

《低惯性与高惯性活性粒子混合体系中的 相分离现象*》的补充材料 1

王晶 焦阳 田文得[†] 陈康

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

1. 单个活性惯性粒子的运动行为

为了研究低惯性 ($m_1 = 1$) 和高惯性 ($m_2 = 100$) 活性粒子组成的混合体系中的相分离现象。首先研究了单个低惯性活性粒子和单个高惯性活性粒子的运动行为。单粒子体系属于理想气体或低浓度的极限情况。在这种情况下, 可以认为粒子的运动不受粒子间的相互作用力的影响。因此, 单个活性惯性粒子在平动自由度上的动力学方程可以简化为

$$m\ddot{\mathbf{r}}_i = -\zeta\dot{\mathbf{r}}_i + F_a\hat{\mathbf{u}}_i(t) + \sqrt{2\zeta k_B T}\boldsymbol{\eta}_i(t). \quad (1)$$

在单粒子的研究中, 所有的数据为 1000 次独立模拟的平均值。

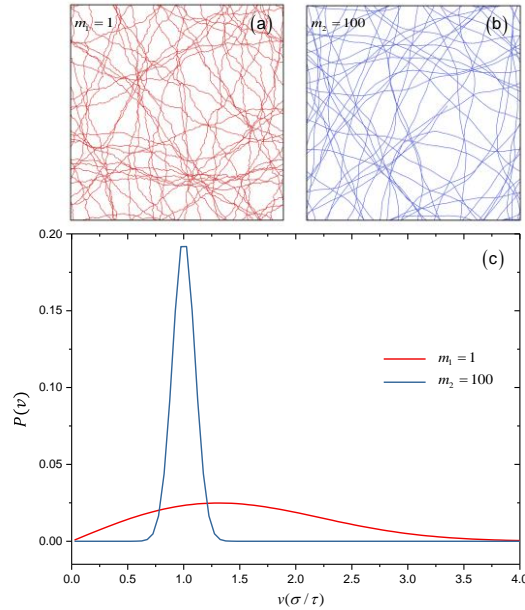


图 S1 (a) 低惯性粒子的运动轨迹; (b)高惯性粒子的运动轨迹; (c) 活性惯性粒子的速度分布 $P(v)$

Fig. S1. (a) Trajectories of particles with low inertia; (b) trajectories of particles with high inertia; (c) velocity distribution $P(v)$ of active inertial particles.

单个活性惯性粒子可以在空间中自由运动, 不受束缚。与低惯性粒子相比(图 S1(a)), 高惯性粒子的运动轨迹较为光滑(图 S1(b)), 这说明高惯性粒子可以维

持其速度的方向。由于活性力的驱动，低惯性粒子速度分布的峰值在 $v = v_a = 1$ 附近。随着粒子惯性的增加，瞬时速度分布的峰值变高，宽度变窄(图 S1(c))。这是因为，惯性的存在使得粒子可以维持其活性速度的大小。

单个活性惯性粒子的时间相关特征由粒子运动的惯性特征时间 $\tau_1 = m/\zeta$ 和活性力的弛豫时间 $1/D_r$ 共同决定。粒子均方位移(mean squared displacement, MSD) 的表达式为

$$\text{MSD}(t) = \left\langle \left| \mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(0) \right|^2 \right\rangle. \quad (2)$$

均方位移($\text{MSD}(t) \propto t^\alpha$)可以表征粒子的扩散能力， $\alpha = 2$ 表明粒子进行超扩散， $\alpha = 1$ 表明粒子进行普通扩散。对于 $m=1$ 的低惯性粒子，其 MSD 主要分为 4 个阶段：惯性弹道，短时扩散，活性弹道和活性扩散(图 S2(a))。在短时间尺度 ($t < \tau_1 = m/\zeta$) 内，惯性主导粒子的运动，粒子在弹道区进行超扩散；在中等时间尺度 ($\tau_1 < t < 1/D_r$) 内，粒子的运动行为由惯性主导的弹道运动转变为自主驱动主导的超扩散；在长时间尺度 ($t > 1/D_r$) 下，粒子恢复为高有效系数的普通扩散行为。然而，对于 $m=100$ 的高惯性粒子，粒子的惯性时间足够长，导致粒子在很长的时间尺度 ($t < 1/D_r$) 内进行超扩散。总之，单个活性惯性粒子的 MSD 与粒子运动的惯性特征时间 $\tau_1 = m/\zeta$ 和活性力的弛豫时间 $1/D_r$ 有关。

粒子速度自相关函数的表达式为

$$\bar{C}_v(t) = \frac{C_v(t)}{C_v(0)} = \frac{\langle \mathbf{v}(t) \cdot \mathbf{v}(0) \rangle}{\langle \mathbf{v}(0) \cdot \mathbf{v}(0) \rangle}. \quad (3)$$

对于 $m=1$ 的低惯性粒子，粒子的速度自相关函数呈现两步衰减(图 S2(b))。第 1 次衰减的特征时间与惯性时间 ($\tau_1 = m/\zeta$) 有关；第 2 次衰减的特征时间与活性力的持久时间 ($1/D_r$) 有关。然而，对于 $m=100$ 的高惯性粒子，粒子的惯性时间足够长，导致速度关联呈一步衰减，发生在 $t = 1/D_r$ 附近。

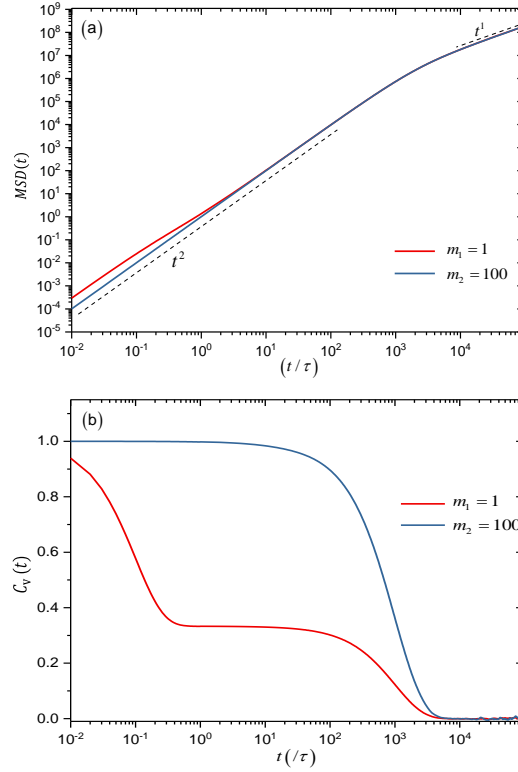


图 S2 活性惯性粒子的(a)均方位移 $MSD(t)$ 和(b)速度自相关函数 $C_v(t)$

Fig. S2. (a) Mean squared displacement $MSD(t)$ and (b) velocity autocorrelation function $C_v(t)$ of active inertial particles.

2. 无平移噪声时体系的相分离和团簇内外粒子的平均热力学温度

正文部分讨论了存在平移噪声的情况下(热浴温度为 $T=1$),混合体系中的相分离现象。为了解平移噪声对相分离及团簇内外粒子热力学温度的影响,进一步研究了无平移噪声($T=0$)时,中等密度($\phi=0.3$)下混合体系中的相分离情况。如图S3所示,与存在平移噪声时的情况不同,在没有平移噪声影响时,单一组的低惯性体系($N_1:N_2=10:0$)和 $N_1:N_2=6:4$ 的混合体系也可以发生相分离现象。这是因为无平移噪声时,活性力对粒子运动的影响变得更大,导致粒子更容易发生相分离。此外,还计算了中等密度($\phi=0.3$)下,团簇(cluster)区域和气态(gas)区域粒子的平均热力学温度。低惯性粒子在cluster区域和gas区域中的平均热力学温度分别为

$$\bar{T}_{\text{eff}}^{\text{cluster}}(m_1) = \frac{1}{2} m_1 \langle v_1^2 \rangle_{\text{cluster}}, \quad (4)$$

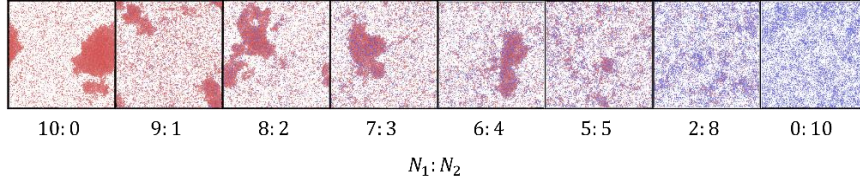
$$\bar{T}_{\text{eff}}^{\text{gas}}(m_1) = \frac{1}{2} m_1 \langle v_1^2 \rangle_{\text{gas}}. \quad (5)$$

高惯性粒子在cluster区域和gas区域中的平均热力学温度分别为

$$\bar{T}_{\text{eff}}^{\text{cluster}}(m_2) = \frac{1}{2} m_2 \langle v_2^2 \rangle_{\text{cluster}}, \quad (6)$$

$$\bar{T}_{\text{eff}}^{\text{gas}}(m_2) = \frac{1}{2} m_2 \langle v_2^2 \rangle_{\text{gas}}. \quad (7)$$

如图S4所示，在没有平移噪声的情况下，随着高惯性粒子比例的增大，两种粒子的热力学温度都呈现下降的趋势。



图S3 模拟快照(无平移噪声)，热浴温度为 $T = 0$ ，密度 $\phi = 0.3$

Fig. S3. Simulation snapshot without translation noise at temperature of the hot bath $T = 0$ and system density $\phi = 0.3$.

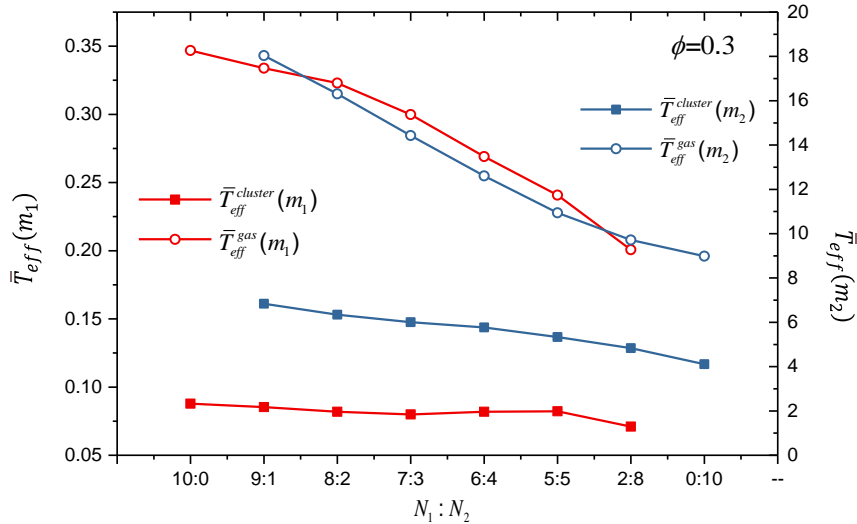


图 S4 无平移噪声时，cluster 区域和 gas 区域中粒子的平均热力学温度，低惯性粒子的平均热力学温度参照左侧刻度线，高惯性粒子的平均热力学温度参照右侧刻度线

Fig. S4. Mean thermodynamic temperatures of particles in cluster and gas regions without translation noise, with thermodynamic temperature of low inertia particles shown on the left scale line, and thermodynamic temperature of high inertia particles on the right scale line.