

电场驱动下布朗粒子在周期管道内的运动*

金盈楠 吴黄凯 金泽帆 刘昕 王超

(台州学院物理系 浙江台州 318000)

(收稿日期:2017-02-22)

摘要:采用分子动力学方法模拟研究电场驱动下布朗粒子在周期管道内的运动.管道由 a 和 b 两部分周期排列而成,其中 a 管道对粒子有吸引作用, b 管道对粒子有纯排斥作用.结果表明,粒子迁移率随电场强度的变化存在明显的跳变.当电场强度比较小时,迁移率趋于零,布朗粒子在 a 管道区域存在明显的受限过程;当电场强度比较大时,迁移率趋于 1,布朗粒子在管道内呈现近自由运动.

关键词:布朗粒子 周期管道 迁移率 分子动力学模拟

1 引言

布朗粒子或生物大分子在外力驱动下可以通过微孔或在微管道内做定向运动.这一输运现象不仅在生命过程中十分普遍,如:离子、小分子以及生物大分子通过核孔在细胞质和细胞核间交换,而且也与生物大分子(如DNA)的分离和检测、药物缓释技术紧密相关^[1,2].随着纳米技术的发展,人们可以构造出蛋白质管道或固体纳米管道并用于研究粒子或大分子在管道内的输运规律.考虑到管道半径或宽度非常小,粒子或分子在输运过程中与管道壁之间存在强烈的相互作用,从而使粒子与管道壁间的相互作用成为影响输运的重要因素^[3~5].粒子与管道壁间的相互作用与管道壁的性质有关.实验上,可通过化学的方法对管道内壁进行修饰从而改变粒子与管道壁间的相互作用^[6,7].目前的研究多集中于粒子或分子在均质管道内或周期势场中的输运^[8~12],而对粒子在复合管道内的输运却少有研究.

本文考虑由两种材料组成的周期性复合管道(粒子与两种材料间的相互作用不同),并采用计算机模拟的方法初步研究电场驱动下布朗粒子在该管道内的运动规律.

2 模型及模拟方法

整个模拟在二维空间中进行,图1给出了模型系统示意图.质量为 m 的布朗粒子处在宽度为 w ,周期长度为 l_p 的无限长管道内,其中管道由长度相同的 a, b 两部分间隔排列而成, a 和 b 两部分均由尺寸相同的静止粒子组成,且 a 部分对布朗粒子有吸引作用而 b 部分对布朗粒子有纯排斥体积作用.管道内存在沿 x 轴正向且强度为 E 的匀强电场.假定布朗粒子带正电,那么在电场力驱动下粒子会沿 x 轴正方向做定向运动.

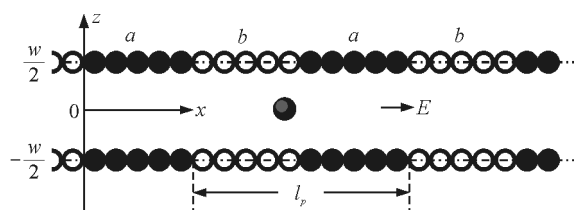


图1 模型系统示意图

布朗粒子与管道壁之间的相互作用由 Lennard-Jones 势描述

$$U_{LJ}(r) = \begin{cases} 4\epsilon_{a/b} \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] + U_{cut}, & r \leq r_{cut} \\ 0, & r > r_{cut} \end{cases} \quad (1)$$

* 2017年浙江省大学生科技创新活动计划暨新苗人才计划资助课题,课题编号:2017R430009

其中 r 表示布朗粒子到管道壁粒子之间的距离, σ 为粒子的直径, ϵ_{pa}/b 表示相互作用强度, U_{cut} 的值取决于 r_{cut} 的选择, 以保证 $U_{\text{LJ}}(r_{\text{cut}}) = 0$. 当只考虑排除体积作用时, r_{cut} 取 $2\frac{1}{6}\sigma$; 当考虑吸引作用时, r_{cut} 取 2.5σ . 另外, 假定布朗粒子带正电荷 q , 因此其在管道内会受到电场力 $\mathbf{F} = qE\mathbf{i}$ 的作用.

布朗粒子的运动均由 Brownian 动力学方程描述

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \mathbf{F}^{\text{int}} + \mathbf{F}^{\text{dr}} - \eta\mathbf{v} + \mathbf{F}^{\text{T}} \quad (2)$$

其中, $\mathbf{F}^{\text{int}} = -\nabla U_{\text{LJ}}$ 代表布朗粒子受到管道粒子的总作用力; \mathbf{F}^{dr} 为电场力; $\eta\mathbf{v}$ 为粘滞力; \mathbf{F}^{T} 为热噪声力, 其满足非关联的高斯分布: $\langle \mathbf{F}^{\text{T}}(t) \rangle = 0$ 和 $\langle \mathbf{F}^{\text{T}}(t) \cdot \mathbf{F}^{\text{T}}(t') \rangle = 6\eta k_{\text{B}} T \delta(t - t')$, 其中 k_{B} 为玻尔兹曼常数, T 为绝对温度. 这种 Brownian 动力学方法是一种非常有效的分子动力学模拟方法. 我们用速度 Verlet 算法求解粒子的位置和速度随时间的变化.

布朗粒子在电场驱动下的运动由粒子在管道长度方向上的迁移率 μ 描述, 即

$$\mu = \frac{1}{E} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle x(t) - x(0) \rangle}{t} \quad (3)$$

其中 $x(t)$ 和 $x(0)$ 分别表示 t 时刻和 0 时刻布朗粒子的 x 坐标. 在自由空间中, 布朗粒子在电场力方向上的迁移率为 $1^{[5]}$.

本文分别选取 ϵ_{pb} , σ , m 和 q 为能量、长度、质量和电荷单位, 则时间单位定义为 $t_{\text{LJ}} = \left(\frac{m\sigma^2}{\epsilon}\right)^{\frac{1}{2}}$. 在模拟中我们固定参数 $\epsilon_{pb} = 1$, $\sigma = 1$, $m = 1$, $\eta = 1$, $q = 1$ 以及 $k_{\text{B}}T = 1$, 而改变参数 E , ϵ_{pa} , w 和 l_p 并考察它们对粒子迁移率的影响.

3 模拟结果及讨论

图 2 给出了不同参数条件下粒子迁移率 μ 随电场强度 E 的变化. 由图可以看出, 在给定参数下 μ 随 E 的变化存在一个明显的跳变: 当 E 比较小, 即驱动力比较弱时, 粒子迁移率 μ 几乎为零; 当 E 比较大, 即驱动力比较强时, 粒子迁移率 μ 趋于 1, 这与粒子在自由空间中的结果相近; 当 E 取值中等时, μ 随 E

的增大而快速增大, 其值迅速由零增至趋于 1. 我们定义 $\mu = 0.5$ 所对应的电场强度为临界电场强度 (记为 E_{C}), 并用它来表征相应参数条件下 μ 随 E 出现跳变时所对应的电场强度. 由图可以看出, 临界电场强度 E_{C} 几乎与管道周期长度 l_p 无关, 但随着粒子与管道 a 部分间的吸引作用强度 ϵ_{pa} 的增强或管道宽度 w 的减小, E_{C} 不断增大.

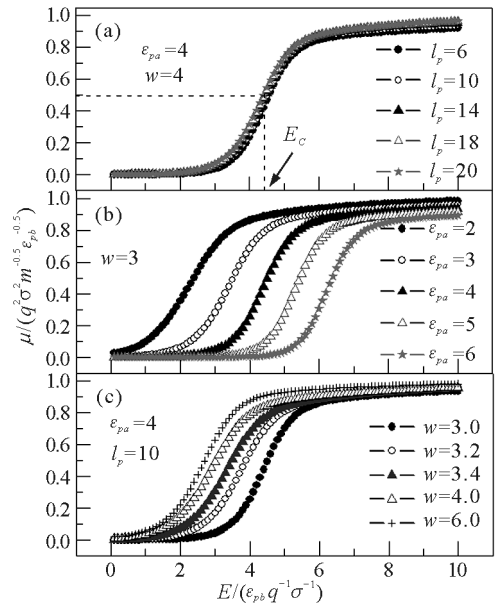
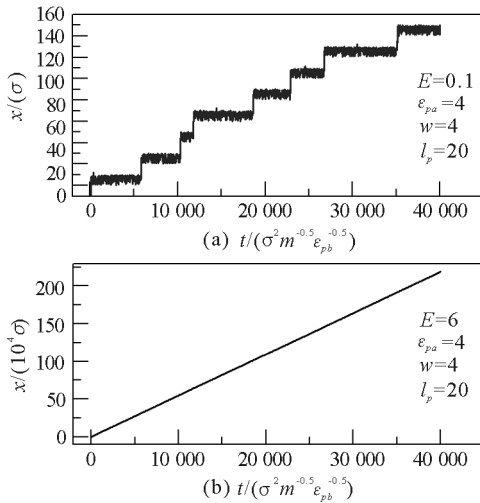


图 2
(a) 管道周期 l_p 不同时, 粒子迁移率 μ 随电场强度 E 的变化;
(b) 粒子与管道 a 部分间的吸引作用强度 ϵ_{pa} 不同时, 粒子迁移率 μ 随电场强度 E 的变化;
(c) 管道宽度 w 不同时, 粒子迁移率 μ 随电场强度 E 的变化.

在我们的模型中, a 管道对布朗粒子具有吸引作用, 而 b 管道对粒子具有纯排斥体积作用, 因此当布朗粒子运动到 a 和 b 管道交界面且准备由 a 管道进入 b 管道时, 来自 a 管道的有效吸引力 F_{eff} 会阻碍运动的发生. 当驱动电场很小, 即驱动力远比 F_{eff} 小时, 粒子很难由 a 管道进入 b 管道, 从而导致非常小的迁移率. 作为例子, 图 3(a) 给出了电场强度 $E = 0.1$ 时, 粒子 x 坐标随时间的演化 (x 坐标原点定义如图 1 所示), 其中 $\epsilon_{pa} = 4$, $w = 4$, $l_p = 20$. 由图可以看出, 在弱电场驱动下, 粒子在 a 管道区域存在明显的受限行为. 在受限过程中, 粒子在 x 方向上不断地进行着前前后后的振荡, 经过一定受限时间之后, 粒子会在随机热噪声力的驱动下迅速通过邻近 b 管道而

进入下一个 a 管道并开启新的受限过程. 相反, 当驱动电场比较大, 即驱动力比 F_{eff} 大时, 粒子很容易由 a 管道进入 b 管道, 从而使粒子出现近自由的受驱运动, 即迁移率接近于 1. 图 3(b) 给出了电场强度 $E=6$ 时, 粒子 x 坐标随时间的演化, 其中 $\epsilon_{pa}=4, \omega=4, l_p=20$. 由图可以看出, 在强电场驱动下, 粒子在管道内快速定向运动, 而且运动过程中没有明显的受限行为.



(a) 电场强度 $E=0.1$ 时, 粒子 x 坐标随时间的演化;

(b) 电场强度 $E=6$ 时, 粒子 x 坐标随时间的演化, 其中 $\epsilon_{pa}=4, \omega=4, l_p=20$.

图 3

临界电场强度 E_C 的大小与 a 管道对粒子的有效吸引力 F_{eff} 相关, 即 F_{eff} 越大 E_C 越大. 在我们的模型中, a 管道对布朗粒子具有短程吸引作用, 因此 F_{eff} 主要取决于管道 a 和 b 两部分交界面上 a 管道粒子对布朗粒子的总吸引力, 这意味着 F_{eff} 仅随 ϵ_{pa} 的增大而增大, 而与 a 管道长度或管道周期长度 l_p 无关, 从而导致 E_C 与 l_p 无关, 但随 ϵ_{pa} 的增大而不断增大, 如图 2(a) 和 (b) 所示. 另外, 随着管道宽度 ω 增大, 布朗粒子在输运过程中出现在管道壁附近的概率不断减小, 这将使得 a 管道的吸引对布朗粒子运动的影响越来越弱, 从而导致 E_C 随 ω 的增大而不断减小, 如图 2(c) 所示.

4 结论

本文用分子动力学方法模拟研究电场驱动下布

朗粒子在周期管道内的运动规律. 管道由 a 和 b 两部分周期排列而成, 其中 a 管道对粒子有吸引作用, 而 b 管道对粒子有纯排斥作用. 结果表明, 粒子迁移率 μ 随电场强度 E 的变化存在明显的跳变. 当 E 比较小时, 受 a 管道有效吸引的影响, 布朗粒子在 a 管道区域存在明显的受限过程, 从而导致 μ 趋于零; 当 E 比较大时, 布朗粒子在管道内呈现近自由运动, 从而使 μ 趋于 1; 在临界电场 E_C 附近, μ 随 E 快速变化. 另外, 我们也讨论了管道周期长度、 a 管道吸引强度以及管道宽度等参数对 E_C 的影响.

参考文献

- 1 B. Luan, G. Stolovitzky, and G. Martyna. Slowing and controlling the translocation of DNA in a solid - state nanopore. *Nanoscale*, 2012(4): 1 068 ~ 1 077
- 2 J. Han, S. W. Turner, and H. G. Craighead. Entropic trapping and escape of long DNA molecules at submicron size constriction. *Phys. Rev. Lett.*, 1999(83): 1 688 ~ 1 691
- 3 A. Milchev, W. Paul, and K. Binder. Polymer chains confined into tubes with attractive walls: A Monte Carlo simulation. *Macromol Theory Simul.*, 1994(3): 305 ~ 323
- 4 P. K. Ghosh, P. Hänggi, F. Marchesoni, F. Nori, and G. Schmid. Detectable inertial effects on Brownian transport through narrow pores. *Europhys. Lett.*, 2012, 98(5): 50 002
- 5 P. K. Ghosh, P. Hänggi, F. Marchesoni, F. Nori, and G. Schmid. Brownian transport in corrugated channels with inertia. *Phys. Rev. E*, 2012(86): 021 112
- 6 M. B. Smith, D. J. McGillivray, J. Genzer, M. Lösche, and P. K. Kilpatrick. Neutron reflectometry of supported hybrid bilayers with inserted peptide. *Soft Matter*, 2010, 6, 862 ~ 865.
- 7 C. Priest. Surface patterning of bonded microfluidic channels. *Biomicrofluidics*, 2010, 4(3), 032 206
- 8 P. Reimann, C. van den Broeck, H. Linke, P. Hänggi, J. M. Rubi, and A. Perez - Madrid. Giant acceleration of free diffusion by use of tilted periodic potentials. *Phys. Rev. Lett.*, 2001, 87: 010 602
- 9 A. Berezhkovskii and L. Dagdug. Biased diffusion in tubes formed by spherical compartments. *J. Chem. Phys.*, 2010, 133(13): 134 102
- 10 R. Festa, E. G. d'Agliano. Diffusion coefficient for a

- Brownian particle in a periodic field of force. *Physica*, 1978(90A):229 ~ 244
- 11 宋金璠, 蒋学华, 吕林霞. 周期势场中布朗运动粒子的非线性效应. *河南师范大学学报(自然科学版)*, 2010, 38(1):90 ~ 92
- 12 李玲, 谢征微. 色噪声驱动的布朗粒子在周期势场中的运动. *四川师范大学学报(自然科学版)*, 1996, 19(4): 80 ~ 84

The Migration of Brownian Particle Driven by Electrical Field in Periodical Channels

Jin Yingnan Wu Huangkai Jin Zefan Liu Xin Wang Chao

(Physics Department of Taizhou University, Taizhou, Zhejiang 318000)

Abstract: The migration of Brownian particle in periodical channels under electrical force was studied by using molecular dynamics simulation. The channel walls are patterned periodically with part a and part b, where the interaction between Brownian particle and channel a is attractive, and that between Brownian particle and channel b is pure repulsive. Results show that there is an obvious jump for the dependence of the mobility on the strength of the electrical field. When the strength of the electrical field is small, the mobility is nearly 0, and the Brownian particle is trapped at channel a. While when the strength of the electrical field is big, the mobility is nearly 1, and the Brownian particle runs almost freely under the electrical force.

Key words: Brownian particle; periodical channel; mobility; molecular dynamics simulation

(上接第 12 页)

对强度取适当值时, 轨迹具有封闭对称性. 以上 3 种轨迹, 推广了文献中电荷运动轨迹, 给物理中的运动轨迹曲线宝库增加了新成员.

参考文献

- 1 汪静谊. 电子在相互垂直的电场和磁场中运动轨迹的讨论. *大学物理*, 1988, 7(9): 43 ~ 45
- 2 余守宪, 唐莹. 重力场和正交均匀电磁场中的旋轮线(摆线). *物理与工程*, 2001, 11(6): 12 ~ 18

The Motion Trajectory of Double Charge in the Uniform Magnetic Fields

Yang Jie

(School of Science, HuZhou Teachers College, HuZhou, ZheJiang 313000)

Jiang Fujin

(The First High School of Huangpi District in Wuhan, Wuhan, Hubei 430300)

Qiu Weigang

(Physics Visual Studio, HuZhou Teachers College, HuZhou, ZheJiang 313000)

Abstract: The equations of motion of double-charge in the uniform magnetic field are given. The constants of motion and the characteristics of orbits are discussed. The closed symmetric orbits are drawn from the numerical solution.

Key Words: double charge; uniform magnetic field; orbit