

Стационарные характеристики движения инерционной активной броуновской частицы в гармонической ловушке

О. С. Ваулина, И. И. Лисина и Е. А. Лисин

Объединенный институт высоких температур РАН, Ижорская ул., 13, стр.2, Москва 125412, Россия

E-mail: olga.vaulina@bk.ru

Статья поступила в редакцию 16 ноября 2023 г.

Аннотация. С помощью численного моделирования впервые исследуется совместное влияние гармонической ловушки и вращательной инерции на движение активной броуновской частицы типа однородного шара. Путем аппроксимации численных данных предложены поправки к модели активной частицы Орнштейна–Уленбека, позволяющие вычислять стационарные значения статистических характеристик (таких как средние квадраты скорости и смещения) активной броуновской частицы в ловушке с учетом ее поступательной и вращательной инерции. Мы показали, что когда частота ловушки и коэффициент трения частицы достаточно велики, инерция вращения существенно влияет только на среднеквадратичную скорость и слабо влияет на среднеквадратичное смещение частицы. <https://doi.org/10.33849/2023212>

1. ВВЕДЕНИЕ

В общем случае активное броуновское движение представляет собой комбинацию поступательного броуновского движения и направленного движения под действием некоторой активной силы со случайным изменением ориентации (например, в результате внешних кувырксов или броуновского вращения) [1, 2]. В настоящее время наблюдается рост интереса к активному броуновскому движению, связанный с разработкой искусственных активных частиц [2, 3].

Несмотря на свою простоту и понятный физический смысл, известная модель активной броуновской частицы (АБР) в общем случае не позволяет получить аналитические результаты с учетом поступательной и вращательной инерции частицы даже в отсутствие ловушки [4, 5]. Однако в ряде случаев инерционные эффекты могут оказывать существенное влияние на динамику активных частиц [5–13]. Кроме того, в большинстве экспериментов движение инерционной частицы ограничено ловушкой. Ранее влияние поступательной инерции на движение активной броуновской частицы в гармонической ловушке рассматривалось в рамках модели активной частицы Орнштейна–Уленбека (АОУР) [14–16], а также были предложены поправки к АОУР-модели, позволяющие учесть эффект вращательной инерции в динамике свободной частицы [17, 18]. Таким образом, хотя влияние ловушки и вращательной инерции на активное броуновское движение уже исследовалось по отдельности, их совместное влияние остается неизученным.

В данной работе исследуется совместное влияние гармонической ловушки и вращательной инерции на стационарные значения статистических характеристик (таких как средние квадраты скорости и смещения) активной броуновской частицы.

2. ИНЕРЦИОННАЯ АКТИВНАЯ ЧАСТИЦА В ГАРМОНИЧЕСКОЙ ЛОВУШКЕ

2.1. Основные уравнения

Рассмотрим двумерное движение частицы в однородной среде под воздействием двух независимых случайных сил различной природы: активной силы $\mathbf{R}$, направление которой определяется броуновским вра-

щением; и силы Ланжевена $\mathbf{F}_{\text{Br}}$, которая является источником ее стохастического (теплого) движения с температурой T , например, броуновской силы за счет случайных толчков молекул/атомов окружающей среды. Здесь мы ограничимся анализом движения частицы в проекции на одну степень свободы (x). Скорость $V \equiv V_x(t) = dx(t)/dt$ и положение x частицы в гармонической ловушке с характерной частотой ω_0 можно найти из уравнения Ланжевена:

$$M \frac{dV}{dt} = -M\nu_{\text{fr}}V - M\omega_0^2x + R + F_{\text{Br}}, \quad (1)$$

здесь M и ν_{fr} — масса и коэффициент трения частицы. Автокорреляционная функция броуновской силы, $\langle F_{\text{Br}}(0)F_{\text{Br}}(t) \rangle = 2TM\nu_{\text{fr}}\delta(t)$, описывает дельта-коррелированный гауссов процесс, где $\delta(t)$ — дельта-функция, описывает дельта-коррелированный гауссов процесс.

В рамках модели активной частицы Орнштейна–Уленбека (АОУР) [14, 15, 19] для аналитического описания динамики активной частицы *без учета ее вращательной инерции* удобно задавать силу R с помощью процесса Орнштейна–Уленбека

$$\frac{dR}{dt} = -\omega R + \zeta, \quad (2)$$

где ω — характерная частота этого процесса (здесь это коэффициент вращательной диффузии), а ζ — случайная величина ($\langle \zeta \rangle = 0$), автокорреляционная функция которой, $\langle \zeta(0)\zeta(t) \rangle = 2\langle R^2 \rangle \omega \delta(t)$, описывает дельта-коррелированный гауссов процесс, где $\langle R^2 \rangle = 0.5(M\nu_{\text{fr}}V_0)^2$ — средний квадрат силы R (в расчете на одну степень свободы), а V_0 — величина собственной скорости движения активной частицы в двумерном пространстве (без учета ее броуновского вращения), см. [15, 20]. Автокорреляционная функция силы, описываемой уравнением (2), имеет простую экспоненциальную зависимость:

$$\langle R(0)R(t) \rangle = \langle R^2 \rangle e^{-\omega t}. \quad (3)$$

В рамках двумерной модели активной броуновской частицы *с учетом ее вращательной инерции*, также

называемой моделью активной ланжевеновской частицы (ALP) [4–6, 17] x -компонента постоянной по величине активной силы $\mathbf{R}_0$ записывается как

$$R(t) = R_0 \cos \theta(t), \quad (4)$$

где $R_0 \equiv |\mathbf{R}_0| = M\nu_{\text{fr}}V_0$, а угол θ , определяющий направление вектора силы $\mathbf{R}_0$ в двумерном пространстве, описывается следующим стохастическим дифференциальным уравнением:

$$\dot{\theta} = -\nu_{\text{rot}}(\dot{\theta} + \sqrt{2\omega}\xi), \quad (5)$$

где $\nu_{\text{rot}} = 4\nu_{\text{fr}}Ma^2/(3J)$ — коэффициент трения вращения частицы (здесь J — момент инерции сферически симметричной частицы с радиусом a), ξ — гауссовский белый шум с нулевым средним и единичной дисперсией. В этом случае автокорреляционная функция силы (4) имеет вид [18, 21]:

$$\langle R(0)R(t) \rangle = \frac{R_0^2}{2} \exp \left[-\omega t - \frac{\omega}{\nu_{\text{rot}}} e^{(-\nu_{\text{rot}}t)} + \frac{\omega}{\nu_{\text{rot}}} \right]. \quad (6)$$

В общем случае уравнения (4), (5) не позволяют получить аналитические результаты для активной частицы в ловушке. Поэтому далее мы будем использовать систему уравнений (1), (6), (7) только для численного моделирования динамики инерционной активной частицы (ALP). Подробности техники моделирования изложены в [22]. В работе [17] была предложена поправка к уравнению (2), позволяющая учесть влияние вращательной инерции свободной активной частицы (на ее среднеквадратичное смещение и автокорреляционную функцию скорости). Для этого вводится эффективная интенсивность случайного процесса R :

$$\langle R^2 \rangle = \frac{\beta}{2} (M\nu_{\text{fr}}V_0)^2, \quad (7)$$

где

$$\beta \cong \sqrt{1 + \frac{\omega}{2\nu_{\text{fr}}}}, \quad (8)$$

для свободной частицы типа однородного шара ($J = 0.4Ma^2$). Важно отметить, что хотя автокорреляционная функция силы $R(t)$, задаваемой уравнением (2) с учетом поправки (7), в общем случае отличается от (6), полученные таким образом аналитические выражения для функции эволюции среднеквадратичного смещения, эффективного коэффициента диффузии и среднего квадрата скорости частицы имеют отличное согласие с результатами численного моделирования динамики свободной активной частицы [17, 22], а в предельных случаях ($\omega/\nu_{\text{rot}} \gg 1$ и $\omega/\nu_{\text{rot}} \ll 1$) соответствуют известным аналитическим решениям [4, 5] для ALP-модели. При этом поправка (7) не может быть использована для описания эволюции кросскорреляционных функций $\langle V(t)R(0) \rangle$ и $\langle V(0)R(t) \rangle$.

Поскольку $\langle RF_{\text{Br}} \rangle = 0$, средние квадраты скорости $V(t)$ и смещения $X(t) = [x(t) - x(0)]$ активной частицы

могут быть представлены в виде:

$$\langle V^2 \rangle = \frac{T}{M} + \langle V_{\text{AP}}^2 \rangle, \quad (9)$$

$$\langle X^2 \rangle = \frac{2T}{M\omega_0^2} + \langle X_{\text{AP}}^2 \rangle. \quad (10)$$

Первые слагаемые в правых частях уравнений (9), (10) представляет собой известные решения для пассивной частицы [19, 23], в то время как вторые слагаемые описывают вклад за счет случайных флуктуаций силы R , действующей на активную частицу (AP).

2.2. Частица в ловушке без учета вращательной инерции

Рассмотрим активное движение частицы с поступательной инерцией и броуновским вращением без учета инерции вращения и поступательного броуновского движения ($F_{\text{Br}} = 0$). Тогда для АОУР-модели путем умножения уравнения (1) на V , R и X , а уравнения (2) на V и X , легко получить следующую систему уравнений:

$$\frac{1}{2} \frac{d\langle V^2 \rangle}{dt} = -\nu_{\text{fr}} \langle V^2 \rangle - \frac{\omega_0^2}{2} \frac{d\langle X^2 \rangle}{dt} + \frac{\langle VR \rangle}{M}, \quad (11)$$

$$\frac{d\langle VR \rangle}{dt} = -\left(\nu_{\text{fr}} + \omega + \frac{\omega_0^2}{\omega} \right) \langle VR \rangle + \frac{R^2}{M}, \quad (12)$$

$$\frac{d^2\langle X^2 \rangle}{dt^2} = -\nu_{\text{fr}} \frac{d\langle X^2 \rangle}{dt} - \omega_0^2 \langle X^2 \rangle + \frac{2\langle VR \rangle}{M\omega} + 2\langle V^2 \rangle. \quad (13)$$

В состоянии динамического равновесия производные по времени в левой части уравнений (11), (12) равны нулю, а при наличии ловушки ($\omega_0 \neq 0$) смещение частицы ограничено, т.е. $\langle X^2 \rangle = \text{const}$. Учитывая, что $\langle R^2 \rangle = 0.5(M\nu_{\text{fr}}V_0)^2$, и полагая $\langle V^2 \rangle = \langle V_{\text{АОУР}}^2 \rangle$ и $\langle X^2 \rangle = \langle X_{\text{АОУР}}^2 \rangle$ при $F_{\text{Br}} = 0$, получим:

$$\langle V_{\text{АОУР}}^2 \rangle = \frac{1}{2} \frac{V_0^2}{1 + \omega/\nu_{\text{fr}} + \omega_0^2/\nu_{\text{fr}}\omega}, \quad (14)$$

$$\langle X_{\text{АОУР}}^2 \rangle = 2\langle V_{\text{АОУР}}^2 \rangle \frac{\nu_{\text{fr}} + \omega}{\omega_0^2\omega}. \quad (15)$$

Для частицы в ловушке время установления динамического равновесия можно оценить как $t_c \sim (\nu_{\text{fr}} + \omega + \omega_0^2/\omega)^{-1}$, см. (12). Если $(\nu_{\text{fr}} + \omega) \ll \omega_0^2/\omega$, то $t_c \sim \omega/\omega_0^2$. Поэтому полученные далее результаты мы будем анализировать в зависимости от двух безразмерных величин: $L = \omega_0^2/\omega\nu_{\text{fr}}$ и ω/ν_{fr} .

Если трение относительно велико ($\omega/\nu_{\text{fr}} \ll 1$), то при относительно большой частоте ловушки ($L \gg 1$) средний квадрат смещения активной частицы не зависит от коэффициента вращательной диффузии:

$$\langle X_{\text{АОУР}}^2 \rangle_{L \gg 1} = \left(\frac{V_0\nu_{\text{fr}}}{\omega_0^2} \right)^2. \quad (16)$$

2.3. Частица в ловушке с учетом вращательной инерции

Для аналитического описания стационарных значений статистических характеристик инерционной активной частицы (в рамках ALP-модели) при относительно небольшой частоте ловушки ($L \ll 1$) воспользуемся поправкой на вращательную инерцию (7), предложенной для модели свободной активной частицы Орнштейна–Уленбека. В этом случае для приращения средних

квадратов скорости и смещения ALP-частицы за счет ее активности также справедливы уравнения (11)–(13). С учетом поправки (7) можно записать:

$$\langle V_{\text{ALP}}^2 \rangle_{L \ll 1} = \beta \langle V_{\text{AOUP}}^2 \rangle, \quad (17)$$

$$\langle X_{\text{ALP}}^2 \rangle_{L \ll 1} = \beta \langle X_{\text{AOUP}}^2 \rangle. \quad (18)$$

В общем случае (для любых L) поправка на вращательную инерцию (7), пригодная для аналитического описания средних квадратов скорости и смещения свободной частицы, при наличии ловушки ($\omega_0 \neq 0$) может быть иной. Значения $\langle X_{\text{ALP}}^2 \rangle_{\text{sim}}$, измеренные в результате численного моделирования динамики активной частицы с вращательной инерцией в гармонической ловушке, представлены на рисунке 1 в виде зависимости отношения $\beta \langle X_{\text{AOUP}}^2 \rangle / \langle X_{\text{ALP}}^2 \rangle_{\text{sim}}$ от величины L при различных ω/ν_{fr} . Численное моделирование показало, что $\beta \langle X_{\text{AOUP}}^2 \rangle / \langle X_{\text{ALP}}^2 \rangle_{\text{sim}}$ полностью определяется безразмерными параметрами $L = \omega_0^2/\omega\nu_{\text{fr}}$ и ω/ν_{fr} . Легко увидеть, что при $L \lesssim 1$ результаты моделирования соответствуют аналитическим расчетам по формуле (18), т.е. $\langle X_{\text{ALP}}^2 \rangle_{L \lesssim 1} / \langle X_{\text{ALP}}^2 \rangle_{\text{sim}} \approx 1$. Однако, с ростом L ситуация существенно меняется.

Для оценки зависимости $\langle X_{\text{ALP}}^2 \rangle$ от величины L при различных ω/ν_{fr} , может быть использована следующая корректирующая формула, полученная на основе на аппроксимации численных данных, полученных для шарообразной частицы (см. рисунок 1):

$$\langle X_{\text{ALP}}^2 \rangle \approx f^{-1} \beta \langle X_{\text{AOUP}}^2 \rangle, \quad (19)$$

где

$$f = 1 - e^{-\alpha} + \beta e^{-\alpha} (1 + \omega/\nu_{\text{fr}}) \sqrt{\frac{L}{2 + \omega/\nu_{\text{fr}} + L}}, \quad (20)$$

здесь $\alpha \cong 6.66(1 + \omega/\nu_{\text{fr}})^{1/2} L^{-1}$.

Рисунки 1 и 2 наглядно показывают, что в случае относительно большого коэффициента трения ($\omega/\nu_{\text{fr}} \ll 1$, $\beta \approx 1$) и слабой ловушки ($L \lesssim 1$), средние квадраты скорости $\langle V_{\text{ALP}}^2 \rangle$ и смещения $\langle X_{\text{ALP}}^2 \rangle$ активной частицы могут быть найдены в рамках хорошо известной AOUP-модели [14, 15].

В пределе большой частоты ловушки ($L \rightarrow \infty$) отношение стационарных значений среднеквадратичных смещений шарообразной частицы, полученных в рамках моделей AOUP и ALP (т.е. без учета и с учетом вращательной инерции активной частицы), упрощается:

$$\frac{\langle X_{\text{AOUP}}^2 \rangle}{\langle X_{\text{ALP}}^2 \rangle} = 1 + \frac{\omega}{\nu_{\text{fr}}}. \quad (21)$$

Из (21) нетрудно получить

$$\langle X_{\text{ALP}}^2 \rangle = \left(\frac{V_0 \nu_{\text{fr}}}{\omega_0^2} \right)^2, \quad (22)$$

для всех отношений ω/ν_{fr} . В этом случае средний квадрат смещения частицы не зависит ни от коэффициента вращательной диффузии ω , ни от инерционной поправки β . Отметим также, что уравнение (22) совпадает

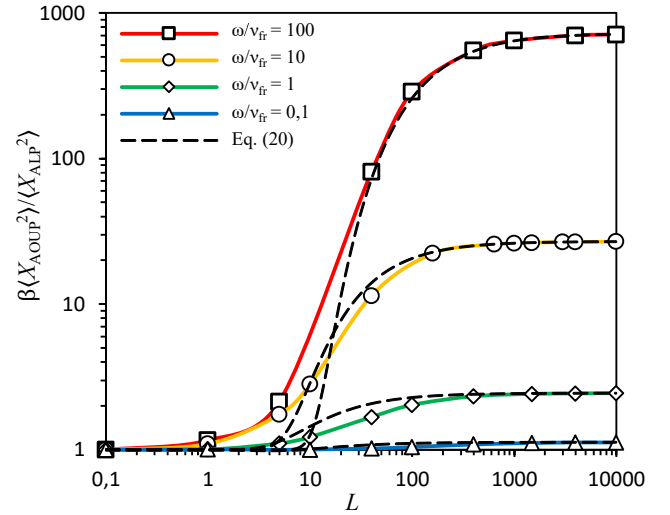


Рисунок 1. Зависимость отношения $\beta \langle X_{\text{AOUP}}^2 \rangle / \langle X_{\text{ALP}}^2 \rangle$ от $L = \omega_0^2/\omega\nu_{\text{fr}}$ при различных ω/ν_{fr} . Символы — $\beta \langle X_{\text{AOUP}}^2 \rangle / \langle X_{\text{ALP}}^2 \rangle_{\text{sim}}$, где значения $\langle X_{\text{ALP}}^2 \rangle_{\text{sim}}$ измерены в результате численного моделирования динамики активной частицы с использованием уравнений (1), (4) и (5). Штриховые линии — аппроксимация (20).

с (16), полученным для модели AOUP без учета вращательной инерции частицы при $\omega/\nu_{\text{fr}} \ll 1$.

Для оценки зависимости среднего квадрата скорости инерционной активной броуновской частицы, находящейся в высокочастотной ловушке ($L \gg \nu_{\text{fr}}/\omega + \omega/\nu_{\text{fr}}$), можно использовать следующую аппроксимацию:

$$\langle V_{\text{ALP}}^2 \rangle \approx 14.5 \frac{\nu_{\text{fr}}^2}{\omega_0^2} \langle V_{\text{AOUP}}^2 \rangle. \quad (23)$$

Из уравнения (21) и рисунка 1 следует, что при большой частоте ловушки и большом коэффициенте трения величина $\langle X_{\text{ALP}}^2 \rangle$ может быть найдена с помощью AOUP-модели [14, 15]. Однако, уравнение (23) и рисунок 2 показывают, что при тех же условиях величина $\langle V_{\text{ALP}}^2 \rangle$ может значительно отличаться от $\langle V_{\text{AOUP}}^2 \rangle$.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выполнено численное моделирование динамики активной броуновской частицы типа однородного шара с поступательной и вращательной инерцией (т.н. активной ланжевеновской частицы, ALP) в гармонической ловушке. Получены стационарные значения средних квадратов скорости, $\langle V_{\text{ALP}}^2 \rangle$, и смещения, $\langle X_{\text{ALP}}^2 \rangle$, активной частицы. Показано, что вклад вращательной инерции полностью определяется парой безразмерных соотношений характерных частот в системе, а именно $\omega_0^2/\omega\nu_{\text{fr}}$ и ω/ν_{fr} .

С помощью аппроксимации результатов численного моделирования предложены поправки к модели активной частицы Орнштейна–Уленбека, позволяющие вычислять средние квадраты скорости и смещения активной броуновской частицы с учетом ее поступательной и вращательной инерции. При относительно малой частоте ловушки для вычисления $\langle V_{\text{ALP}}^2 \rangle$ и $\langle X_{\text{ALP}}^2 \rangle$ может быть использована модель активной частицы Орнштей-

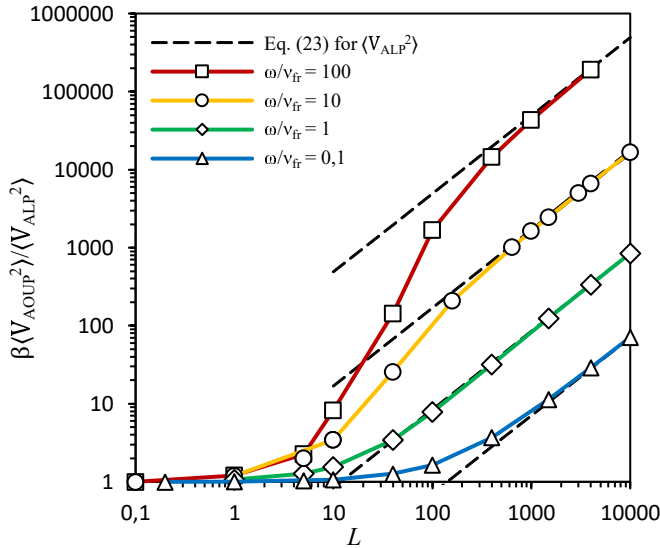


Рисунок 2. Зависимость отношения $\beta \langle V_{\text{AOUP}}^2 \rangle / \langle V_{\text{ALP}}^2 \rangle$ от $L = \omega_0 / \omega \nu_{\text{fr}}$ при различных ω / ν_{fr} . Символы — $\beta \langle V_{\text{AOUP}}^2 \rangle / \langle V_{\text{ALP}}^2 \rangle_{\text{sim}}$, где значения $\langle V_{\text{ALP}}^2 \rangle_{\text{sim}}$ измерены в результате численного моделирования динамики активной частицы с использованием уравнений (1), (4) и (5). Штриховые линии — аппроксимация (23) для $\langle V_{\text{ALP}}^2 \rangle$.

на–Уленбека (АОУР) с поправкой β на вращательную инерцию, предложенной ранее для свободной частицы [17]. При большой частоте ловушки и большом коэффициенте трения, вращательная инерция существенно влияет только на среднеквадратичную скорость, и не оказывает никакого влияния на средний квадрат смещения частицы.

Результаты данной работы расширяют существующее теоретическое описание движения свободной активной броуновской частицы с поступательной и вращательной инерцией в область, где необходимо учитывать удерживающие силы ловушки. Полученные результаты также важны для дальнейшего развития теории инерционного активного броуновского движения, в частности, для описания функции эволюции среднеквадратичного смещения частицы, автокорреляционных и кросс-корреляционных функций координаты и скорости активной частицы с вращательной инерцией в ловушке.

БЛАГОДАРНОСТИ

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда №22-22-00899, <https://rscf.ru/project/22-22-00899/>.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Romanczuk P, Bär M, Ebling W, Lindner B and Schimansky-Geier L 2012 *The European Physical Journal Special Topics* **202** 1–162
- Bechinger C, Di Leonardo R, Löwen H, Reichhardt C and Volpe G 2016 *Rev. Mod. Phys.* **88** 045006
- Арансон И С 2013 *УФН* **183** 87–102
- Ghosh P C, Li Y, Marchegiani G and Marchesoni F 2015 *J. Chem. Phys.* **143** 211101
- Scholz C, Jahanshahi S, Ldov A and Löwen H 2018 *Nat. Commun* **9** 5156
- Löwen H 2020 *J. Chem. Phys.* **152** 040901
- Nosenko V, Luoni F, Kaouk A, Rubin-Zuzic M and Thomas H 2020 *Phys. Rev. Res.* **2** 033226
- Arkar K, Vasiliev M M, Petrov O F, Kononov E A and Trukhachev F M 2021 *Molecules* **26** 561
- Kolmakov G V and Aranson I S 2021 *Phys. Rev. Res.* **3** 013188
- Petrov O F, Boltnev R E and Vasiliev M M 2022 *Sci. Rep.* **12** 6085
- Leoni M, Paoluzzi M, Eldeen S, Estrada A, Nguyen L, Alexandrescu M, Sherb K and Ahmed W W 2020 *Phys. Rev. Res.* **2** 043299
- Fernandez-Rodriguez M A, Grillo F, Alvarez L, Rathlef M, Buttinoni I, Volpe G and Isa L 2020 *Nat. Commun.* **11** 4223
- Leyman M, Ogemark F, Wehr J and Volpe G 2018 *Phys. Rev. E* **98** 052606
- Caprini L and Marconi U M B 2021 *J. Chem. Phys.* **154** 024902
- Nguyen G P, Wittmann R and Löwen H 2021 *J. Phys. Cond. Matt.* **34** 035101
- Vaulina O S, Lisina I I and Lisin E A 2022 *Phys. of Plasm.* **29** 11
- Lisin E A, Vaulina O S, Lisina I I and Petrov O F 2022 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **24** 14150–14158
- Sprenger A R, Caprini L, Löwen H and Wittmann R 2023 *J. Phys. Cond. Matt.* **35** 305101
- Uhlenbeck G E and Ornstein L S 1930 *Phys. Rev.* **36** 823
- Caprini L, Sprenger A R, Löwen H and Wittmann R 2022 *J. Chem. Phys.* **156** 071102
- Gerling R and Hüller A 1980 *Z. Phys. B* **40** 209–217
- Lisin E A, Vaulina O S, Lisina I I and Petrov O F 2021 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **23** 16248
- Wang M C and Uhlenbeck G E 1945 *Rev. Mod. Phys.* **17** 323