

具有不同扩散系数的活性手征粒子分离*

李晨璞¹⁾ 吴魏霞²⁾ 张礼刚¹⁾ 胡金江¹⁾ 谢革英¹⁾ 郑志刚^{3)4)†}

1) (河北建筑工程学院数理系, 张家口 075000)

2) (北京印刷学院基础教育学院, 北京 102600)

3) (华侨大学系统科学研究所, 厦门 361021)

4) (华侨大学信息科学与工程学院, 厦门 361021)

(2024年5月14日收到; 2024年7月16日收到修改稿)

近几年对活性粒子的研究已成为很多领域研究者关注的重要课题之一, 其中关于活性手征粒子的相分离问题具有重要的理论和实际意义. 本文通过朗之万动力学研究了具有不同扩散系数的活性手征粒子组成的二元混合系统中粒子的相分离. 较小的相对扩散系数有利于“冷”粒子形成大的团簇而分离, 较大的相对扩散系数则会减弱分离效果. 由于粒子特征(自驱动速度、自转角速度)和相对扩散系数对粒子间碰撞作用的影响, 系统要使“冷”“热”粒子达到相分离, 自驱动速度和自转角速度的增大(或减小)不能同步, 自驱动速度的相对变化率要小于自转角速度的相对变化率. 通过分析“冷”粒子有效扩散系数的变化, 系统相分离现象得到了很好的解释. 有效扩散系数较小意味着“冷”粒子会聚集形成较大的团簇, 系统可出现相分离现象, 而当有效扩散系数较大时“冷”粒子的扩散较强, 不会形成大的团簇产生相分离. 另外, 随着粒子填充率的增大“冷”粒子最大团簇粒子数占比曲线进行先增大后减小的非单调变化, 每条曲线存在一段最优粒子填充率宽度. 相对扩散系数和自驱动速度的增大, 会使曲线的最优填充率宽度变窄并向右偏移.

关键词: 活性粒子, 手征, 朗之万方程, 扩散系数

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

CSTR: 32037.14.aps.73.20240686

DOI: 10.7498/aps.73.20240686

1 引言

活性粒子是具有自驱动能力的个体, 它们通过消耗自身或周围环境的能量来实现自我驱动^[1,2]. 由于活性粒子具有热平衡物质所没有的新颖性质, 近几年在物理、生物及化学等领域, 尤其在微纳米科学和生命科学方面活性粒子的应用备受关注^[3-9], 如精子、大肠杆菌等生物粒子以及一些人造活性粒子等^[10-15]. 依据运动方式的不同, 活性粒子大致可分为自驱动粒子(粒子具有自驱动速度, 没有自转角速度)、活性手征粒子(粒子具有自驱动速度, 也

有自转角速度)和极性活性手征粒子(粒子具有自驱动速度和自转角速度, 而且粒子取向遵循一定的规则)^[16-18]. 活性粒子因其可产生自我驱动的非平衡动力学性质被广泛研究, 其中定向输运和相分离已成为当前微观粒子输运研究中一个重要课题^[19-24]. 在由大量活性手征粒子组成的系统中活性粒子分离有多种方式, 如利用非对称障碍物进行分离^[25-28]、引入反馈机制进行分离机制^[29]、采用不同类粒子相混合进行分离等^[30,31], 这些分离方式主要是针对混合在一起两种不同手征的活性粒子进行分离.

Weber等^[32]研究了具有不同扩散系数的被动粒子组成的二元混合系统中粒子的相分离现象, 由

* 国家自然科学基金(批准号: 12375031, 11875135)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zgzheng@hau.edu.cn

于粒子间的相互碰撞作用,尤其是扩散系数不同的两种粒子的相互作用,扩散系数较小的粒子逐渐聚集到一起形成团簇,而扩散系数较大的粒子分散在团簇周围形成相对稀疏的类气相^[23].在此基础上,Kumari等^[33]通过引入周期势场,进一步优化了上述混合系统中具有不同扩散系数被动粒子的分离,扩散系数小的粒子会聚集到势场极小值附近,产生更好的分离效果.然而不同扩散系数对活性手征粒子分离的影响尚未被研究,本文的研究点聚焦于此.本文将详细分析在不同扩散系数活性手征粒子组成的二元混合系统中相对扩散系数、活性粒子的自驱动速度、自转角速度以及粒子填充率对系统中粒子分离效果的影响.

2 动力学模型

同文献^[32, 33]一样,一个由 N 个活性手征粒子组成的二元混合平面系统,系统是边长为 L 的正方形格子,且系统满足周期性边界条件.在系统中 $N_{\text{hot}} = N/2$ 个“热”粒子的平动扩散系数 D_{TH} 较大,而另外 $N_{\text{cold}} = N/2$ 个“冷”粒子的平动扩散系数 D_{TL} 则较小.引入相对平动扩散系数 $D = D_{\text{TL}}/D_{\text{TH}}$,它反映了两种粒子平动扩散系数的相对大小,为了便于后续的分析本文令 $D_{\text{TH}} = 1$.在过阻尼条件下活性手征粒子满足如下的朗之万动力学方程:

$$\frac{dx_i}{dt} = v_0 \cos \theta_i + \mu \sum_{j=1}^N F_{ij}^x + \sqrt{2D_{\text{T}}}\xi_i^x(t), \quad (1)$$

$$\frac{dy_i}{dt} = v_0 \sin \theta_i + \mu \sum_{j=1}^N F_{ij}^y + \sqrt{2D_{\text{T}}}\xi_i^y(t), \quad (2)$$

$$\frac{d\theta_i}{dt} = \omega + \sqrt{2D_{\theta}}\xi_i^{\theta}(t), \quad (3)$$

其中, x_i , y_i , θ_i 分别是粒子的横坐标、纵坐标和角坐标, $i = 1, 2, \dots, N$. v_0 是粒子的自驱动速度, μ 是迁移率. D_{T} 和 D_{θ} 分别为平动扩散系数和转动扩散系数, ξ_i 是均值为零的高斯白噪声,满足 $\langle \xi_i^{\alpha} \xi_j^{\beta}(t') \rangle = \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta} \delta(t - t')$, $\alpha, \beta = x, y, \theta$. ω 是粒子的自转角速度, $\omega > 0$ 表示粒子逆时针转动, $\omega < 0$ 表示顺时针转动,当 $\omega = 0$ 时粒子成为没有手征性的自驱动粒子.

粒子间的相互作用采用短程的弹性简谐力,当 $r_{ij} < 2a$ 时 $\mathbf{F}_{ij} = -k(r_{ij} - 2a)\mathbf{r}_0$,其中 $\mathbf{r}_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$,

$\mathbf{r}_0 = (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)/r_{ij}$ 是 \mathbf{r}_{ij} 的单位矢量, a 是粒子的半径, k 是弹性系数,而当 $r_{ij} \geq 2a$ 时 $\mathbf{F}_{ij} = 0$.

引入时间尺度 $1/(\mu k)$ 和长度尺度 a 对方程(1)–(3)进行无量纲化,无量纲化后的朗之万动力学方程为

$$\frac{d\hat{x}_i}{dt} = \hat{v}_0 \cos \hat{\theta}_i + \sum_{j=1}^N \hat{F}_{ij}^x + \sqrt{2\hat{D}_{\text{T}}}\hat{\xi}_i^x(t), \quad (4)$$

$$\frac{d\hat{y}_i}{dt} = \hat{v}_0 \sin \hat{\theta}_i + \sum_{j=1}^N \hat{F}_{ij}^y + \sqrt{2\hat{D}_{\text{T}}}\hat{\xi}_i^y(t), \quad (5)$$

$$\frac{d\hat{\theta}_i}{dt} = \hat{\omega} + \sqrt{2\hat{D}_{\theta}}\hat{\xi}_i^{\theta}(t), \quad (6)$$

其中 $\hat{x}_i = x_i/a$, $\hat{y}_i = y_i/a$, $\hat{t} = \mu kt$, $\hat{y}_0 = v_0/(\mu ka)$, $\hat{\omega} = \omega/(\mu k)$, $\hat{D}_{\text{T}} = D_{\text{T}}/(\mu k)$, $\hat{D}_{\theta} = D_{\theta}/(\mu k)$.在后续的讨论分析中,文中均采用无量纲量,为了便于书写省略各参量上面的“帽子”.本文采用 Runge-Kutta 二阶随机算法对(4)式–(6)式进行数值模拟.在模拟计算中,粒子初始位置和初始方向分别在正方形格子(即初始时刻“冷”“热”粒子均匀随机分布在方形格子中)和 $[0, 2\pi]$ 范围内均匀随机分布,模拟计算的时间步长为 $dt = 10^{-3}$,总时间为 10^4 .为了减小误差提高精度,计算结果均采用计算 20 次后的统计平均值,其他参数 $L = 40$, $a = 1$, $\mu = 1$, $k = 100$, $N = 300$, $D_{\text{TH}} = 1$.

3 结果分析

在研究分析粒子分离时,最大团簇粒子数比是一个可以反应粒子分离效果的重要参数.因在系统中主要形成的是“冷”粒子团簇,所以关注重点是“冷”粒子的聚集情况,则对于“冷”粒子其最大团簇粒子数占比 $P = \langle n_{\text{max}} \rangle \times 100/N_{\text{cold}}$,其中 n_{max} 是“冷”粒子形成的最大团簇中“冷”粒子数.相对于被动粒子(自驱动速度 $v_0 = 0$,自转角速度 $\omega = 0$),活性手征粒子的自驱动速度 v_0 和自转角速度 ω 均不为零,这两个参量必然会对系统中活性粒子的分离效果产生重要影响.另外,粒子填充率反映了系统中粒子总面积占方形格子面积的比例,即系统中所有粒子占的面积与二维平面系统面积之比 $\Phi = N\pi a^2/L^2$.相对平动扩散系数 $D = D_{\text{TL}}/D_{\text{TH}}$ 对分离效果的影响也不容忽略.另外,为了更好地解释“冷”粒子的聚集,引入“冷”粒子有效扩散系数 D_{eff} ^[29,34]:

$$D_{\text{effL}} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{4t} \langle |\Delta \mathbf{r}_i(t)|^2 \rangle, \quad (7)$$

其中 $\Delta \mathbf{r}_i(t) \equiv \mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_i(0)$, $i = 1, 2, \dots, N_{\text{cold}}$.

3.1 不同粒子系统中的粒子相分离

对于存在不同平动扩散系数 D_{TL} 和 D_{TH} 的“冷”(蓝色)“热”(红色)粒子组成的被动粒子系统, 由于粒子间的相互作用和“冷”粒子相对于“热”粒子较小的扩散行为, “冷”粒子会被“热”粒子逐渐包围而聚集形成团簇, 达到分离效果, 如图 1(a) 所示. 图 1(b), (c) 显示的是在自驱动粒子(即自转角速度 $\omega = 0$, 自驱动速度 $v_0 \neq 0$)组成的系统中, “冷”“热”粒子的分离情况. 不同之处是图 1(b) 中 $v_0 = 0.1$ 比较小, 而图 1(c) 中 $v_0 = 1$ 则比较大, 由图 1(b), (c) 可以看到, 粒子的聚集效果完全不同. 图 1(b) 显示当系统中粒子的 v_0 较小时, v_0 对“冷”粒子形成团簇的影响很小, 可以近似忽略.“冷”粒子运动缓慢“热”粒子运动活跃, 由于粒子间的相互作用“冷”粒子逐渐被“热”粒子包围而聚集,

情况类似图 1(a) 中显示的被动粒子. 在图 1(c) 显示的系统中的粒子的 v_0 较大, “冷”粒子的扩散行为加强, v_0 对“冷”粒子团簇形成的作用不可忽视. 由于 v_0 较大“热”粒子并不能通过粒子间的相互作用而使“冷”粒子聚集, 较大的自驱动速度使“冷”粒子可冲破“热”粒子的束缚, 此时“冷”粒子不会形成团簇而出现相分离现象. 图 1(d) 显示的是由活性手征粒子(即 $\omega \neq 0$, $v_0 \neq 0$)组成的系统, 其中 $v_0 = 1$, $\omega = 10$. 由图 1(c), (d) 可以看到, 当 v_0 均为 1 的情况下, 在由自驱动粒子组成的系统(图 1(c))与由活性手征粒子组成的系统(图 1(d))中粒子的聚集效果完全不同, ω 具有重要作用. 活性手征粒子运动时的重要物理量是回转半径 $R = v_0/\omega$, 其大小近似反映了粒子活动范围. 对于活性手征粒子系统, $v_0 = 1$ 较大但是由于 $\omega = 10$ 的存在, 这使得粒子的回转半径 $R = 0.1$, 即粒子的扩散减弱, 活动范围较小. 此时“冷”粒子会逐渐聚到一起形成团簇而产生相分离.

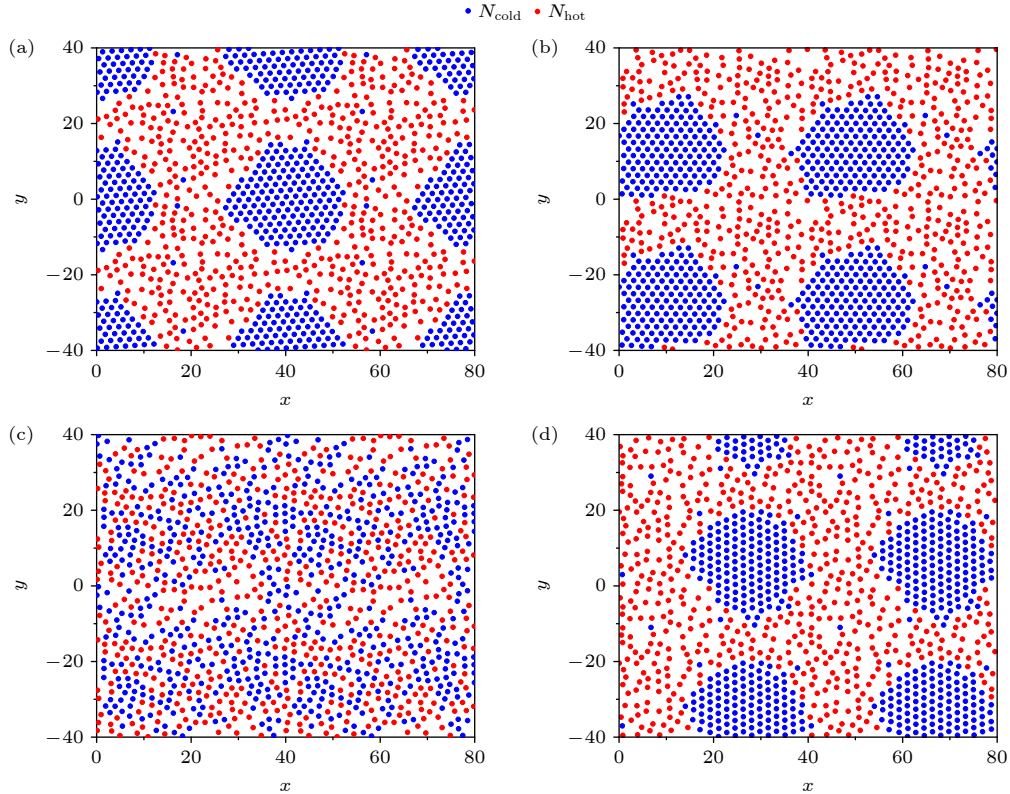


图 1 三种不同系统中粒子的相分离 ($N_{\text{cold}} = N_{\text{hot}} = N/2 = 150$, $D = D_{\text{TL}}/D_{\text{TH}} = 0.001$) (a) 被动粒子系统 ($v_0 = 0$, $\omega = 0$); (b) 自驱动粒子系统 ($v_0 = 0.1$, $\omega = 0$); (c) 自驱动粒子系统 ($v_0 = 1$, $\omega = 0$); (d) 活性手征粒子系统 ($v_0 = 1$, $\omega = 10$)

Fig. 1. Phase separation of particles in three different systems ($N_{\text{cold}} = N_{\text{hot}} = N/2 = 150$, $D = D_{\text{TL}}/D_{\text{TH}} = 0.001$): (a) The system of passive particles ($v_0 = 0$, $\omega = 0$); (b) the system of self-driven particles ($v_0 = 0.1$, $\omega = 0$); (c) the system of self-driven particles ($v_0 = 1$, $\omega = 0$); (d) the system of active chiral particles ($v_0 = 1$, $\omega = 10$).

3.2 相对扩散系数对分离效果的影响

在本文建立的活性手征粒子二元混合系统中,“冷”粒子能否逐渐聚集形成团簇而达到分离主要由 3 个量决定,分别是粒子回转半径 R (由 v_0 和 ω 决定)、相对扩散系数 D 和粒子间的相互作用,后文将详细对这些量进行讨论.

图 2 和图 3 分别是不同的 v_0 和 ω 时“冷”粒子的最大团簇粒子数占比 P 和有效扩散系数 D_{effL} 随相对扩散系数 D 的变化曲线,两图中曲线两两相互对应.对于图 2 中的 6 条曲线,总体上当 D 增大过程中 P 逐渐减小,而图 3 中的 6 条曲线 D_{effL} 值逐渐增大.这说明在 D 较小时,“冷”粒子的扩散较弱有利于粒子的分离,而大的 D 使“冷”粒子的扩散行为增强,粒子不会出现相分离现象.对于 (v_0, ω) 分别等于 $(0.1, 1)$, $(0.1, 10)$, $(0.1, 50)$ 这 3 条曲线,即回旋半径 R 分别为 0.1, 0.01, 0.002,由图 2 和图 3 可以看到,当 D 很小 $(0.001\text{--}0.05$ 区间范围)时, P 均大于 80 而 D_{effL} 值在 0.018 附近相对较小.此时“冷”粒子的扩散行为较弱,可很好地聚集而产生大的团簇.小的扩散和小的回旋半径 R 意味着“冷”粒子在很小范围内原地转动,并伴有不断无规则小波动,同时扩散较大的“热”粒子通过碰撞使得“冷”粒子逐渐聚集而形成大的团簇.“冷”粒子的小范围活动,对于其形成大的团簇很重要.随着 D 的增大 $(0.005\text{--}0.07$ 区间范围), P 很快从 80 减小到 50, D_{effL} 增大到 0.027.这时“冷”粒子虽然仍有小的回旋半径 R ,但是 D 的增大使得部分“冷”粒子扩散增强突破了周围“热”粒子的束缚,系统很难形成较大的“冷”粒子团簇.随着 D 的进一步增大 $(0.07\text{--}1$ 区间范围), P 从 50 进一步减小到 10,而 D_{effL} 仍然保持在较大的 0.027,“冷”粒子大的无规则扩散运动更容易挣脱“热”粒子的束缚,不会形成大团簇.对于 (v_0, ω) 分别等于 $(3, 10)$ 和 $(1, 1)$ 这两条曲线即回旋半径 R 分别等于 0.3, 1,由图 2 和图 3 可以看到,不管 D 很大还是很小, P 都很小,而 D_{effL} 却很大(如图 2 中 $P < 30$,图 3 中 $D_{\text{effL}} = 0.027$),这表明此时“冷”粒子的扩散行为较强,在方形格子系统中“冷”粒子形成的团簇粒子数都很小.粒子回转半径 R 的增大使得粒子(不管“冷”粒子还是“热”粒子)的活动范围较大,不再是小范围“原地踏步”,尤其是当 D 较大时在大回转和扩散二者的双重作用下,“冷”粒子不会聚集到一起形成

大团簇.

另外,当 $(v_0, \omega) = (1, 10)$ 时,图 3 中 D_{effL} 值与图 2 中的 P 值对应不太理想,曲线被 $D = 0.05$ 分为两段,如图中虚线所示.当 $D > 0.05$ 时, $D_{\text{effL}} = 0.027$ 数值较大,这和其他 5 条曲线相同.当 $D < 0.05$ 时 D_{effL} 值波动较大,与其他曲线中 D_{effL} 相对稳定的逐渐增大不同,这是因为在 ω 和 D 相同的情况下(可与 $v_0 = 0.1, \omega = 10$ 曲线进行对比),大的 v_0 引起粒子间的碰撞增多扩散较大,但是由于粒子具有较大的 ω ,这时“冷”粒子仍是可以聚集形成大的团簇,如图 2 所示.类似较大的 v_0 引起 D_{effL} 明显波动的情况在图 5 和图 7 中也存在,此时系统中的“冷”“热”粒子仍可出现相分离现象.

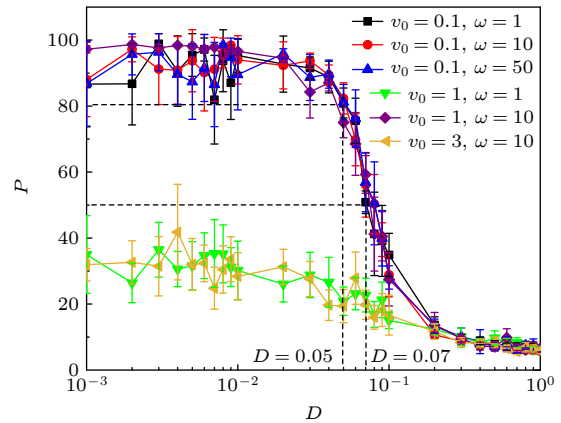


图 2 不同的 v_0 和 ω 时“冷”粒子最大团簇粒子数占比 P 随相对扩散系数 D 的变化曲线

Fig. 2. The proportion P of “cold” particle in the largest cluster as a function of the relative diffusion coefficient D for different values of v_0 and ω .

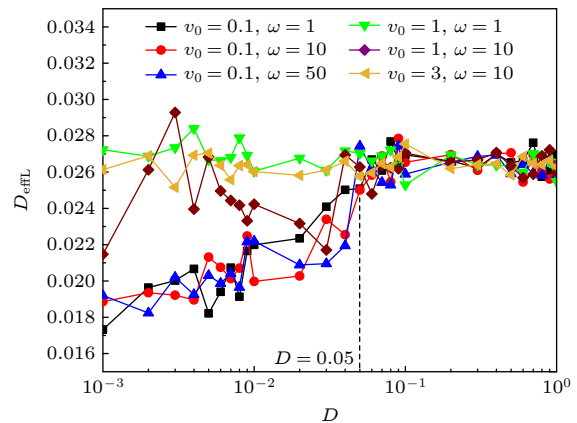


图 3 不同的 v_0 和 ω 时“冷”粒子的有效扩散系数 D_{effL} 随相对扩散系数 D 的变化曲线

Fig. 3. The effective diffusion coefficient D_{effL} of “cold” particle as a function of the relative diffusion coefficient D for different values of v_0 and ω .

3.3 粒子自驱动速度对分离效果的影响

由 3.2 节可知, 回转半径 R 对“冷”粒子形成大的团簇具有重要的影响, 而决定 R 的是粒子自驱动速度 v_0 和自转角速度 ω .

图 4 和图 5 分别为不同的 ω 和 D 时“冷”粒子的最大团簇粒子数占比 P 和有效扩散系数 D_{effL} 随 v_0 变化曲线, 两图曲线同样两两相互对应. 可看到两图中 4 条曲线变化趋势大致相同, 当 v_0 逐渐增大时, P 逐渐变小, 而 D_{effL} 却逐渐增大, 逐渐增大的 v_0 使“冷”粒子的扩散行为增强, 阻碍系统进入分离态, 相反逐渐减小的 v_0 则有利于系统进入分离态.

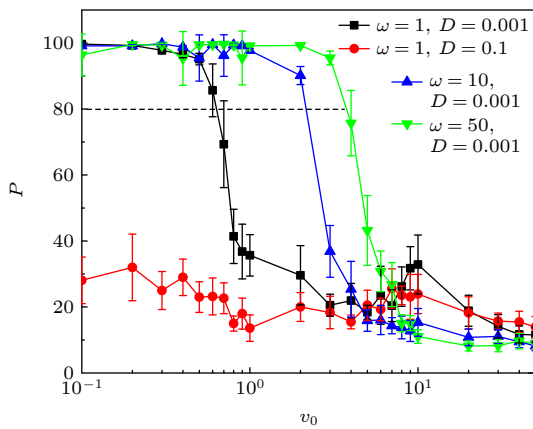


图 4 不同 ω 和 D 时“冷”粒子的最大团簇粒子数占比 P 随自驱动速度的 v_0 变化

Fig. 4. The proportion P of “cold” particle in the largest cluster as a function of the self-driven velocity v_0 for different values of ω and D .

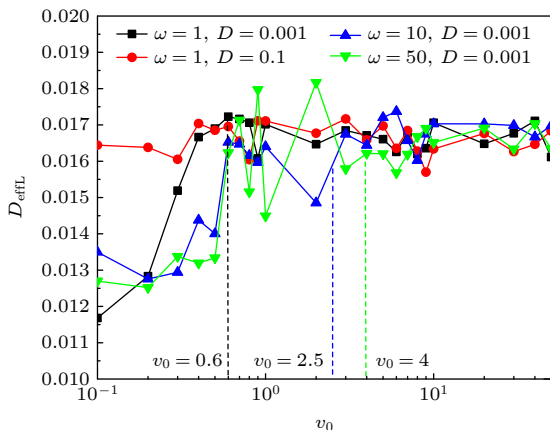


图 5 不同 ω 和 D 时“冷”粒子的有效扩散系数 D_{effL} 随自驱动速度的 v_0 变化

Fig. 5. The effective diffusion coefficient D_{effL} of “cold” particle as a function of the self-driven velocity v_0 for different value of ω and D .

从图 4 和图 5 可以看出, 4 条曲线仍存在不同, 当 $D = 0.001$, ω 分别等于 1, 10, 50 时, v_0 较小时 P 均大于 80, 即系统中“冷”粒子基本都会聚集到一个大的团簇, 此时 D_{effL} 都很小, 说明“冷”粒子的扩散行为很弱便于聚集. 3 条曲线的区别在于随着 v_0 的增大, P 先快速减小时的值不同. 对于 $\omega = 1$ 的曲线, P 从 $v_0 = 0.6$ 开始快速减小, 对于 $\omega = 10$ 和 50 的两条曲线 P 分别从 $v_0 = 2.5$ 和 4 开始快速减小. 从图 5 可以看到, 3 条曲线的 D_{effL} 分别在 $v_0 = 0.6, 2.5$ 和 4 时已变得比较大, “冷”粒子的扩散逐渐增强. 3 条曲线对应的回转半径 R 分别是 $R_{\omega=1} = 0.6$, $R_{\omega=10} = 0.25$ 和 $R_{\omega=50} = 0.08$ (图 5 中虚线). 这说明在 D 相同的情况下, 随着 ω 的增大“冷”粒子形成最大团簇而达到分离所需的最大 v_0 也在增大, 而最大回转半径 R 减小, v_0 与 ω 的增大是不同步的, v_0 的相对增大率小于 ω 的相对增大率. 究其动力学原因在于, 假设随着 ω 的增大, v_0 也同步增大, 即它们增大时回转半径 R 不变, 这意味着在相同时间内 v_0 或 ω 较大的粒子运动路程长, 必然会和其他粒子产生更多的碰撞, 扩散就会增大, 这导致“冷”粒子的汇聚程度变小分离效果减弱, 与图 5 中 D_{effL} 曲线显示的“冷”粒子扩散情况相一致. 所以 v_0 相比于 ω 要进行缓慢增大以减小回转半径 R , 以此来抵消增多的碰撞作用, 确保“冷”粒子可形成大团簇. 这是手征粒子具有的特征与粒子间碰撞作用相互竞争的结果.

当 $\omega = 1$, $D = 0.001, 0.1$ 时, 当 v_0 很小 (如 0.1—0.6 区间) 时 $D = 0.001$ 曲线的 P 远大于 $D = 0.1$ 曲线的, 而 D_{effL} 小于 $D = 0.1$ 曲线的. 在 R 和 D 都很小时“冷”粒子的扩散行为较弱, 易于形成大的团簇, 相反 D 很大“冷”粒子的扩散行为增强, 很难聚集形成大团簇. 当 v_0 很大 (如 0.6—50 区间) 时两曲线几乎重叠在一起, P 都很小而 D_{effL} 很大. 相对于很大的 v_0 , D 对“冷”粒子形成团簇的影响很小, 这时“冷”粒子的扩散行为较强, 系统很难形成大团簇产生相分离.

3.4 粒子自转角速度对分离效果的影响

图 6 和图 7 所示分别为不同 v_0 时“冷”粒子最大团簇粒子数占比 P 和有效扩散系数 D_{effL} 随 ω 的变化曲线, 其中 $D = 0.001$ 很小. 由两图可以看到, 在 $\omega \in [0.05, 50]$ 区间内 $v_0 = 0.1$ 曲线的 P 较大且均大于 80, 而 D_{effL} 却都很小, 数值在 0.018

附近. “冷”粒子因具有较小的 v_0 (R 也很小) 和较小的 D , 其扩散行为较弱, 只在很小的区域内“原地”运动. 再加上“热”粒子的“驱赶”, 这种情况下系统中“冷”粒子可以形成大团簇达到相分离. 对于 $v_0 = 10$ 的曲线 P 都小于 30, 而对应的 D_{eff} 却很大, 数值都在 0.027 附近, “冷”粒子扩散能力较强. “冷”粒子此时具有较大的 v_0 (R 也很大), 即活动范围很大, 可突破“热”粒子的束缚. 此时系统不会出现相分离现象, 对应的 P 值很小.

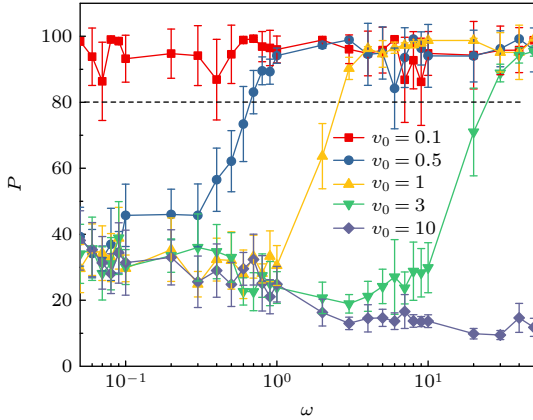


图 6 不同 v_0 时“冷”粒子的最大团簇粒子数占比 P 随自转角速度 ω 的变化 ($D = 0.001$)
 Fig. 6. The proportion P of “cold” particle in the largest cluster as a function of the self-rotational angular velocity ω for different values of v_0 with $D = 0.001$.

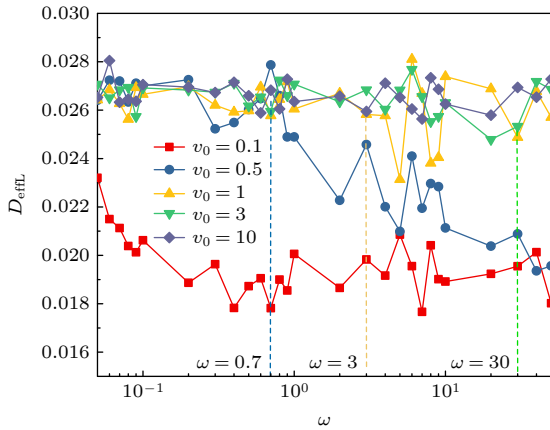


图 7 不同 v_0 时“冷”粒子的有效扩散系数 D_{eff} 随自旋角频率 ω 的变化 ($D = 0.001$)
 Fig. 7. The effective diffusion coefficient D_{eff} of “cold” particle as a function of the self-rotational angular velocity ω for different values of v_0 with $D = 0.001$.

当 v_0 分别等于 0.5, 1 和 3 时, 随着 ω 的增大, P 从 30 左右增大到 80 以上 (图 6), 而 D_{eff} 从 0.027 逐渐减小到 0.018 (图 7). 这说明随着 ω 增大,

“冷”粒子的扩散行为越来越弱, 系统从不可分离态逐渐进入可分离态. 此外, 图 6 和图 7 中的这 3 条曲线 ($v_0 = 0.5, 1$ 和 3) 具有显著的不同, P 达到 80 以上时所对应的 ω 是不同的. 对于这 3 条曲线, ω 分别大于 0.7, 3 和 30 时 P 达到 80 以上 (如图 7 中的虚线所示), “冷”粒子的 D_{eff} 从较大的 0.027 开始减小, 扩散行为逐渐减弱. 此时粒子回转半径 $R_{v_0=0.5} \approx 0.71$, $R_{v_0=1} \approx 0.33$ 和 $R_{v_0=3} \approx 0.1$, 这说明 D 相同情况下当 v_0 增大时, “冷”粒子形成最大团簇而达到分离所需的最小 ω 也在增大, 但是最大回转半径 R 减小, 二者的增大不同步, ω 的相对增大率大于 v_0 的相对增大率. 图 7 中 $v_0 = 1, 3$ 时, D_{eff} 的变化趋势与 $v_0 = 0.5$ 明显不同, D_{eff} 分别从 $\omega = 3$ 和 30 开始出现明显波动, 但是由于粒子具有较大的 ω , 这时“冷”粒子仍形成大的团簇, 如图 6 所示 P 都可大于 80.

图 8 和图 9 所示分别为不同相对扩散系数 D 下“冷”粒子的最大团簇粒子数占比 P 和有效扩散系数 D_{eff} 随 ω 的变化曲线, 其中 $v_0 = 0.5$. $D = 0.001, 0.01$ 时, 随着 ω 的增大, P 值从 30 左右逐渐增大到 80 以上, D_{eff} 从 0.027 减小到 0.018. 虚线 $P = 80$ 将曲线分为两段, 对应的分界点处 $\omega = 0.9$. 这说明当 ω 较大时“冷”粒子的扩散较弱, 更易于形成大团簇而产生相分离, 另外 ω 越大也意味着粒子的回转半径 R 越小, 粒子的活动范围相对也越小. $D = 0.001$ 曲线的 P 值比 $D = 0.01$ 曲线略大一些, 而 D_{eff} 值比 $D = 0.01$ 曲线小一些. 这是由于 D 值的增大会使冷粒子的扩散行为加强,

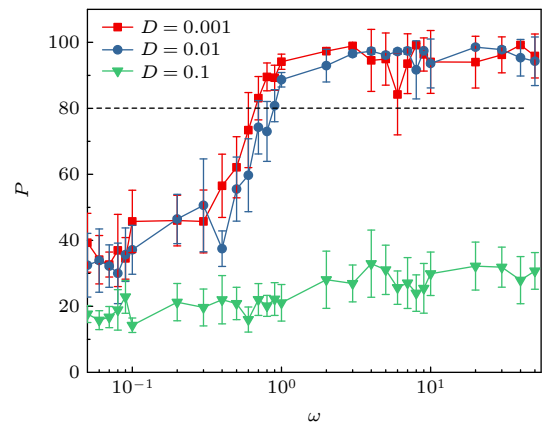


图 8 不同 D 时“冷”粒子的最大团簇粒子数占比 P 随自转角速度 ω 的变化 ($v_0 = 0.5$)
 Fig. 8. The proportion P of “cold” particle in the largest cluster as a function of the self-rotational angular velocity ω for different values of D with $v_0 = 0.5$.

不利于“热”粒子对“冷”粒子的束缚，“冷”粒子难以形成大的团簇. 对于 $D = 0.1$ 曲线, 由于 D 值较大所以在 $\omega \in (0.05, 50)$ 整个横坐标范围内 P 都很小而 D_{effL} 很大, “冷”粒子扩散行为较强, 不能形成大团簇.

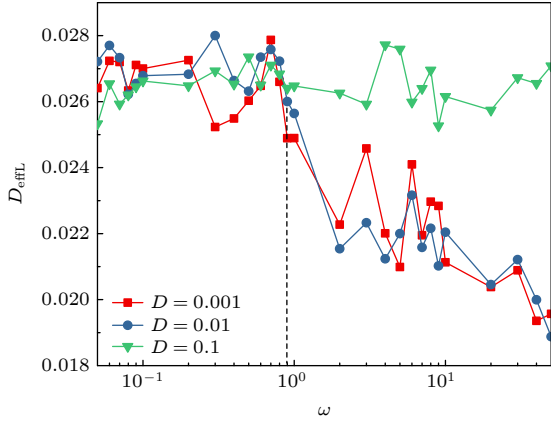


图 9 不同 D 时“冷”粒子的有效扩散系数 D_{effL} 随自旋角频率 ω 的变化 ($v_0 = 0.5$)

Fig. 9. The effective diffusion coefficient D_{effL} of “cold” particle as a function of the self-rotational angular velocity ω for different values of D with $v_0 = 0.5$.

3.5 粒子填充率对分离效果的影响

粒子填充率 Φ 对系统分离效果会产生重要的作用, 因为方形格子系统中粒子数影响粒子间的相互碰撞频率, 碰撞是“冷”粒子逐渐聚集形成大团簇的重要因素. 不同 v_0, ω 和 D 时“冷”粒子的最大团簇粒子数占比 P 随 Φ 的变化曲线如图 10 所示. 图 11 所示为“冷”粒子的有效扩散系数 D_{effL} 随 Φ 的变化曲线, 图 10 和图 11 中的曲线相互对应. 由图 10 看到, 随着 Φ 的增大, P 值呈先增大后减小的非单调变化, 即每条曲线都存在使 P 最大的最优 Φ 值, 并且最优 Φ 值的区间宽度不同. 对于 (v_0, ω, D) 分别等于 $(0.1, 1, 0.001)$ 和 $(0.1, 10, 0.001)$ 这两条曲线, 根据上文对图 4 的分析知道当 $N = 300$ 时, P 很大即系统中“冷”粒子可以形成大团簇, 而相同条件下 Φ 很小 (如 $N < 150$) 时, “冷”粒子并不能形成大团簇. 原因是由于“热”粒子很少, 虽然“冷”粒子的 v_0 和 D 都很小, 但是少量的“热”粒子对“冷”粒子的碰撞束缚作用不足以使“冷”粒子聚集形成大团簇, “冷”粒子的扩散行为较强, 如图 11 所示. 当 Φ 很大 (如 $N > 400$) 时“冷”粒子同样不能形成大团簇, 因为此时方形格子系统几乎快被粒子占满, “冷”粒子只能在自身位置附近进行微小振动, 图 11 显示此时“冷”粒子扩散行为较弱, 它们不会聚集到

一起形成大的团簇.

当 (v_0, ω, D) 分别等于 $(0.1, 1, 0.1)$ 和 $(1, 1, 0.001)$ 时, 最优 Φ 值宽度变窄, 只有在 $N = 400$ 附近 P 值可达到最大, 这是因为 D 或 v_0 的增大都会增加“冷”粒子的扩散, 粒子的运动范围增大, 这可从图 11 中 D_{effL} 较大看出. 此时系统要使“冷”粒子聚集而形成大团簇就需要增大“热”粒子的束缚作用, 从粒子数角度分析这意味着需要增加系统中的粒子数, 即要求相对大的 Φ , 这样最优 Φ 值宽度变窄. 当然如果 D 或 v_0 足够大, 系统不会存在最优 Φ 使系统出现“冷”“热”粒子相分离的现象.

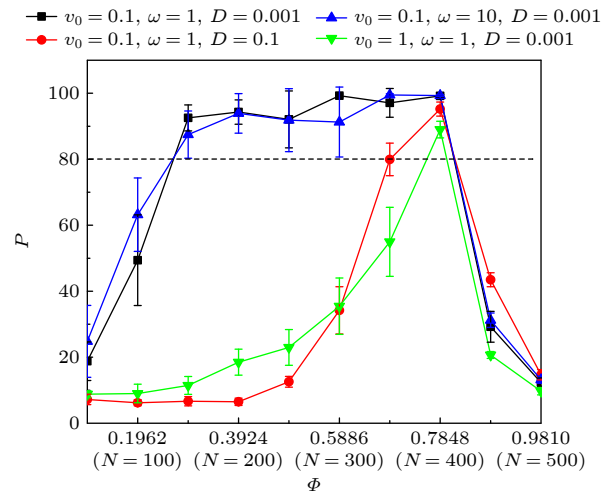


图 10 不同 v_0, ω 和 D 时“冷”粒子的最大团簇粒子数占比 P 随粒子填充率 Φ 变化曲线

Fig. 10. The proportion P of “cold” particle in the largest cluster as a function of the filling rate of particle for different values of v_0, ω and D .

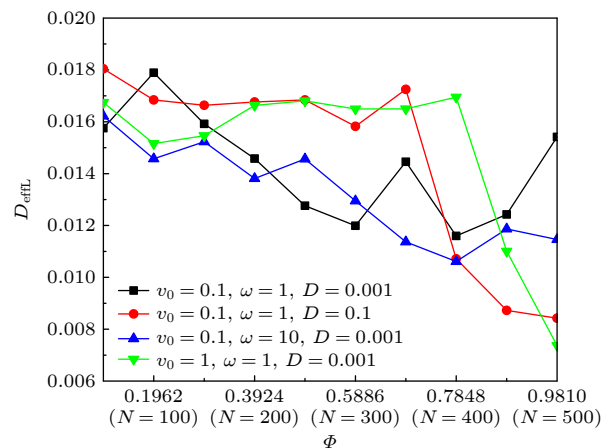


图 11 不同 v_0, ω 和 D 时“冷”粒子的有效扩散系数 D_{effL} 随粒子填充率 Φ 变化曲线

Fig. 11. The effective diffusion coefficient D_{effL} of “cold” particle as a function of the filling rate of particle for different values of v_0, ω and D .

4 结 论

本文通过建立活性手征粒子不同扩散系数的二元混模型研究了粒子相对扩散系数 D 、自驱动速度 v_0 、自转角速度 ω 和粒子填充率 Φ (即粒子数 N) 对系统中“冷”粒子聚集形成大团簇效果的影响. 首先, D 反映了系统中“冷”“热”粒子相对扩散的剧烈程度, 较小的 D 有利于系统粒子的分离, 而较大的 D 则会增大“冷”粒子的扩散减弱相分离效果. 其次, 在 ω 和 D 不变时, 减小 v_0 可减小 R 值减弱粒子的扩散, 系统中粒子的分离效果加强. 随着粒子 ω 的增大, “冷”粒子可形成最大团簇而达到分离时所需要的最大 v_0 也增大, 对应的粒子最大回转半径 R 却减小. 在 v_0 和 D 不变时, 增大 ω 也会减弱粒子的扩散, 使分离效果加强. 当 v_0 越大时“冷”粒子形成最大团簇所需的最小 ω 也越大, 同样最大回转半径 R 也越小. v_0 和 ω 的增大 (或减小) 不是同步的, v_0 的相对变化率小于 ω 的相对变化率. 这是活性手征粒子所具有的特征与粒子间碰撞作用相互竞争的结果. 另外, 随着 Φ 的增大, “冷”粒子最大团簇粒子数占比 P 呈先增大后减小的非单调变化, 每条曲线都存在一定的最优 Φ 值区间宽度. 相对扩散系数 D 和自驱动速度 v_0 的增大, 会使曲线的最优 Φ 值区间宽度变窄并向右偏移.

在本文建立的活性手征粒子二元混合模型中, 二元是指系统中平动扩散系数分别为 D_{TL} 和 D_{TH} 的两类“冷”“热”粒子, 分离是指对“冷”粒子与“热”粒子的区分, 并没有对粒子的自转角速度 ω 的转动方向做限制. 如果系统中同时存在 $\omega > 0$ (逆时针) 和 $\omega < 0$ (顺时针) 两种粒子, 本文所建立的模型并不能分离这两种粒子, 这方面的研究将在后续工作中进行.

参考文献

[1] Ramaswamy S 2010 *Ann. Rev. Condens. Matter Phys.* **1** 323
 [2] Howse J S, Ebbens S J 2010 *Soft Matter* **6** 726
 [3] Lobaskin V, Romenskyy M 2013 *Phys. Rev. E* **87** 052135
 [4] Edwards A M, Phillips R A, Watkins N W, Freeman M P,

Murphy E J, Afanasyev V, Buldyrev S V, da Luz M G, Raposo E P, Stanley H E, Viswanathan G M 2007 *Nature* **449** 1044
 [5] Brambilla M, Ferrante E, Birattari M, Dorigo M 2013 *Swarm Intelligence* **7** 1
 [6] Helbing D 2001 *Rev. Mod. Phys.* **73** 1067
 [7] Marchetti M C, Joanny J F, Ramaswamy S, Liverpool T B, Prost J, Rao M, Simha R A 2013 *Rev. Mod. Phys.* **85** 1143
 [8] Wang J, Gao W 2012 *ACS Nano* **6** 5745
 [9] Chen C, Liu S, Shi X Q, Chaté H, Wu Y 2017 *Nature* **542** 210
 [10] Berg H C 2003 *Biochem* **72** 19
 [11] Berg H C 2004 *Ecoli in Motion* (New York: Springer Press) pp39–47
 [12] Nishiguchi D, Sano M 2015 *Phys. Rev. E* **92** 052309
 [13] Ma X, Hahn K, Sanchez S 2015 *J. Am. Chem. Soc.* **137** 4976
 [14] Li J, Singh V V, Sattayasamitsathit S, Orozco J, Kaufmann K, Dong R, Gao W, Jurado-Sanchez B, Fedorak Y, Wang J 2014 *ACS Nano* **8** 11118
 [15] Abdelmohsen L K, Peng F, Tu Y, Wilson D A 2014 *J. Mater. Chem. B* **2** 2395
 [16] Vlope G, Gigan S, Volpe G 2014 *Am. J. Phys.* **82** 659
 [17] Bechinger C, Di Leonardo R, Löwen H, Reichhardt C, Volpe G, Volpe G 2016 *Rev. Mod. Phys.* **88** 045006
 [18] Ai B Q, Shao Z G, Zhong W R 2018 *soft matter* **14** 4388
 [19] Zhang H P, Shi X Q, Yang M C 2022 *Physics* **51** 217 (in Chinese) [张何朋, 施夏清, 杨明成 2022 物理 **51** 217]
 [20] Cates M E, Tailleur J 2015 *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **6** 219
 [21] Fily Y, Marchetti M C 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 235702
 [22] Redner G S, Hagan M F, Baskaran A 2013 *Biophys. J.* **104** 640a
 [23] Speck T, Bialké J, Menzel A M, Löwen H 2014 *Phys. Rev. Lett.* **112** 218304
 [24] Xia Y Q, Shen Z L, Guo Y K 2019 *Acta Phys. Sin.* **68** 161101 (in Chinese) [夏益祺, 谌庄琳, 郭永坤 2019 物理学报 **68** 161101]
 [25] Kaiser A, Popowa K, Wensink H H, Lowen H 2013 *Phys. Rev. E* **88** 022311
 [26] Wan M B, Reichhardt C O, Nussinov Z, Reichhardt C 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 018102
 [27] Ahuja S 2011 *Chiral Separation Methods for Pharmaceutical and Biotechnological Products* (Hoboken: John Wiley and Sons Press) p131
 [28] Wu J C, Dong T W, Jiang G W, An M, Ai B Q 2020 *J. Chem. Phys.* **152** 034901
 [29] Liao J J, Lin F J 2020 *Acta Phys. Sin.* **69** 220501 (in Chinese) [廖晶晶, 简福军 2020 物理学报 **69** 220501]
 [30] Kümmel F P, Shabestari P, Lozano C, Volpe G, Bechinger C 2015 *Soft Matter* **11** 6187
 [31] Zhu W J, Li T C, Zhong W R, Ai B Q 2020 *J. Chem. Phys.* **152** 1849031
 [32] Weber S N, Weber C A, Frey E 2016 *Phys. Rev. Lett.* **116** 058301
 [33] Kumari S, Nunes A S, Araújo N A, Telo da Gama M M 2017 *J. Chem. Phys.* **147** 174702
 [34] Ai B Q 2017 *Phys. Rev. E* **96** 012131

Separation of active chiral particles with different diffusion coefficients*

Li Chen-Pu¹⁾ Wu Wei-Xia²⁾ Zhang Li-Gang¹⁾ Hu Jin-Jiang¹⁾
Xie Ge-Ying¹⁾ Zheng Zhi-Gang^{3)4)†}

1) (*School of Science, Hebei University of Architecture, Zhangjiakou 075000, China*)

2) (*Science Education Department, Beijing Institute of Graphic Communication, Beijing 102600, China*)

3) (*Institute of Systems Science, Huaqiao University, Xiamen 361021, China*)

4) (*College of Information Science and Engineering, Huaqiao University, Xiamen 361021, China*)

(Received 14 May 2024; revised manuscript received 16 July 2024)

Abstract

In recent years, the study of active particles has become one of the important topics concerned by researchers in many fields, among which the phase separation of active chiral particles has important theoretical and practical significance. In this paper, the phase separation of binary mixed systems composed of active chiral particles with different diffusion coefficients is studied by Langevin dynamics. A smaller relative diffusion coefficient is conducive to the formation of large clusters and the separation of “cold” particles, while a larger relative diffusion coefficient will weaken the separation effect. Due to the influence of particle characteristics (self-driven velocity, self-rotational angular velocity) and relative diffusion coefficient on the collision between particles, if one wants the “cold” and “hot” particles to reach phase separation, increasing (or reducing) the self-driven velocity and self-rotational angular velocity cannot be synchronous, and the relative rate of change of self-driven velocity is smaller than that of the self-rotational angular velocity. By analyzing the changes of the effective diffusion coefficient of “cold” particles, the phenomenon of phase separation in the system can be better explained. A smaller effective diffusion coefficient means that the “cold” particles will aggregate into larger clusters, and the system may exhibit phase separation. However, when the effective diffusion coefficient is larger, the diffusion of “cold” particles is stronger and the “cold” particles will not form large clusters, which means that the system cannot aggregate into phase separation. In addition, with the filling rate of particle increasing, the proportion curve of the number of cold particles in maximum cold particle cluster undergoes a non-monotonic change, specifically, it first increases and then decreases. Each curve has an optimal filling rate but its width is different. With the increase of the relative diffusion coefficient and self-driven velocity, the width of the optimal filling rate of the proportion curve will become narrower and shift toward the right.

Keywords: active particles, chirality, Langevin equation, diffusion coefficient

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

DOI: [10.7498/aps.73.20240686](https://doi.org/10.7498/aps.73.20240686)

CSTR: [32037.14.aps.73.20240686](https://cstr.cn/32037.14.aps.73.20240686)

* Project partially supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12375031, 11875135).

† Corresponding author. E-mail: zgzheng@hau.edu.cn



具有不同扩散系数的活性手征粒子分离

李晨璞 吴魏霞 张礼刚 胡金江 谢革英 郑志刚

Separation of active chiral particles with different diffusion coefficients

Li Chen-Pu Wu Wei-Xia Zhang Li-Gang Hu Jin-Jiang Xie Ge-Ying Zheng Zhi-Gang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 73, 200201 (2024) DOI: 10.7498/aps.73.20240686

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240686>

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>

自旋半经典朗之万方程一般形式的探讨

Discussion on generalized formulation of spin semiclassical Langevin equation

物理学报. 2023, 72(14): 140501 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230106>

氧气空心阴极放电模拟

Simulation of hollow cathode discharge in oxygen

物理学报. 2022, 71(2): 025201 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211150>

纳米颗粒布朗扩散边界条件的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of Brownian diffusion boundary condition for nanoparticles

物理学报. 2021, 70(14): 148201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20202240>

温差条件下包含手征活性粒子的封闭圆环的输运

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

物理学报. 2023, 72(3): 030501 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20221772>

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>