

温差条件下包含手征活性粒子的封闭圆环的运输*

廖晶晶 康琦 罗飞[†] 蔺福军[‡]

(江西理工大学理学院, 赣州 341000)

(2022 年 9 月 11 日收到; 2022 年 11 月 24 日收到修改稿)

在温差条件下, 由于二维周期通道的横向温度差引发的上下不对称和活性粒子的手征性质使得活性粒子在纵向发生定向运动, 继而驱动包裹粒子的封闭圆环定向运输. 圆环的运动方向由粒子的手征性决定. 研究表明, 圆环的运动速度是活性粒子的角速度、下壁温度及温度差的峰值函数. 圆环包含一个手征活性粒子与包含多个手征活性粒子的定向运动行为具有较大差异. 特别是, 圆环半径对两种情况下圆环的运动行为差异影响较大. 当封闭圆环只包含一个粒子且粒子做圆周运动的轨迹半径较大(小)时, 粒子与圆环的相互作用对圆环定向运动起促进(抑制)作用, 圆环速度随圆环半径增大而减小(增大); 当封闭圆环包含多个粒子时, 粒子间的相互作用对圆环定向运动起抑制作用, 圆环半径越大, 粒子间相互作用越弱, 圆环速度越大. 本文的研究结果为在微尺度上活性粒子流的操控提供了新的可能性.

关键词: 手征活性粒子, 受限圆环, 温差, 运输**PACS:** 05.10.Gg, 05.20.-y, 87.16.Uv, 05.60.-k**DOI:** 10.7498/aps.72.20221772

1 引言

活性物质是能将周围环境中的能量转化为自我驱动的一类重要的非平衡体系^[1], 近年来在物理、生物及化学领域, 尤其是在现代纳米科学和生命科学的应用方面受到极大关注, 相关研究取得了巨大进展. 不同于被动粒子, 由于活性物质具有自驱动、自适应的特性, 且可在无序中生有序产生群集运动, 因此具有一系列热力学平衡体系不具备的非平衡性质且表现出新奇的现象^[2-5]. 最近, 一种新型活性物质(手征活性物质)引起了研究者的极大兴趣, 该种物质做环状(或螺旋状)运动而不是直线运动. 自然界中存在多种手征活性物质, 如在界面上顺时针旋转的大肠杆菌^[6], 在薄膜上顺时针运动的 FtsZ 蛋白^[7]. 目前, 研究手征活性粒子主要

集中在三个方面: 群集和相分离^[2,8-16]、不同手征性的混合粒子分离^[17-20]、手征活性粒子的整流^[21-26]. 研究手征活性物质的意义, 一方面能从统计物理学的角度来揭示生命体系的运动和迁移, 丰富非平衡统计物理的相关规律; 另一方面在智能材料与微纳米机器人的设计、解决水资源及土壤污染等环境问题、靶向药物运输和癌症检测等精准医疗领域有突出的应用前景.

手征活性粒子与障碍物之间的相互作用已经在理论、模拟及实验方面进行了很多研究. 2007 年 Galajda 等^[27]率先在实验上验证了大肠杆菌在放置了一组漏斗阵列的腔室中会发生整流现象. 2014 年, Potiguar 等^[5]提出了在没有外场作用的情况下, 不对称凸障碍物能诱导粒子的定向运输. McDermott 等^[28]研究了准一维不对称衬底中活性粒子的集体棘轮效应和流的反转. Ghosh 课题组^[29]

* 国家自然科学基金(批准号: 11905086, 12265014)、江西省自然科学基金(批准号: 20212BAB201015)、江西省赣州市科技计划项目(批准号: 202101095077)和江西理工大学博士科研启动项目资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: gzlufei@126.com

[‡] 通信作者. E-mail: fujun012@yeah.net

对 Janus 粒子的棘轮输运进行了研究, 发现其整流比普通热势棘轮强得多. 此外, 他们还研究了旋转微泳物的定向输运, 发现在上下和左右都不对称的通道能产生净离子流^[23]. Sandor 等^[30]研究了在行波基片作用下, run-and-tumble 主动圆盘的输运情况, 发现在这种输运过程中, 圆盘与基片有一个明显的过渡, 即磁盘只与基片部分耦合, 形成相分离的团簇状态. Reichhardt 课题组^[31–33]研究了随机或周期性障碍阵列以及漏斗阵列中的活性粒子输运行为. Schakenraad 研究组^[34]证明了地形梯度引入了对粒子持续性的空间调节, 导致粒子向更高持久性区域的定向运动. Kaiser 等^[35]证明了在 V 形障碍物中运动的细菌会发生集体捕获现象, 2019 年, Kumar 等^[36]从实验上实现了这种捕获. 2020 年, Ribeiro 及其合作者^[37]研究了不同噪声大小的活性物质在吸引的周期背景势中的扩散机制和捕获行为. 近期, Borba 等^[38]发现活性物质在由不对称障碍物组成的无序晶格中会发生定向输运. 由于障碍物周围容易捕获粒子, 造成活性粒子发生流反转. 叶方富团队联合陈科团队和郑宁课题组^[39]研究了手征活性流体的拓扑边界输运, 证明了在奇黏度增强的耗尽力作用下, 粒子能稳定地位于系统边界, 不受障碍物的影响沿边界单向运动. 陈康教授课题组^[40]研究了活性布朗粒子在二维结构中 with 刷毛表面的相互作用, 结果发现在大自驱动力下, 链束振荡伴随着动态团簇的形成和解体. 艾保全教授课题组^[41,42]研究了由行进障碍阵列驱动的极性粒子的输运和对齐相互作用粒子的俘获行为.

目前, 大多数的活性系统研究中, 活性粒子和障碍物之间并未相互约束, 而在实际系统中, 共同约束在活性粒子的棘轮输运中起重要作用. 如施夏清课题组^[43]研究了自驱动杆状粒子在半柔性弹性环中的集体行为. 结果显示, 不对称的粒子分布对弹性环整体迁移有重要贡献. 田文得课题组^[44]研究了封闭圆环内的活性粒子定向运动导致的柔软圆环的反常形变. 此外, 以往对手征活性粒子的研究主要集中在恒温方面, 平动和转动扩散系数被假定为不耦合. 然而, 温差环境更接近于真实系统. 众所周知, 平动和转动扩散耦合与温度有关. 温差对粒子输运行为有重要影响. 如艾保全教授课题组^[45]研究了在不同边界条件下, 温度差对手征活性粒子定向输运的影响. 尽管如此, 温差条件下包

含手征活性粒子的封闭圆环的输运尚未研究过, 因此, 本文研究了限制在被动环内的手征活性粒子在温差条件下会产生定向运动. 重点研究了环的约束及手征活性粒子对环的驱动对整流的影响.

2 模型和方法

考虑 n 个半径为 r 的手征活性粒子被半径为 R 的封闭圆环包裹, 在二维直通道 (x 方向为周期边界, 周期为 L_x , y 方向为受限边界且满足温差条件, 宽度为 L_y) 中运动, 如图 1(a). 设置 $y = 0$ (低通道壁) 处温度为 T_0 , $y = L_y$ (高通道壁) 处温度为 $T_0 + \delta T$. y 方向的温度梯度可由方程 (1) 描述:

$$T(y) = T_0 + \delta T \frac{y}{L_y} = T_0 \left(1 + \Delta T \frac{y}{L_y} \right), \quad (1)$$

其中 δT 和 ΔT 分别是上通道壁与下通道壁的绝对温差和相对温差. 平动扩散系数和转动扩散系数分别由方程 (2) 和方程 (3) 描述^[46]:

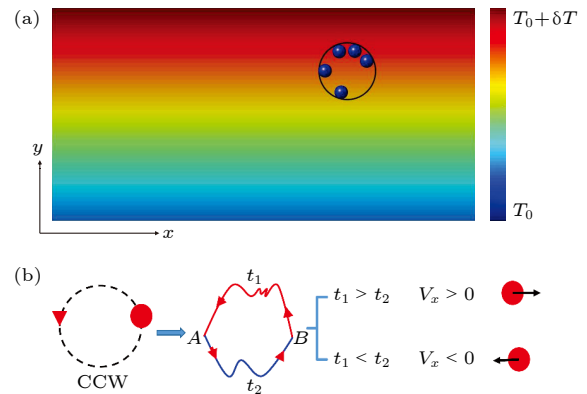


图 1 (a) 手征活性粒子驱动圆环运动的模型. 手征活性粒子驱动包裹它们的圆环在二维周期通道中运动, 通道 x 方向为周期边界, y 方向为受限边界且满足温差条件. 设置 $y = 0$ 处温度为 T_0 , $y = L_y$ 处温度为 $T_0 + \delta T$. y 方向的温度梯度可由方程 (1) 描述. (b) 逆时针旋转粒子 (counterclockwise, CCW) 漂移方向. 当 $t_1 > t_2$ 时, 粒子往右边运动; 当 $t_1 < t_2$ 时, 粒子往左边运动

Fig. 1. (a) Sketch of a ring containing chiral active particles moving in a two-dimensional periodic channel. Periodic boundary conditions are imposed in the x -direction, and hard wall boundaries with temperature difference are imposed in the y -direction. The temperature is set to T_0 at $y = 0$ and $T_0 + \delta T$ at $y = L_y$. The temperature gradient in the y -direction is described by Eq. (1). (b) Sketch of the drift directions for counterclockwise (CCW) particles. The particles on average move to the right for $t_1 > t_2$ and the left for $t_1 < t_2$.

$$D_T(y) = \mu k_B T_0 \left(1 + \Delta T \frac{y}{L_y} \right), \quad (2)$$

$$D_\theta(y) = \mu_r k_B T_0 \left(1 + \Delta T \frac{y}{L_y} \right), \quad (3)$$

其中 k_B 是玻尔兹曼常数. 平动迁移率 μ 和转动迁移率 μ_r 相互独立.

手征活性粒子的运动来源于随机扩散、自驱动力和扭矩的共同作用. 粒子 i 的位置可由 $\mathbf{r}_i \equiv (x_i, y_i)$ 描述, 粒子速度方向由极坐标轴 $\mathbf{n}_i \equiv (\cos \theta_i, \sin \theta_i)$ 中的方向角 θ_i 表示. 这里定义 $\mathbf{F}_i = F_i^x \mathbf{e}_x + F_i^y \mathbf{e}_y = \sum_j \mathbf{F}_{ij}$ 为粒子 i 与其他活性粒子的作用力, $\mathbf{G}_{ic} = G_i^x \mathbf{e}_x + G_i^y \mathbf{e}_y$ 为粒子 i 与圆环的作用力. 对手征活性粒子来说, 作用在粒子上的扭矩会产生角速度, θ 随角速度变化. 此处忽略温度梯度产生的扭矩. 粒子 i 遵循以下过阻尼郎之万方程:

$$\frac{dx_i}{dt} = \mu(F_i^x + G_i^x) + v_0 \cos \theta_i + \sqrt{2D_T(y_i)} \xi_i^x(t), \quad (4)$$

$$\frac{dy_i}{dt} = \mu(F_i^y + G_i^y) + v_0 \sin \theta_i + \sqrt{2D_T(y_i)} \xi_i^y(t), \quad (5)$$

$$\frac{d\theta_i}{dt} = \Omega_i + \sqrt{2D_\theta(y_i)} \xi_i^\theta(t), \quad (6)$$

其中 v_0 表示自驱动速度的振幅. Ω_i 表示角速度, 它的符号决定了活性粒子 i 的手征性. 当 $\Omega_i < 0$ 时, 粒子顺时针旋转 (clockwise, CW); 当 $\Omega_i > 0$ 时, 粒子逆时针旋转 (counterclockwise, CCW). $\xi_i^x(t)$, $\xi_i^y(t)$ 和 $\xi_i^\theta(t)$ 为高斯白噪声.

活性粒子 i 和活性粒子 j 的相互作用力 \mathbf{F}_{ij} 以及活性粒子 i 和圆环的相互作用力 \mathbf{G}_{ic} 用线性弹性力来表示. 如果 $r_{ij} < 2r$, 则 $\mathbf{F}_{ij} = k_1(2r - r_{ij})\mathbf{e}_r$ (否则, $\mathbf{F}_{ij} = 0$), 其中 r_{ij} 是活性粒子 i 和 j 的距离. 如果 $r_{ic} < R - r$, 则 $\mathbf{G}_{ic} = k_2(R - r - r_{ic})\mathbf{e}_r$ (否则, $\mathbf{G}_{ic} = 0$), 其中 r_{ic} 是活性粒子 i 和圆环中心的距离. 用大的 k_1 和 k_2 值来模拟硬粒子, 以确保粒子出现重叠后很快分开.

圆环由活性粒子作用在圆环上的力 $\mathbf{G}_c = G_c^x \mathbf{e}_x + G_c^y \mathbf{e}_y = \sum_i \mathbf{G}_{ci}$ 驱动. 圆环的质心运动方程为

$$\gamma \frac{dx_c}{dt} = G_c^x, \quad (7)$$

$$\gamma \frac{dy_c}{dt} = G_c^y, \quad (8)$$

其中 γ 为摩擦系数. $\mathbf{r} = (x_c, y_c)$ 是圆环的质心. \mathbf{G}_{ci} 是 \mathbf{G}_{ic} 的反作用力.

引入长度和时间尺度量 $\hat{x} = \frac{x}{2r}$, $\hat{y} = \frac{y}{2r}$, $\hat{t} = \mu k t$, 对方程 (4)–(6) 进行无量纲化:

$$\frac{d\hat{x}_i}{d\hat{t}} = \hat{F}_i^x + \hat{G}_i^x + \hat{v}_0 \cos \theta_i + \sqrt{2\hat{D}_T(\hat{y}_i)} \hat{\xi}_i^x(\hat{t}), \quad (9)$$

$$\frac{d\hat{y}_i}{d\hat{t}} = \hat{F}_i^y + \hat{G}_i^y + \hat{v}_0 \sin \theta_i + \sqrt{2\hat{D}_T(\hat{y}_i)} \hat{\xi}_i^y(\hat{t}), \quad (10)$$

$$\frac{d\theta_i}{d\hat{t}} = \hat{\Omega}_i + \sqrt{2\hat{D}_\theta(\hat{y}_i)} \hat{\xi}_i^\theta(\hat{t}), \quad (11)$$

其他参数无量纲化为 $\hat{L}_x = \frac{L_x}{2r}$, $\hat{L}_y = \frac{L_y}{2r}$, $\hat{R} = \frac{R}{2r}$, $\hat{v}_0 = \frac{v_0}{2\mu k r}$, $\hat{D}_T(\hat{y}_i) = \frac{D_T(y_i)}{\mu k r^2}$, $\hat{D}_\theta(\hat{y}_i) = \frac{D_\theta(y_i)}{\mu k}$. 以下讨论均使用无量纲量, 因此所有量上的“帽子”将省略.

使用二阶 Runge-Kutta 算法对方程 (9)–(11) 积分, 得到所有量的动力学行为. 因为 y 方向为有界, 粒子输运只发生在 x 方向, 所以为了量化棘齿效应, 只计算 x 方向的平均速度. 经过长时间计算, 得到圆环在 x 方向的平均速度为

$$V_c = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{x_c(t) - x_c(0)}{t}. \quad (12)$$

3 结果和讨论

在模拟中, 整个积分时间为 10^7 , 积分步长为 10^{-3} . 计算结果是 100 次模拟的平均值. 无特别说明, 其他参数设置为 $L_x = 30.0$, $L_y = 15.0$, $\gamma = 1.0$, $r = 0.5$, $k_1 = k_2 = 1.0$, $k_B = 1.0$, $\mu = 1.0$ 及 $\mu_r = 1.0$. 这里重点研究手征活性粒子驱动圆环的运动. 当粒子加上横向不对称时, 粒子旋转运动被破坏. 以逆时针旋转粒子 (CCW) 为例, 其漂移方向如图 1(b) 所示. 粒子沿上 (下) 轨迹从 $B(A)$ 运动到 $A(B)$ 所需时间为 $t_1(t_2)$. 当 $t_1 > t_2$ 时, 粒子往右边运动, $V_x > 0$; 当 $t_1 < t_2$ 时, 粒子往左边运动, $V_x < 0$. 改变 Ω , T_0 , ΔT , R , v_0 及 n , 计算得到了被手征活性粒子驱动的圆环的平均速度.

图 2 给出了分别包含 CCW 粒子和 CW 粒子的圆环的平均速度 V_c 随角速度 $|\Omega|$ 的变化. 结果显示, 包含 CCW 粒子的圆环速度为正, 包含非手征粒子的圆环速度为 0, 包含 CW 粒子的圆环速度为负数. 圆环的运动方向完全取决于所包含的粒子手征性. 当 $|\Omega| \rightarrow 0$ 时, 手征性消失, 定向运动消失, 因此 V_c 趋于零; 当 $|\Omega| \rightarrow \infty$ 时, 自驱动角度变化太

快,以至于粒子将会经历零平均力,因此, V_c 趋于零. 所以存在一个最优值 $|\Omega|$, 使得 V_c 达到最大值. 当给定 $|\Omega|$ 值时, 包含 CCW 粒子的圆环速度 V_c 等于包含 CW 粒子的圆环速度 $-V_c$, 所以以下讨论中只考虑 CCW 粒子. 可以解释如下: 在自由均匀空间中, 手征活性粒子做圆周运动且运动轨迹的半径为 $v_0/|\Omega|$. 当空间中存在温差时, 圆周运动轨迹被破坏. 由于高温导致运动的随机性, 靠近下通道壁的轨迹比靠近上通道壁的轨迹更具弹道性. 运动轨迹的上半部分更随机且更长, 而下半部分更具方向性且更短. 沿上壁运动时间大于沿下壁运动时间, 因此包含 CCW 粒子的圆环向右运动 ($V_c > 0$). 同理, 包含 CW 粒子的圆环向左运动 ($V_c < 0$). 图 2(a) 为 $R = 3.0$ 时, 在不同手征活性粒子数 n 下的圆环速度随角速度 $|\Omega|$ 的变化. 结果显示, 圆环平均速度 V_c 随手征活性粒子数增多而微量减小. 图 2(b) 和图 2(c) 分别给出了 $n = 1$ 和 $n = 4$ 时, 不

同圆环半径 R 下圆环速度随角速度 $|\Omega|$ 的变化. 结果表明, 当 $n = 1$ 时, V_c 随圆环半径 R 的增大而减小; 而当 $n = 4$ 时, V_c 随圆环半径 R 的增大而增大. 这是由于当圆环只包含一个粒子时, 粒子与圆环的相互作用对圆环定向运动起促进作用, 圆环半径越大, 圆环质心移动速度受手征活性粒子驱动越小, 因而圆环速度越小. 当圆环包含多个粒子时, 粒子间的相互作用对圆环定向运动起抑制作用, 圆环半径越大, 粒子间相互作用越弱, 对圆环定向运动的抑制越小, 因而圆环速度越大. 本文研究的所有输运行为将有类似的结果 (如图 3—图 9). 图 2(d) 给出了在 $n = 4$ 且 $R = 6.0$ 时, 不同温度差 ΔT 下包含 CCW 粒子的圆环速度随角速度 $|\Omega|$ 的变化. 结果显示, V_c 的峰值对应的特征频率来源于噪声振动与角频率之间的竞争, 温度差越大, 特征频率越大.

图 3 所示为在不同手征活性粒子数 n 及不同圆环半径 R 下, 圆环速度 V_c 随下通道壁温度 T_0 的

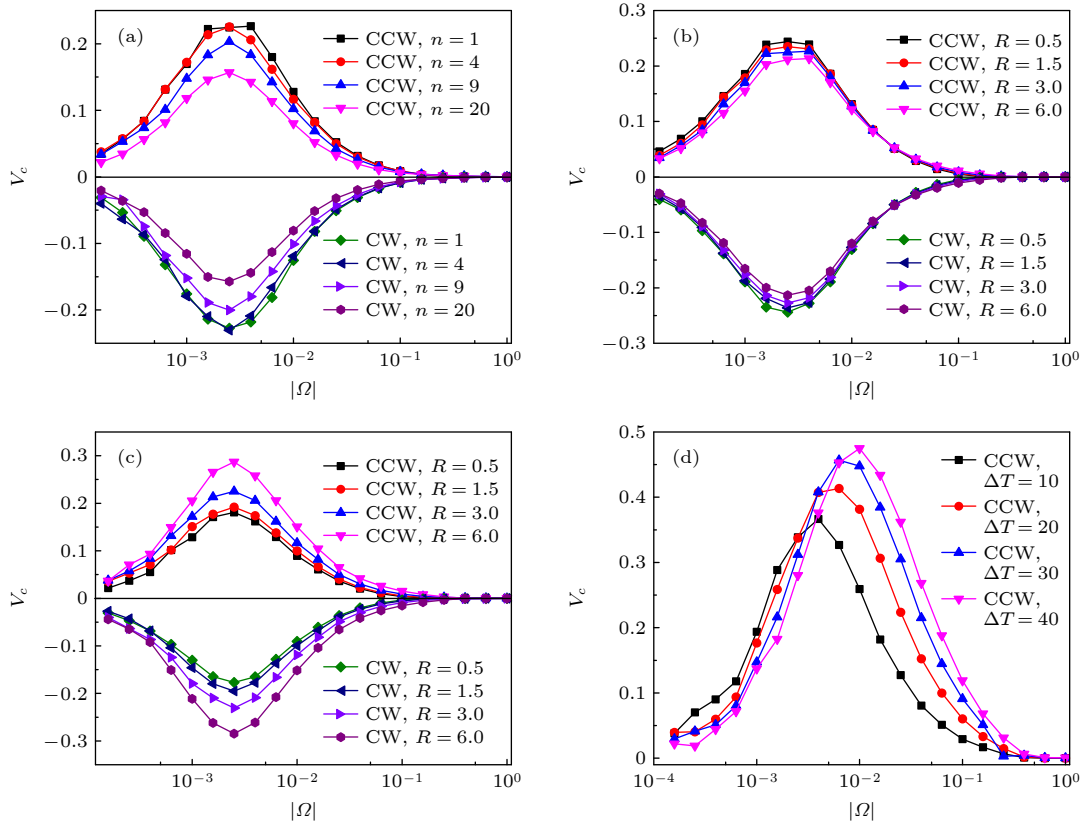


图 2 平均速度 V_c 随角速度 $|\Omega|$ 的变化 (a) 在不同手征活性粒子数 n 下, $R = 3.0$ 且 $\Delta T = 5.0$; (b) 在不同圆环半径 R 下, $n = 1$ 且 $\Delta T = 5.0$; (c) 在不同圆环半径 R 下, $n = 4$ 且 $\Delta T = 5.0$; (d) 在不同 ΔT 下, $n = 4$ 且 $R = 6.0$. 其他参数为 $v_0 = 2.0$ 及 $T_0 = 0.001$

Fig. 2. Average velocity V_c as a function of the angular velocity $|\Omega|$: (a) For different particle number of chiral active particles n at $R = 3.0$ and $\Delta T = 5.0$; (b) for different values of the ring radius R at $n = 1$ and $\Delta T = 5.0$; (c) for different values of the ring radius R at $n = 4$ and $\Delta T = 5.0$; (d) for different values of temperature difference ΔT at $n = 4$ and $R = 6.0$. The other parameters are $v_0 = 2.0$ and $T_0 = 0.001$.

变化. 由图可知, V_c 是下壁温度 T_0 的峰值函数. 当 $T_0 \rightarrow 0$ 时, 平动扩散系数 D_T 、转动扩散系数 D_θ 及平均温度 $T_0(1 + \Delta T/2)$ 趋于零, 手征活性粒子定向运输消失, 因此圆环速度 $V_c \rightarrow 0$. 当 $T_0 \rightarrow \infty$ 时, 平均温度 $T_0(1 + \Delta T/2)$ 非常高, 粒子运动轨迹变

得随机, 由于 D_T 和 D_θ 分别远远大于 v_0 和 Ω , 粒子自驱动速度可以忽略, V_c 趋于零. 因此存在最优值 T_0 使得圆环速度 V_c 达到最大值.

图 4 给出了在不同手征活性粒子数 n 及不同圆环半径 R 下, 圆环速度 V_c 随温度差 ΔT 的变化.

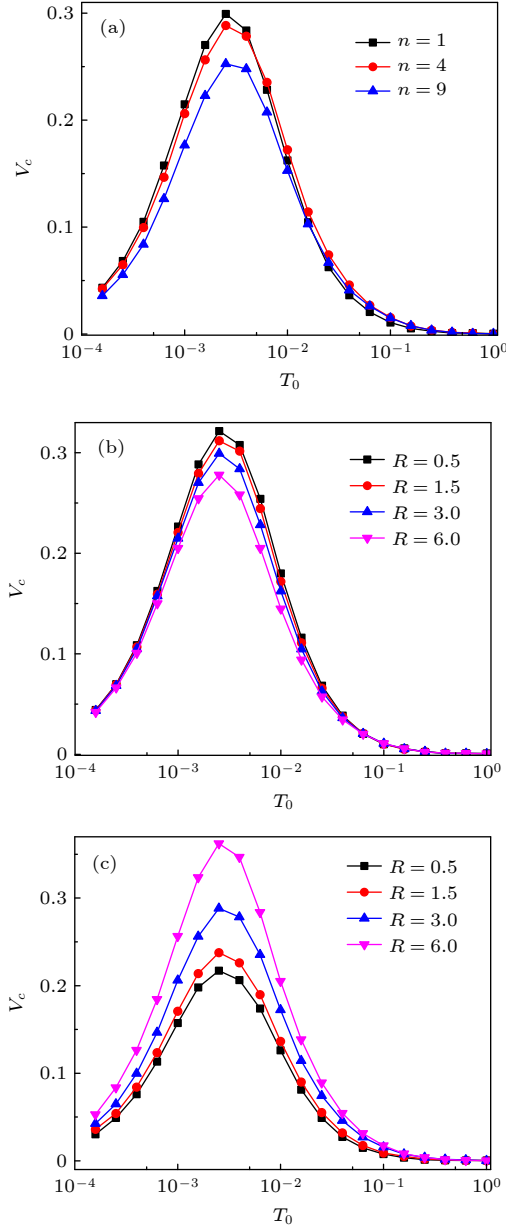


图 3 平均速度 V_c 随下通道壁温度 T_0 的变化 (a) 在不同手征活性粒子数 n 下, $R = 3.0$; (b) 在不同圆环半径 R 下, $n = 1$; (c) 在不同圆环半径 R 下, $n = 4$. 其他参数为 $v_0 = 2.0$, $\Delta T = 10.0$ 及 $\Omega = 0.01$

Fig. 3. Average velocity V_c vs. the temperature T_0 of the lower wall: (a) For different particle number of chiral active particles n at $R = 3.0$; (b) for different values of the ring radius R at $n = 1$; (c) for different values of the ring radius R at $n = 4$. The other parameters are $v_0 = 2.0$, $\Delta T = 10.0$ and $\Omega = 0.01$.

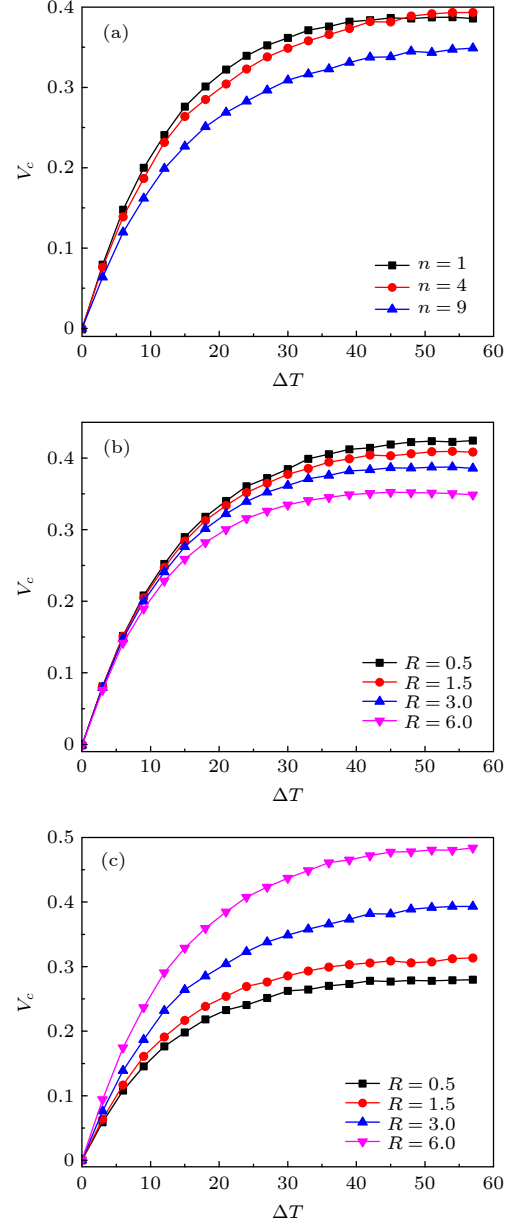


图 4 平均速度 V_c 随温度差 ΔT 的变化 (a) 在不同手征活性粒子数 n 下, $R = 3.0$; (b) 在不同圆环半径 R 下, $n = 1$; (c) 在不同圆环半径 R 下, $n = 4$. 其他参数为 $v_0 = 2.0$, $T_0 = 0.001$ 及 $\Omega = 0.01$

Fig. 4. Average velocity V_c vs. temperature difference ΔT : (a) For different values of chiral active particle number n at $R = 3.0$; (b) for different values of the ring radius R at $n = 1$; (c) for different values of the ring radius R at $n = 4$. The other parameters are $v_0 = 2.0$, $T_0 = 0.001$ and $\Omega = 0.01$.

结果表明, V_c 是温度差 ΔT 的峰值函数 (图中未显示 ΔT 很大时的图像). 当 $\Delta T \rightarrow 0$ 时, 通道空间均匀, 不具有不对称性, 因此手征活性粒子定向输运消失, 圆环速度 V_c 趋于零. 当 $\Delta T \rightarrow \infty$ 时, 平均温度 $T_0(1 + \Delta T/2)$ 非常高, 自驱动速度和粒子手征性可以忽略 ($D_T(y) \gg v_0$ 及 $D_\theta(y) \gg \Omega$), 随机运动占主导地位, 因此 V_c 趋于零. 所以存在最优值 ΔT 使得圆环速度达到最大值.

图 5 是在不同角速度 Ω 下, 平均速度 V_c 随圆环半径 R 的变化. 可以看出, $\Omega = 1.0$ 时, 粒子自驱动角度变化太快, 圆环速度 V_c 趋于零. 这与图 2 结果一致. 当圆环包含一个粒子即 $n = 1$ (图 5(a)), 且 $\Omega = 0.01$ 时, 粒子做圆周运动的轨迹半径 v_0/Ω 较大, 粒子与圆环的相互作用对圆环定向运动起促进作用, 圆环半径 R 越大, 粒子对圆环的驱动力越弱,

因而 V_c 越小; 而当 $\Omega = 0.1$ 时, 粒子做圆周运动的轨迹半径 v_0/Ω 较小, 粒子与圆环的相互作用对圆环定向运动起抑制作用, 圆环定向运动主要来自于 Ω 导致的上下部分轨迹的差异强度, 圆环半径 R 越大, 圆环对粒子抑制作用越弱, 所以 V_c 越大. 当圆环包含多个粒子, 即 $n = 4$ 时 (图 5(b)), 粒子间的相互作用变得重要, 抑制了粒子的定向运动, 从而抑制圆环的定向运动, 随圆环半径增大, 粒子间相互作用减弱, 因而 V_c 随圆环半径 R 的增大而增大.

图 6 显示了在不同下通道壁温度 T_0 下, 平均速度 V_c 随圆环半径 R 的变化. 结果显示, 当圆环包含一个粒子, 即 $n = 1$ 时, V_c 随圆环半径 R 的增大而减小; 当圆环包含多个粒子, 即 $n = 4$ 时, V_c 是圆环半径 R 的峰值函数, 且峰值位置随 T_0 增大而往 R 减小方向移动. 可以解释如下: 当 $n = 1$ 时, 粒子与

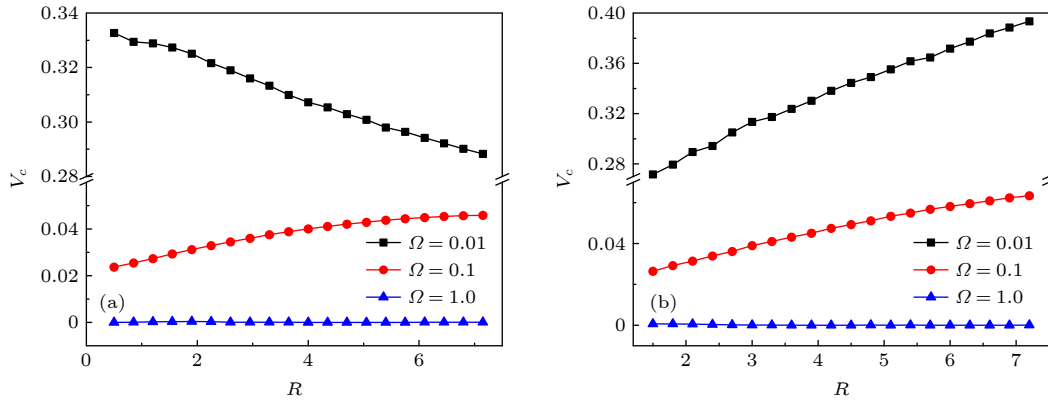


图 5 在不同角速度 Ω 下, 平均速度 V_c 随圆环半径 R 的变化 (a) $n = 1$; (b) $n = 4$. 其他参数为 $v_0 = 2.0$, $T_0 = 0.001$ 及 $\Delta T = 20.0$.

Fig. 5. Average velocity V_c vs. the ring radius R for different angular velocity Ω : (a) $n = 1$; (b) $n = 4$. The other parameters are $v_0 = 2.0$, $T_0 = 0.001$ and $\Delta T = 20.0$.

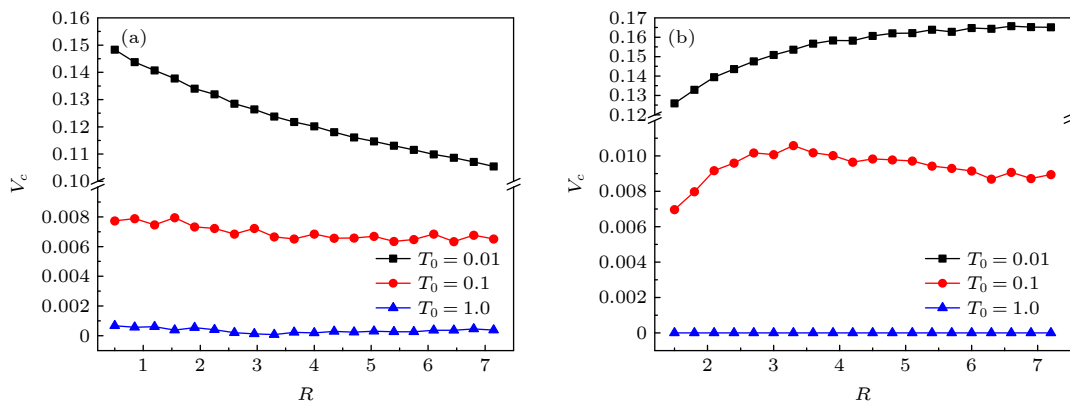


图 6 在不同下通道壁温度 T_0 下, 平均速度 V_c 随圆环半径 R 的变化 (a) $n = 1$; (b) $n = 4$. 其他参数为 $v_0 = 2.0$, $\Omega = 0.01$ 及 $\Delta T = 20.0$.

Fig. 6. Average velocity V_c vs. the ring radius R for different temperature T_0 of the lower wall: (a) $n = 1$; (b) $n = 4$. The other parameters are $v_0 = 2.0$, $\Omega = 0.01$ and $\Delta T = 20.0$.

圆环的相互作用对圆环运动起促进作用, 圆环半径越大, 粒子在圆环内运动的轨迹越长, 粒子对圆环的驱动力越弱, 因而 V_c 随圆环半径 R 的增大而减小. 当 $n = 4$ 时, 圆环的运动由粒子的扩散和粒子间的相互作用共同决定, 当 R 较小时, 粒子的相互作用起主导作用, 抑制了圆环运动, 所以随圆环半径 R 的增大, 抑制作用减弱, V_c 增大; 而当 R 较大时, 粒子间相互作用逐渐减弱, 粒子扩散作用增强, 粒子与圆环的相互作用对圆环运动起促进作用, 因此 V_c 随圆环半径 R 的增大而减小. 值得注意的是, 圆环速度是下壁温度 T_0 的峰值函数, 这与图 3 的结果一致.

图 7 显示了在不同温度差 ΔT 下, 平均速度 V_c 随圆环半径 R 的变化. 当 $n = 1$ 时, V_c 随圆环半径 R 的增大而减小; 当 $n = 4$ 时, V_c 随圆环半径 R 的增大而增大. 这是因为当 $n = 1$ 时, 粒子与圆环的相互作用占主导地位, 对圆环运动起促进作用, 因而 V_c 随圆环半径 R 的增大而减小. 当 $n = 4$ 时, 手征活性粒子间的相互作用抑制了粒子的定向运动, 从而抑制圆环的定向运动, 圆环半径越大, V_c 越大. 温度差 ΔT 越大, 通道空间的不对称性越强, 圆环速度越大. 这一结果与图 4 一致.

图 8 描绘了在不同自驱动速度 v_0 下, 平均速度 V_c 随圆环半径 R 的变化. 可以看出, 当 $n = 1$ 且 v_0 较小时, V_c 是圆环半径 R 的峰值函数, 峰值的位置随 v_0 增大而往 R 减小方向移动, 这是因为 v_0 较小时, 粒子运动轨迹半径 v_0/Ω 较小, 粒子与圆环的相互作用对圆环定向运动起抑制作用, 随着 R 的增大, 圆环对粒子抑制作用变弱, 所以圆环速度增大;

当 R 继续增大, 粒子在圆环内运动的轨迹增长, 粒子与圆环的相互作用减弱, 对粒子沿上半部分和下半部分的轨迹差异性影响越来越小, 因而随 R 增大圆环速度减小; 由于 v_0 的增加致使粒子运动轨迹半径增大, 粒子沿上半部分和下半部分的轨迹差异性增大, 从而促进圆环运动, 所以峰值位置随 v_0 增大而往 R 减小方向移动. 当 $n = 1$ 且 v_0 较大时, V_c 随圆环半径 R 的增大而减小, 这是由于 v_0 较大, 粒子运动轨迹半径 v_0/Ω 较大, 圆环半径 R 越大, 粒子对圆环的驱动力越弱, 因而 V_c 越小. 当 $n = 4$ 时, 粒子间相互作用抑制圆环速度, 随圆环半径 R 增大抑制作用减弱, 因而 V_c 增大.

图 9 给出了在不同手征活性粒子数 n 下, 平均速度 V_c 随圆环半径 R 的变化. 结果表明, 当圆环包含 1 个粒子时, 粒子与圆环的相互作用对圆环速度起促进作用, 且随圆环半径的增大而减小, 因而 V_c 减小. 而当圆环包含多个粒子时, 粒子间的相互作用起主导作用, 对圆环速度起抑制作用, 圆环半径增大, 抑制作用减弱, 圆环速度增大. 特别地, 当 $R < 5.3$ 时, 圆环的限制作用较强, 粒子数越多, 圆环速度越小; 而当 $R > 5.3$ 时, 圆环的限制作用减弱, 粒子数越多, 粒子间相互作用促进粒子的自驱动力, 从而增大圆环速度, 因而 V_c 越大.

图 10 描绘了平均速度 V_c 随自驱动速度 v_0 的变化. v_0 的增加导致两个结果: 1) 加速粒子运动, 从而促进圆环定向运动; 2) 增大粒子圆周运动的轨迹半径 (v_0/Ω), 使得粒子沿上通道和下通道的轨迹差异性增大, 促进圆环定向运动. 因此, v_0 总是促进圆环速度的增大.

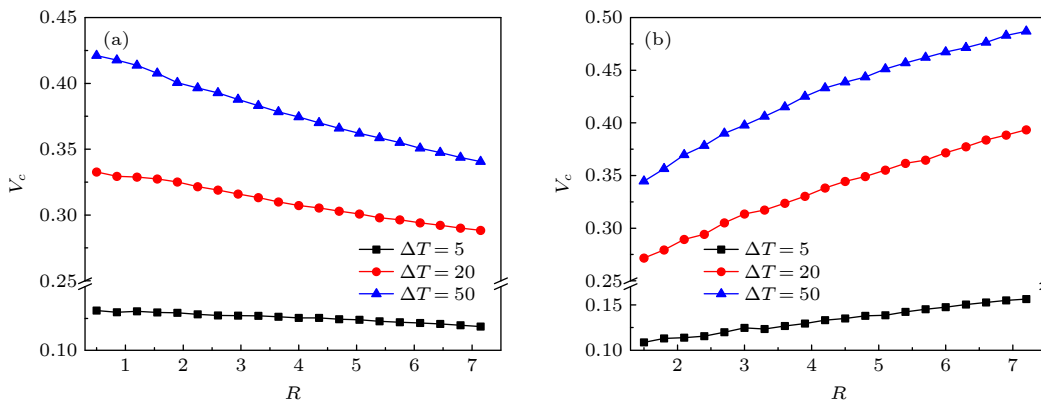


图 7 在不同温度差 ΔT 下, 平均速度 V_c 随圆环半径 R 的变化 (a) $n = 1$; (b) $n = 4$. 其他参数为 $v_0 = 2.0$, $T_0 = 0.001$ 及 $\Omega = 0.011$

Fig. 7. Average velocity V_c vs. the ring radius R for different temperature difference ΔT : (a) $n = 1$; (b) $n = 4$. The other parameters are $v_0 = 2.0$, $T_0 = 0.001$ and $\Omega = 0.01$.

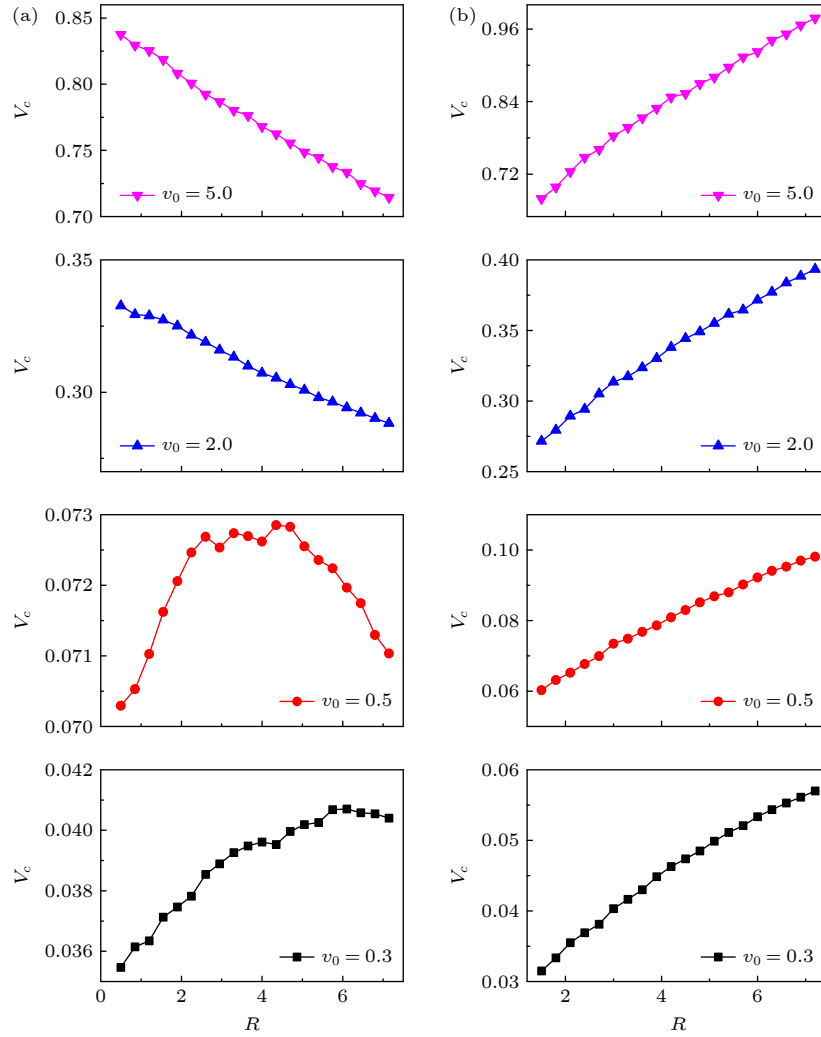


图 8 在不同自驱动速度 v_0 下, 平均速度 V_c 随圆环半径 R 的变化 (a) $n=1$; (b) $n=4$. 其他参数为 $T_0=0.001$, $\Omega=0.01$ 及 $\Delta T=20.0$

Fig. 8. Average velocity V_c vs. the ring radius R for different self-propelled velocity v_0 : (a) $n=1$; (b) $n=4$. The other parameters are $T_0=0.001$, $\Omega=0.01$ and $\Delta T=20.0$.

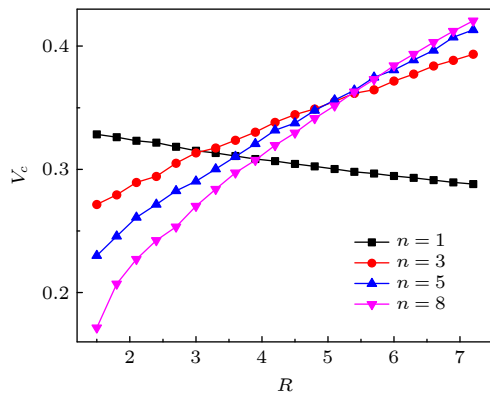


图 9 在不同手征活性粒子数 n 下, 平均速度 V_c 随圆环半径 R 的变化. 其他参数为 $T_0=0.001$, $\Omega=0.01$ 及 $\Delta T=20.0$

Fig. 9. Average velocity V_c vs. the ring radius R for different particle number of chiral active particles n . The other parameters are $T_0=0.001$, $\Omega=0.01$ and $\Delta T=20.0$.

图 11 给出了在不同圆环半径 R 下, 平均速度 V_c 随手征活性粒子数 n 的变化. 当圆环半径较小 ($R=3.0$) 时, V_c 随粒子数的增多而减小. 此时, 圆环与粒子间的相互作用, 即圆环的限制作用起主导地位, 当粒子数增多时, 粒子间相互作用增强, 圆环的限制作用增强, 即粒子与圆环的碰撞次数增多, 方向随机, 从而平均了圆环的定向运动, 抑制圆环的运动速度, 因此 V_c 随粒子数的增多而减小. 当圆环半径较大 ($R=5.3$ 及 7.0) 时, V_c 为粒子个数的峰值函数. V_c 先随 n 的增大而增大, 继而达到最大值, 再随 n 的增大而减小. 可以解释如下: 当粒子数较少时, 粒子间的相互作用促进了圆环的运动, 所以当粒子个数增多时, 圆环的速度增大; 当粒子数较多时, 粒子间相互作用增强, 圆环的限制

作用增强,从而减弱了圆环速度.当粒子个数充满整个圆环时,粒子很挤导致无法运动,因而圆环速度 $V_c \rightarrow 0$.特别地,当圆环半径很大 ($R = 7.0$) 时,粒子间相互作用相比圆环半径较小时更弱,所以圆环速度随粒子个数缓慢降低.此外,我们注意到, $n = 1$ 时,圆环半径越大, V_c 越小;而 $n > 1$ 时,圆

环半径越大, V_c 越大.这一结果与前面结果保持一致.

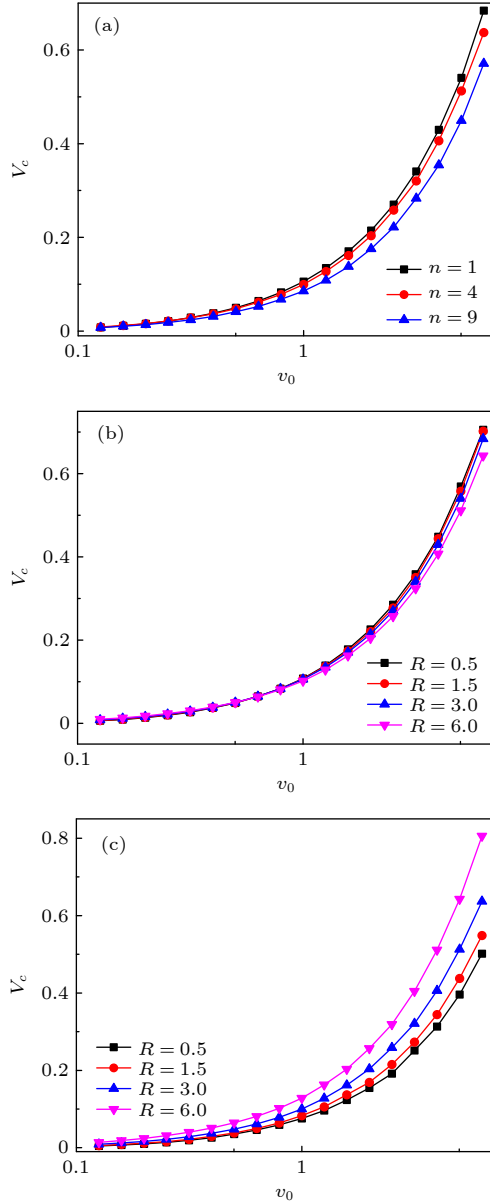


图 10 平均速度 V_c 随自驱动速度 v_0 的变化 (a) 在不同手征活性粒子数 n 下, $R = 3.0$; (b) 在不同圆环半径 R 下, $n = 1$; (c) 在不同圆环半径 R 下, $n = 4$. 其他参数为 $\Delta T = 10.0$, $T_0 = 0.001$ 及 $\Omega = 0.01$

Fig. 10. The average velocity V_c as a function of the self-propelled velocity v_0 : (a) For different particle number of chiral active particles n at $R = 3.0$; (b) for different values of the ring radius R at $n = 1$; (c) for different values of the ring radius R at $n = 4$. The other parameters are $\Delta T = 10.0$, $T_0 = 0.001$ and $\Omega = 0.01$.

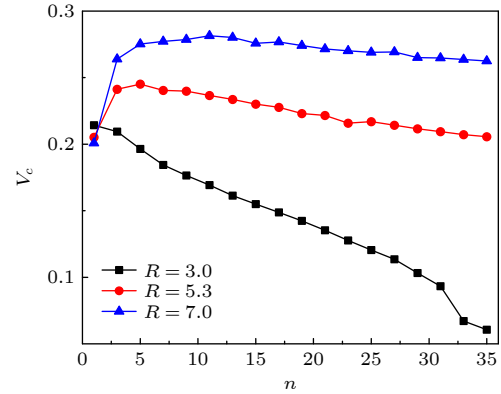


图 11 在不同圆环半径 R 下, 平均速度 V_c 随手征活性粒子数 n 的变化. 其他参数取值为 $T_0 = 0.001$, $\Omega = 0.01$ 及 $\Delta T = 10.0$

Fig. 11. Average velocity V_c vs. particle number of chiral active particles n for different ring radius R . The other parameters are $T_0 = 0.001$, $\Omega = 0.01$ and $\Delta T = 10.0$.

最后来讨论实现该模型可能的实验装置. 在温差条件下考虑枯草芽孢杆菌 (直径为 $1 \mu\text{m}$) 限制在一个由细菌边界层构成的封闭圆环中, 该圆环被枯草芽孢杆菌驱动在周期性的二维通道中运动. 通道周期 $L_x = 30.0 \mu\text{m}$, 通道宽度 $L_y = 15.0 \mu\text{m}$. 因为通道空间存在温度差, 手征活性粒子可以驱动圆环在纵向上定向运动. 圆环的运动状态可以由数字高分辨率显微摄像机捕获, 并由此计算平均速度.

4 结 论

本文数值计算了在温差条件下, 包含手征活性粒子的封闭圆环的运输. 由于周期通道的横向温度差引发的上下不对称和手征活性粒子内部可以打破热平衡的手征性质导致活性粒子在纵向发生定向运动, 继而驱动包裹粒子的封闭圆环定向运输. 圆环的运动方向由粒子的手征性决定. 研究表明, 圆环的运动速度 V_c 是活性粒子的角速度 Ω 、下壁温度 T_0 及温度差 ΔT 的峰值函数. 圆环包含一个手征活性粒子与包含多个手征活性粒子的定向运动行为具有较大差异. 特别是, 圆环半径 R 对两种情况下圆环的运动行为差异影响较大. 当封闭圆环只包含一个粒子且粒子做圆周运动的轨迹半径 v_0/Ω 较大时, 粒子与圆环的相互作用对圆环定向运动起促进作用, 圆环半径 R 越大, 粒子对圆环的驱动力

越弱, 因而圆环速度 V_c 随圆环半径 R 的增大而减小; 当粒子做圆周运动的轨迹半径 v_0/Ω 较小时, 粒子与圆环的相互作用对圆环定向运动起抑制作用, 圆环定向运动主要来自于 Ω 导致的上下部分轨迹的差异强度, 圆环半径 R 越大, 圆环对粒子抑制作用越弱, 所以 V_c 越大. 当封闭圆环包含多个粒子时, 粒子间的相互作用变得重要, 抑制了粒子的定向运动, 从而抑制圆环的定向运动, 随着圆环半径 R 的增大, 粒子间相互作用减弱, 因而 V_c 随圆环半径 R 的增大而增大. 值得注意的是, 当圆环半径较小 ($R = 3.0$) 时, V_c 随粒子数 n 的增多而减小; 当圆环半径较大 ($R = 5.3, 7.0$) 时, V_c 为粒子个数 n 的峰值函数. 本文的结果可以应用于通过细菌或人工微米粒子来驱动封闭障碍物或马达运动, 如混合微设备工程、药物运输、微流体及芯片技术.

参考文献

- [1] Bechinger C, Di Leonardo R, Löwen H, Reichhardt C, Volpe G 2016 *Rev. Mod. Phys.* **88** 045006
- [2] Liebchen B, Levis D 2017 *Phys. Rev. Lett.* **119** 058002
- [3] Levis D, Liebchen B 2018 *J. Phys.: Condens. Matter* **30** 084001
- [4] Reichhardt C J O, Reichhardt C 2017 *Nat. Phys.* **13** 10
- [5] Potiguar F Q, Farias G A, Ferreira W P 2014 *Phys. Rev. E* **90** 012307
- [6] Langa E, DiLuzio W R, Whitesides G M, Stone H A 2006 *Biophys. J.* **90** 400
- [7] Loose M, Mitchison T J 2014 *Nat. Cell Biol.* **16** 38
- [8] Nguyen N H P, Klotz D, Engel M, Glotzer S C 2014 *Phys. Rev. Lett.* **112** 075701
- [9] Scholz C, Engel M, Pöschel T 2018 *Nat. Commun.* **9** 931
- [10] Scholz C, Jahanshahi S, Ldov A, Löwen H 2018 *Nat. Commun.* **9** 5156
- [11] Lei Q, Ciamarra M P, Ni R 2019 *Sci. Adv.* **5** eaau7423
- [12] Liao G J, Klapp S H L 2018 *Soft Matter* **14** 7873
- [13] Reichhardt C, Reichhardt C J O 2019 *J. Chem. Phys.* **150** 064905
- [14] Metselaar L, Doostmohammadi A, Yeomans J M 2019 *J. Chem. Phys.* **150** 064909
- [15] Ma F, Wang S, Wu D T, Wu N 2015 *Proc. Natl. Acad. Sci.* **112** 6307
- [16] Ventejou B, Chaté H, Montagne R, Shi X 2021 *Phys. Rev. Lett.* **127** 238001
- [17] Mijalkov M, Volpe G 2013 *Soft Matter* **9** 6376
- [18] Ai B Q, Chen Q 2015 *J. Chem. Phys.* **143** 104113
- [19] Ai B Q, He Y F, Zhong W R 2015 *Soft Matter* **11** 3852
- [20] Nourhani A, Crespi V H, Lammert P E 2015 *Phys. Rev. Lett.* **115** 118101
- [21] Olson Reichhardt C J, Reichhardt C 2017 *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **8** 51
- [22] Liao J J, Huang X Q, Ai B Q 2018 *J. Chem. Phys.* **148** 094902
- [23] Li Y, Ghosh P K, Marchesoni F, Li B 2014 *Phys. Rev. E* **90** 062301
- [24] Geiseler A, Hänggi P, Marchesoni F, Mulhern C, Savel'ev S 2016 *Phys. Rev. E* **94** 012613
- [25] Ghosh P K, Li Y, Marchesoni F, Nori F 2015 *Phys. Rev. E* **92** 012114
- [26] Geiseler A, Hänggi P, Marchesoni F 2017 *Sci. Rep.* **7** 41884
- [27] Galajda P, Keymer J, Chaikin P, Austin R 2007 *J. Bacteriol.* **189** 8704
- [28] McDermott D, Reichhardt C J O, Reichhardt C 2016 *Soft Matter* **12** 8606
- [29] Ghosh P K, Misko V R, Marchesoni F, Nori F 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 268301
- [30] Sandor C, Libal A, Reichhardt C, Reichhardt C J O 2017 *Phys. Rev. E* **95** 012607
- [31] Reichhardt C, Reichhardt C J O 2018 *Phys. Rev. E* **97** 052613
- [32] Reichhardt C, Reichhardt C J O 2017 *J. Phys.: Condens. Matter* **30** 015404
- [33] Reichhardt C J O, Reichhardt C 2018 *New J. Phys.* **20** 025002
- [34] Schakenraad K, Ravazzano L, Sarkar N, Wondergem J, Gioni 2020 *Phys. Rev. E* **101** 032602
- [35] Kaiser A, Popowa K, Wensink H H, Löwen H 2013 *Phys. Rev. E* **88** 022311
- [36] Kumar N, Gupta R K, Soni H, Ramaswamy S, Sood A K 2019 *Phys. Rev. E* **99** 032605
- [37] Ribeiro H E, Ferreira W P, Potiguar F Q 2020 *Phys. Rev. E* **101** 032126
- [38] Borba A D, Domingos J L, Moraes E C B, Potiguar F Q, Ferreira W P 2020 *Phys. Rev. E* **101** 022601
- [39] Yang Q, Zhu H, Liu P, Liu R, Shi Q, Chen K, Zheng N, Ye F, Yang M 2021 *Phys. Rev. Lett.* **126** 198001
- [40] Yang Q, Fan Q, Shen Z, Xia Y, Tian W, Chen K 2018 *J. Chem. Phys.* **148** 214904
- [41] Zhong W R, Xiong J W, Ai B Q 2018 *J. Chem. Phys.* **149** 174906
- [42] Zhu W J, Huang X Q, Ai B Q 2018 *Chin. Phys. B* **27** 080504
- [43] Zhong Y, Shi X Q 2020 *Acta Phys. Sin.* **69** 080507 (in Chinese) [仲颖, 施夏清 2020 物理学报 **69** 080507]
- [44] Tian W D, Gu Y, Guo Y K, Chen K 2017 *Chin. Phys. B* **26** 100502
- [45] Ai B Q, Li J J, Li Z Q, Xiong J W 2019 *J. Chem. Phys.* **150** 184905
- [46] Volpe G, Gigan S, Volpe G 2014 *Am. J. Phys.* **82** 659

Transport of closed ring containing chiral active particles under transversal temperature difference^{*}

Liao Jing-Jing Kang Qi Luo Fei[†] Lin Fu-Jun[‡]

(School of Science, Jiangxi University of Science and Technology, Ganzhou 341000, China)

(Received 11 September 2022; revised manuscript received 24 November 2022)

Abstract

Active matter is a new and challenging field of physics. Chiral active particle experiences a constant torque and performs circular motion due to the self-propulsion force not aligning with the propulsion direction. Recently, most of studies of the active particle systems focused on constant temperature, but did not take into consideration the constraints by the barriers. In our work, the rectification of a ring containing chiral active particles with transversal temperature difference is numerically investigated in a two-dimensional periodic channel. It is found that the ring powered by chiral active particles can be rectified by the transversal temperature difference and the direction of the transport is determined by the chirality of active particles. The average velocity is a peaked function of angular velocity, the temperature of the lower wall or temperature difference. The transport behaviors of the ring containing one chiral active particle is qualitatively different from those of the ring containing several particles. Especially, the ring radius can strongly affect the transport behaviors. For the ring containing one chiral active particle, the interaction between the particle and the ring facilitates the rectification of the ring when the circular trajectory radius of the chiral particle is large. The average velocity decreases with the increase of the ring radius because the propelling force to the ring by the particle is small. When the circular trajectory radius is small, the interaction between the particle and the ring suppresses the transport. The speed increases as the ring radius increases because the directional transport comes from the difference in temperature between the upper wall and the lower wall. For the ring containing several particles, the interaction between particles reduces the rectification of the ring. The average velocity increases with the increase of the ring radius due to the interaction between particles decreasing. Remarkably, the velocity of the ring decreases as the particle number increases when the ring radius is small, but is a peaked function when the ring radius is not small. Our results offer new possibilities for manipulating an active particle flow on a microscale, and can be applied practically to propelling carriers and motors by a bath of bacteria or artificial microswimmers, such as hybrid micro-device engineering, drug delivery, micro-fluidics, and lab-on-chip technology.

Keywords: chiral active particles, confined ring, temperature difference, transport

PACS: 05.10.Gg, 05.20.-y, 87.16.Uv, 05.60.-k

DOI: 10.7498/aps.72.20221772

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11905086, 12265014), the Natural Science Foundation of Jiangxi Province, China (Grant No. 20212BAB201015), the Science and Technology Planning Project of Ganzhou City, China (Grant No. 202101095077), and the Research Foundation for Advanced Talents of Jiangxi University of Science and Technology, China.

[†] Corresponding author. E-mail: gzuofei@126.com

[‡] Corresponding author. E-mail: fujun012@yeah.net

温差条件下包含手征活性粒子的封闭圆环的输运

廖晶晶 康琦 罗飞 蔺福军

Transport of closed ring containing chiral active particles under transversal temperature difference

Liao Jing-Jing Kang Qi Luo Fei Lin Fu-Jun

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 030501 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20221772

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20221772>

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

混合手征活性粒子在时间延迟反馈下的扩散和分离

Diffusion and separation of binary mixtures of chiral active particles driven by time-delayed feedback

物理学报. 2020, 69(22): 220501 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200505>

高能透射电子束照射聚合物薄膜的带电效应

Charging effect of polymer thin film under irradiation of high-energy transmission electron beam

物理学报. 2019, 68(23): 230201 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191112>

电介质/半导体结构样品电子束感生电流瞬态特性

Transient characteristics of electron beam induced current in dielectric and semiconductor sample

物理学报. 2020, 69(6): 060201 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191543>

椭圆波束对非均匀手征分层粒子的俘获特性研究

Analysis of trapping force exerted on multi-layered chiral sphere induced by laser sheet

物理学报. 2022, 71(10): 104208 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212284>

外加电场作用下的壁面约束衰亡等离子体中带电粒子非平衡输运特性

Non-equilibrium transport of charged particles in a wall-confined decaying plasma under an externally applied electric field

物理学报. 2022, 71(23): 232801 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20221431>

手征马约拉纳费米子

Chiral Majorana fermion

物理学报. 2020, 69(11): 117302 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200534>