

专题: 华南师范大学建校暨物理学科建立 90 周年

可形变自驱动粒子在不对称周期管中的定向输运*

郭瑞雪 艾保全†

(华南师范大学物理学院, 广州 510006)

(2023 年 5 月 23 日收到; 2023 年 8 月 9 日收到修改稿)

粒子的随机运动被整流为定向运动是非平衡统计物理的重要研究内容. 尽管如此, 在活性粒子整流的研究中, 粒子通常被视为刚性的. 然而, 在软物质中, 粒子通常具有可变形的性质. 本文重点探讨了可形变自驱动粒子在非对称周期通道中的定向运输行为. 由于这些粒子具有可变形的特性, 它们可以通过比自身小的通道. 本文通过数值计算发现, 可形变自驱动粒子能够打破热力学平衡, 在空间不对称的条件下产生定向运动. 粒子的集体运动方向完全由通道的不对称性决定. 本文还发现, 增加自驱动速度和粒子软化都能促进粒子的整流, 而增大密度和旋转扩散则会阻碍粒子的定向运动. 本文的研究成果有助于理解可形变粒子在受限结构中的定向运动行为, 并为相关软物质马达的实验研究提供理论支持.

关键词: 布朗马达, 可形变自驱动粒子, 不对称周期管

PACS: 05.40.-a, 02.50.-r, 05.60.-k

DOI: 10.7498/aps.72.20230825

1 引言

作为生物学和物理学的前沿课题之一, 分子马达的定向运动一直备受关注. 这些微小的分子马达在生物体内能够将 ATP 水解能转化为机械能, 从而产生定向运动^[1-3]. 它们在细胞内的物质定向运输方面发挥着关键作用, 并几乎参与了生物体所有的生命活动, 包括肌肉收缩、细胞运动和基因复制^[4,5]. 因此, 深入研究分子马达的运动特性具有重要意义. 为了更深入地了解分子马达的运动特性, 国内外学者从理论和实验两个方面进行了全面的研究. 其中, 布朗马达作为重要的理论模型为进一步探究分子马达的运动特性提供了理论支持^[6-8].

布朗马达是一种利用时间或空间的不对称性将随机运动转化为定向运输的非平衡系统. 该运输机制在物理学、生物学、纳米技术等领域引起了广泛关注 and 深入研究^[9-13]. 根据非平衡驱动的差异, 布朗马达模型可分为摇摆棘轮^[14-17]、闪烁棘轮^[18-21]

和关联棘轮^[22-24] 3 种主要类型. 摇摆棘轮中无偏向的外力引起系统的瞬态时间不对称, 进而在周期不对称势中发生定向运动. 闪烁棘轮模型中粒子在空间不对称的势场随机在两态或多态间跃迁或者采取势的时间调制来形成定向运动. 关联棘轮模型主要考虑色噪声对整流的影响. 其他类型的布朗马达模型则可视作上述 3 种类型的扩展或组合, 比如驱动蛋白的头部弹性连接, 而势在两态之间闪烁的模型可归为闪烁的棘轮模型^[25]. 研究各类布朗棘轮模型有助于深入理解定向输运行为, 并为优化定向输运提供可能性^[26].

在布朗马达系统中, 以往对于不对称通道中的整流运动的研究已经覆盖了多种类型的粒子, 包括活性粒子^[27-29]、极性粒子^[30] 和手性粒子^[31] 等. 这些研究中粒子都被看作是刚性的. 然而, 在细胞单层、发育中的组织、压缩泡沫和乳剂等软物质系统中, 粒子往往是可形变的. 而且, 软/可形变粒子的形变特性会强烈影响系统的动力学行为^[32-36]. 例如, 可形变粒子可以通过明显小于粒子尺寸的通

* 国家自然科学基金 (批准号: 12075090) 和广东省自然科学基金 (批准号: 2022A1515010449) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: aibq@scnu.edu.cn

道并进行定向输运^[37]. 因此, 在受限结构中可形变粒子如何影响定向运动是一个有趣但尚未解决的问题.

为了解决这一问题, 本文研究了在二维不对称周期管中可形变的自驱动粒子, 并重点考虑了可形变特性对粒子的定向输运的影响. 对于可形变自驱动粒子, 自驱动会破坏热力学平衡, 在空间不对称条件下产生定向输运. 粒子的集体运动方向完全由周期管的不对称性决定. 增大粒子的自驱动速度和粒子软化都会促进粒子的整流, 而增大密度和旋转扩散则会阻碍粒子的整流. 此外, 在大的自驱动速度下, 粒子的可形变特性对定向输运的影响更加显著.

2 模型和方法

考虑 N 个可形变自驱动粒子在二维周期不对称管中的运动. 二维不对称周期通道的形状可以用其半宽度来描述 (如图 1(a) 所示):

$$h(x) = \begin{cases} \frac{H}{L_1}x + \frac{W}{2}, & 0 \leq x < L_1, \\ \frac{H}{L_2}(L-x) + \frac{W}{2}, & L_1 \leq x < L, \end{cases} \quad (1)$$

其中 $L = L_1 + L_2$ 为通道的周期. 通道的最小宽度和最大宽度分别为 W 和 $2H + W$. 定义一个不对称参数 $\Delta = (L_1 - L_2)/L$ 来描述通道的不对称性, 当 $\Delta = 0$ 时通道是完全对称的. 在通道的 x 方向施

加周期性边界条件, 在 y 方向则施加反射边界条件. 类似的几何结构被广泛地应用于非平衡定向输运的研究中^[38,39].

可形变粒子模型由 N 个具有 N_v 个顶点的多边形组成, 每个多边形具有 $N_v - 1$ 个形状自由度. $\mathbf{l}_{m,i} = \mathbf{r}_{m,i+1} - \mathbf{r}_{m,i}$ 表示连接顶点 $i+1$ 和 i 的键矢量. a_m 和 $p_m = \sum_{i=1}^{N_v} l_{m,i}$ 分别表示多边形的面积和周长, 如图 1(b) 所示. 可形变粒子系统的形状-能量函数可以被描述为^[34]

$$E = \frac{k_1 N_v}{2} \sum_{m=1}^N \sum_{i=1}^{N_v} (l_{m,i} - l_0)^2 + \frac{k_a}{2} (a_m - a_0)^2 + \frac{k_b}{2N_v} \sum_{m=1}^N \sum_{i=1}^{N_v} \left(\frac{2(\hat{l}_{m,i} - \hat{l}_{m,i+1})}{l_{m,i} + l_{m,i+1}} \right)^2, \quad (2)$$

其中, 第 1 项是收缩项, 它将顶点之间的连接视为弹簧常数为 k_1 、平衡长度为 l_0 的弹簧. 第 2 项是粒子面积 a_m 的二次项, 描述其不可压缩性, 其中 k_a 和 a_0 分别表示面积刚度模量和目标面积. 第 3 项是弯曲项, 其中 k_b 表示弯曲刚度. 无量纲的形状参数 $A = (N_v l_0)^2 / (4\pi a_0)$ 控制粒子的形变能力, A 越大则表示粒子越软. 对于具有 N_v 个顶点的规则多边形有 $A_v = N_v \tan(\pi/N_v) / \pi$, 且当 $N_v \rightarrow \infty$ 时, $A_v = 1$, 这意味着顶点可以形成平滑的几何图形. 在几何学中, 标准圆对应于 $A/A_v = 1$, 正五边形对应于 $A/A_v = 1.16$, 正六边形对应于 $A/A_v = 1.1$.

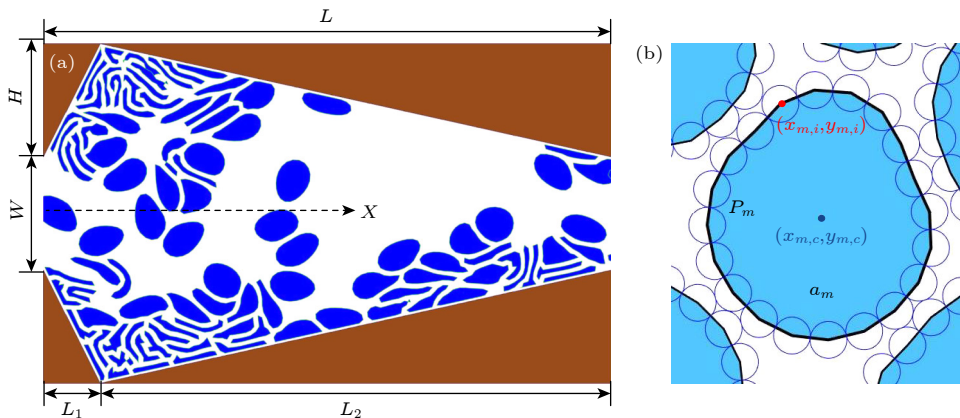


图 1 (a) 可形变粒子在二维不对称周期通道中运动的示意图, 通道的形状利用其半宽度来描述 ((1) 式), x 方向施加周期边界条件, y 方向施加反射边界条件; (b) 由 20 个顶点构成的多边形粒子, $\{x_{m,c}, y_{m,c}\}$ 表示多边形 m 的质心, $\{x_{m,i}, y_{m,i}\}$ 表示多边形 m 的第 i 顶点的位置

Fig. 1. (a) Scheme of deformable particles moving in a two-dimensional asymmetric periodic channel, the shape of the channel is described by the half width of the channel (Eq. (1)), periodic boundary condition is imposed in the x -direction and reflection boundary condition in the y -direction; (b) the deformable polygonal particles with 20 vertices, $\{x_{m,i}, y_{m,i}\}$ is the position of vertex i in the polygon m and $\{x_{m,c}, y_{m,c}\}$ is the center of mass of the polygon m .

可形变粒子的质心的自驱动速度大小为 v_0 , 方向为 $\mathbf{n}_m = (\cos\theta_m, \sin\theta_m)$, 其中 θ_m 满足如下方程:

$$\frac{d\theta_m}{dt} = \sqrt{2D_\theta}\xi_m(t), \quad (3)$$

其中, D_θ 为旋转扩散系数. 通常情况下, 热扩散可以用高斯白噪声来描述, 因此, 这里的 $\xi_m(t)$ 表示具有单位方差和零均值的高斯白噪声, 满足统计关系: $\langle \xi_m(t) \rangle = 0$, $\langle \xi_m(t)\xi_m(t') \rangle = \delta(t-t')$.

构成多边形的顶点 i 的运动可以用过阻尼朗之万方程描述:

$$\frac{d\mathbf{r}_{m,i}}{dt} = v_{m,i}\mathbf{n}_i + \mu(\mathbf{F}_i + \mathbf{G}_i), \quad (4)$$

其中

$$\mathbf{F}_i = -\nabla_i E, \quad \mathbf{G}_i = -\nabla_i U,$$

$$\mathbf{n}_i = \left(\frac{dx_{m,i}}{\sqrt{dx_{m,i}^2 + dy_{m,i}^2}}, \frac{dy_{m,i}}{\sqrt{dx_{m,i}^2 + dy_{m,i}^2}} \right),$$

$$dx_{m,i} = x_{m,i} - x_{m,c}, \quad dy_{m,i} = y_{m,i} - y_{m,c},$$

μ 是迁移率, $v_{m,i}$ 表示粒子 m 中第 i 个顶点的自驱动速度. 由于自驱动力作用于粒子的质心, 可以通过下面的步骤将自驱动的速度扩散到每个顶点, 从而得到 $v_{m,i}$: 1) 计算粒子 m 质心和其顶点 i 之间的夹角 $\phi_{m,i} = \arctan\left(\frac{dy_{m,i}}{dx_{m,i}}\right)$; 2) 计算差值 $\Delta\phi_{m,i} = \phi_{m,i} - \theta_m$, 得到 $\Delta\phi_{m,i} = \text{mod}(\Delta\phi_{m,i}, 2\pi)$, 其中 $\text{mod}()$ 是一个取模运算; 3) 计算粒子 m 中第 i 个顶点上的自驱动速度分量为 $v_{m,i} = v_0 \exp\left(-\frac{\Delta\phi_{m,i}^2}{2D_s^2}\right) + v_{\min}$, 其中 D_s 是速度分布到附近顶点的扩散系数, $v_{\min} = 0.01v_0$ 确保了顶点是活性的.

为了计算粒子之间的排斥相互作用, 将每个顶点都视为直径 $\delta = l_0$ 的圆盘 (如图 1(b) 所示). 通过将接触的多边形上的重叠粒子间的排斥相互作用相加, 从而得到了总的排斥相互作用能为 [34]

$$U = \sum_{m=1}^N \sum_{n>m}^N \sum_{i=1}^{N_v} \sum_{j=1}^{N_v} \frac{k_r}{2} (\delta - |\mathbf{r}_{m,i} - \mathbf{r}_{n,j}|)^2 \times \Theta(\delta - |\mathbf{r}_{m,i} - \mathbf{r}_{n,j}|), \quad (5)$$

式中, k_r 是排斥相互作用的强度, Θ 是 Heaviside 阶跃函数.

由于可形变粒子沿 y 方向的运动受到通道边界的限制, 因此只关注沿 x 方向的集体运动. 在足

够长的时间下, 粒子沿 x 方向的平均速度可以表示为

$$\langle V_x \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} [\Delta X(t)/t], \quad (6)$$

其中 $\Delta X(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle x_{m,c}(t) - x_{m,c}(0) \rangle$ 是在时刻 t 沿 x 方向的粒子的平均位移, $\langle \dots \rangle$ 表示在不同初始条件下的平均值. 为了便于讨论, 定义 $\langle V_s \rangle = \langle V_x \rangle / v_0$. 此外, 定义通道中粒子所占的面积和总面积的比值 $\varphi = Na_0 / [L(H+W)]$, 用来描述通道中的粒子密度.

模拟中采用随机欧拉算法对方程 (3) 和方程 (4) 进行数值积分, 积分时间步长 $dt = 0.001$, 总积分时间 $t = 10^5$, 以确保系统达到非平衡稳态. 无特殊说明时, 将设置参数为 $\mu = 1$, $N = 100$, $N_v = 20$, $k_l = k_a = 1$, $k_b = 0$, $k_c = 10$, $L = 20$, $W = 4$, $H = 4$, 以及 $D_\theta = 0.01$.

3 结果与讨论

3.1 通道不对称性对定向运动的影响

图 2 描述了不同自驱动速度 v_0 的情况下, 粒子的平均速度 V_s 随不对称参数 Δ 的变化关系. 研究表明, 自驱动速度能够使系统远离平衡, 从而发生定向输运, 且定向运动方向完全由通道的不对称性决定的. 当 $\Delta < 0$ 时, 粒子的平均速度为正, $\Delta > 0$ 时, 粒子的平均速度为负, $\Delta = 0$ 时, 定向输运消失. 这种现象可以解释为, 粒子倾向于向斜坡平缓的一侧移动. 当 $\Delta < 0$ 时, 通道的最大宽度的左侧更陡, 因此, 粒子更容易向更平稳的右侧移动, 即 $\langle V_s \rangle > 0$. 同理, 当 $\Delta > 0$ 时, $\langle V_s \rangle < 0$. 当 $\Delta = 0$ 时, 通道是完全对称的, 粒子在两个方向上运动的概率

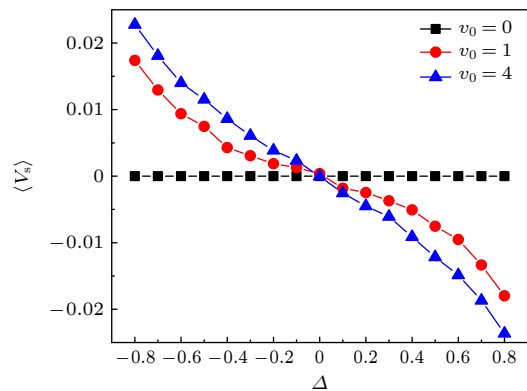


图 2 平均速度 $\langle V_s \rangle$ 随不对称参数 Δ 在不同 v_0 下的变化曲线, $A = 1.16$

Fig. 2. Average velocity $\langle V_s \rangle$ versus the asymmetric parameter Δ for different v_0 at $A = 1.16$.

相同, 因此 $\langle V_s \rangle = 0$. 因此, 定向运动的方向完全由通道的不对称性决定, N, A, v_0 等参数仅影响平均速度的大小, 而不影响运动方向. 因此, 在下文讨论中, 只考虑 $\Delta < 0$ 的情况, 设置 $\Delta = -0.8$, 并通过改变密度 φ 、形状参数 A 、自驱动速度 v_0 和旋转扩散系数 D_θ 来研究可形变粒子的定向输运.

3.2 自驱动速度对定向运动的影响

图 3 为不同 φ 值下, 平均速度 $\langle V_s \rangle$ 随自驱动速度 v_0 的变化曲线. 其中, 可以观察到较大的 v_0 会促进可形变粒子的整流. 当 $v_0 \rightarrow 0$ 时, 系统处于平衡状态, $\langle V_s \rangle \rightarrow 0$. 当 v_0 不断增大时, 非平衡驱动增强, 持续长度 $L_p = v_0/D_\theta \gg L$, 使粒子容易通过熵垒, 便于粒子通过不对称管道. 另外, 发现随着速度的增大, 粒子的拉伸效应会变得更加显著, 拉伸效应也会进一步促进粒子的整流. 然而, 当 φ 较大时, 随着 v_0 的增大, 粒子与瓶颈快速接触会加剧拥堵, 从而会阻碍棘轮输运; 但是当 v_0 足够大时, 粒子有足够的动能跨越瓶颈. 因此当 φ 较大时, $\langle V_s \rangle - v_0$ 曲线中会出现凹值的现象.

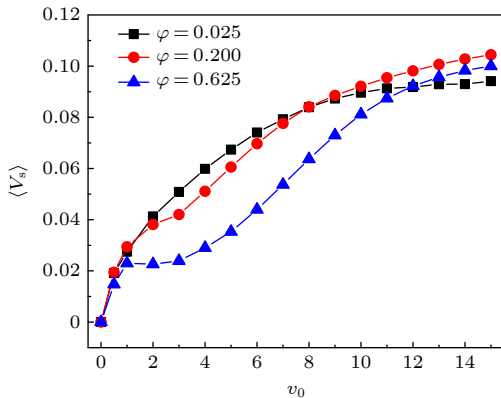


图 3 平均速度 $\langle V_s \rangle$ 随自驱动速度 v_0 在不同 φ 下的变化曲线, $A = 1.16$
 Fig. 3. Average velocity $\langle V_s \rangle$ versus the self-propulsion speed v_0 for different φ at $A = 1.16$.

3.3 旋转扩散对定向运动的影响

图 4 为不同 v_0 时的平均速度 $\langle V_s \rangle$ 随旋转扩散系数 D_θ 的变化曲线, 从图中可发现平均速度 $\langle V_s \rangle$ 随 D_θ 的增大而逐渐减小. 这是因为持续长度 $L_p (L_p = v_0/D_\theta)$ 在逐渐减小, 导致粒子通过通道更加困难. 当 $D_\theta \rightarrow \infty$ 时, 持续长度 $L_p \rightarrow 0$, 活性粒子变为被动粒子, 系统中没有非平衡驱动, 因此定向输运消失.

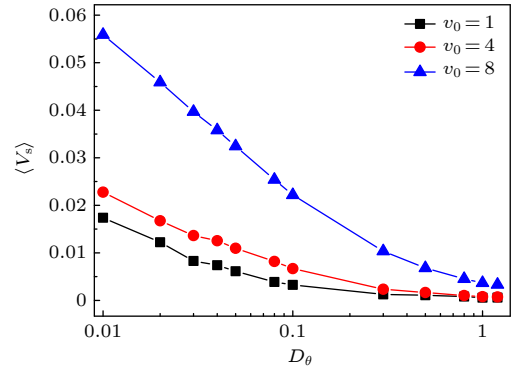


图 4 平均速度 $\langle V_s \rangle$ 随旋转扩散系数 D_θ 在不同 v_0 下的变化曲线, $A = 1.16, \varphi = 0.625$
 Fig. 4. Average velocity $\langle V_s \rangle$ versus the rotational diffusion coefficient D_θ for different v_0 at $A = 1.16$ and $\varphi = 0.625$.

3.4 粒子软化对定向运动的影响

形状参数 A 越大, 粒子越容易变形和变软. 图 5(a) 为不同 v_0 下, 平均速度 $\langle V_s \rangle$ 随形状参数 A 的变化关系. 从图 5(a) 可以观察到在较小的 v_0 下, 形状参数对平均速度的影响很小, 而在较大的 v_0 下, $\langle V_s \rangle$ 随形状参数的增大逐渐增大. 随着 A 的增大, 粒子被软化, 这意味着粒子的面积可以增大, 甚至大于初始面积. 粒子的面积越大, 拉伸效应就越明显. 因此在 v_0 较大时, 形状参数 A 的增大会促进粒子的整流. 而 v_0 较小时, 粒子的拉伸效应不是很明显, 此时 A 对整流的影响较小. 图 5(b) 描述了 $\langle V_s \rangle$ 在 $v_0 - A$ 平面的相图, 从图中能够更清晰地观察 $\langle V_s \rangle$ 随 v_0 和 A 的变化情况. 当固定 A 时, 平均速度 $\langle V_s \rangle$ 随着速度增大而变大. 固定较小 v_0 时, A 对平均速度的影响非常小, 当固定较大 v_0 时, A 对平均速度的影响较大.

3.5 粒子密度对定向运动的影响

图 6 为不同 v_0 下的平均速度 $\langle V_s \rangle$ 随着密度 φ 的变化曲线. 从图 6 可以观察到密度的增大会阻碍粒子的定向运动, 而且这个影响在大 v_0 时比在小 v_0 时更为显著. 因为对于小 v_0 的情况, 粒子有足够的变形及调整使其顺利通过瓶颈. 而对于大 v_0 的情况, 粒子会迅速接近瓶颈, 粒子数的增加会加剧粒子的堵塞, 使其通过通道的难度增大, 从而阻碍了棘轮输运.

3.6 多粒子和单粒子的对比

最后, 在 φ 相同的情况下, 将多粒子和单粒子

运动情况进行比较. 在这种情况下, 设置单粒子的面积等于多粒子面积之和. 图 7(a)—(c) 分别描述了多粒子和单粒子的平均速度 $\langle V_s \rangle$ 随 A , v_0 , D_θ 三个参数的变化关系. 结果表明, 虽然多粒子和单粒子都可通过通道瓶颈, 但多粒子更能促进整

流. 事实上, 尽管单个可形变粒子能够通过比其自身尺寸更小的通道瓶颈, 但当它分裂成多个可形变粒子时, 显然更容易通过通道瓶颈, 从而促进粒子的整流.

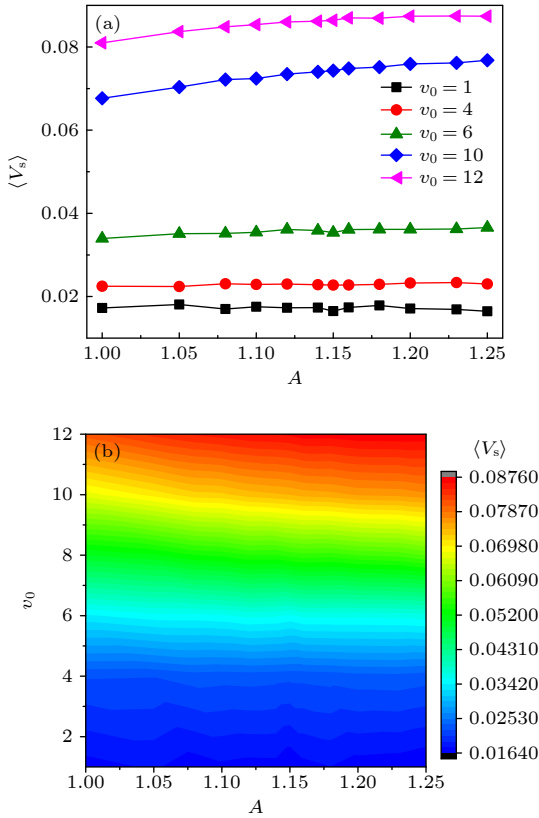


图 5 (a) 平均速度 $\langle V_s \rangle$ 随形状参数 A 在不同 v_0 下的变化曲线; (b) 平均速度 $\langle V_s \rangle$ 在 v_0 - A 平面的相图, $\phi = 0.625$
 Fig. 5. (a) Average velocity $\langle V_s \rangle$ versus the shape parameter A for different v_0 at $\phi = 0.625$; (b) phase diagram of the average velocity $\langle V_s \rangle$ in the v_0 - A representation at $\phi = 0.625$.

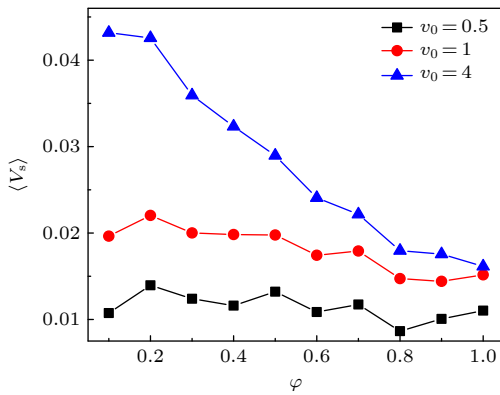


图 6 平均速度 V_s 随密度 ϕ 在不同 v_0 下的变化曲线, $A = 1.16$
 Fig. 6. Average velocity V_s versus the density ϕ for different v_0 at $A = 1.16$.

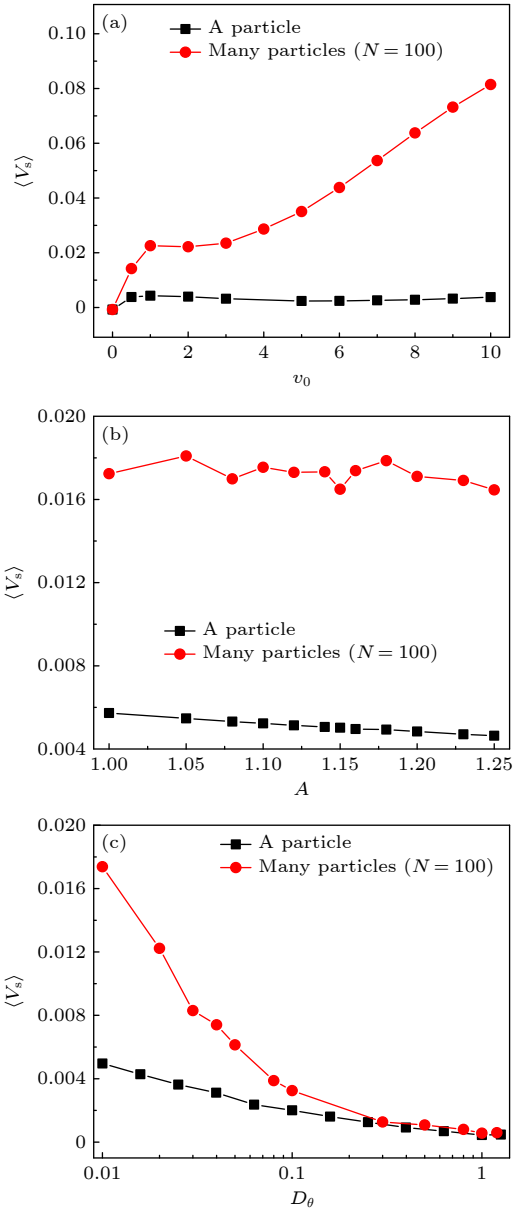


图 7 $\phi = 0.625$ 时, 单粒子和多粒子的平均速度 $\langle V_s \rangle$ 分别随 A , v_0 , D_θ 的变化曲线

Fig. 7. The average velocity of single particle and many particles $\langle V_s \rangle$ is taken as a function of A , v_0 , and D_θ at $\phi = 0.625$.

4 结 论

本文通过数值模拟研究了二维不对称周期通道中的可形变自驱动粒子的定向运输. 粒子的自驱动速度作为非平衡驱动, 打破热力学平衡, 在空间

不对称的条件下产生定向运动. 研究表明, 粒子的定向运动方向完全由通道的不对称参数决定, 粒子更倾向于向较平缓的一侧运动. 粒子自驱动速度的增大和粒子的软化能够促进棘轮输运. 特别是在大自驱动速度下, 粒子的拉伸效应会更加明显, 粒子软化对定向输运的促进会更加显著. 然而, 密度和旋转扩散的增大会阻碍粒子的整流. 密度的增大会导致粒子堵塞, 使其通过通道变得更加困难. 而旋转扩散的增加则会导致粒子运动的持续长度减小, 同样使得粒子通过通道更加困难. 当密度一定时, 相较于单个可形变粒子, 多个可形变粒子总是促进整流的.

细胞的集体运动在组织生长、伤口愈合和免疫反应中起着重要的作用, 这对于理解病理机制, 如癌症和转移的形成也很重要. 在本文中, 粒子的形状可以用多自由度来描述, 这比以往用于描述软/可形变粒子系统的模型更有优势. 从结果来看, 可形变粒子可以通过明显小于自身尺寸的通道瓶颈, 并进行定向输运, 这不同于以往刚性粒子的结果. 本文的研究结果有助于理解可形变粒子在受限结构中的输运行为, 并为相关的软物质实验提供理论支持. 期望这些结果能够促使细胞集体运动的进一步实验研究, 以深入了解与集体细胞运动相关的生物过程.

参考文献

- [1] Xie P 2010 *Int. J. Biol. Sci.* **6** 665
- [2] Browne W, Feringa B 2006 *Nat. Nanotechnol.* **1** 25
- [3] Jülicher F, Ajdari A, Prost J 1997 *Rev. Mod. Phys.* **69** 1269
- [4] Liu Y Y, Sun J M, Fan L M, Gao T F, Zheng Z G 2023 *Acta Phys. Sin.* **72** 040501 (in Chinese) [刘艳艳, 孙佳明, 范黎明, 高天附, 郑志刚 2023 物理学报 **72** 040501]
- [5] Rice S, Lin A W, Safer D, Hart C L, Naber N, Carragher B O, Cain S M, Pechatnikova E, Wilson-Kubalek E M, Whittaker M, Pate E, Cooke R, Taylor E W, Milligan R A, Vale R D 1999 *Nature* **402** 778
- [6] Reimann P 2002 *Phys. Rep.* **361** 57
- [7] Ros A, Eichhorn R, Duong T, Regtmeier J, Reimann P, Anselmetti D 2005 *Nature* **436** 928
- [8] Gao T F, Chen J C 2009 *J. Phys. A Math. Theor.* **42** 065002
- [9] Ai B Q, He Y F, Zhong W R 2011 *Phys. Rev. E* **83** 051106
- [10] Gao T F, Liu F S, Chen J C 2012 *Chin. Phys. B* **21** 020502
- [11] Zhang H W, Wen S T, Zhang H T, Li Y X, Chen G R 2012 *Chin. Phys. B* **21** 078701
- [12] Parrondo J M R, De Cisneros B J 2002 *Appl. Phys. A* **75** 179
- [13] Luo Y H, Zeng C H, Ai B Q 2020 *Phys. Rev. E* **102** 042114
- [14] He Y F, Ai B Q, Dai C X, Song C, Wang R Q, Sun W T, Liu F C, Feng Y 2020 *Phys. Rev. Lett.* **124** 075001
- [15] Li Y Y, Ghosh P K, Marchesoni F, Li B W 2014 *Phys. Rev. E* **90** 062301
- [16] Mateos L J 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 258
- [17] Ai B Q 2017 *Phys. Rev. E* **96** 012131
- [18] Lau B, Kedem O, Ratner M A, Weiss E A 2016 *Phys. Rev. E* **93** 062128
- [19] Sandor C, Libal A, Reichhardt C, Olson Reichhardt C J 2017 *Phys. Rev. E* **95** 032606
- [20] Astumian R N, Bier M 1994 *Phys. Rev. Lett.* **72** 1766
- [21] Liao J J, Zhu W J, Ai B Q 2018 *Phys. Rev. E* **97** 062151
- [22] Mei D, Xie C W, Zhang L 2003 *Phys. Rev. E* **68** 051102
- [23] de Souza Silva C C, Van de Vondel J, Morelle M, Moshchalkov V V 2006 *Nature* **440** 651
- [24] Derenyi I, Vicsek T 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 374
- [25] Zhang H W, Wen S T, Chen G R, Li Y X, Cao Z X, Li W 2012 *Chin. Phys. B* **21** 038701
- [26] Lv M T, Yan M Y, Ai B Q, Gao T F, Zheng Z G 2017 *Acta Phys. Sin.* **66** 220501 (in Chinese) [吕明涛, 延明月, 艾保全, 高天附, 郑志刚 2017 物理学报 **66** 220501]
- [27] Wan M B, Reichhardt C J O, Nussinov Z, Reichhardt C 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 18102
- [28] Kummel K, ten Hagen B, Wittkowski R, Buttinoni I, Eichhorn R, Volpe G, Löwen H, Bechinger C 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 198302
- [29] Ai B Q, He Y F, Zhong W R 2017 *Phys. Rev. E* **95** 012116
- [30] Zhu W J, Li F G, Ai B Q 2017 *Eur. Phys. J. E* **40** 59
- [31] Nourhani A, Crespi V H, Lammert P E 2015 *Phys. Rev. Lett.* **115** 118101
- [32] Cardenas-Barrantes M, Cantor D, Barés J, Renouf M, Azéma E 2021 *Phys. Rev. E* **103** 062902
- [33] Wang D, Treado J D, Boromand A, Norwick B, Murrell M P, Shattuck M D, O'Hern C S 2021 *Soft Matter* **17** 9901
- [34] Boromand A, Signoriello A, Ye F, O'Hern C S, Shattuck M D 2018 *Phys. Rev. Lett.* **121** 248003
- [35] Ai B Q, Ma J, Zeng C H, He Y F 2023 *Phys. Rev. E* **107** 024406
- [36] Ai B Q, Guo R X 2021 *Phys. Rev. E* **104** 064411
- [37] Li J J, Lin F J, Ai B Q 2022 *New J. Phys.* **24** 073027
- [38] Reichhardt C J O, Reichhardt C 2010 *Phys. Rev. B* **81** 224516
- [39] Bellizotti Souza J C, Vizirim N P, Reichhardt C J O, Reichhardt C, Venegas P A 2021 *Phys. Rev. B* **104** 054434

SPECIAL TOPIC — The 90th Anniversary of South China Normal University and Physics Discipline

Directed transport of deformable self-propulsion particles in an asymmetric periodic channel*

Guo Rui-Xue Ai Bao-Quan †

(School of Physics, South China Normal University, Guangzhou 510006, China)

(Received 23 May 2023; revised manuscript received 9 August 2023)

Abstract

Molecular motor can effectively convert chemical energy into mechanical energy in living organisms, and its research is currently at the forefront of study in biology and physics. The dynamic process of its guided movement, along with the crucial role they play in intra-cellular material transport, has significantly aroused the interest of many researchers. Theoretical and experimental researches have allowed detailed examinations of the motion attributes of these molecular motors. The Brownian ratchet model important. It provides an illustration of a non-equilibrium system that transforms thermal fluctuation into guided transport by utilizing temporal or spatial asymmetry. The mechanism has been extensively explored and studied across fields including physics, biology and nanotechnology. Investigations into a variety of ratchets and identification of optimum conditions contribute to a deeper understanding of guided Brownian particle transport.

Preceding studies on ratchet systems largely concentrated on the rectification motions of diverse types of particles-active, polar and chiral-in asymmetric structures. However, the transport of deformable particles in asymmetric channel has not been examined relatively. Particles in soft material systems such as cell monolayer, tissue, foam, and emulsion are frequently deformable. The shape deformation of these soft particles significantly affects the system's dynamic behavior. Thus, understanding the guided transport of these deformable particles within a confined structure is crucial.

In order to explain this problem more clearly, we numerically simulate the guided transportation of active, deformable particles within a two-dimensional, periodic, asymmetric channel. We identify the factors that influence the transport of these particles within a confined structure. The main feature of the deformable particle model is that the particle's shape is characterized by multiple degree of freedom. For active deformable particles, self-propulsion speed disrupts thermodynamic equilibrium, leading to guided transport in spatially asymmetric condition. Our findings demonstrate that a particle's direction of movement is entirely determined by the channel's asymmetric parameter, and it tends to be attracted towards increased stability. Augmenting particle self-propulsion speed and particle softness can facilitate ratchet transport. When the self-propulsion speed v_0 is large, the particle's tensile effect becomes more apparent, and particle softening significantly enhances directed transport. In contrast, an increase in density and rotational diffusion can slow particle rectification. Increased density can obstruct particles, making channel passage more difficult. Elevated rotational diffusion reduces persistence length, challenging particle transition through channels. With constant density, a greater number of particles will also encourage rectification. These research findings offer a valuable insight into the transportation behaviors of deformable particles in a confined structure. They also deliver crucial theoretical support for applicable experiments in the field of soft matter.

Keywords: Brownian motor, deformable self-propulsion particles, asymmetric periodic channels**PACS:** 05.40.-a, 02.50.-r, 05.60.-k**DOI:** [10.7498/aps.72.20230825](https://doi.org/10.7498/aps.72.20230825)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12075090) and the Natural Science Foundation of Guangdong Province, China (Grant No. 2022A1515010449).

† Corresponding author. E-mail: aibq@snu.edu.cn



可形变自驱动粒子在不对称周期管中的定向运输

郭瑞雪 艾保全

Directed transport of deformable self-propulsion particles in an asymmetric periodic channel

Guo Rui-Xue Ai Bao-Quan

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 200501 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230825

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230825>

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

摩擦不对称耦合布朗马达的定向运输

Investigation on the directional transportation of coupled Brownian motors with asymmetric friction

物理学报. 2020, 69(10): 100503 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191961>

周期性爆沸诱导的液滴自驱动

Self-propulsion droplet induced via periodic explosive boiling

物理学报. 2021, 70(24): 244703 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20211386>

粗糙势中耦合布朗粒子的定向运输性能

Transport performance of coupled Brownian particles in rough ratchet

物理学报. 2019, 68(24): 240501 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191203>

T型微通道中液滴半阻塞不对称分裂行为研究

Semi-obstructed splitting behaviors of droplet in an asymmetric microfluidic T-junction

物理学报. 2021, 70(7): 074701 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201171>

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>

闪电双向先导理论及观测:极性不对称、不稳定及间歇性

Theory and observation of bidirectional leader of lightning: Polarity asymmetry, instability, and intermittency

物理学报. 2018, 67(20): 205201 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20181079>