

《有限多孔介质诱导活性哑铃的聚集行为*》的补充材料

金燕 石子璇 金奕扬 田文得[†] 张天辉[†] 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. 活性哑铃在六角点阵介质周围的聚集形态

我们对活性哑铃在六角点阵介质周围的聚集行为进行了初步的探究, 发现活性哑铃在六角排列的介质周围形成的聚集形态与正方点阵是相似的 (图 S1)。

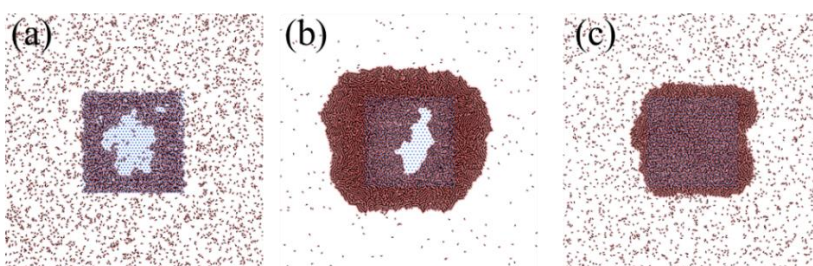


图 S1 活性哑铃在六角点阵介质周围的聚集形态, 蓝色粒子是介质格点, 黑色粒子是活性哑铃的头部, 红色粒子是活性哑铃的尾部 (a) $d = 2.5\sigma, f_a = 10, T = 0.5$; (b) $d = 3.2\sigma, f_a = 10, T = 0.02$; (c) $d = 3.2\sigma, f_a = 10, T = 0.2$

Fig.S1. Aggregation of active dumbbells around hexagonal lattice medium, with blue particles denoting the obstacles, the black particles the head of active dumbbells, and red particles the tail of active dumbbells: (a) $d = 2.5\sigma, f_a = 10, T = 0.5$; (b) $d = 3.2\sigma, f_a = 10, T = 0.02$; (c) $d = 3.2\sigma, f_a = 10, T = 0.2$.

2. 介质的无序度对活性哑铃聚集行为的影响

为了模拟无序多孔介质, 引入一个新的物理量——随机度(无序度) δ , 用来描述障碍物排列的无序程度。初始的障碍物排列是整齐的正方点阵, 我们将这种情况下的阵列看成 $\delta = 0$ 。然后, 使每个障碍物格点的 x 和 y 坐标分别移动 dx 和 dy 。 dx 和 dy 是满足正态分布 $N(\mu, \delta^2)$ 的随机数, 期望值 $\mu = 0$, δ 就是随机度。随机度越大, 障碍物排列越无序。图 S2 显示了主要的模拟结果。无序度会影响活性哑铃在介质中的运动行为, 但整体的现象与有序介质相似。无序介质的边缘更粗糙, 能使更多活性哑铃附着在介质周围; 同时, 无序介质内部会有更多狭小的结构, 诱导活性哑铃形成几何 “trap”, 从而产生聚集。

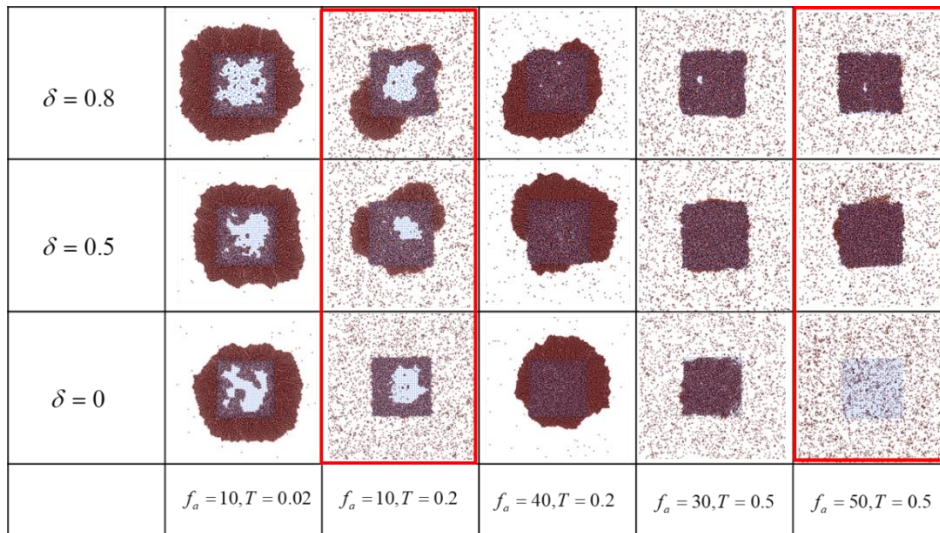


图 S2 活性哑铃在不同无序程度的介质周围的聚集形态

Fig.S2. Aggregation of active dumbbells around medium with different degrees of disorder.

3. 晶格间距对活性哑铃聚集行为的影响

我们针对晶格间距对活性哑铃聚集行为的影响做了一些初步的探究，在一定的条件下，晶格间距的增大使活性哑铃更容易形成密实聚集（图 S3）。但是，晶格常数很大时，活性哑铃很难在介质中形成聚集。

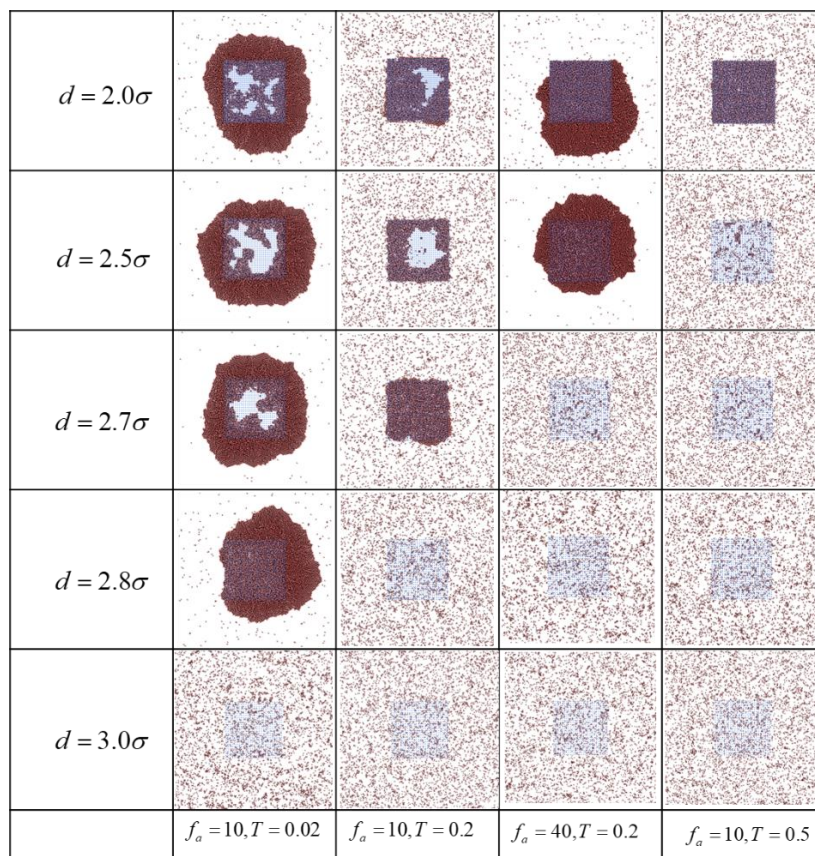


图 S3 不同晶格间距下活性哑铃在介质周围的聚集形态

Fig.S3. Aggregation of active dumbbells around medium at different lattice spacings.