{r}', \quad (17)$$

$$\mathbf{M} = A\mathbf{r}' \times \mathbf{r}'' + C\Omega_3\mathbf{r}'. \quad (18)$$

## 5. Enačbe gibanja

Sedaj imamo vse enačbe, ki jih potrebujemo za zapis enačbe gibanja za palico, ki se premika v viskozni tekočini in ima upogibno in torzijsko elastičnost. Ker v Stokesovi enačbi, ki opisuje tok, ni časovnega odvoda, sta sila in navor tekočine na filament odvisna le od hitrosti in oblike filameta v določenem trenutku. Kljub temu je v večini primerov analitično nemogoče izračunati sile na filament [12]. Zato izkoristimo dejstvo, da je presek filameta dosti manjši od njegove dolžine. V tej limiti lahko privzamemo, da je hidrodinamska sila na določen del filameta odvisna le od hitrosti filameta v tej točki. S to predpostavko zanemarimo dejstvo, da vsak del filameta povzroča tok,

ki vpliva na hidrodinamsko silo, ki deluje na prostale dele filamenta. Kljub temu pa makroskopski eksperimenti kažejo, da je ta približek dober za opis oblike filamentov v viskozni tekočini [13][14][15]. Zaradi preprostosti se omejimo na primer, ko je sila okoliške tekočine izotropna. Okoliška tekočina na palico deluje s silo  $\zeta \dot{\mathbf{r}}$  in navorom  $\zeta_r \dot{\phi}$ , ki sta uravnovešena z elastično silo in navorom na enoto dolžine, ki smo ju izpeljali zgoraj.  $\zeta$  in  $\zeta_r$  sta translacijski in rotacijski koeficient upora ( $\zeta = 2\pi\eta a$  in  $\zeta_r = \pi\eta a^3$ ) [16]

$$\zeta \dot{\mathbf{r}} = \mathbf{F}' = \mathbf{f}(s) \text{ in } \zeta_r \dot{\phi} = M_3' = m_3(s). \quad (19)$$

Če v enačo 14 vstavimo  $\delta\Omega_3 = \dot{\Omega}_3 \delta t$  dobimo zvezo [11]

$$\dot{\Omega}_3 = (\dot{\phi})' - \Omega_3 \mathbf{r}' \cdot (\dot{\mathbf{r}})' + (\mathbf{r}' \times \mathbf{r}'') \cdot (\dot{\mathbf{r}})'. \quad (20)$$

Ta enačba opisuje kako se torzijska napetost  $\Omega_3$  transportira po tanki palici in predstavlja lokalni zakon o ohranitvi le te. Prva dva člena sta posledica dejstva, da se torzijska napetost v palici spreminja, če se hitrost vrtenja vzdolž palice spreminja. Drugi člen odraža dejstvo, da se lahko torzijska napetost spremeni zaradi giabnja palice, ki ni povezano z vrtenjem okrog lokalne tangente [17]. Če združimo enačbi 19 z enačbama, ki smo ju izpeljali za navor in silo na filament in upoštevamo še zvezo 20 ter lokalno neraztegljivost palice ( $\mathbf{r}' \cdot \dot{\mathbf{r}}' = 0$ ), lahko zapišemo enačbi za gibanje filamenta s krožnim preskom

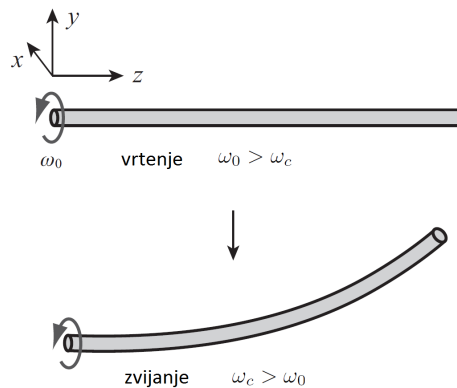
$$\zeta \dot{\mathbf{r}} = -A\mathbf{r}^{(4)} + C[\Omega_3(\mathbf{r}' \times \mathbf{r}'')] - (\Lambda\mathbf{r}')', \quad (21)$$

$$\zeta_r \dot{\Omega}_3 = C\Omega_3'' + \zeta_r(\mathbf{r}' \times \mathbf{r}'') \cdot (\dot{\mathbf{r}})'. \quad (22)$$

## 6. Prehod med vrtenjem in zvijanjem

V tem poglavju bom kot primer uporabe enačb gibanja predstavila prehod med vrtenjem in zvijanjem palice v nizekotemperaturni limiti.

V tej limiti obravnavamo palice oziroma filamente, katerih dolžina je mnogo manjša kot njihova upogibna in torzijska vztrajnost, zato lahko zanemarimo vpliv termodinamskih fluktuacij [12]. V takem primeru se uravnovešajo vsiljevana torzija, difuzija torzije po palici in zvijanje, kar vodi do dveh stabilnih stanj, pri frekvencah nižjih od kritične  $\omega_c$  ostane palica ravna in se vrte okoli lastne osi, ko je frekvenca vsiljevnja višja od kritične pa palica preide v stanje zvijanja. Oba načina sta prikazana na sliki 4. Prehod med obema stanjema je dinamični analog statičnega primera, ko se



**Slika 4.** Zgoraj na sliki je prikazano vrtenje, ki pri frekvencah višjih od kritične preide v zvijanje, ki je na sliki spodaj. Prirejeno po [11].

palica, ki jo torzijsko obremenjujemo na obeh koncih zvije.

Kritično frekvenco, pri kateri se zgodi nestabilnost in palica preide iz enega stanja v drugo, bomo izračunali iz enačb gibanja tako, da bomo posikali njihove rešitve pri ustreznih robnih pogojih.

Vedno obstaja rešitev, da je palica ravna, kar predstavlja vrtenje. Pri določenih frekvencah pa obstajajo še druge, netrivialne rešitve. Pri prvi taki rešitvi se bo palica deformirala in prešla v stanje zvijanja.

Ko so frekvence vsiljevanja majhne  $\omega_0 < \omega_c$  je palica ravna in iz enačbe gibanja 22 lahko preberemo, da je odvod torzije palice ( $\dot{\Omega}_3 = \dot{\Omega}$ ) enak

$$\zeta_r \dot{\Omega} = C\Omega'' \quad (23)$$

Drugi člen v enačbi gibanja je enak nič, saj je palica ravna in je  $(\dot{\mathbf{r}})'$  enak nič. Če želimo rešiti enačbo, moramo poznati robne pogoje. Na koncu palice kjer vsiljujemo vrtenje velja, da

$$\zeta_r \omega_0 = C\Omega'(0), \quad (24)$$

na prostem koncu pa

$$C\Omega(s = L) = 0. \quad (25)$$

Rešitev zgornje diferencialne enačbe z upoštevanjem robnih pogojev je

$$\Omega(s) = \frac{\zeta_r \omega_0}{C}(s - L)[9]. \quad (26)$$

Navor  $\mathbf{M}_{zunanji}$ , s katerim moramo delovati na palico, da se bo enakomerno vrtela s frekvenco  $\omega_0$  okoli svoje osi, je torej enak

$$\mathbf{M}_{zunanji} = -C\Omega(0) = \zeta_r \omega_0 L = \pi \eta a^2 \omega_0 L. \quad (27)$$

Vidimo, da je navor sorazmeren s frekvenco vsiljevanja  $\omega_0$ , kar je posledica tega, da smo vzeli linearizirano teorijo viskoznih sil. Ko se frekvenca zvišuje, se palica pri kritični frekvenci deformira zaradi dinamične povezave med torzijo in upogibom. Če želimo izračunati kritično frekvenco, kjer postane stanje vrtenja nestabilno  $\omega_c$ , najprej lineariziramo enačbo gibanja 21. Ker je palica pred prehodom ravna, lahko predpostavimo, da so v najnižjem redu odmiki pravokotni na smer palice. Če palica kaže v smeri osi  $z$ , lahko zapišemo  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_\perp + z\hat{\mathbf{z}}$ , kjer je  $\mathbf{r}_\perp = (X(z), Y(z), 0)$  [12][11]. Če uvedemo še novo spremenljivko  $\xi = X + iY$ , dobimo

$$\zeta \dot{\xi} = -A\xi^{(4)} + i\zeta\omega_0[(s - L)\xi'']'. \quad (28)$$

Robna pogoja pri  $z = 0$ , kjer je palica togo vpeta sta

$$\xi(0) = \xi'(0) = 0. \quad (29)$$

Prosti konec ne čuti ne sile ne navora, zato velja

$$\xi''(L) = \xi'''(L) = 0. \quad (30)$$

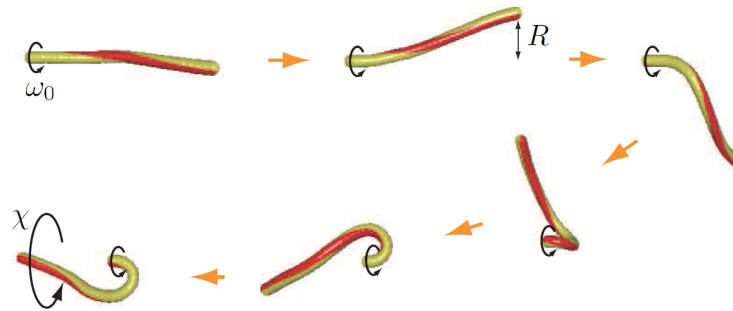
Da najdemo kritično frekvenco, uporabimo nastavek za rešitev enačbe  $\xi(s, t) = \exp(i\chi t)$ , kjer je  $\chi$  realen. S pomočjo robnih pogojev lahko izračunamo kritično frekvenco, kjer se zgodi nestabilnost. To je najbolje narediti numerično. Kritična frekvenca, pri kateri se zgodi prehod med vrtenjem okrog osi in zvijanjem, je enaka

$$\omega_c = 8.9 \frac{A}{\pi \eta a^2 L^2} = 8.9 \frac{k_B T}{\pi \eta a^2 l_p} \left(\frac{l_p}{L}\right)^2 [9][2]. \quad (31)$$

Ta rezultat pomeni, da je za frekvence, ki so večje od kritične, palica nestabilna glede na neskončno majhne motnje, zato se začne zvijati. Njeno gibanje je sestavljeno iz vrtenja okrog lokalne tangente s frekvenco  $\omega_0$  in iz gibanja središčnih točk palice, z dosti manjšo frekvenco  $\chi \approx \frac{22.9}{L^2} \omega_c$  [12].

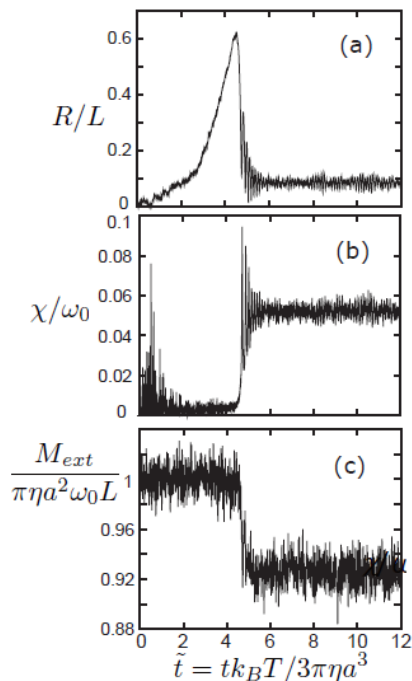
## 7. Numerične simulacije

Zgornje analitične izračune lahko primerjamo z numeričnimi simulacijami in tako ocenimo njihov doseg in pravilnost.



**Slika 5.** Rezultati numerične simulacije gibanja filameta pri frekvenci višji od kritične za  $N=30$  (število sfer, ki sestavljajo polimer),  $l_p/L = 10^3$  in  $\omega_0/\omega_c = 1.20$ . [11]

Prva omejitev zgornjih rezultatov je, da smo z njimi lahko napovedali le kritično frekvenco, ne pa tudi obnašanja filameta po tem, ko preide v stanje zvijanja. Zvijanje palice je namreč močno nelinearen in neravnovesen proces, mi pa smo enačbe linearizirali, da so bile rešljive. Zato so numerične simulacije najboljša možnost, da izvemo kakšno je gibanje filameta po prehodu [11].



**Slika 6.** Časovni razvoj različnih količin (a) radija prostega konca, (b) frekvence  $\chi$  in (c) zunanjskega navora  $M_{zunanjsi}$ , s katerim delujemo na vpet konec za  $N=30$ ,  $l_p/L = 10^3$  in  $\omega_0/\omega_c = 1.20$ . [11]

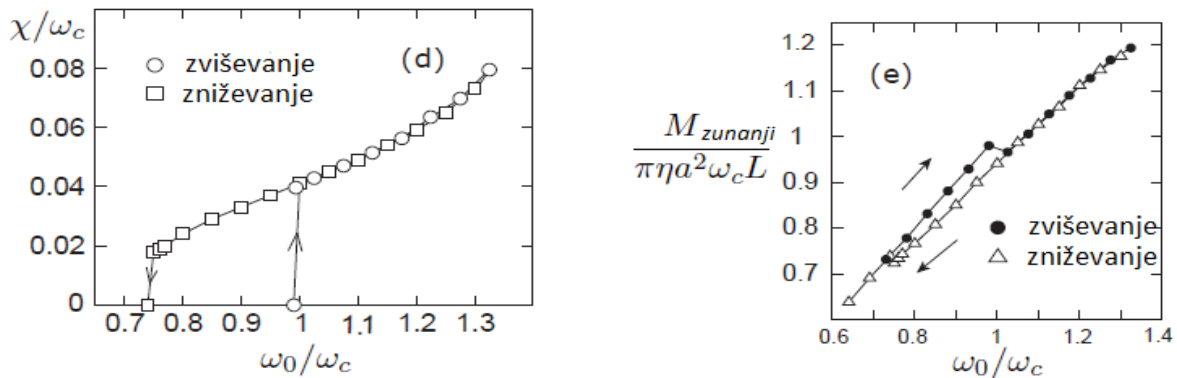
Na sliki 5 vidimo, da če filamentu vsiljujemo vrtenje s frekvenco višjo od kritične, odmik prostega konca palice od začetne osi vrtenja  $R$  narašča eksponentno, dokler se palica ne prepogne in vstopi v fazo stabilnega zvijanja z velikimi amplitudami. Tega drugega stabilnega stanja le z linearno teorijo nismo mogli napovedati. Slika 6 prikazuje odvisnosti od časa za oddaljenosti prostega konca od začetne smeri palice, frekvence  $\chi$  s katero se filament vrti okrog vpetega konca in zunanjskega navora, ki deluje na vpet konec palice. Na vseh treh grafih lahko opazimo prehod med nestabilnim zvijanjem palice in stabilnim zvijanjem z velikimi amplitudami. Radij prostega konca eksponentno narašča dokler se filament ne prepogne in preide v stabilno zvijanje z velikimi amplitudami. Frekvenca  $\chi$  se skokovito poveča, ko filament preide v stabilno stanje, zunanji navor pa se malo a opazno zmanjša.

Če si ogledamo še grafa na sliki 7 opazimo, da dobimo histerezi, če opazujemo frekvenco  $\chi$  in zunanji navor v odvisnosti od frekvence vsiljevanja pri zviševanju in zniževanju le te. To nas napelje na misel, da končno stanje filameta ni odvisno le od frekvence vsiljevanja, marveč tudi od njegove ukrivljenosti na začetku [11]. To je še en parameter, ki ga nismo upoštevali pri zgornjih analitičnih izračunih in zato nismo mogli oceniti, kakšna je odvisnost kritične frekvence od začetne oblike palice. Levo na sliki 8 je prikazam diagram stabilnosti. Iz njega lahko razberemo pri kateri frekvenci se zgodi prehod med vrtenjem

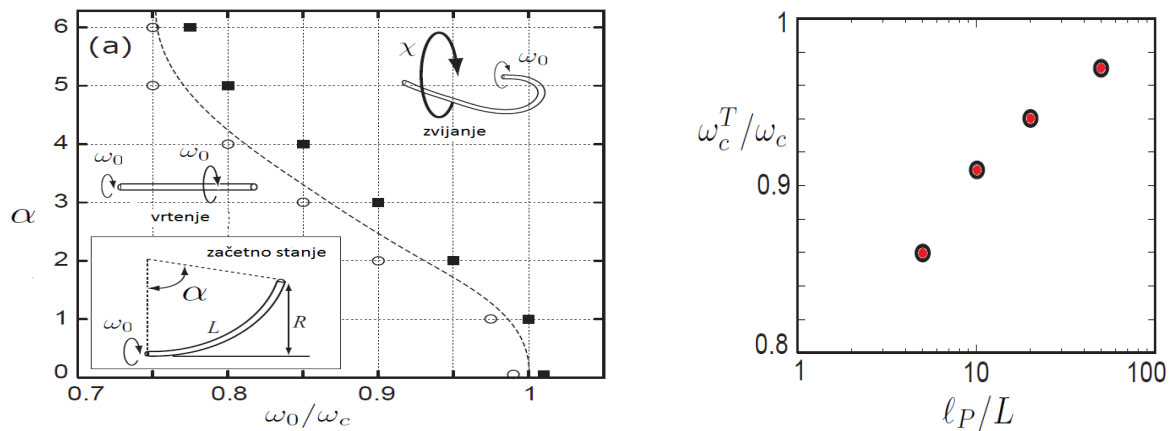
in zvijanjem v odvisnosti od začetnega upogibnega kota, ki je prikazan na istem grafu levo spodaj. Razvidno je, da je kritična frekvenca za palice, ki so na začetku bolj upognjene nižja kot tista, ki smo jo izračunali za na začetku ravno palico.



V sedajšnji obravnavi smo popolnoma zanemarili termične fluktuacije, ker so le te zanemarljive pri nizkih temperaturah. Vseeno pa nekoliko vplivajo na prehod med stanjema vrtenja in zvijanja. Končne, a vseeno nizke temperature, so take, da je razmerje upogibne vztrajnostne dolžine in dolžine filameta končno, vseeno pa je dolžina filameta mnogo večja od njegove vztrajnostne dolžine. V takšnih pogojih opazimo, da prehod med stanjema nastopi pri nižjih frekvencah kot bi jih predvideli iz izračunov. To odstopanje se vidi na sliki 8 desno, ki prikazuje, koliko pred predvideno kritično frekvenco  $\omega_c$  se že začne prehod v stanje zvijanja. Manjša kot je dolžina filameta v primerjavi z vztrajnostno upogibno dolžino, bolj frekvenca prehoda odstopa od izračunane.



**Slika 7.** Odvisnost frekvence  $\chi$  (levo) in zunanje navora (desno) od frekvence vsiljevanja za višanje in nižanje vsiljevane frekvence pri  $N=30$ ,  $l_p/L = 10^3$ . Prirejeno po [11].



**Slika 8.** Levo: Diagram stabilnosti kot funkcija začetnega upogibnega kota in frekvence vsiljevanja. Desno: Odvisnost frekvence prehoda  $\omega_c^T$  od razmerja  $l_p/L$ . [11]

To odstopanje lahko razložimo tako, da primerjamo upogibno energijo  $E$ , ki je sorazmerna s kvadratom upogibnega kota  $\alpha$ ,  $E \approx A\alpha^2/(2L)$ , in  $k_B T/2$ .

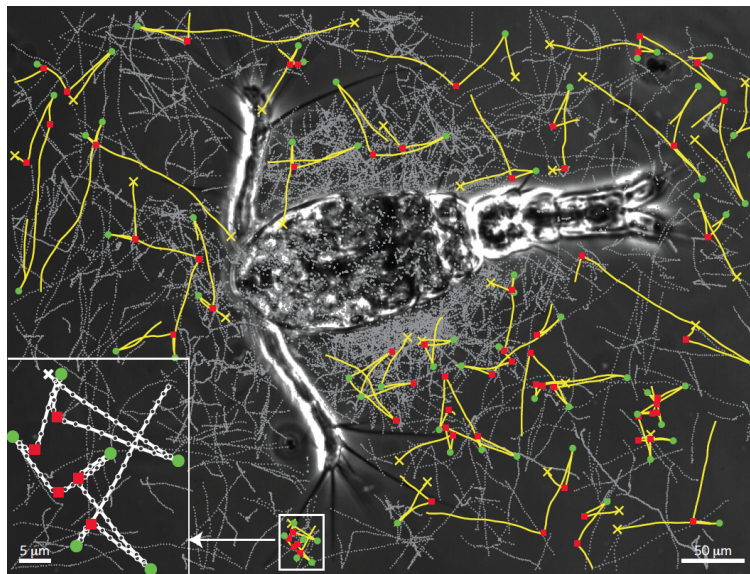
$$\frac{A\alpha^2}{2L} = \frac{k_B T}{2} \Rightarrow \langle \alpha^2 \rangle \sim \frac{L k_B T}{A} = \frac{L}{l_p}. \quad (32)$$

Na ta način smo dobili oceno za povprečen kot upogiba zaradi termičnih fluktuacij. Kot je razvidno iz grafa na sliki 8 začetni upogibni kot zniža frekvenco prehoda. Kot  $\alpha$  je vse večji za manjše  $l_p$ , zato je frekvenca prehoda manjša, če zvišujemo temperaturo.

## 8. Gibanje bakterij

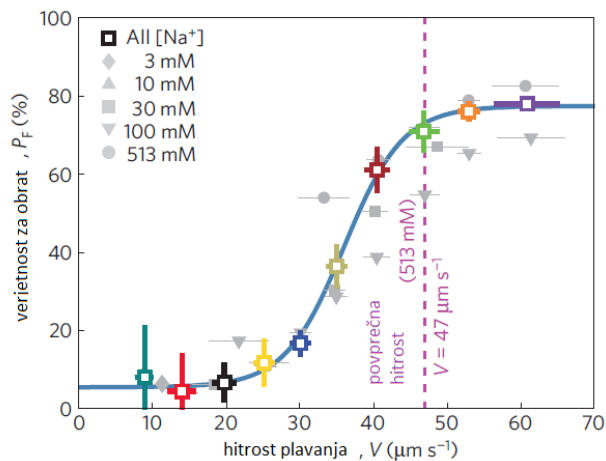
Za konec bom opisala eksperiment, ki prikazuje pomembnost zvijanja filamentov v naravi. Pri eksperimentu, ki so ga izvedli Son Guasto in Stocker, so opazovali gibanje morske bakterije *Vibrio alginolyticus*, ki tako kot 90% gibljivih morskih bakterij, za plavanje uporablja biček preko kavlja povezan z vrtečim se motorjem [18]. Mehanizem, ki ga uporabljajo za spreminjanje smeri, še vedno ni povsem znan.

Gibanje bakterij so opazovali tako, da so iz morja zajeli vzorec, ki so ga čez noč pustili v raztopini, ki je vzpodbudila rast bakterij. Gibanje so posneli s pomočjo visoko hitrostnih CMOS kamer in faznokonstrastnim mikroskopom. Slika 9 prikazuje trajektorije bakterij, ki so jih posneli. Vidni so zasuki za 180 stopinj, ki so označeni z zelenimi pikami in obrati za 90 stopinj, ki jih prikazujejo rdeči kvadratici. Obrate so določili na podlagi zaznave nenadne sprememe smeri in hkratnega znižanja hitrosti. Nato so glede na kot med začetno in končno smerjo gibanja razdelili obrate na tiste za 180 in na tiste za 90 stopinj. Pri nadaljnjem opazovanju gibanja posamezne bakterije so opazili značilni vzorec gibanja, ki je sestavljen iz gibanja nazaj, obrata za 180 stopinj, gibanja naprej in nato obrata za 90 stopinj. Kot vzrok za spremembo smeri za 90 stopinj so predlagali nestabilnost kavlja. Ker med plavanjem naprej kavelj stiskata tako telo bakterije, kot tudi biček, lahko sila in navor na kavelj presežeta kritično vrednost in kavelj se zaradi nestabilnosti upogne. Izračunali so, da se to zgodi pri hitrosti plavanja  $V = 51 \mu\text{m}/\text{s}$ , kar je primerljivo s povprečno hitrostjo plavanja, ki pri tipičnih morskih koncentracijah natrija znaša  $47 \mu\text{m}/\text{s}$  [18].



**Slika 9.** Trajektorije gibanja vzorca bakterij *V. alginolyticus* zajetih iz morja in izpostavljenih ceponožnemu raku. Križci označujejo začetek trajektorije, zelene pike obrat za  $180^\circ$ , rdeči kvadratici pa obrat za  $90^\circ$ . Slika iz [18].

Da so preverili odvisnost verjetnosti za obrat od hitrosti plavanja in s tem od sile in navora, ki delujeta na biček, so nadzorovano manjšali koncentracijo natrijevih ionov v vodi z bakterijami. Ker motor deluje zaradi gradienta koncentracije  $\text{Na}^+$ , pri manjših koncentracijah bakterije plavajo počasneje. Pri nižjih hitrostih plavanja sila in navor nista dovolj velika, da bi se bakterija lahko obrnila. Odvisnost verjetnosti za obrat od hitrosti plavanja je prikazana na sliki 10. Verjetnost za obrat so določili na podlagi analize 17061 trajektorij pri različnih koncentracijah  $\text{Na}^+$ , tako, da so pogledali pri koliko trajektorijah se zgodi obrat. Verjetnost se znatno poveča s hitrostjo, pri nizkih hitrostih pa verjetnost pade skoraj na nič. To potrjuje hipotezo, da je vzrok za obrat za 90 stopinj ravno nestabilnost kavlja. Enako obnašanje so opazili tudi pri *Pseudoalteromonas haloplanktis* in *V. coralliilyticus*, ki prav tako za premikanje uporabljata en biček.



**Slika 10.** Verjetnost obrata za  $90^\circ$  v odvisnosti od hitrosti plavanja pri različnih koncentracijah  $\text{Na}^+$ . Prirejeno po [18].

Migetalk, ki so filamenti na eni strani pritrjeni na celico, se zvijajo in tako ustvarijo tok v levo smer, na podlagi česar zarodek loči med levo in desno stranjo [19].

## 9. Zaključek

Model polimera ali filamenta, ki mu na enem koncu vsiljuemo vrtenje, na drugem pa je prost, nam omogoča, da se seznanimo z lastnostmi takšnega gibanja, kar je osnova za raziskovanje kompleksnejših pojavov, ki vključujejo zvijanje filamentov. Ker je model zelo splošen, lahko rezultate apliciramo na mnogo različnih procesov, od delovanja bičkov in migetalk, do zvijanja molekule DNK.

Če želimo naš model aplicirati na biološke pojave, se moramo zavedati njegovih omejitev. Da smo lahko analitično izračunali kritično frekvenco, smo bili primorani narediti vrsto približkov in linearizirati naše enačbe. Ker pa je osnovna lastnost neravnovesne mehke snovi nelinearnost odziva, s takšnim pristopom ne moremo dobro opisati gibanja. Numerične simulacije so zato zelo pomembne pri obravnavi te problematike.

Povezovanje različnih znanosti in razvoj eksperimentalnih tehnik za manipulacijo ene molekule v prihodnosti lahko pomaga pri boljšem razumevanju bioloških procesov, ki vključujejo zvijanje filamentov. To lahko med drugim pripomore k izboljšavi nanomaterialov, ki za delovanje uporabljajo mehanizme, podobne tistim, ki so prisotni v naravi.

## LITERATURA

- [1] A. Goriely in M. Tabor, *The Nonlinear Dynamics of Filaments*, *Nonlinear Dynamics* **21** (2000), 101–133.
- [2] H. Wada in R.R. Netz, *Non-equilibrium hydrodynamics of a rotating filament*, *Europhysics Letters* **74** (2006), 645–651.
- [3] W. Lee, Y. Kim, S.D. Olson, S. Lim, *Nonlinear dynamics of a rotating elastic rod in a viscous fluid*, *Physical Review E* **90** (2014), 033012.
- [4] R.E. Goldstein in S.A. Langer, *Nonlinear dynamics of stiff polymers*, *Physics Review Letters* **75** (1995), 1094–1097.
- [5] J.P. Keener, *Knotted vortex filament in an ideal fluid*, *Journal of Fluid Mechanics* **211** (1990), 629–651.
- [6] H. C. Spruit, *Motion of magnetic flux tubes in the solar convection zone and chromosphere*, *Astronomy and Astrophysics* **98** (1981), 155–160.
- [7] S. Da Silva in A.R. Choudhuri, *A theoretical model for tilts of bipolar magnetic regions*, *Astronomy and Astrophysics* **272** (1993), 621–633.
- [8] L.D. Landau in E.M. Lifshitz, *Theory of Elasticity*, Butterworth Heinemann, 1986.
- [9] C.W. Wolgemuth, T.R. Powers, R.E. Goldstein, *Twirling and whirling: Viscous dynamics of rotating elastic filaments*, *Physics Review Letters* **84** (2000), 1623–1626.

- [10] S. Lim in C.S. Peskin, *Simulations of the Whirling Instability by the Immersed Boundary Method*, SIAM Journal on Scientific Computing **25** (2004), 2066–2083.
- [11] S. Komura in T. Ohta, *Non-Equilibrium Soft Matter Physics*, World Scientific Publishing, 2012.
- [12] T.R. Powers, *Dynamics of filaments and membranes in viscous fluid*, Reviews of Modern Physics **82** (2010), 1607–1631.
- [13] S.A. Koehler in T.R. Powers, *Twirling Elastica: Kinks, Viscous Drag, and Torsional Stress*, Physics Review Letters **85** (2000), 4827–4830.
- [14] T.S. Yu, E. Lauga, A.E. Hosoi, *Experimental investigations of elastic tail propulsion at low Reynolds number*, Physics of Fluids **18** (2006), 091701.
- [15] B. Quian in T.R. Powers, *Shape Transition and Propulsive Force of an Elastic Rod Rotating in a Viscous Fluid*, Physics Review Letters **100** (2008), 078101.
- [16] J. Happel in H. Brenner, *Low Reynolds Number hydrodynamics*, Noordhoff, 1973.
- [17] R.E. Goldstein, T.R. Powers, C.H. Wiggins, *Viscous nonlinear dynamics of twist and writhe*, Physics Review Letters **80** (1998), 5232–5235.
- [18] K. Son, J.S. Guasto, R. Stocker, *Bacteria can exploit a flagellar buckling instability to change direction*, Nature Physics **9** (2013), 494–499.
- [19] N. Hirokawa, Y. Tanaka, Y. Okada, S. Takeda, *Nodal Flow and the Generation of Left-Right Asymmetry*, Cell **125** (2006), 33–45.