

干活性物质的动力学理论

陈雷鸣

Hydrodynamic theory of dry active matter

Chen Lei-Ming

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 65, 186401 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.186401

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.186401>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I18>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

微粗糙结构表面液滴浸润特性的多体耗散粒子动力学研究

Drops on microstructured surfaces: A numerical study using many-body dissipative particle dynamics

物理学报.2015, 64(5): 054701 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.054701>

基于蚯蚓背孔射流的仿生射流表面减阻性能研究

Characteristics on drag reduction of bionic jet surface based on earthworm's back orifice jet

物理学报.2015, 64(2): 024701 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.024701>

带自由面流体的多体耗散粒子动力学模拟

The study of fluid with free surface by many-body dissipative particle dynamics

物理学报.2014, 63(8): 084701 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.084701>

有结构壁面上液滴运动特征的耗散粒子动力学模拟

Movement of a droplet on a structured substrate: A dissipative particle dynamics simulation study

物理学报.2013, 62(13): 134701 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.134701>

均匀流中近壁面垂直流向振荡圆柱水动力特性研究

Hydrodynamic characters of a near-wall circular cylinder oscillating in cross flow direction in steady current

物理学报.2013, 62(6): 064701 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.064701>

专题: 软物质研究进展

干活性物质的动力学理论*

陈雷鸣†

(中国矿业大学理学院, 徐州 221116)

(2016年8月5日收到; 2016年9月9日收到修改稿)

活性物质是融合非平衡态统计物理、软物质物理和生命科学的新兴交叉学科, 近几年取得了飞速的发展. 本文简短回顾了“干”活性物质的理论研究进展, 从统计物理的角度, 围绕有序性、有序-无序相变和粒子数涨落这几个问题对极性和非极性系统的连续体理论做了重点介绍, 并讨论了理论预测和数值以及实验结果之间的关系.

关键词: 活性物质, 流体动力学, 相变

PACS: 64.70.qj, 87.18.Gh, 47.10.-g, 05.70.Ln

DOI: 10.7498/aps.65.186401

1 引言

活性物质领域所研究的非平衡现象和体系在自然界中广泛存在, 特别是在生命现象中扮演着重要的角色. 随着物理学家对生命系统的研究日益关注, 活性物质作为非平衡态统计物理、软物质物理和生命科学的新兴交叉学科, 近二十年取得了飞速的发展.

活性物质所包含的系统很广, 大到宏观上的鸟群、鱼群、陆地上的动物群落, 小至自由游动的细菌

形成的细菌群落、生长迁移的上皮细胞皮层、细胞内部的细胞骨架等. 这些系统所具有的共同特点可以用来定义活性物质: 它是自然界中广泛存在的一种非常典型的非平衡态系统, 它由大量活性粒子组成, 这些活性粒子通过将其他形式的能量转化为动能, 获得自我推进的能力^[1]. 由于粒子与粒子、粒子与媒介之间的相互作用, 整个系统能够在宏观上表现出异常丰富的动力学现象(见图1). 从物理的角度去解释这些生命系统中的现象是十分独到、新颖和有趣的, 因此, 吸引了越来越多的物理工作者投入到这个领域的研究中来.

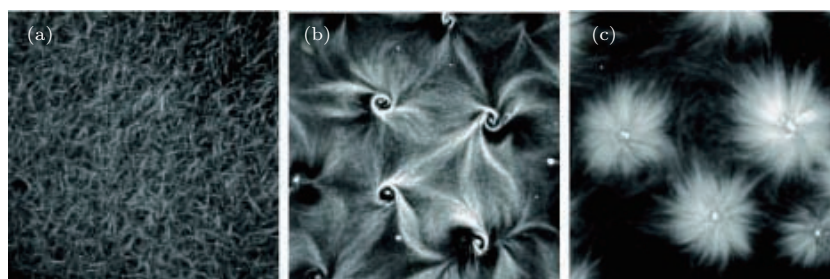


图1 固定在基板上的微丝体系随着肌球蛋白浓度增加(从左到右递增)形成的集体动力学行为^[2]

(a) 无序; (b) 螺旋形; (c) 星形

Fig. 1. Microtubule pattern organized in vitro by the action of multimeric kinesin^[2]: (a) Disorder; (b) spiral; (c) aster.

* 国家自然科学基金(批准号: 11474354)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: leiming@cumt.edu.cn

根据系统动量是否守恒、活性物质可分为“干”和“湿”两大类. 系统动量不守恒的活性物质称为“干”活性物质, 反之则称为“湿”活性物质. 在“干”活性物质中, 活性粒子运动于固定的表面或多孔的媒介中, 由于活性粒子与表面或媒质之间的摩擦作用, 系统(活性粒子)的动量不守恒, 具体例子包括固定表面上运动的细菌群落^[3], 陆地上的动物群^[4], 还有一些人造系统, 如平板上的振动颗粒等^[5-10]. 在“湿”活性物质中, 活性粒子通常处于某种流体中, 系统总动量(活性粒子和流体的动量之和)是守恒的. 在有些情况下, “湿”活性物质中流体的动力学作用可以忽略, 系统的集群运动行为仍可以用“干”活性物质的动力学理论来描述. 例如液体中游动的细菌群, 与细菌之间的长程流体动力学相互作用相比, 细菌之间的短程相互作用和系统噪声极有可能占主导地位^[11]; 再如在鸟群中, 鸟与鸟之间的长程相互作用也可以忽略^[12], 取而代之的是所谓的metric-free短程相互作用^[13]. 还有一类活性物质系统介于“干”和“湿”之间, 例如, 夹在两块挨得很近的平板之间的细菌溶液, 如果我们关注的是大尺度(远远大于平板之间的距离)的动力学行为, 这个系统可以看作是二维的系统, 由于平板与溶液之间的摩擦作用, 系统总动量(细菌和流体的动量之和)不守恒, 我们可以称这一类活性物质为“双成分‘干’活性物质”; 另外的一个例子是二维活性胶体溶液^[14]. 本文所回顾的主要是“单成分‘干’活性物质”的动力学理论研究进展.

根据活性粒子自身的结构和活性粒子之间相互作用的对称性, 活性物质可以划分为极性和非极性两大类. 极性活性物质由头尾可以区分、具备自我推进能力的活性粒子(极性活性粒子)组成, 如鸟群、鱼群、细菌群落等, 活性粒子之间存在近邻的趋同作用, 即近邻的活性粒子倾向于沿相同的方向运动, 这种趋同作用与系统噪声是相互竞争的关系. 当噪声处于主导地位时, 系统处于指向无序的状态, 粒子运动方向随机, 系统整体没有定向移动; 当趋同作用处于主导时, 系统处于指向有序的状态, 粒子平均速度不为零, 系统产生整体运动. 就对称性而言, 这两种状态类似于铁磁体中的顺磁态和铁磁态. 极性活性物质的卡通图见图2, 图中极性粒子由单箭头表示, 箭头指向代表粒子运动方向. Vicsek模型^[15]是最简单的极性活性物质微观模型. 非极性活性物质可以由头尾不可区分的非极

性活性(细长)粒子组成(如黑色素细胞^[16]), 也可以由(细长)极性活性粒子组成, 这些粒子的速度沿着长轴的指向, 如自我推进的小硬杆^[17-19], 这两种情况下粒子之间的相互作用是非极性的, 它倾向于使粒子的长轴取向相互平行. 当非极性活性系统处于有序相时, 具备向列型液晶的指向有序性. 非极性活性物质的卡通图同样见图2, 图中非极性粒子由双箭头表示.

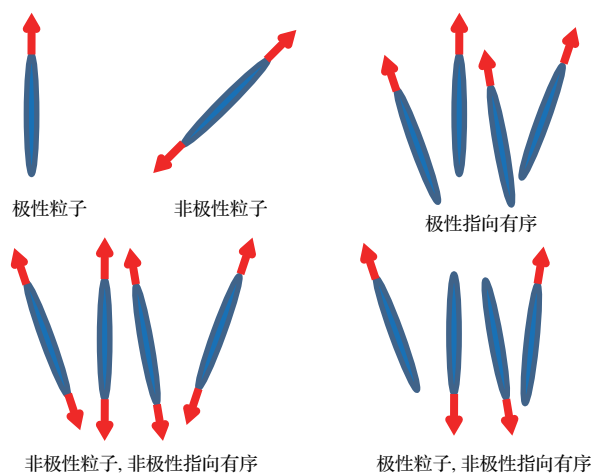


图2 活性粒子和活性物质卡通图

Fig. 2. Illustration of the various types of active particles and ordered phases.

2 动力学理论模型

2.1 极性“干”活性物质的动力学理论——Toner-Tu理论模型

Toner-Tu理论模型描述的是极性“干”活性物质在大的时间和空间尺度上表现出来的动力学行为^[4,20,21], 这个理论的建立受到了极性“干”活性物质的最简微观模型——Vicsek模型^[15]的启发. 在Vicsek模型中, 系统由大量具有自我推进能力、运动速率恒定但运动方向可以自由改变的活性粒子组成, 并且近邻粒子之间存在排序作用(即倾向于沿同一方向运动), 但这种排序存在误差(系统噪声). Vicsek模型对二维系统的计算机模拟表明, 当粒子数密度比较低或系统噪声比较大时, 系统处于指向无序的状态; 当粒子数密度比较高或系统噪声比较小时, 系统处于指向有序的状态, 能够产生整体的定向移动. 这个结果和平衡态系统的结果形成了鲜明的对比, 众所周知, 由Mermin-Wagner定理^[22], 处于各向同性环境中的二维平衡态系统不能形成真正的长程有序, 例如, 在没有外场作用

的情况下,有限温度下的二维XY模型不能产生长程指向有序.为了解释这种差异,Toner和Tu采用唯象的思想方法,完全基于对称性推导出极性“干”活性物质的连续体理论模型.这个理论模型定义了活性物质的一个普适类,凡是属于这个普适类的系统,无论微观细节如何,它的宏观动力学都适用Toner-Tu理论模型来描述.在这点上Toner-Tu理论模型和Navier-Stokes(NS)方程很相似,后者同样定义了一个普适类,只要是流体,不论它是水还是油,或是由其他分子组成,系统的宏观动力学都由NS方程来描述,微观上的差异则体现在方程中参数(如黏滞系数)的取值上.Toner-Tu理论模型也可以通过微观模型(如Vicsek模型)进行粗粒化得到^[23-25],这种推导方式的优点是能够把连续体理论中的参数与微观模型的具体微观细节定量联系起来,但是执行难度大,对微观细节复杂的系统可行性不高.而唯象的思想方法完全忽略微观细节,推导过程非常简洁,但无法建立连续体理论模型与微观模型之间的定量联系.接下来我们从唯象的角度介绍Toner-Tu理论模型.

Toner-Tu理论模型由两个动力学方程组成,这类方程所涉及的动力学变量是“慢”变量:这些变量的长波部分的弛豫时间在长波极限下趋于无穷大.动力学变量有两类,一类是守恒量的密度,另一类则与系统自发对称破缺相关.对于极性“干”活性物质,系统动量不守恒,总粒子数是惟一的守恒量(假定活性粒子不会凭空产生或消失),因此,粒子数密度 $\rho(t, \mathbf{r})$ 是动力学变量,这里的 t 和 \mathbf{r} 分别代表时间和空间的坐标.另外,极性活性物质从指向无序到指向有序转变时,粒子的平均速度由零变为非零,该速度的方向由系统随机选定,因此,粒子速度 $\mathbf{v}(t, \mathbf{r})$ (确切地说,粒子速度在与平均速度垂直的平面内的分量)是与自发对称破缺相关的动力学变量.关于这两个动力学量的两个动力学方程由以下两个式子给出:

$$\begin{aligned} & \partial_t \mathbf{v} + \lambda_1 (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} + \lambda_2 \mathbf{v} (\nabla \cdot \mathbf{v}) + \lambda_3 \nabla (v^2) \\ & = \alpha \mathbf{v} - \beta v^2 \mathbf{v} - \nabla P + D_B \nabla (\nabla \cdot \mathbf{v}) \\ & \quad + D_T \nabla^2 \mathbf{v} + D_2 (\mathbf{v} \cdot \nabla)^2 \mathbf{v} + \mathbf{f}_p, \end{aligned} \quad (1)$$

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \quad (2)$$

其中 P 代表压强, \mathbf{f}_p 代表系统噪声,它的统计规律由下式表示:

$$\langle f_{pi}(t, \mathbf{r}) f_{pj}(t', \mathbf{r}') \rangle = \Delta_p \delta_{ij} \delta^d(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t'),$$

其中 Δ_p 为噪声强度.方程(1)中各项的系数都是 ρ 和 $|\mathbf{v}|$ 的函数.方程(2)是大家熟悉的连续性方程,来自于粒子数守恒.

方程(1)的推导主要基于对称性.当系统处于各向同性的环境中时,系统的动力学演化规律与系统所处的位置和方位无关,因此,方程(1)必须具备平移不变性和旋转不变性,这意味着,假如 $\mathbf{v}(t, \mathbf{r})$ 满足方程(1),那么将系统进行整体平移或旋转后(相应地, $\mathbf{v}(t, \mathbf{r}) \rightarrow \mathbf{v}'(t, \mathbf{r}')$), $\mathbf{v}'(t, \mathbf{r}')$ 必须仍然满足方程(1).另外还有这样一条规则,因为我们关注的是系统在大尺度上表现出来的行为,与此相关的仅是 $\mathbf{v}(t, \mathbf{r})$ 和 $\rho(t, \mathbf{r})$ 的长波部分,对于这部分自由度,对 $\mathbf{v}(t, \mathbf{r})$ 或 $\rho(t, \mathbf{r})$ 的求导次数越多,所得的结果越小,因此,如果动力学方程中有这样两项,它们的 $\mathbf{v}(t, \mathbf{r})$ 和 $\rho(t, \mathbf{r})$ 的幂次相同,那么求导次数多的那一项可以忽略.对 $\mathbf{v}(t, \mathbf{r})$ 的动力学方程中应用上述规则,并仅保留满足对称性要求的项,最终得到方程(1).

方程(1)与NS方程是相同类型的动力学理论,由于描述的系统不同,两者在形式上存在差异.方程(1)只在特定的参考系中才成立,它所描述的“干”活性物质中处在固定的表面上或媒介之中,并且活性粒子与固定表面或媒介之间有相互作用,它所选择的参考系是这些表面或媒介,因此,方程(1)不满足伽利略不变性.而NS方程满足伽利略不变性,它在任何参考系中都成立.因此,由于没有“伽利略不变性”的约束,方程(1)比NS方程多出了好几项,例如以 $\lambda_{2,3}$, α , β 为系数的这几项,其中 α , β 为系数的两项很重要,它们能够解释为什么极性活性物质能发生指向无序-指向有序(即,整体静止-整体定向移动)转变,而普通流体则不能.

在平均场近似下,忽略系统涨落,取决于 α 取值的不同,方程(1)对应两种截然不同的稳态.为了保证系统的速度不会趋于无穷大, $\beta > 0$ 必须得到满足.当 $\alpha < 0$ 时,只要速度不为零,系统总是处于减速状态,因此系统的稳态位于 $\mathbf{v} = \mathbf{0}$,这对应系统的无序相;当 $\alpha > 0$ 时,如果 $0 < |\mathbf{v}| < \sqrt{\alpha/\beta}$,系统处于加速状态,如果 $|\mathbf{v}| > \sqrt{\alpha/\beta}$,系统处于减速状态,因此系统的稳态位于 $|\mathbf{v}| = \sqrt{\alpha/\beta}$,这对应系统的有序相.由此可见,平均场理论预测的相变临界点位于 $\alpha = 0$ 处,并且序参量(系统的平均速度)在临界点处是连续变化的,因此该相变是连续相变.

然而, 如果进一步将系统涨落以及的取值对的依赖性考虑在内, 对方程(1)和(2)采用线性近似可以证明, 从有序相一侧接近临界点的过程中(即 $\alpha \rightarrow 0^+$), 系统中粒子均匀分布的状态会变得不稳定, 这与基于微观模型的理论计算结果相一致^[23,24]. 基于动力学方程(1)和(2)的数值解也发现^[24,26], 有序相一侧接近临界点处粒子密度分布均匀的有序相消失, 取而代之的是密度分布成带状结构的状态. 基于Vicsek模型的计算机模拟也在临界点附近位于有序相的一侧观察到了带状的密度分布结构^[27,28], 如图3所示. 这些研究结果表明, 极性“干”活性物质中指向有序态和指向无序态之间的相变应当是不连续相变. 由于密度分布的失稳是该相变不连续的原因, 抑制这种不稳定性应该能够实现连续相变. 最近关于不可压缩极性“干”活性物质的动力学理论论证了该连续相变的可能性并计算了其临界指数^[29], 这个预测还有待实验或基于微观模型的计算机模拟来验证.

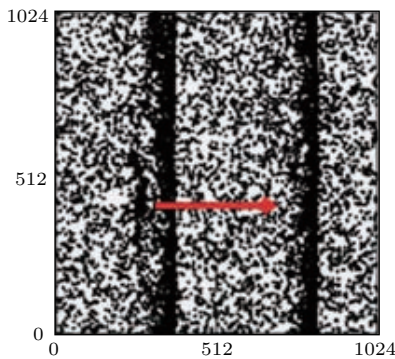


图3 Vicsek模型在有序相一侧接近临界点出呈现出的带状结构, 图中箭头代表粒子整体运动方向^[30]
 Fig. 3. The band structure in the simulation of the Vicsek model in the orientationally ordered phase. The arrow points along the global motion of the particles^[30].

Toner-Tu理论有两个很重要的预测, 都是针对极性“干”活性物质的指向有序相提出的. 其中的一个预测是活性物质系统中存在粒子数巨涨落现象, 即指活性物质系统中的粒子数涨落比平衡态系统中的大. 这个结论可以通过对方程(1)和(2)做线性近似、进行一些简单的计算得出. 将方程(1)和(2)在系统有序相的稳态附近做线性展开, 仅保留线性项, 由此很容易算出静态结构因子, 进而可以得到某个区域内粒子数涨落满足的标度关系:

$$\Delta N \sim \langle N \rangle^a, \quad a = \frac{1}{2} + \frac{1}{d}, \quad (3)$$

其中 $\langle N \rangle$ 为该区域的平均总粒子数, ΔN 为标准偏差, d 为系统所处空间的维数. 当系统处于二维空间(即 $d = 2$), (3)式意味着 $\Delta N \sim \langle N \rangle!$ 这与大家熟知的平衡态系统的结果形成鲜明的对比, 在平衡态系统中, $a = 0.5$, $\Delta N \sim \sqrt{\langle N \rangle}$.

(3)式仅是线性近似的结果, 在二维的情况下运用重整化群理论能够求出 a 的精确值: $a = 0.8$ ^[4,20,21], 这个值比线性近似的结果小, 但仍然明显比平衡态系统的 a 值大. 活性物质中的粒子数巨涨落现象已经在颗粒物质的振动实验和细菌实验中得到了证实, 极性颗粒物质的振动实验测得 $2a = 1.45 \pm 0.05$ ^[11], 细菌实验^[31](见图4)测得 $a = 0.75$, 这些结果与理论值 $a = 0.8$ 都是比较接近的. 也在Vicsek模型的计算机模拟中观测到了粒子数巨涨落现象^[28,30,32]. 要彻底了解这种现象的产生机理还需要付出更多的努力, 原来认为粒子数巨涨落是有序相所特有的现象, 后来又发现了一些能导致活性物质在无序相产生粒子数巨涨落的机理^[33-35].

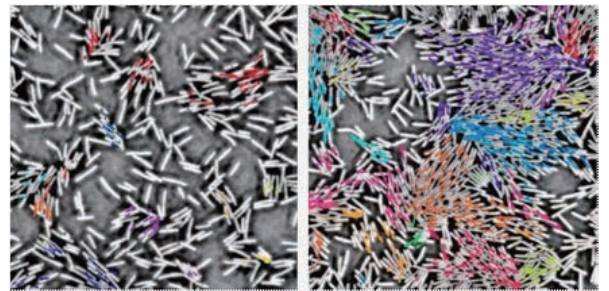


图4 游动的细菌表现出很强的极性指向有序^[31] 低密度时(左图)的粒子数涨落比高密度时(右图, 图中细菌个数为718)的小; 高密度时的粒子数涨落指数是0.75, 明显大于比平衡态系统的涨落指数0.5

Fig. 4. Swimming bacterial exhibit strong polar orientational order^[31]. The number fluctuations are smaller at low density (left frame) than at high density (right frame). The number fluctuation exponent, which is defined in Eq. (3), is 0.75 at high density, substantially larger than 0.5 obtained for an equilibrium system.

Toner-Tu理论的另一个很重要的预测是处于二维空间的极性“干”活性物质的有序相具备长程指向有序. 然而, 在对称性上与极性“干”活性物质对应的铁磁模型—XY模型, 由Mermin-Wagner定理, 在二维的情况下不能形成长程指向有序, 它的有序相只具备“准”长程指向有序. 之所以这两个系统能产生这么明显的差异是因为极性“干”活性物质属于非平衡态系统, 而XY模型属于平衡态

系统, 这一点在两者的理论模型中能够体现出来. 方程 (1) 与 XY 模型的动力学方程——含时金兹堡-朗道方程相比, 除了压强那一项以外, 方程 (1) 中多出了系数为 $\lambda_{1,2,3}$ 的非线性项, 这种形式的项是无法在平衡态系统的动力学方程中出现的. 在二维的情况下, 真正关键性的差异来自系数为 λ_1 的那一项 (此时 λ_2 那一项自然消失), 如果这一项不存在, 方程 (1) 和 (2) 得出的序参量在有序相的涨落是随系统尺寸增大呈对数发散, 这意味着与 XY 模型一样的结果, 即准长程的指向有序; 当这一项存在时, 运用重整化群标度理论仍然可以巧妙精确地推算出序参量关联函数的标度指数 [4], 由此可以进一步计算序参量的涨落, 得到的结果是有限的, 这表明系统具备长程指向有序. 在三维的情形下, 方程 (1) 中系数为 λ_2 的那一项的存在使得该理论模型的求解变得非常复杂, 目前还没有确切的结果. Toner-Tu 理论对二维活性物质序参量关联函数的标度行为、声波传播模式等的预测得到了基于微观模型的计算机模拟的验证, 结果符合得很好 [36].

总的来说, Toner-Tu 理论很好地解释了实验上和数值模拟中所观测到的一些现象. 这套理论方法主要适用于宏观上粒子分布比较均匀的“有序相”, 这通常需要在粒子数密度比较高的系统中才能实现. 对于粒子数密度比较小的系统, 观测到的序参量和粒子数涨落行为可能与理论的预测结果有比较大的差异 [27]. Toner-Tu 理论还被应用到一些比较特殊的极性“干”活性物质系统, 如粒子数不守恒的系统 [37]、不可压缩的系统 [38], 得到了一些很有趣的结果.

2.2 非极性“干”活性物质的动力学理论

非极性活性物质能够形成的最简单的序是向列序, 当进入有序相时, 系统中粒子的长轴取向相互平行. 不过与极性活性物质不同, 由于系统不显极性, 非极性活性物质系统不可能产生整体的定向移动, 所以从表面上看, 非极性活性物质的有序相与平衡态系统的向列相似乎没有区别, 但理论研究却发现这两个系统中的粒子数涨落有着很大的区别 [5], 后来的实验研究 [8] 和数值模拟 [32,39] 也都证实了这一点. 与极性“干”活性物质的动力学理论模型一样, 非极性“干”活性物质的动力学理论模型可以直接用唯象的思想方法推导得出 [40], 也可以从微观模型出发经过粗粒化得到 [41-44]. 不过在理

论模型的求解方面, 非极性活性物质所取得的进展不如极性活性物质的丰富. 接下来介绍非极性“干”活性物质的动力学理论模型.

对于非极性“干”活性物质, 系统的动力学变量是粒子数密度 $c(\mathbf{r}, t)$ 和序参量 $Q(\mathbf{r}, t)$, 前者是守恒量的密度, 因此是“慢”变量, 后者则是“系统自发对称破缺”产生的“慢变量”. 序参量 $Q(\mathbf{r}, t)$ 是个张量, 对于单轴的 d 维系统, 该张量用矩阵表示为

$$Q = [\hat{n}\hat{n} - (1/d)] S,$$

其中 \hat{n} 是沿粒子长轴方向的单位矢量, S 代表系统有序的程度, 它的值越大, 有序性越高.

前面在极性“干”活性物质部分给出的动力学方程 (1) 和 (2) 是一个比较统一的形式, 对有序相和无序相都能适用, 它可以作为有序-无序相变模型 (不过这个模型很难求解), 将它在有序相的稳态附近展开也可以得到有序相的理论模型. 而这里主要回顾非极性“干”活性物质有序相 (活性向列相) 的动力学理论, 不涉及无序和有序之间的转变问题, 因此接下来给出的动力学方程仅适用于有序相.

首先, 由粒子数守恒得到

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{j} = -\nabla \cdot (c\mathbf{v}), \quad (4)$$

上式中粒子流密度 $\mathbf{j} = c\mathbf{v}$, \mathbf{v} 代表 (粗粒化的) 粒子速度. 对于非极性“干”活性物质, 动量不守恒, 并且 \mathbf{v} 也不是序参量, 因此 \mathbf{v} 是一个“快”变量, 在后面的推导过程中它将被写成 c 和 Q 的表达式, 从而从动力学方程中消去.

接下来对动量密度 $m\mathbf{j}$ 应用牛顿第二定律:

$$m \frac{\partial \mathbf{j}}{\partial t} = -\Gamma \mathbf{v} - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{f} \\ = -\Gamma \mathbf{v} - w_0 \nabla c - w_1 \nabla \cdot (Qc) + \mathbf{f}_a, \quad (5)$$

其中 Γ 项 (>0) 代表活性物质与固定表面或媒介之间的摩擦作用所带来的动量损耗, $\boldsymbol{\sigma}$ 是应力张量, 包含了粒子之间的相互作用, 其中 w_0 项类似于压强的效果, w_1 项是活性向列相区别于平衡态向列相的关键部分, 它表明序参量分布的不均匀性导致局部的极性, 从而引发粒子的流动 (如图 5 所示), \mathbf{f}_a 是随机高斯白噪声. 方程 (5) 中第二个等式右边仅保留了最重要的项, 例如, 系统对称性所允许的其他所有含有 \mathbf{v} 的项与 Γ 项相比, 都被忽略了, 因为这些项要么含有 \mathbf{v} 的更高次幂, 要么出现更多次的求导.

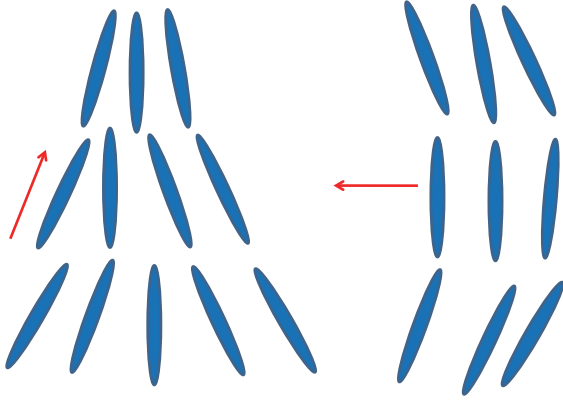


图5 非极性系统中活性粒子取向的不均匀导致局部显极性, 从而粒子的活性必然引发粒子流

Fig. 5. Inhomogeneities in the nematic order generate polarity. Then activity necessarily gives rise to a current.

因为这里关注的是非极性“干”活性物质处于有序相时的理论模型, 假定系统处于远离临界点的活性向列相, 那么序参量的大小 S 可以近似为常量, 因此序参量的涨落主要来自粒子长轴取向 \hat{n} 的变化. 定义粒子长轴的平均取向为 \hat{z} , 垂直于 \hat{z} 的方向为“ \perp ”, 将 \hat{n} 关于 \hat{z} 展开, 记作 $\hat{n} = \hat{z} + \delta\mathbf{n}$. 由于 \hat{n} 是单位矢量, 由几何关系得到 $\delta n_z \sim |\delta\mathbf{n}_\perp|^2$, 因此, $\delta n_z \ll |\delta\mathbf{n}_\perp|^2$, \hat{n} 的涨落中由 $\delta\mathbf{n}_\perp$ 主导. 通过简单的推导可以证明, 活性向列相与平衡态向列型液晶的 $\delta\mathbf{n}_\perp$ 满足的动力学方程形式相同, 均由下式给出:

$$\partial_t \delta\mathbf{n}_\perp = \lambda_+ \partial_z \mathbf{v}_\perp + \lambda_- \nabla_\perp v_z + K_1 \nabla_\perp (\nabla_\perp \cdot \delta\mathbf{n}_\perp) + K_2 \nabla_\perp^2 \delta\mathbf{n}_\perp + K_3 \partial_z^2 \delta\mathbf{n}_\perp + \mathbf{f}_{a\perp}, \quad (6)$$

上式中 $\lambda_\pm = (\lambda \pm 1)/2$, λ 是所谓的“流动排序参数”, $K_{1,2,3}$ 是 Frank 自由能中的弹性系数, $\mathbf{f}_{a\perp}$ 是随机噪声在“ \perp ”平面内的分量, 它的统计规律可以表示为

$$\langle f_{ai}^\perp(\mathbf{r}, t) f_{aj}^\perp(\mathbf{r}', t') \rangle = \delta_{ij} \Delta_a \delta^d(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t'),$$

上式中 f_{ai}^\perp 表示 $\mathbf{f}_{a\perp}$ 在“ \perp ”平面内沿 i 方向的分量, Δ_a 是噪声强度.

在长时间尺度极限下, 方程(5)中的 $\partial\mathbf{j}/\partial t$ 与 $-\Gamma\mathbf{v}$ 相比可以忽略, 于是 \mathbf{v} 可以当作未知数进行求解, 写成 c 和 $\delta\mathbf{n}_\perp$ 的表达式, 代入方程(5)和(6)中, 并将粒子数密度在平均值附近展开: $c(\mathbf{r}, t) = c_0 + \delta c(\mathbf{r}, t)$. 经过以上这道工序, 如果仅保留线性项, 将获得下面两个动力学方程

$$\frac{\delta c}{\partial t} = (D_z \partial_z^2 + D_\perp \nabla_\perp^2) \delta c + 2c_0 \alpha \partial_z (\nabla_\perp \cdot \delta\mathbf{n}_\perp)$$

$$+ \nabla \cdot \mathbf{f}_c, \quad (7)$$

$$\frac{\partial \delta\mathbf{n}_\perp}{\partial t} = (K_z \partial_z^2 + K_\perp \nabla_\perp^2 + K'_L \nabla_\perp \nabla_\perp \cdot) \delta\mathbf{n}_\perp + D_{cn} \partial_z \nabla_\perp \delta c + \mathbf{f}_{a\perp}, \quad (8)$$

上面两式中的 \mathbf{f}_c 和各系数由方程(5)和(6)中的系数决定. 要得到完整的理论模型, 方程(7)和(8)中还应包含非线性项. 对于平衡态的向列型液晶, 方程(8)中的非线性项不会定性改变线性理论的结果, 这意味着二维的平衡态向列型液晶具备准长程的指向有序性, 遵循 Mermin-Wagner 定理. 对于活性向列相, 方程(8)中包含更多的非线性项, 这些项能否像极性“干”活性物质的理论模型中的非线性项一样, 定性改变线性理论的结果, 使系统获得长程指向有序? 这需要对这个理论模型做一个系统全面的重整化群计算, 这个任务很艰巨, 目前还没有这方面的尝试.

基于方程(7)和(8)可以预测系统的粒子数涨落情况. 计算结果发现, 对于二维的非极性“干”活性物质, 给定体积内粒子数的标准偏差正比于该体积内的平均粒子数, 即 $\Delta N \sim \langle N \rangle$, 这意味着 $a \sim 1.0$ (请参见(3)式中对 a 的定义), 这表明系统的粒子数巨涨落现象非常明显. 这么巨大的涨落应该可以在生命系统的实验中观测到, 例如, 二维的非极性活性物质可以通过将高浓度的黑素细胞悬浮液散播到某个平面衬底上形成^[45], 不过到目前为止还没有进行过这样的尝试. 在单层头尾对称的微米尺寸的小铜线振动实验中测得 $a \sim 1.0$ ^[8], 这与上述线性理论的结果符合得很好, 为活性向列相中存在粒子数巨涨落提供了有力的证据, 不过对这个实验现象的解释尚存在一些争议^[46,47]. 也在对非极性活性物质微观模型的计算机模拟中观测到了粒子数巨涨落现象^[32].

3 结论与展望

本文对“干”活性物质的动力学理论(主要是连续体理论)的研究进展做了一个简短的回顾, 尽管涉及的内容仅仅是活性物质研究领域的冰山一角, 我们也能看到在过去二十年中, 活性物质研究在理论上和实验上都取得了很大的进展, 同时也遗留了许多重要的或有趣的前沿问题. 这里列出两个与本文所介绍的动力学理论密切相关的问题以供读者参考.

目前为止对活性物质有序相的研究主要针对具备指向有序性的相,然而就对称性而言,所有平衡态系统中存在的物相类型,如各种液晶和晶体,都可能在活性物质中出现,因此,过去研究各种平衡态物相所关注的科学问题同样适用于活性物质,由此带来的研究课题将是非常丰富的.最近,活性层列型液晶和活性晶体的解析理论研究和数值模拟已经取得了一些进展^[48–50].

相变是物理学中一个经久不衰的研究主题,人们对平衡态系统中的相变已经进行了大量的研究,活性物质中各种物相类型之间的转变属于非平衡态相变,它们的普适规律在当前应当更具有探索的价值.本文所介绍的连续体理论在这方面应当有很好的应用.极性“干”活性物质系统中的指向有序-指向无序相变是目前为止活性物质系统中研究得最多的相变,计算机模拟和数值研究显示该相变属于不连续相变^[23,24,26–28],这个结论已被广泛接受,不过关于这个相变的一些标准化的理论工作,如重整化群计算,目前还没有开展.

相信任何一位对活性物质感兴趣的研究者都可以列出一串自己认为重要的前沿问题,很可能这些问题比本文列举的更有趣、更有科学意义,毕竟活性物质包含的研究内容是如此丰富、新颖和有趣.作为软凝聚态物理的一个新兴研究方向,活性物质的研究方兴未艾,它开辟了从统计物理学的角度去研究生命体系和复杂多体非平衡体系的新方向,这不仅能给物理知识带来极大的创新,同时在开发智能材料、药物运输等方面也有巨大的应用价值.希望能有更多科技工作者加入到活性物质的研究中来.

感谢苏州大学软凝聚态物理及交叉研究中心施夏清老师的讨论.

参考文献

- [1] Schweitzer F 2003 *Brownian Agents and Active Particles: Collective Dynamics in the Natural and Social Sciences* (Berlin: Springer)
- [2] Surrey T, Nédélec F, Leibler S, Karsenti E 2001 *Science* **292** 1167
- [3] Wolgemuth C, Hoiczyk E, Kaiser D, Oster G 2002 *Curr. Biol.* **12** 369
- [4] Toner J, Tu Y 1998 *Phys. Rev. E* **58** 4828
- [5] Ramaswamy S, Simha R A, Toner J 2003 *Europhys. Lett.* **62** 196

- [6] Yamada D, Hondou T, Sano M 2003 *Phys. Rev. E* **67** 040301
- [7] Aranson I S, Tsimring L S 2006 *Phys. Rev. E* **74** 031915
- [8] Narayan V, Ramaswamy S, Menon N 2007 *Science* **317** 105
- [9] Kudrolli A, Lumay G, Volfson D, Tsimring L S 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 058001
- [10] Deseigne J, Dauchot O, Chate H 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 098001
- [11] Drescher K, Dunkel J, Cisneros L H, Ganguly S, Goldstein R E 2011 *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **108** 10940
- [12] Ballerini M, Cabibbo N, Candelier R 2008 *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **105** 1232
- [13] Ginelli F, Chate H 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 168103
- [14] Bricard A, Caussin J B, Desreumaux N, Dauchot O, Bartolo D 2013 *Nature* **503** 95
- [15] Vicsek T, Czirok A, Ben-Jacob E, Cohen I, Shochet O 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 1226
- [16] Gruler H, Dewald U, Eberhardt M 1999 *Eur. Phys. J. B* **11** 187
- [17] Peruani F, Deutsch A, Bar M 2006 *Phys. Rev. E* **74** 030904
- [18] Baskaran A, Marchetti M C 2008 *Phys. Rev. E* **77** 011920
- [19] Yang Y, Marceau V, Gompper G 2010 *Phys. Rev. E* **82** 031904
- [20] Toner J, Tu Y 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 4326
- [21] Toner J, Tu Y, S Ramaswamy 2005 *Ann. Phys.* **318** 170
- [22] Mermin N D, Wagner H 1966 *Phys. Rev. Lett.* **17** 1133
- [23] Bertin E, Droz M, Gregoire G 2006 *Phys. Rev. E* **74** 022101
- [24] Bertin E, Droz M, Gregoire G 2009 *J. Phys. A* **42** 445001.
- [25] Ihle T 2011 *Phys. Rev. E* **83** 030901
- [26] Mishra S, Baskaran A, Marchetti M C 2010 *Phys. Rev. E* **81** 061916
- [27] Gregoire G, Chate H 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 025702
- [28] Chate H, Ginelli F, Gregoire G, Raynaud F 2008 *Phys. Rev. E* **77** 046113
- [29] Chen L, Toner J, Lee C F 2015 *New J. Phys.* **17** 042002
- [30] Chate H, Ginelli F, Gregoire G, Peruani F, Raynaud F 2008 *Eur. Phys. J. B* **64** 451
- [31] Zhang H P, Beer A, Florin E L, Swinney H L 2010 *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **107** 13626
- [32] Chate H, Ginelli F, Montagne R 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 180602
- [33] Tailleur J, Cates M E 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 218103
- [34] Cates M E 2012 *Rep. Prog. Phys.* **75** 042601
- [35] Fily Y, Baskaran A, Marchetti M C 2012 *Soft Matter* **8** 3002
- [36] Tu Y, Ulm M, Toner J 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 4819
- [37] Toner J 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 088102
- [38] Chen L, Toner J, Lee C F 2016 *Nature Communications* **7** 12215
- [39] Mishra S, Ramaswamy S 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 090602
- [40] Simha R A, Ramaswamy S 2002 *Phys. Rev. Lett.* **89** 058101
- [41] Ahmadi A, Marchetti M C, Liverpool T B 2006 *Phys. Rev. E* **74** 061913

- [42] Mishra S 2009 *Ph. D. Dissertation* (Bangalore: Indian Institute of Science)
- [43] Shi X, Chate H, Ma Y 2014 *New J. Phys.* **16** 035003
- [44] Bertin E, Chate H, Ginelli F, Mishra S, Peshkov A, Ramaswamy S 2013 *New J. Phys.* **15** 085032
- [45] Gruler H, Dewald U, Eberhardt M 1999 *Eur. Phys. J. B* **11** 187
- [46] Aranson I S, Snezhko A, Olafsen J S, Urbach J S 2008 *Science* **320** 612
- [47] Narayan V, Ramaswamy S, Menon N 2008 *Science* **320** 612
- [48] Chen L, Toner J 2013 *Phys. Rev. Lett.* **111** 088701
- [49] Adhyapak T C, Ramaswamy S, Toner J 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 118102
- [50] Romanczuk P, Chate H, Chen L, Ngo S, Toner J 2015 *New J. Phys.* **18** 063015

SPECIAL TOPIC — Progress in Soft Matter Research

Hydrodynamic theory of dry active matter*

Chen Lei-Ming[†]

(College of Sciences, China University of Mining and Technology, Xuzhou 221116, China)

(Received 5 August 2016; revised manuscript received 9 September 2016)

Abstract

In this paper we shortly review theoretical progress in the field of active matter, focusing on the continuum theory of dry systems, in which momentum of active particles is not conserved due to the interaction between the particles and a substrate or medium. In particular, we review the phenomenological way of deriving hydrodynamic equations for both polar and apolar systems, and the predictions of these theories such as long-ranged orientational order in two-dimensional polar systems and giant number fluctuations. The comparisons among theoretical predictions, numerical results, and experimental evidence are also summarized.

Keywords: active matter, hydrodynamics, phase transitions

PACS: 64.70.qj, 87.18.Gh, 47.10.-g, 05.70.Ln

DOI: 10.7498/aps.65.186401

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11474354).

† Corresponding author. E-mail: leiming@cumt.edu.cn