# 有限多孔介质诱导活性哑铃的聚集行为*

金燕 石子璇 金奕扬 田文得† 张天辉‡ 陈康††

(苏州大学物理科学与技术学院, 软凝聚态物理及交叉研究中心, 苏州 215006)

(2024 年 6 月 3 日收到; 2024 年 6 月 27 日收到修改稿)

自然界的许多活性物质都处在复杂的环境中, 例如动物群体穿过丛林、微生物在土壤中迁移、细菌被设计用于感知肿瘤的多孔环境等. 活性物质在复杂环境中的行为是一个值得探究的课题, 在生物物理、医疗工程、工业领域具有可观的应用意义. 本文用活性哑铃代表细菌等具有形状各向异性的活性物质, 采用郎之万动力学模拟, 研究它们渗透有限多孔介质的行为. 研究发现在低温和适当的活性力下, 活性哑铃能在介质内外聚集并形成 4 种稳定的聚集结构. 4 种聚集结构分别是中空巨聚集、介质内中空聚集、密实巨聚集、介质内密实聚集. 定向运动的持久性决定了活性哑铃的聚集程度. 4 种聚集结构的密度、极性序参量、热力学温度在介质内外的分布有明显的区别. 本研究结果有助于进一步理解活性物质在复杂环境中的生命活动, 为微流器件的设计、药物的输运等医学操作提供新的思路.

**关键词:** 活性物质, 多孔介质, 郎之万动力学模拟

**PACS:** 05.40.Jc, 05.40.–a, 87.16.Uv, 82.20.Wt **DOI:** 10.7498/aps.73.20240784

## 1 引 言

活性物质是自然界中广泛存在的非平衡体系, 其特点是可以从周围环境摄取能量为自身运动提供机械能[1]. 活性物质的尺度很广, 大到宏观的人群、鸟群, 小到微观的精子细胞、细菌菌落等. 传统的无规则热运动的体系是均匀的、平衡的, 但是由于活性物质单体的自驱动有方向持续性, 活性物质体系内部往往是不均匀的, 涌现出一系列新奇的非平衡现象, 比如运动诱导的相分离[2–8]、自阻塞[9,10]、活性湍流[11,12] 等.

自然界中活性物质的生存环境往往是复杂的, 例如免疫细胞在组织中迁移、细菌在土壤或生物凝胶中栖息、动物在树林地带奔跑等. 大多数人工合成的活性物质也是为了应用在复杂环境中, 例如污水的净化[13]、微流器件的设计[14] 以及药物输送等其他医学操作[15,16]. 因此, 活性物质在复杂环境中的运动行为是一个值得关注的课题.

当活性物质的形状可以忽略时, 球形粒子模型能够很好地模拟活性物质的运动[17]. 近年来有大量关于活性粒子在复杂环境中的模拟研究[18–26]. 例如活性粒子在驱动力持久性较强时在圆形障碍物周围形成涡旋[26]、活性粒子在不同孔隙度的平直或圆形多孔壁上形成不同的聚集形态[20,23]、调整障碍物晃动的频率与幅度能使障碍物中的活性粒子产生流动与阻塞[22]、在三维多孔介质环境中活性粒子靠近障碍物时被限制在局部, 成核生长, 表现出运动诱导的相分离[19].

球形粒子具有形状的各向同性, 但细菌等活性物质具有细长的体型, 使用具有形状各向异性的哑铃模型或棒状模型会使模拟更加贴合真实生命体

* 国家自然科学基金 (批准号: 21774091, 21674078, 11974255) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: tianwende@suda.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: zhangtianhui@suda.edu.cn

†† 通信作者. E-mail: kangchen@suda.edu.cn

© 2024 中国物理学会 Chinese Physical Society 

系. 形状各向异性与障碍物相互作用的耦合使细菌等活性物质在多孔介质中的运动行为更加复杂. 实验工作中, 多孔介质的孔隙尺度、障碍物密度能强烈影响大肠杆菌的迁移[27,28]. Kumar 等[29] 通过模拟发现, 在二维聚合物凝胶多孔环境中, 活性力会增强活性哑铃的动力学, 活性哑铃的化学不对称性能进一步增强其动力学. 不同的运动模式也会影响细菌在多孔环境中的扩散行为, 比如引入密度感应机制的细菌, 在拥挤区域增加重新定向的频率, 动力学可达到 2 个数量级的显著提升[30,31].

多孔介质在模拟工作中通常被设置成排列整齐或随机的障碍物点阵, 位置固定或可晃动. 活性物质在多孔介质中的运动行为取决于诸多因素, 包括自身的驱动力强度、定向持久时间, 以及障碍物的形状和密度等. 上述研究内容大多关注活性物质在无限介质中的输运行为, 很少涉及有限介质. Qian 等[18] 通过模拟发现了活性粒子进入有限多孔介质有三种典型的聚集模式, 不同模式取决于障碍物产生的排斥势垒与活性粒子驱动力强度之间的竞争、驱动的定向持久性与渗透特征时间的竞争. 现在把活性粒子扩展为形状各向异性的活性哑铃, 形状各向异性会导致驱动方向与相互作用的耦合, 活性哑铃会怎样进入有限介质并形成怎样的聚集结构? 与活性粒子的聚集行为有何异同? 这是一个值得深入探讨的问题.

通过郎之万动力学模拟, 我们发现在不同的驱动力强度与温度条件下, 活性哑铃进入有限多孔介质有 4 种典型的聚集过程, 最终形成 4 种稳定的聚集结构. 在低噪声和适当的驱动力强度下, 活性哑铃能在介质内外形成聚集. 活性哑铃定向运动的持久长度决定聚集的程度. 4 种典型聚集结构从介质中心到介质外部的密度、极性序参量、热力学温度的分布情况有显著的区别. 该研究有助于进一步理解细菌等活性物质在复杂环境中的行为, 在生物物理、药物输送以及工业领域有潜在的应用价值.

## 2 模型与方法

通过郎之万动力学模拟来研究活性哑铃进入有限多孔介质的聚集行为. 建立边长为 $L_{\rm b}$ 的正方形二维模拟盒子, $x$ 方向和 $y$ 方向都设置周期性边界条件. 整个体系中有 $N$ 个活性哑铃, 多孔介质区域在盒子中央, 是由 $N_{\rm o}$ 个圆形障碍物排列而成的正方点阵. 每个活性哑铃由两个直径为 $\sigma$ 的活性粒子单体用键连接而成. 粒子之间的相互作用势包含两部分, 分别是键伸缩势以及非键结相互作用势. 同一个哑铃中的两个单体之间存在键伸缩势, 表达式为

$$U_{\rm b} = k_{\rm b}(|\boldsymbol{r}_{i1} - \boldsymbol{r}_{i2}| - r_0)^2, \tag{1}$$

其中 $\boldsymbol{r}_{i1}$ 和 $\boldsymbol{r}_{i2}$ 是第 $i$ 个活性哑铃中两个单体粒子的位置矢量. $r_0$ 是平衡键长, $k_{\rm b}$ 是弹性系数. 不同的活性哑铃之间的相互作用以及活性哑铃与多孔介质的相互作用都采用纯排斥的 WCA (Weeks-Chandler-Andersen) 势, 表达式分别为

$$U_{\rm d} = \begin{cases} 4\varepsilon\left[\left(\dfrac{\sigma}{|\boldsymbol{r}_{i\alpha} - \boldsymbol{r}_{j\beta}|}\right)^{12} - \left(\dfrac{\sigma}{|\boldsymbol{r}_{i\alpha} - \boldsymbol{r}_{j\beta}|}\right)^{6}\right] + \varepsilon, & |\boldsymbol{r}_{i\alpha} - \boldsymbol{r}_{j\beta}| \leqslant r_{\rm cut}, \\ 0, & |\boldsymbol{r}_{i\alpha} - \boldsymbol{r}_{j\beta}| > r_{\rm cut}, \end{cases} \tag{2}$$

$$U_{\rm o} = \begin{cases} 4\varepsilon\left[\left(\dfrac{\sigma}{|\boldsymbol{r}_{i\alpha} - \boldsymbol{r}_{\rm o}|}\right)^{12} - \left(\dfrac{\sigma}{|\boldsymbol{r}_{i\alpha} - \boldsymbol{r}_{\rm o}|}\right)^{6}\right] + \varepsilon, & |\boldsymbol{r}_{i\alpha} - \boldsymbol{r}_{\rm o}| \leqslant r_{\rm cut}, \\ 0, & |\boldsymbol{r}_{i\alpha} - \boldsymbol{r}_{\rm o}| > r_{\rm cut}, \end{cases} \tag{3}$$

其中 $\alpha, \beta \in \{1, 2\}$ 且 $i \neq j$, $\boldsymbol{r}_{\rm o}$ 是介质中障碍物格点的位置矢量, 截断半径 $r_{\rm cut} = 2^{1/6}\sigma$. 障碍物粒子固定不动, 活性哑铃中每个单体的运动遵循朗之万方程:

$$m\frac{{\rm d}^2\boldsymbol{r}_{i\alpha}}{{\rm d}t^2} = -\nabla_{\boldsymbol{r}_{i\alpha}}U_{i\alpha} - \gamma\frac{{\rm d}\boldsymbol{r}_{i\alpha}}{{\rm d}t} + \boldsymbol{F}_a^{i\alpha} + \sqrt{2\gamma k_{\rm B}T}\boldsymbol{\eta}_{i\alpha}(t), \tag{4}$$

$$U_{i\alpha} = U_{\rm b} + \sum_{j=1, j\neq i}^{j=N}\sum_{\beta=1}^{\beta=2} U_{\rm d} + \sum_{o=1}^{o=N_{\rm o}} U_{\rm o}, \tag{5}$$

$$\boldsymbol{F}_{\rm a}^{i\alpha} = f_{\rm a}(\boldsymbol{r}_{i1} - \boldsymbol{r}_{i2})/2, \tag{6}$$

其中 $\alpha \in \{1, 2\}$. (4) 式中右边的 4 项分别代表第 $i$ 个活性哑铃中第 $\alpha$ 个单体粒子受到的相互作用力、摩擦阻力、活性力和热噪声. $m$ 为单体粒子的质量.

活性力沿键的方向施加, 平均分给键两端的粒子, $f_a$ 是施加在单位键长上的活性力. $\theta$ 是活性力与 $x$ 轴正方向的夹角, 表示活性哑铃的取向 (图 1(a)). $\boldsymbol{\eta}_{i\alpha}(t)$ 是单位方差的高斯白噪声. 模拟过程中通过调节 $f_a$ 来控制活性力的大小, 通过温度 $T$ 来改变热噪声的大小.

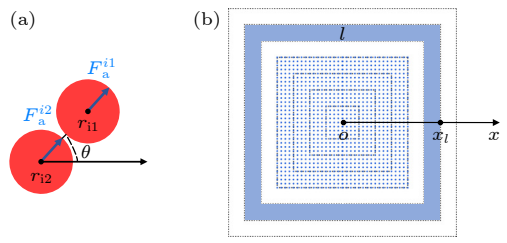


图 1 模型示意图 (a) 活性哑铃模型; (b) 划分区域的模拟盒子

Fig. 1. Schematic diagram of the model: (a) Active dumbbell model; (b) simulation box divided into areas.

我们使用 LAMMPS 软件进行模拟, 设置 $L_b = 300\sigma$, 多孔介质区域的正方点阵有 $n$ 行 $n$ 列, $n = 33$. 障碍物粒子直径为 $\sigma$, 晶格常数 $d = 2.5\sigma$. 活性哑铃的面积分数为 $\phi = \dfrac{N\pi\sigma^2}{2L_b^2} = 0.15$. 活性哑铃先被限制在有限介质外, 充分热平衡后解除限制, 正式开始模拟. 模拟使用约化单位, 质量单位 $m = 1$, 长度单位 $\sigma = 1$, 能量单位 $\varepsilon = 1$, 时间单位 $\tau = \sqrt{m\sigma^2/\varepsilon}$. 设置 $r_0 = 1.0\sigma$, $k_b = 1000\varepsilon/\sigma^2$ (活性哑铃的形变很微弱). 阻尼系数 $\gamma = 10$, 可以认为活性哑铃的运动是过阻尼的[6]. 模拟时间步长为 $0.002\tau$, 模拟总步数为 $3\times10^7$, 总时长为 $6\times10^4\tau$. 为了方便定量分析活性哑铃进入有限介质的动力学过程, 精确地反映介质内外活性哑铃聚集的结构特征, 下文的统计中会将整个模拟盒子划分成嵌套的正方环形区域, 介质中心位于坐标原点, $x_l$ 表示第 $l$ 个区域右侧外边界的横坐标 (图 1(b)).

## 3 结果与讨论

### 3.1 聚集过程

在不同的温度和活性力下, 活性哑铃进入有限多孔介质呈现出 4 种聚集过程 (如图 2), 最终能

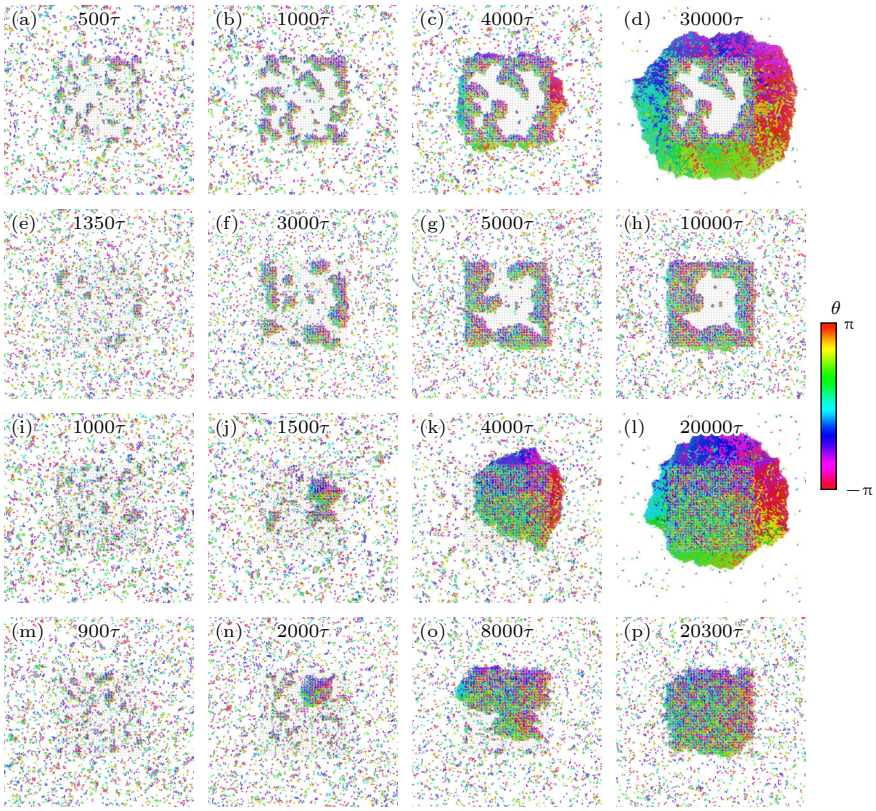


图 2 活性哑铃进入有限多孔介质的 4 种聚集过程的模拟快照, 颜色表示活性哑铃的取向, 图片上标注了对应的模拟时刻 (a)—(d) $f_a = 10$, $T = 0.02$; (e)—(h) $f_a = 10$, $T = 0.2$; (i)—(l) $f_a = 40$, $T = 0.2$; (m)—(p) $f_a = 30$, $T = 0.5$

Fig. 2. Simulation snapshot of four aggregation processes of active dumbbells entering finite porous media, the color indicates the orientation of the active dumbbell, the corresponding simulation time has been marked on the pictures: (a)–(d) $f_a = 10$, $T = 0.02$; (e)–(h) $f_a = 10$, $T = 0.2$; (i)–(l) $f_a = 40$, $T = 0.2$; (m)–(p) $f_a = 30$, $T = 0.5$.

形成 4 种稳定的聚集结构. 第 1 种 (例如 $f_a = 10$, $T = 0.02$) 是活性哑铃在介质中随机位置形成较小的团簇, 随后进入介质的活性哑铃大部分在介质边缘聚集形成阻塞, 介质边缘完全阻塞后会有大量活性哑铃附着在介质周围形成稳定的大团簇. 第 2 种 (例如 $f_a = 10$, $T = 0.2$) 聚集过程初期与第 1 种相似, 但聚集后期不会有活性哑铃稳定附着在介质周围. 第 3 种 (例如 $f_a = 40$, $T = 0.2$) 聚集过程是活性哑铃在介质内部随机位置不断有小团簇形成、生长、湮灭, 直到有一个或几个位置的团簇稳定生长并逐渐覆盖整个介质, 与此同时介质边缘外部会有大量活性哑铃附着, 形成大团簇. 第 4 种 (例如 $f_a = 30$, $T = 0.5$) 聚集过程最初与第 3 种过程相似, 但是整个过程中活性哑铃始终只在介质区域聚集.

为了定量分析活性哑铃进入有限介质的聚集过程, 我们计算了不同时刻从介质内到介质外各个正方环形区域中活性哑铃的平均密度 $\varphi_l$, 表达式为

$$\varphi_l = N_l \pi \sigma^2 / (2A_l), \tag{7}$$

其中 $N_l$ 是位于第 $l$ 个环形区域中的活性哑铃的数量, $A_l$ 是第 $l$ 个环形区域的面积. 图 3 是经过 10 次系综平均的结果.

第 1 种聚集过程 (图 3(a)) 初期, 活性哑铃缓慢进入介质中, 在 $200\tau$ 时活性哑铃渗透整个介质并在介质中均匀分布, 然后在介质中随机形成小团簇. 在介质边缘, 团簇生长最快并逐渐彼此连接形成堵塞. 此过程中介质内活性哑铃密度随时间逐渐升高. 但堵塞形成之后 (约 $3000\tau$ 左右), 介质内哑铃密度变化很小, 与此同时介质外部有活性哑铃附着, 形成巨聚集.

第 2 种聚集过程 (图 3(b)) 中活性哑铃渗透介质的速度较慢, 在 $450\tau$ 左右布满整个介质. 随后小团簇开始形成, $4000\tau$ 左右介质边缘阻塞. 之后, 介质内外活性哑铃的密度变化很小. 值得注意的是, 在此期间介质中心的哑铃密度略有下降, 这是因为介质中心有游离的活性哑铃会向外游动, 贴附在聚集区域的内表面.

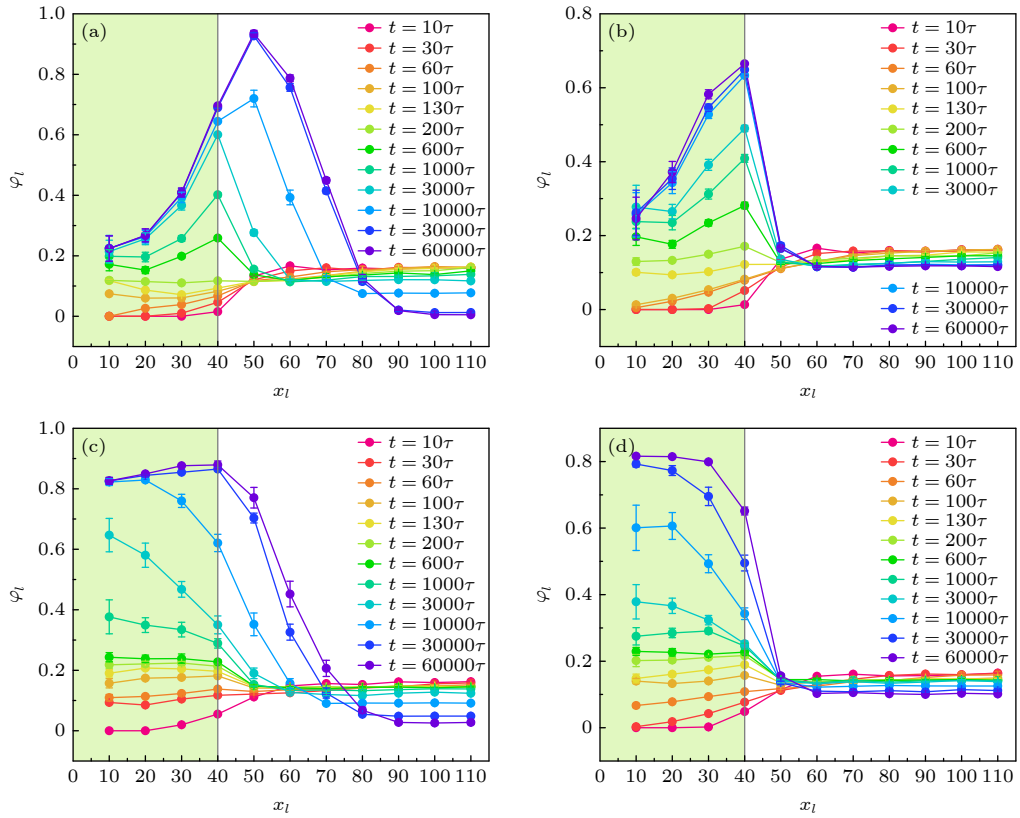


图 3 不同时刻各正方环形区域中活性哑铃的平均密度 $\varphi_l$, 绿色背景表示介质区域 (a) $f_a = 10$, $T = 0.02$; (b) $f_a = 10$, $T = 0.2$; (c) $f_a = 40$, $T = 0.2$; (d) $f_a = 30$, $T = 0.5$

Fig. 3. Average density $\varphi_l$ of active dumbbells in each square ring region at different times, and the green background indicates the medium region: (a) $f_a = 10$, $T = 0.02$; (b) $f_a = 10$, $T = 0.2$; (c) $f_a = 40$, $T = 0.2$; (d) $f_a = 30$, $T = 0.5$.

第 3 种聚集过程 (图 3(c)) 中活性哑铃的速度很大, 在 $100\tau$ 已经渗透整个介质. $300\tau$—$1000\tau$ 这段时间, 介质中有小团簇在随机位置不断生长湮灭. 统计上介质内活性哑铃的分布是均匀的, 密度曲线是一个平台, 之后团簇开始稳定生长. 和前两种情形不同, 团簇生长位置是随机的并不是在边缘处优先生长, 所以我们看到介质中央的密度迅速升高, 随后团簇扩展到外部并覆盖整个介质, 形成巨聚集.

第 4 种聚集过程 (图 3(d)) 中噪声强烈影响活性哑铃的定向运动, 小的团簇并不能稳定生长. 介质内部密度曲线的平台在 $2000\tau$ 被打破, 团簇开始随机生长并填充整个介质. 但是由于介质边缘的活性哑铃频繁移动, 所以密度从内到外依次递减.

在前两种聚集过程的团簇生长初期, 介质内的密度曲线是从内到外递增的, 因为有大量的活性哑铃在介质边缘聚集. 在后两种聚集过程中, 有相当一段时间介质内部的哑铃分布是统计均匀的, 密度曲线是一段平台, 随后团簇稳定生长的位置也是随机的.

## 3.2 形态图与机制

为了定量分析活性力和温度对活性哑铃在介质内外的聚集行为的影响, 我们计算了各参数条件下活性哑铃在介质内外的聚集度 $M$ 以及介质内部聚集结构的孔隙度 $C$. 当某个活性哑铃的一个单体与另一个哑铃的某个单体之间的距离 $r < r_{\rm cut}$ 时, 我们认为这两个活性哑铃互相接触, 位于同一个团簇中. 聚集在介质内外的活性哑铃会形成一个连接的大团簇, 该团簇包含的活性哑铃数量为 $N_{\rm c}$. 定义聚集度 $M = N_{\rm c}/N$, 即大团簇中的活性哑铃数量与体系中活性哑铃总数的比值. 当活性哑铃在介质边缘稳定聚集时, 介质内部会有部分空腔, 我们称之为聚集结构中的孔隙区, 孔隙度 $C$ 可以准确地表示孔隙区的大小. 有限介质是障碍物格点组成的正方晶格, 每 4 个格点围成一个原胞, 若没有活性哑铃位于该原胞中, 则该原胞属于孔隙区. 统计所有属于孔隙区的原胞数量 $n_{\rm c}$, 我们可以得到孔隙度 $C = n_{\rm c}d^2/A$, $A$ 是介质区域的总面积.

活性哑铃进入有限介质呈现出 4 种聚集过程, 并且最终形成 4 种稳定的聚集结构. 在稳定的聚集状态下对聚集度 $M$ 和孔隙度 $C$ 进行长时间平均和十次系综平均后, 我们根据活性哑铃在介质内部的聚集孔隙度 $C$ 是否大于 0.01(排除活性哑铃在介质中运动时偶然产生的微小孔隙的影响) 来区分中空态和密实态, 根据活性哑铃在介质内聚集而产生的大团簇边界是否超出介质区域且 $M > 0.4$ 来区分巨聚集态和介质内聚集态. 最终将这 4 种聚集结构定义为中空巨聚集 (图 2(d))、介质内中空聚集 (图 2(h))、密实巨聚集 (图 2(l))、介质内密实聚集 (图 2(p)), 并绘制了几种聚集结构关于温度和活性力的形态图 (图 4).

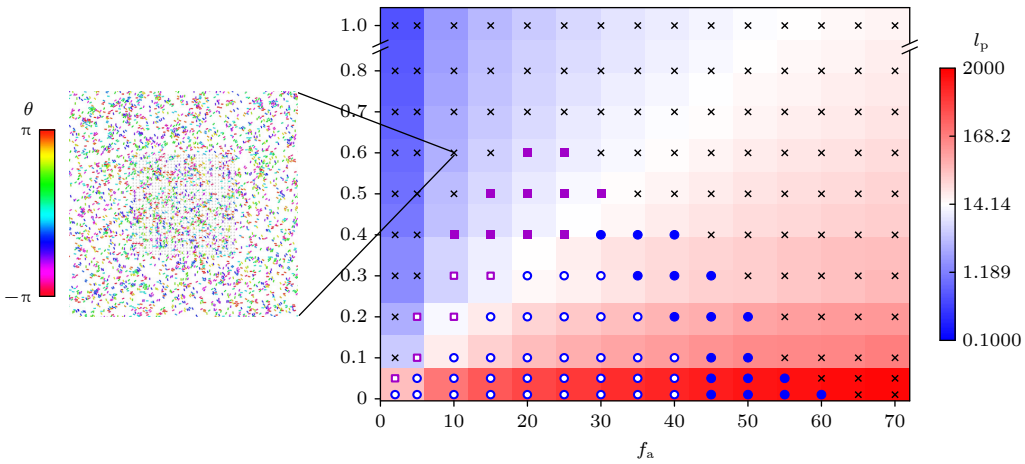


图 4 形态图, 蓝色空心圆代表中空巨聚集, 蓝色实心圆代表密实巨聚集, 紫色空心正方形代表介质内中空聚集, 紫色实心正方形代表介质内密实聚集, 黑色叉号表示介质内外无聚集, 背景颜色表示活性哑铃的持久长度

Fig. 4. Morphology diagram, the blue hollow circle represents the hollow giant aggregation, the blue solid circle represents the dense giant aggregation, the purple hollow square represents the hollow aggregation in the media, the purple solid square represents the dense aggregation in the media, and the black cross indicates no aggregation inside or outside the medium, the background color indicates the persistence length of the active dumbbell.

根据均匀环境中活性哑铃的扩散性质, 活性哑铃的旋转扩散系数 $D_{\mathrm{R}}=2k_{\mathrm{B}}T/(\gamma\sigma^2)$, 定向运动的持久时间 $t_{\mathrm{R}}=1/D_{\mathrm{R}}$ [32]. 活性哑铃的自驱动速度大小 $v_{\mathrm{a}}\approx f_{\mathrm{a}}/2\gamma$ (活性哑铃键长的变化很微弱), 定向运动的持久长度 $l_{\mathrm{p}}=v_{\mathrm{a}}t_{\mathrm{R}}$. 活性哑铃的持久长度随着温度的升高而减小, 随着活性力的增大而增大.

从形态图中不难看出, 在低噪声和适当的驱动力下活性哑铃能在介质内外形成聚集. 聚集产生的原因是介质区域空间狭小, 活性哑铃在介质中相遇时容易形成几何"trap". 与运动诱导的相分离 (motility-induced phase separation, MIPS) 不同[7], 这种聚集的形成依赖于障碍物的协助. 定向运动的持久性决定了聚集的程度. 当持久长度较小时, 活性哑铃只能在介质区域形成聚集, 当持久长度较大时, 活性哑铃可以在介质周围附着, 形成巨聚集. 低噪声、中低活性时, 活性哑铃进入介质初期在介质中形成的小团簇是稳定的, 后续进入介质的活性哑铃会先接触到靠近介质边缘的小团簇, 优先在介质边缘形成聚集, 形成中空态. 噪声太高或活性力太大都会导致最初的小团簇不稳定, 也就不会有活性哑铃在介质边缘稳定聚集.

### 3.3 结构特征

图 5 是在稳定的聚集状态下对聚集度 $M$ 和孔隙度 $C$ 进行长时间平均和 10 次系综平均后的结果. 随着温度的升高, 活性哑铃在介质周围的聚集度降低 (图 5(a)). 温度较低时, 在很大的活性力范围内, 活性哑铃都能形成巨聚集, 并且活性哑铃的聚集度 $M$ 非常接近 1. 这是因为噪声对活性哑铃定向运动的干扰很弱, 几乎所有的活性哑铃都能附着在介质周围形成稳定的聚集. 在中低温度下, 活性哑铃的聚集度随活性力的增大而增大, 对应了聚集结构从介质内聚集态到巨聚集态的转变. 但此时 $M$ 很难接近 1, 因为噪声强烈干扰了活性哑铃的定向运动, 活性哑铃在介质外部的聚集并不稳定. 当温度高达 $T=0.5$ 时, 活性哑铃只能在介质中聚集. 当活性力很大时, 活性哑铃在介质中的运动性很强, 不会形成明显的聚集, 聚集度 $M$ 锐减到 0 附近.

从图 5(b) 可以看出, 低温时活性哑铃在介质中聚集的孔隙度随着活性力的增大而单调减小. 此时噪声的影响不明显, 活性力主导活性哑铃表现出定向运动的特征. 因此, 活性力越大, 活性哑铃定向运动渗透介质的速度就越快. 在介质外部被活性哑铃包裹之前有越多的活性哑铃进入介质中, 聚集的孔隙度就越小.

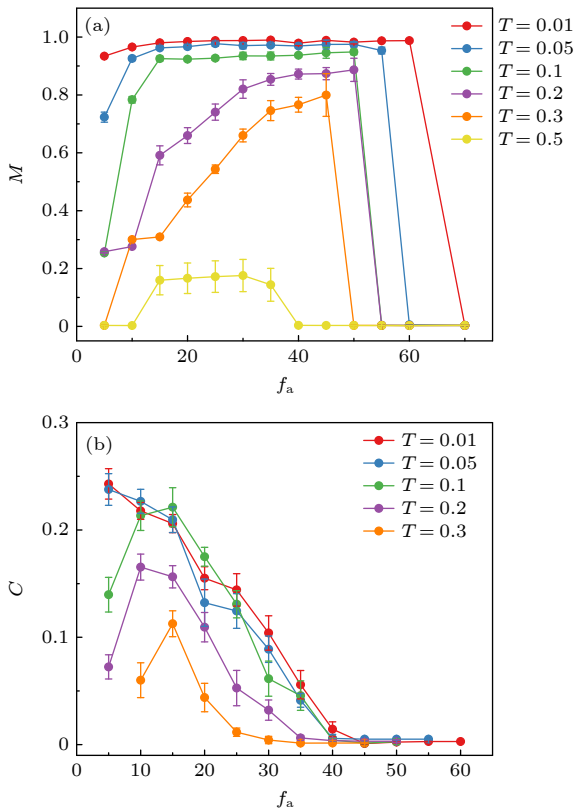


图 5 (a) 活性哑铃的聚集度 $M$; (b) 介质中活性哑铃聚集的孔隙度 $C$

Fig. 5. (a) Degree of aggregation $M$ of active dumbbells; (b) porosity of media with active dumbbell aggregation.

温度较高时, 活性力对孔隙度有明显的非单调影响. 在较低的活性力下, 噪声强烈干扰活性哑铃的定向运动, 使其在介质边缘聚集阻塞. 此时活性力增大会加快边缘阻塞的过程, 阻止更多活性哑铃进入介质, 导致孔隙度增大. 活性力较大时, 活性哑铃的定向运动能够克服噪声的影响. 此时, 活性力越大, 活性哑铃定向运动的速度就越大, 在边缘阻塞前进入介质的活性哑铃数目越多, 孔隙就越小.

为了进一步探讨几种聚集结构内部的物理特征, 我们计算了活性哑铃在各个正方环形区域的极性序参量 $P_l$ 以及热力学温度 $T_l$, 并在稳定的聚集形态下进行长时间的平均和 10 次系综平均 (图 6). 极性序参量 $P_l$ 的表达式为

$$P_l=-\frac{1}{N_l}\sum_{n=1}^{n=N_l}\frac{\boldsymbol{p}_n\cdot\boldsymbol{r}_{\mathrm{c}}^n}{r_{\mathrm{c}}^n}, \tag{8}$$

其中 $\boldsymbol{p}_n = (\cos\theta_n,\ \sin\theta_n)$, $\theta_n$ 表示环形区域中第 $n$ 个活性哑铃的取向, $\boldsymbol{r}_{\rm c}^n$ 表示第 $n$ 个活性哑铃的质心位置矢量. 热力学温度的表达式为

$$T_l = \frac{1}{N_l}\sum_{n=1}^{n=N_l} m_{\rm c} v_n^2/2, \tag{9}$$

$m_{\rm c}$ 是每个活性哑铃的质量, $v_n$ 是环形区域中第 $n$ 个活性哑铃的瞬时速度. $T_l$ 能反映各个区域活性哑铃的平均动能[33]. 在稳定的聚集形态中, 团簇中的活性哑铃在一定程度上是可以运动的. 不同区域中活性哑铃的运动程度不同, 这与密度 $\varphi_l$ 和极性序参量 $P_l$ 的分布是密切相关的.

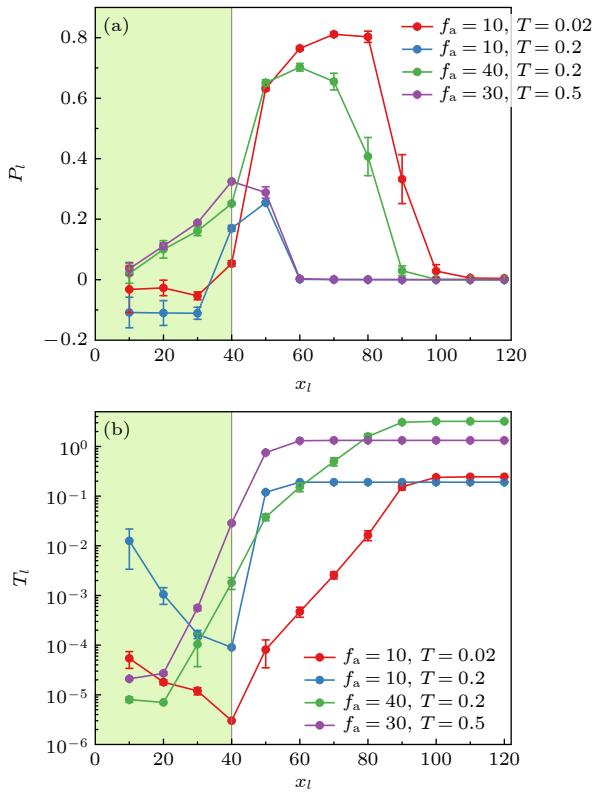


图 6 四种典型聚集结构中活性哑铃的极性序参量 $P_l$ (a) 和热力学温度 $T_l$ (b)

Fig. 6. Polar order parameter $P_l$ (a) and thermodynamic temperature $T_l$ (b) of active dumbbells in four typical aggregation structures.

中空态的两种聚集结构中, 介质内活性哑铃的取向大多指向介质外部, 因此 $P_l$ 的值小于 0. 介质边缘以及介质外部的活性哑铃大多指向介质内部, 尤其是巨聚集态, 在介质外部形成的大团簇中 $P_l$ 能达到 0.8 以上. 团簇在介质外部紧贴介质边缘处的极性略小, 这是因为强烈的挤压破坏了活性哑铃的有序排列. 团簇外边缘极性序参量逐渐减小. 同时, 对于中空态的两种聚集结构, 介质中的热力学温度 $T_l$ 从内向外递减, 活性哑铃在介质中的动能从内向外逐渐减小. 因为介质空腔中位于团簇内边界的部分活性哑铃可以活动, 平均动能较大. 介质边缘的活性哑铃分布最密集, 挤压最严重, 因此平均动能极小. 介质外部的活性哑铃从内到外动能逐渐增大, 外部气态区自由活动的活性哑铃热力学温度最高. 两种密实结构在介质中的极性序参量 $P_l$ 从内向外都是逐渐增大的, 这是因为活性哑铃在聚集形成过程中大多围着一个最初的核逐渐填充整个介质, 并且介质中央活性哑铃的平均动能最小. 热力学温度 $T_l$ 从内向外逐渐升高, 在外部自由气态区到达平台.

## 4 结 论

通过郎之万动力学模拟, 我们发现在不同的温度和活性力下, 活性哑铃进入有限多孔介质呈现出 4 种聚集过程, 能形成 4 种稳定的聚集结构. 根据活性哑铃在介质内外的聚集度以及介质内部的聚集孔隙度可以将这 4 种结构定义为: 中空巨聚集、密实巨聚集、介质内中空聚集、介质内密实聚集. 这 4 种聚集结构从介质中央到介质外的密度、极性序参量、热力学温度表现出不同的分布特点. 聚集产生的原因是介质区域空间狭小, 活性哑铃在介质中相遇时容易形成几何“trap”. 与 MIPS 不同[7], 这种聚集的形成依赖于障碍物的协助. 定向运动的持久性决定了活性哑铃的聚集程度. 活性哑铃在低噪声和低活性力下容易在介质边缘阻塞, 形成中空态的聚集结构. 活性哑铃在有限多孔介质周围的聚集行为体现了自身的定向运动与有限多孔介质相互作用的耦合. 我们还初步探究了介质的排列方式与晶格间距对活性哑铃的聚集行为的影响. 活性哑铃在六角排列的介质周围也可以形成中空与密实聚集形态 (补充材料图 S1). 在一定的条件下, 介质排列的无序性会促进活性哑铃的聚集行为 (补充材料图 S2), 晶格间距的增大使活性哑铃更容易形成密实聚集 (补充材料图 S3). 我们的研究结果为活性物质在复杂环境中的应用提供了参考.

## 参考文献

[1] Ramaswamy S 2010 *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **1** 323
[2] Buttinoni I, Bialké J, Kümmel F, Löwen H, Bechinger C,

Speck T 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 238301
[3] Caporusso C B, Digregorio P, Levis D, Cugliandolo L F, Gonnella G 2020 *Phys. Rev. Lett.* **125** 178004
[4] Shi X Q, Fausti G, Chaté H, Nardini C, Solon A 2020 *Phys. Rev. Lett.* **125** 168001
[5] Suma A, Gonnella G, Marenduzzo D, Orlandini E 2014 *EPL* **108** 56004
[6] Caporusso C B, Negro G, Suma A, Digregorio P, Carenza L N, Gonnella G, Cugliandolo L F 2024 *Soft Matter* **20** 923
[7] Gonnella G, Lamura A, Suma A 2014 *Int. J. Mod. Phys. C* **25** 1441004
[8] Suma A, Gonnella G, Laghezza G, Lamura A, Mossa A, Cugliandolo L F 2014 *Phys. Rev. E* **90** 052130
[9] Henkes S, Fily Y, Marchetti M C 2011 *Phys. Rev. E* **84** 040301
[10] Reichhardt C, Reichhardt C J O 2015 *Phys. Rev. E* **91** 032313
[11] Giomi L 2015 *Phys. Rev. X* **5** 031003
[12] Riedel I H, Kruse K, Howard J 2005 *Science* **309** 300
[13] Gao W, Wang J 2014 *ACS Nano* **8** 3170
[14] Tan Z, Yang M, Ripoll M 2019 *Phys. Rev. Appl.* **11** 054004
[15] Kagan D, Laocharoensuk R, Zimmerman M, Clawson C, Balasubramanian S, Kong D, Bishop D, Sattayasamitsathit S, Zhang L, Wang J 2010 *Small* **6** 2741
[16] Sanchez S, Solovev A A, Schulze S, Schmidt O G 2011 *Chem. Commun.* **47** 698
[17] Bechinger C, Di Leonardo R, Löwen H, Reichhardt C, Volpe G, Volpe G 2016 *Rev. Mod. Phys.* **88** 045006
[18] Qian B S, Tian W D, Chen K 2021 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **23** 20388
[19] Moore F, Russo J, Liverpool T B, Royall C P 2023 *J. Chem. Phys.* **158** 104907
[20] Das S, Ghosh S, Chelakkot R 2020 *Phys. Rev. E* **102** 032619
[21] Nayak S, Das S, Bag P, Debnath T, Ghosh P K 2023 *J. Chem. Phys.* **159** 164109
[22] Ai B Q, Meng F H, He Y L, Zhang X M 2019 *Soft Matter* **15** 3443
[23] Das S, Chelakkot R 2020 *Soft Matter* **16** 7250
[24] Reichhardt C, Reichhardt C J O 2022 *J. Chem. Phys.* **156** 124901
[25] Zhu W J, Huang X Q, Ai B Q 2018 *Chin. Phys. B* **27** 080504
[26] Pan J X, Wei H, Qi M J, Wang H F, Zhang J J, Tian W D, Chen K 2020 *Soft Matter* **16** 5545
[27] Bhattacharjee T, Amchin D B, Ott J A, Kratz F, Datta S S 2021 *Biophys. J.* **120** 3483
[28] Sosa-Hernandez J, Santillan M, Santana-Solano J 2017 *Phys. Rev. E* **95** 032404
[29] Kumar P, Theeyancheri L, Chakrabarti R 2022 *Soft Matter* **18** 2663
[30] Lohrmann C, Holm C 2023 *Phys. Rev. E* **108** 054401
[31] Irani E, Mokhtari Z, Zippelius A 2022 *Phys. Rev. Lett.* **128** 144501
[32] Cugliandolo L F, Gonnella G, Suma A 2015 *Phys. Rev. E* **91** 062124
[33] Wang J, Jiao Y, Tian W D, Chen K 2023 *Acta Phys. Sin.* **72** 190501 (in Chinese) [王晶, 焦阳, 田文得, 陈康 2023 物理学报 **72** 190501]

# Finite porous medium induced aggregation behavior of active dumbbells*

Jin Yan Shi Zi-Xuan Jin Yi-Yang Tian Wen-De †
Zhang Tian-Hui ‡ Chen Kang ††

(*Center for Soft Condensed Matter Physics & Interdisciplinary Research, School of Physical Science and Technology, Soochow University, Suzhou* 215006, *China*)

( Received 3 June 2024; revised manuscript received 27 June 2024 )

**Abstract**

Many active substances in nature are in complex environments, such as animal populations passing through the jungles, microorganisms migrating in the soil, and bacteria designed to sense the porous environment of tumors. The behavior of active substances in complex environments is a subject worth exploring, because they have great application significance in biophysics, medical engineering, and industrial fields. In this work, we use active dumbbells to represent bacteria and other active substances with shape anisotropy, and use Langevin dynamics simulation to study their permeation behaviors in finite porous media. We find that under low temperature and appropriate activity, active dumbbells can aggregate inside and outside the medium and form four stable aggregation structures, they being hollow giant aggregation, hollow aggregation in medium, dense giant aggregation, and dense aggregation in medium. The aggregation is caused by the small space of the medium region, and the geometric trap is easily formed when the active dumbbells meet in the medium. Unlike motility-induced phase separation, the formation of such an aggregation relies on the assistance of obstacles. The persistence of directional motion determines the degree of aggregation of active dumbbells. There are significant differences among the four aggregation structures in density distribution, polar order parameter, and thermodynamic temperature inside and outside the medium. Under certain conditions, the disorder of medium arrangement can promote the aggregation behavior of active dumbbells, and the increase of lattice constant makes it easier for active dumbbells to form dense aggregation. Our research findings contribute to a more in-depth understanding of the life activities of active substances in complex environments, thus providing new ideas for designing microfluidic devices, drug delivery and other medical operations.

**Keywords:** active matter, porous media, Langevin dynamics simulation

**PACS:** 05.40.Jc, 05.40.–a, 87.16.Uv, 82.20.Wt **DOI:** 10.7498/aps.73.20240784

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 21774091, 21674078, 11974255).

† Corresponding author. E-mail: tianwende@suda.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: zhangtianhui@suda.edu.cn

†† Corresponding author. E-mail: kangchen@suda.edu.cn

物理学报 Acta Physica Sinica

Chinese Physical Society

Institute of Physics, CAS

# 有限多孔介质诱导活性哑铃的聚集行为

金燕　石子璇　金奕扬　田文得　张天辉　陈康

# Finite porous medium induced aggregation behavior of active dumbbells

Jin Yan　Shi Zi-Xuan　Jin Yi-Yang　Tian Wen-De　Zhang Tian-Hui　Chen Kang

引用信息 Citation: Acta Physica Sinica, 73, 160502 (2024)　DOI: 10.7498/aps.73.20240784

在线阅读 View online: https://doi.org/10.7498/aps.73.20240784

当期内容 View table of contents: http://wulixb.iphy.ac.cn

---

**您可能感兴趣的其他文章**

**Articles you may be interested in**

空间调制的驱动外场下活性聚合物的动力学行为

Dynamic behavior of active polymer chain in spatially-modulated driven field

物理学报. 2022, 71(24): 240501　https://doi.org/10.7498/aps.71.20221367

低惯性与高惯性活性粒子混合体系中的相分离现象

Phase separation phenomenon in mixed system composed of low- and high-inertia active particles

物理学报. 2023, 72(19): 190501　https://doi.org/10.7498/aps.72.20230792

活性浴中惰性粒子形状对有效作用力的影响

Effect of passive particle shape on effective force in active bath

物理学报. 2024, 73(15): 158202　https://doi.org/10.7498/aps.73.20240650

多孔介质内气泡Ostwald熟化特性三维孔网数值模拟

Three-dimensional numerical simulation of Ostwald ripening characteristics of bubbles in porous medium

物理学报. 2023, 72(16): 164701　https://doi.org/10.7498/aps.72.20230695

使用条件生成对抗网络生成预定导热率多孔介质

Predetermined thermal conductivity porous medium generated by conditional generation adversarial network

物理学报. 2021, 70(5): 054401　https://doi.org/10.7498/aps.70.20201061

自驱动杆状粒子在半柔性弹性环中的集体行为

Collective behaviors of self-propelled rods under semi-flexible elastic confinement

物理学报. 2020, 69(8): 080507　https://doi.org/10.7498/aps.69.20200561