arXiv:2611.32972v1 [cond-mat.soft] 24 Nov 2026

限域诱导的手性活性粒子和哑铃粒子转变

Mike Brandt*Institute for Theoretical Physics、 Heidelberg University、
69120 Heidelberg、 Germany andPresent address: Service de Physique de l'Etat Condensé、
CEA、CNRS Université Paris-Saclay、 91191 Gif-sur-Yvette、 France

Falko Ziebert† 和 Carsten Littek‡Institute for Theoretical Physics、
Heidelberg University、 69120 Heidelberg、 Germany（日期：2026年11月25日）

我们提出了一个用于描述谐振陷阱中手性活性布朗粒子（cABP）和手性主动布朗哑铃（cABD）的随机行为的统一框架。一方面，我们采用 Martin-Siggia-Rose路径积分形式，以被动布朗运动作为参考状态，并将活性作为关于自推进速度的微扰级数纳入其中。该方法最适合用于计算精确的时间依赖相关函数。另一方面，我们使用福克-普朗克方程，该方程最适合用于获得稳态概率分布。我们详细讨论了系统从低活性/强约束下以陷阱为中心的分布，向高活性/弱约束下的环形分布的转变，以及手性（即活性角速度）的影响。对于哑铃粒子，会发生一系列此类转变，而关联函数则可提供有关粒子构象和取向的信息。这确立了这一组合框架作为研究随机活性粒子系统的有力工具。

I. 引言

研究最为广泛的"活性物质" [1] 实现形式是自推进粒子，即利用能量源/通量运动、处于非平衡态的粒子。细菌等微型游动体 [2] 是最常见的生物学实现形式，而如今实验室制备的实现形式也有很多，且大多属于胶体领域 [3]。因此，它们通常会表现出强烈的涨落，需要采用随机性描述。

这类"活性布朗粒子"中一个有趣的子类是具有手性 [4, 5]的粒子。例子包括具有形状各向异性 [6] 或活性各向异性 [7], 的人造游动体，以及因鞭毛搏动模式[8, 9], 而绕圈旋转的精子细胞，或爬行寄生虫 [10], ； 后者的手性由推动其运动的黏附素表面流 [11]造成。

本文聚焦于单个活性粒子的动力学与统计性质。活性与限域势之间的相互作用是一个备受关注的问题 [12, 13]。约束的一个典型特征是出现最简单的非平衡转变之一，即随着活性增强或约束减弱，概率分布从以陷阱中心为峰值转变为在有限径向距离处达到峰值的"甜甜圈形"分布。这一转变最初由理论预言 [14], ，随后通过将活性胶体限制在声学陷阱中得到了实验观测 [15]。

在理论研究方面，关于处于势中的活性粒子的文献日益增多 [14, 16–19] ，受限手性活性粒子也已得到讨论 [19–21]。最后，人们还引入了针对更复杂粒子的模型。哑铃粒子，即两个相互连接的粒子，主要用于在模拟中实现弱形状各向异性 [22–24], ； 此外，假定连接粒子的弹簧力的活性布朗哑铃 [25] 、更长的活性聚合物 [26] ，以及活性晶体的有效模型 [27] 也相继被提出。在方法方面，由于系统固有的随机性，研究中主要采用朗之万方法 [4, 14, 25] 和与之等价的福克-普朗克方程方法（FPE） [5, 17, 18]。采用Doi-Peliti方法的随机路径积分 [28], 、福克-普朗克方程的场论版本 [29, 30] ，或 Martin-Siggia-Rose-Janssen-DeDominicis（MSRJD）形式 [19, 31, 32], ，则是在近期发展起来的一种数学上等价的替代方案，并具有一定优势。

本文结合 MSRJD 路径积分形式与福克-普朗克方程，全面研究被困于谐势中的手性活性布朗粒子和哑铃粒子的行为。本文结构如下：首先，在第二节中，我们简要介绍这两种方法，以及如何将其应用于活性粒子的随机运动方程。接着，在第三节中，我们用这两种方法详细研究手性活性布朗粒子（cABP，也称为布朗圆周游动体）。作为研究结果，我们给出其精确的相关矩和以级数展开形式表示的稳态概率分布，从而能够量化其在陷阱中的形状转变与速度的关系——

性、角速度和陷阱强度。在第四节中，我们将相同的方法应用于手性主动布朗

* mike.brandt2@cea.fr
† ziebert@thphys.uni-heidelberg.de
‡ littek@thphys.uni-heidelberg.de

哑铃（cABD）。此外，我们还讨论哑铃平均取向的一些有趣特征，并描述陷阱中一系列形状转变，这些转变与构成哑铃的活性粒子和被动货物的分布有关。最后，在第五节中，我们将给出结论并展望未来。

II. 随机路径积分与福克-普朗克方程

我们首先概述用于描述随机运动的方法，即Martin-Siggia-Rose-Janssen-DeDominicis（MSRJD）路径积分 [33–35],和福克-普朗克方程（FPE） [36, 37]。路径积分方法的讨论建立在文献 [19]所 प्रस्तुत的详细推导之上。福克-普朗克方程是随机过程中的标准工具[38] ，此前也已应用于谐振陷阱中的主动布朗粒子，例如文献 [17, 18]。正如文献 [39]所讨论的，这两种方法在描述随机动力学方面是等价的。

正如我们将要指出的，路径积分最适合用于计算时间依赖矩，而无需分布函数；相比之下，用于求解概率分布的时间依赖福克-普朗克方程通常较为困难。然而，由于本文所考虑的受陷系统在长时间后会达到稳态，定态福克-普朗克方程可以通过相当简单的递推关系推导出稳态分布函数。相反，在路径积分方法中计算关于活性的微扰级数，很快就会变得十分困难。

A. MSRJD 路径积分

我们考虑一个具有 d 个自由度的系统，由状态向量 X表示，并由过阻尼朗之万方程控制

$$\begin{cases} \dot{X}_\mu(t) = F_\mu(X(t)) + \sqrt{2D_\mu}\,\eta_\mu(t), \\ X(0) = X_0, \end{cases} \tag{1}$$

其中， F_μ 表示确定性漂移， D_μ 是对应于分量 X_μ的扩散系数。项$\eta_\mu(t)$表示高斯白噪声

$$\langle \eta_\mu(t) \rangle = 0 \quad \text{and} \quad \langle \eta_\mu(t)\eta_\nu(t') \rangle = \delta_{\mu\nu}\delta(t-t'). \tag{2}$$

物理轨迹 $X(X_0,\ \eta)$ 由给定的初始条件 $X(t=0) = X_0$ 和特定的噪声实现 η唯一确定。

根据 Martin-Siggia-Rose形式 [33]，我们通过泛函狄拉克δ分布在路径积分中施加朗之万运动方程，即 $\mathrm{EoM}(X, X_0, \eta) \equiv \dot{X} - F(X) - \sqrt{2D}\,\eta = 0$,

根据下式，我们将其表示为带有辅助响应场 χ 的路径积分

$$\delta\big(\mathrm{EoM}(X, X_0, \eta)\big) = \int \mathrm{D}\chi\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\left(\chi\middle|\mathrm{EoM}(X,X_0,\eta)\right)}, \tag{3}$$

其中我们引入如下记号

$$(X|Y) = \sum_{\mu=1}^{d} \int_0^\infty \mathrm{d}t\; X_\mu(t) Y_\mu(t). \tag{4}$$

对高斯分布噪声 η 进行平均，并分别为 X_μ 和χ_μ引入源场 h_μ 和g_μ ，可得到给定初始条件 $X(0) = X_0$下的生成泛函，

$$\mathcal{Z}[h, g] = \int_{X(0)=X_0} \mathrm{D}\chi \mathrm{D}X\, \mathrm{e}^{-S(X,\chi)+(X|h)+(\chi|g)}, \tag{5}$$

其中我们称

$$S(X, \chi) = (\chi|D\chi) + \mathrm{i}\left(\chi\middle|\dot{X} - F(X)\right), \tag{6}$$

它是关于 X 和 χ的泛函，即系统的 MSRJD作用量。

1. *Perturbative Expansion in Activity*

现在，我们具体考虑受刚度为α的谐振陷阱约束的二维手性活性布朗粒子（cABP）的朗之万方程。自由度为空间位置 $\vec{q} = (q_x,\ q_y)$和取向矢量 $\vec{n}(\vartheta) = (\cos\vartheta,\ \sin\vartheta)$，其中角度为 $\vartheta \in [0, 2\pi)$。粒子以恒定速度 v_0 沿着 $\vec{n}$ 自推进，并受到恒定角速度 Ω 的作用，从而破坏手性对称性。将摩擦系数设为 1，过阻尼朗之万方程为

$$\dot{\vec{q}}(t) = v_0\vec{n}(\vartheta) - \alpha\vec{q}(t) + \sqrt{2D_q}\,\vec{\eta}_q(t), \tag{7}$$

$$\dot{\vartheta}(t) = \Omega + \sqrt{2D_\vartheta}\,\eta_\vartheta(t). \tag{8}$$

其中 D_q 和 D_ϑ 分别表征平移和旋转高斯白噪声的强度。

由于 $\vec{n}(\vartheta)$中的三角函数引入了非线性耦合，方程（7）无法通过解析方法求得精确的闭式解。因此，我们采用关于自推进速度 v_0的微扰方法。为此，我们将作用量分解为自由部分和相互作用（活性）部分:

$$S(\vec{q}, \vartheta, \chi) = S_0(\vec{q}, \vartheta, \chi) + S_\mathrm{A}(\vec{q}, \vartheta, \chi). \tag{9}$$

自由作用量 S_0 描述了两个相互独立的过程——谐振陷阱中的二维奥恩斯坦-乌伦贝克过程和手性旋转扩散:

$$\begin{aligned} S_0(\vec{q}, \vartheta, \chi) = {} & D_q(\vec{\chi}_q|\vec{\chi}_q) + \mathrm{i}\big(\vec{\chi}_q\big|\dot{\vec{q}} + \alpha\vec{q}\big) \\ & + D_\vartheta(\chi_\vartheta|\chi_\vartheta) + \mathrm{i}\big(\chi_\vartheta\big|\dot{\vartheta} - \Omega\big). \end{aligned} \tag{10}$$

活性部分 S_{A} 对自推进进行编码，并将位置响应场 $\vec{\chi}_q$ 与取向角 ϑ 耦合起来

$$S_{\mathrm{A}}(\vec{q},\vartheta,\chi) = -\mathrm{i}v_0\big(\vec{\chi}_q\big|\vec{n}(\vartheta)\big). \tag{11}$$

引入源场 h_μ 和 g_μ后，未受扰系统的生成泛函可分解为

$$\mathcal{Z}_0[h,g] = \mathcal{Z}^{\alpha}[\vec{h}_q,\vec{g}_q]\cdot\mathcal{Z}^{\vartheta}[h_\vartheta,g_\vartheta]. \tag{12}$$

这里， $\mathcal{Z}^{\alpha}$ 和 $\mathcal{Z}^{\vartheta}$ 分别是二维 Ornstein-Uhlenbeck 过程和二维手性旋转扩散的生成泛函。对于初始条件 $X_0=(\vec{q}_0,\ \vartheta_0)$，它们的值为

$$\mathcal{Z}^{\alpha}[\vec{h}_q,\vec{g}_q] = \exp\left[\big(\mathrm{e}^{-\alpha t}\vec{q}_0\big|\vec{h}_q\big)+\frac{1}{2}\big(\vec{h}_q\big|C_\alpha\big|\vec{h}_q\big)+\big(\vec{h}_q\big|G_\alpha\big|\vec{g}_q\big)\right], \tag{13}$$

$$\mathcal{Z}^{\vartheta}[h_\vartheta,g_\vartheta] = \exp\left[\big(\vartheta_0|h_\vartheta\big)+\big(\Omega t|h_\vartheta\big)+\frac{1}{2}\big(h_\vartheta|C_\vartheta|h_\vartheta\big)+\big(h_\vartheta|G_\vartheta|g_\vartheta\big)\right]. \tag{14}$$

这里的传播子可通过求解相应的 Dyson-Schwinger 方程得到，参见文献 [19]。G_α 和 C_α 支配着 Ornstein-Uhlenbeck 动力学，

$$G_\alpha(t,t') = -i\Theta(t-t')\mathrm{e}^{-\alpha(t-t')}, \tag{15}$$

$$C_\alpha(t,t') = \frac{D_q}{\alpha}\left[\mathrm{e}^{-\alpha|t-t'|}-\mathrm{e}^{-\alpha(t+t')}\right]. \tag{16}$$

类似地， G_ϑ 和 C_ϑ 编码了自由角扩散:

$$G_\vartheta(t,t') = -\mathrm{i}\Theta(t-t'), \tag{17}$$

$$C_\vartheta(t,t') = 2D_\vartheta\min\{t,t'\}. \tag{18}$$

有了 $\mathcal{Z}_0[h,g]$的闭合表达式后，我们现在需要处理活性。我们将 S_{A} 中的场提升为关于源场的泛函导数

$$X_\mu(t)\to\frac{\delta}{\delta h_\mu(t)}\quad\text{and}\quad\chi_\mu(t)\to\frac{\delta}{\delta g_\mu(t)}, \tag{19}$$

针对 $\mu\in\{x,y,\vartheta\}$。这使我们能够将作用量的主动部分提到被动参考系的自由生成泛函前面

$$\mathcal{Z}[h,g] = \mathrm{e}^{-S_{\mathrm{A}}\left(\frac{\delta}{\delta h},\frac{\delta}{\delta g}\right)}\mathcal{Z}_0[h,g]. \tag{20}$$

该表达式描述了活性导致的过程相对于被动过程的偏离，并且可以按 v_0 –阶逐阶系统地求值——由于速度在 S_{A} 中作为线性因子出现，参见式 (11)——方法是对指数函数进行泰勒展开。

在技术上，最好将作用量的主动ˆ部分转换为算子，$S_{\mathrm{A}}\mapsto -iv_0A$ 其中

$$\hat{A} = \frac{1}{2}\big\{\big(a^+|\phi^+\big)+\big(a^-|\phi^-\big)\big\}, \tag{21}$$

其中算子 $a^\sigma(t)$ 和 $\phi^\sigma(t)$ 定义为

$$a^\sigma(t) = \frac{\delta}{\delta g_x(t)}+\mathrm{i}\sigma\frac{\delta}{\delta g_y(t)}, \tag{22}$$

$$\phi^\sigma(t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\sigma\frac{\delta}{\delta h_\vartheta(t)}} \tag{23}$$

对于 $\sigma\in\{+,-\}$。将这些算子作用于自由生成泛函 $\mathcal{Z}_0[h,g]$ ，得到以下规则

$$\phi^\sigma(t)\mathcal{Z}_0[h,g] = \mathcal{Z}^{\alpha}[\vec{h}_q,\vec{g}_q]\,\mathcal{Z}^{\vartheta}[h_\vartheta-\mathrm{i}\sigma\delta_t,g_\vartheta], \tag{24}$$

$$a^\sigma(t)\mathcal{Z}_0[h,g] = \Big[\big(\vec{h}_q|G_\alpha\big)_x(t)+\mathrm{i}\sigma\big(\vec{h}_q|G_\alpha\big)_y(t)\Big]\,\mathcal{Z}_0[h,g], \tag{25}$$

其中， δ_t with $\delta_t(t')=\delta(t'-t)$ 表示平移后的狄拉克 δ 函数。

2. *Moments and probability distribution*

现在，只需计算生成泛函 $\mathcal{Z}[h,g]$ 关于源场在 $h,\ g=0$ 处的泛函导数，即可得到关联函数。关键的是，这种算符形式揭示了微扰级数的严格终止条件：由于 ˆ A^N 作用于 $\mathcal{Z}_0$ 会生成与 $|\vec{h}_q|^N$ 成正比的项，令 $\vec{h}_q=0$ 即可消去所有更高阶项。因此， $\vec{q}$ 的 N^{th} 阶矩的微扰级数恰好在 $\mathcal{O}(v_0^N)$ 阶终止。利用这一性质，可以计算空间相关函数的精确非微扰结果，例如平均位置或均方位移（MSD）。

傅里叶空间中的空间概率分布也可以通过对生成泛函应用指数算子来计算

$$\hat{\mathrm{p}}(t,\vec{k}) = \left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}\cdot\frac{\delta}{\delta\vec{h}_q}}\mathcal{Z}[h,g]\right)\Bigg|_{h,g=0}\equiv\mathcal{Z}[\vec{h}_q=-\mathrm{i}\vec{k}\delta_t,0]. \tag{26}$$

这一表达式的基础是对 $\delta\left(\vec{x}-\frac{\delta}{\delta\vec{h}_q}\right)$ 的傅里叶表示，它用于计算 $p(t,x)=\langle\delta(\vec{x}-\vec{q}(t))\rangle$[19]。值得注意的是，由于导数的指数

算子起到平移的作用，与在零点求值的有限阶矩不同，这里必须在平移后的源 $h_q = -ik\delta_t$ 处求值。因此，多次应用活性算子会产生不会消失的修正。于是，概率分布的微扰级数不会在 v_0 的有限阶处终止，必须将其截断以获得近似解。

由于本文考虑了谐势约束，cABP 的概率分布在长时间极限下会收敛到稳态分布。利用路径积分框架求得该稳态，需要计算给定阶数v_0 下的生成泛函——这涉及 N 重嵌套时间积分——随后再取极限 $t \to \infty$。虽然我们已经将计算做到 v_0^4阶，但获得该稳态还有一种简单得多的方法，即下文将要介绍的福克-普朗克方法。

B. 福克-普朗克方程

作为另一种方法，相空间 $\mathbb{R}^2 \times [0, 2\pi)$ 上的定态福克-普朗克方程（FPE）为稳态分布提供了一个偏微分方程。如下文所述，这将问题归结为求解模耦合递推这一代数任务。

福克-普朗克方程的漂移系数和扩散系数可以直接从相应的朗之万动力学 [38]中提取。平移漂移由谐性回复力 $-\alpha\vec{x}$ 和自推进力 $v_0\vec{n}(\vartheta)$给出，角度漂移则由角速度 Ω 给出。由于我们假设两个平移自由度和角度分别受到相互独立的加性噪声作用，扩散张量为对角矩阵，其常数元素为D_q 和 D_ϑ。因此，概率密度 $\mathrm{P}(\vec{x}, \vartheta)$ 所满足的定态福克-普朗克方程为

$$\begin{aligned} 0 = {} & \alpha \nabla_{\vec{x}} \cdot (\vec{x}\,\mathrm{P}) - v_0 \vec{n}(\vartheta) \cdot \nabla_{\vec{x}} \mathrm{P} + D_q \nabla_{\vec{x}}^2 \mathrm{P} \\ & - \Omega \partial_\vartheta \mathrm{P} + D_\vartheta \partial_\vartheta^2 \mathrm{P}. \end{aligned} \tag{27}$$

为了解析地处理这个偏微分方程，我们进行模分解。首先，将空间坐标变换到傅里叶空间

$$\hat{\mathrm{P}}(\vec{k}, \vartheta) = \int \mathrm{d}^2 x \; \mathrm{P}(\vec{x}, \vartheta) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{x}}. \tag{28}$$

由于谐势以及平移噪声和旋转噪声均具有各向同性，稳态概率分布必然表现出相同的连续旋转对称性。因此，傅里叶空间中的稳态密度只能取决于波矢的大小 $k = |\vec{k}|$ 以及取向与波矢之间的相对角度。为了处理傅里叶空间中自推进项所包含的标量积 $\vec{n}(\vartheta) \cdot \vec{k}$，我们将波矢写成极坐标 $\vec{k} = k(\cos\varphi, \sin\varphi)$，并进行角度分解位置，具体如下

$$\hat{\mathrm{P}}(\vec{k}, \vartheta) = \sum_{m \in \mathbb{Z}} \hat{\mathrm{P}}_m(k) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}m(\vartheta - \varphi)}. \tag{29}$$

将这些展开代入稳态福克–普朗克方程（式(27)），得到

$$\begin{aligned} 0 = {} & -\alpha k \partial_k \hat{\mathrm{P}}_m + (D_q k^2 + D_\vartheta m^2 + \mathrm{i}m\Omega) \hat{\mathrm{P}}_m \\ & + \frac{\mathrm{i}v_0 k}{2} \big(\hat{\mathrm{P}}_{m-1} + \hat{\mathrm{P}}_{m+1} \big). \end{aligned} \tag{30}$$

与路径积分方法中的做法类似，我们现在为 $v_0 = 0$引入一个被动参考态，并以 v_0的幂级数展开完整解。

1. Passive Reference State

虽然 $\hat{\mathrm{P}}_m(k)$ 表示精确密度的第 m^{th} 个角向傅里叶模，我们现在引入 $\hat{\mathrm{P}}^{(n)}(\vec{k}, \vartheta)$，作为活性 v_0 的第 n^{th} 阶微扰修正。令$v_0 = 0$，则 k中的常微分方程

$$\alpha k \partial_k \hat{\mathrm{P}}_m^{(0)} = \big(D_q k^2 + D_\vartheta m^2 + im\Omega \big) \hat{\mathrm{P}}_m^{(0)} \tag{31}$$

可通过分离变量法求解，得到

$$\hat{\mathrm{P}}_m^{(0)}(k) = \mathcal{N}_m \cdot k^{-\frac{D_\vartheta m^2 + im\Omega}{\alpha}} \mathrm{e}^{-\frac{D_q k^2}{2\alpha}} \tag{32}$$

其中归一化常数为 $\mathcal{N}_m$。我们必须要求$m = 0$，否则解将在 $k = 0$处发散；这不符合物理实际，因为它必须等于归一化值。$\mathcal{N}_0$ 的值可由对 ϑ的边缘分布进行归一化得到，这直接给出 $\mathcal{N}_0 = 1/2\pi$。因此，被动参考态为

$$\hat{\mathrm{P}}_0^{(0)}(k) = \frac{1}{2\pi} \mathrm{e}^{-\frac{D_q}{2\alpha} k^2}, \tag{33}$$

这其实也可以推测出来。它是取向角 ϑ 的均匀分布与谐势中被动布朗粒子的高斯分布的乘积。

2. Power Series Expansion

现在，我们通过采用幂级数试探形式，围绕被动参考态展开

$$\hat{\mathrm{P}}_m(k) = \left(\sum_{j=0}^{\infty} g_{m,j} k^j \right) \hat{\mathrm{P}}_0^{(0)}(k). \tag{34}$$

请注意，为了保证可归一化性，必须满足 $j \geq 0$，并且根据记号的一致性，有 $g_{0,\,0} = 1$ 。

将展开代入方程（30），得到展开系数的递推关系

$$g_{m,j} = \frac{-iv_0}{2(\alpha j + D_\vartheta m^2 + im\Omega)}\left(g_{m-1,j-1} + g_{m+1,j-1}\right). \tag{35}$$

这一关系的一个重要特征是，它通过一个与 v_0 成正比的因子，将 j 阶系数与 $j-1$ 阶系数耦合起来。进而，这意味着 $g_{m,\,j} \sim v_0^j$ 因此，g_m 中的级数展开，$_j$ 构成了关于自推进速度的微扰展开。这与路径积分形式中的微扰展开完全类似。在取极限 $t \to \infty$ 后，通过递推关系和路径积分形式计算得到的系数实际上完全相同，这反映了这两种方法在数学上的等价性 [39]。

递推关系无法用闭合形式求解。事实上，对于 c_n、系数为 $Q_n^{\pm} \in \mathbb{R}$ 的一般标量递推关系，其解

$$Q_n c_n + Q_n^+ c_{n+1} + Q_n^- c_{n-1} = 0 \tag{36}$$

只能表示为无限长的连分式 [38]，因此我们必须将展开截断在某个阶数 N。不过，与 MSRJD形式中的时变表述所涉及的 N 个积分相比，这种方法将计算谐势约束的手性活性布朗粒子的稳态概率分布这一问题，简化为一个线性递推关系。

III. 手性活性布朗粒子

现在，我们运用第二节介绍的方法，对受约束的手性活性布朗粒子（cABP）的随机运动进行定量分析。首先，我们利用生成泛函（式（20）），推导速度和位置关联函数的时间依赖表达式，并描述中间时段的振荡交叉行为。MSRJD形式的优势在于，无需明确写出概率分布。随后，我们给出自推进二阶近似下，时间依赖概率分布 P($\vec{q}$，t) 的微扰表达式。最后，我们给出福克-普朗克方程递推关系的解，以及由此得到的稳态概率分布，见式（34）—（35）。谐势约束较强或自推进较弱时，分布在中心呈单峰；谐势约束较弱或自推进较强时，粒子能够爬升势能，因此分布呈径向峰状。我们绘制谐势刚度 α 与自推进速度 v_0 的相图，以刻画这种形状转变，并表明角速度 Ω 会使转变向更高活性偏移，即阻碍分布转变为径向峰状。

A. 矩

cABP 的随机运动可通过其速度/取向$\vec{v} = v_0\vec{n}(\vartheta)$ 和位置 $\vec{q}$ 的关联函数来刻画。对生成泛函（式（20））关于源 $h_\mu(t)$ 在 h，$g = 0$ 处求泛函导数，即可分别导出这两类关联函数。

速度的动力学完全包含在被动参考系中，因此无需进行微扰展开。为方便起见，我们省略自推进速度 v_0，并用取向矢量 $\vec{n}$表示关联。我们使用算子 $\phi^\sigma(t)$来表示三角函数

$$\begin{aligned}\cos(\vartheta(t)) &= \frac{1}{2}\left[\phi^-(t) + \phi^+(t)\right]\mathcal{Z}\Big|_{h,g=0},\\ \sin(\vartheta(t)) &= \frac{1}{2\mathrm{i}}\left[\phi^-(t) - \phi^+(t)\right]\mathcal{Z}\Big|_{h,g=0}.\end{aligned} \tag{37}$$

平均取向可以简单地计算为

$$\langle\vec{n}(\vartheta(t))\rangle = \mathrm{e}^{-D_\vartheta t}\vec{n}(\vartheta_0 + \Omega t). \tag{38}$$

平均取向矢量以恒定角速度 Ω 旋转，直至旋转扩散使其衰减为零。换言之，在长时间尺度下，旋转扩散会完全随机化取向，尽管粒子具有手性。

取向的时变二阶矩有助于理解 cABP 的动力学行为。这些量与均方位移中观察到的典型振荡直接相关，如图 1 所示。取向自相关函数是标量积

$$\begin{aligned}\langle\vec{n}\cdot\vec{n}'\rangle &= \langle\cos(\vartheta(t) - \vartheta(t'))\rangle\\ &= \frac{1}{2}\left[\phi^-(t)\phi^+(t') + \phi^+(t)\phi^-(t')\right]\mathcal{Z}\Big|_{h,g=0}\end{aligned} \tag{39}$$

其中 $\vec{n} = \vec{n}(\vartheta(t))$，类似地 $\vec{n}' = \vec{n}(\vartheta(t'))$。结果与初始取向角 ϑ_0 无关，这是必然的。我们发现

$$\langle\vec{n}(t)\cdot\vec{n}(t')\rangle = \cos\left(\Omega(t-t')\right)\mathrm{e}^{-D_\vartheta|t-t'|} \tag{40}$$

对于任意时间 t，$t' > 0$。因此，取向自关联函数呈现角频率为粒子角频率 Ω 的阻尼振荡，其指数衰减的时间尺度由转动扩散决定，D_ϑ，参见图 1a)。已有实验报道了光学限域下 Janus胶体的取向自关联函数具有这种行为 [40]，而式 (40) 先前已通过拉普拉斯变换法从福克-普朗克方程推导得到 [41]。

取向矢量的叉积为

$$\begin{aligned}\langle\vec{n}\times\vec{n}'\rangle &= \langle\sin(\vartheta(t') - \vartheta(t))\rangle\\ &= \frac{1}{2\mathrm{i}}\left[\phi^-(t')\phi^+(t) - \phi^+(t')\phi^-(t)\right]\mathcal{Z}\Big|_{h,g=0}\\ &= \sin\left(\Omega(t'-t)\right)\mathrm{e}^{-D_\vartheta|t-t'|}.\end{aligned} \tag{41}$$

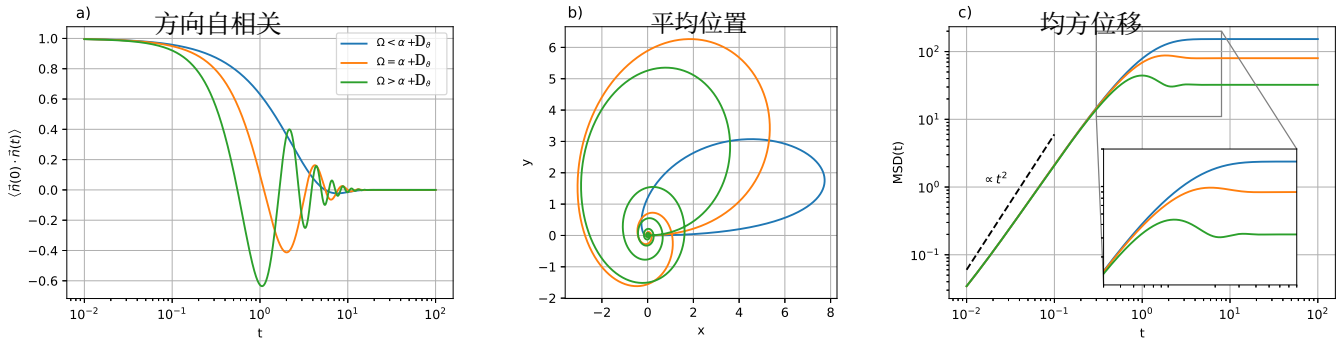

图 1. 不同角速度 Ω 下 cABP 的矩，并与弛豫率 $\lambda = \alpha + D_\vartheta$ 进行比较。a) 取向自相关函数 $\langle \vec{n}(0) \cdot \vec{n}(t) \rangle$ 是一种阻尼振荡，其阻尼率为 D_ϑ。当 $\Omega \geq \lambda = \alpha + D_\vartheta$ 时会发生振荡，并且与均方位移中的振荡一致，见面板 c)。b) 平均位置弛豫至陷阱中心。手性导致近似圆周运动。c) MSD(t) 从弹道行为（$\propto t^2$）过渡到恒定的稳态值。由于手性，当 $\Omega \geq \lambda = \alpha + D_\vartheta$ 时，该过渡会表现出振荡。

在二维中，这是一个赝标量。同样，我们发现了一个频率为 Ω、阻尼率为 D_ϑ的阻尼振荡。当时间差 $\delta t = t' - t \ll 1$ 较小时，该表达式简化为 $\langle \vec{n} \times \vec{n}' \rangle \sim \Omega \delta t$，也就是说，$\vec{n}$ 以恒定角速度 Ω 旋转。

涉及粒子位置$\vec{q}(t)$的关联函数必须通过微扰方法计算，因为自由作用量仅能描述处于谐势约束中并经历手性旋转扩散的被动粒子的动力学——散。关于无手性情况下的微扰计算，请参阅我们此前的发表成果 [19] ；此处仅给出 cABP 的平均位置和均方位移结果。正如前文所述，对于涉及 N 个位置 $\vec{q}$ 因子的任意矩，在阶数为 $\mathcal{O}(S_{\mathrm{A}}^N)$时，微扰级数会自然截断，因此这些结果是精确的。

对于粒子位置的期望值和均方位移，可以得到

$$\langle \vec{q}(t) \rangle = \mathrm{e}^{-\alpha t} \vec{q}_0 + \frac{v_0}{(\alpha - D_\vartheta)^2 + \Omega^2} \left[\mathrm{e}^{-D_\vartheta t} \left[(\alpha - D_\vartheta) \vec{n}(t) - \Omega \vec{n}_\perp(t) \right] - \mathrm{e}^{-\alpha t} \left[(\alpha - D_\vartheta) \vec{n}(0) - \Omega \vec{n}_\perp(0) \right] \right], \tag{42}$$

$$\mathrm{MSD}(t) = \frac{2D_q}{\alpha} \left(1 - \mathrm{e}^{-2\alpha t} \right) + \frac{v_0^2}{\alpha} \left[\frac{\alpha + D_\vartheta}{(\alpha + D_\vartheta)^2 + \Omega^2} + \frac{(\alpha - D_\vartheta)\, \mathrm{e}^{-2\alpha t}}{(\alpha - D_\vartheta)^2 + \Omega^2} \right] - \frac{2 v_0^2\, \mathrm{e}^{-(\alpha + D_\vartheta) t} \cos(\Omega t - \varphi)}{\sqrt{\left[(\alpha - D_\vartheta)^2 + \Omega^2 \right] \left[(\alpha + D_\vartheta)^2 + \Omega^2 \right]}}. \tag{43}$$

这里 $\vec{n}_\perp(t) = (-\sin \vartheta(t), \cos \vartheta(t))^\intercal$。对于 $\langle \vec{q}(t) \rangle$ 的结果表明，无论粒子从何处出发，在较晚时刻，粒子平均位于陷阱中心。图 1 b) 展示了三条从原点出发、$\vartheta_0 = 0$ 且具有三种不同角速度 Ω 的轨迹。平均而言，粒子首先因自推进而远离中心。随后，手性和谐势约束将粒子带回中心。需要注意的是，对于径向峰状分布，平均位置也具有这种行为；在该分布中，粒子会以有限半径进行轨道运动，见下文。

对于均方位移，为简单起见，我们假设粒子最初位于陷阱中心，即 $\vec{q}_0 = (0,0)^\intercal$。对于具有任意初始条件 $X_0 = (\vec{q}_0, \vartheta_0)$ 的表达式，请参见文献 [19] 中的公式（94）。

最后一项中的相位角为

$$\varphi = \arctan \frac{\Omega}{\alpha - D_\vartheta} - \arctan \frac{\Omega}{\alpha + D_\vartheta}. \tag{44}$$

可以看出，对于 $t \to \infty$，均方位移呈现阻尼振荡，并趋于有限极限。

我们分别在图 1 c) 和 a) 中展示了 MSD（t）和方向自相关函数 $\langle \vec{n}(0) \cdot \vec{n}(t) \rangle$。该图展示了角速度 Ω 相对于弛豫率 $\lambda = \alpha + D_\vartheta$ 的依赖行为。我们特别关注弹道区间与长时间稳态之间的瞬态动力学。图中显示，在中间时间段，MSD 和方向自相关会以频率 Ω 发生振荡，这一点已在文献 [40] 的实验中观察到。振荡的原因在于受到旋转扩散影响的手性自推进

以及谐势约束。二者的相互作用导致粒子分布出现呼吸模态，即其宽度发生阻尼式周期变化。

均方位移的解析表达式有助于进行更形式化的解释。方程（43）中的最后一项是频率为 Ω、弛豫率为 $\lambda = \alpha + D_\vartheta$的阻尼振荡。这表明，振荡与非振荡瞬态之间并不存在由角速度和弛豫率决定的鲜明转变。相反，对于 Ω α 和 D_ϑ的任意 组合，均方位移都会振荡。从时间尺度来看，我们发现：当 Ω $< \lambda$ 时，振荡会受到抑制；而当 Ω $> \lambda$ 时，振荡仅受到微弱阻尼。这种现象可称为“呼吸交叉”。值得注意的是，相关速率 Ω 和 λ 与系统的典型长度尺度有关：手性粒子的圆周运动半径为 $R = v_0/\Omega$，而分布的典型展宽为 $l = v_0/\lambda$，因此当 Ω $= \lambda$时，这些长度尺度相同。

最后，我们计算位置与取向的交叉关联 $\langle q_i(t) n_j(t') \rangle$ 与 $t' = t + \delta t$。自由项为

$$\langle q_i(t) n_j(t') \rangle^{(0)} = q_{0i} n_j(t+\delta t)\ \mathrm{e}^{-(\alpha+D_\vartheta)t - D_\vartheta \delta t}. \quad (45)$$

由于谐势约束和转动扩散，这一贡献完全是被动的，因此在长时间极限下会消失 $t \to \infty$ 。活性改变了这一图景。在活性的一级项中（更高阶项 $\mathcal{O}(v_0^N)$ 与 $N \geq 2$再次恒等为零），我们需要计算积分

$$\begin{aligned} \Delta^{(1)} \langle q_i(t) n_j(t') \rangle &= \mathrm{i} v_0 \int_0^\infty \mathrm{d}s\ G_\alpha(t,s) \langle n_i(s) n_j(t') \rangle \\ &= v_0 \int_0^t \mathrm{d}s\ \mathrm{e}^{-\alpha(t-s)} \langle n_i(s) n_j(t') \rangle, \quad (46) \end{aligned}$$

该积分与速度自关联的格林–久保积分非常相似，只是带有一个来自谐振陷阱的权重。利用取向矢量关联函数的式（40、41），我们得到标量积和交叉积

$$\Delta^{(1)} \langle \vec{q} \cdot \vec{n}' \rangle = \frac{v_0 \mathrm{e}^{-D_\vartheta \delta t}}{\sqrt{(\alpha + D_\vartheta)^2 + \Omega^2}} \left[\cos(\Omega \delta t + \varphi') - \mathrm{e}^{-(\alpha+D_\vartheta)t} \cos(\Omega(t+\delta t) + \varphi') \right], \quad (47)$$

$$\Delta^{(1)} \langle \vec{q} \times \vec{n}' \rangle = \frac{v_0 \mathrm{e}^{-D_\vartheta \delta t}}{\sqrt{(\alpha + D_\vartheta)^2 + \Omega^2}} \left[\sin(\Omega \delta t + \varphi') - \mathrm{e}^{-(\alpha+D_\vartheta)t} \sin(\Omega(t+\delta t) + \varphi') \right], \quad (48)$$

其中 $\varphi' = \arctan \frac{\Omega}{\alpha \pm D_\vartheta}$ 在长时间极限下，方括号中的第二项消失。

如参考文献 [42] 所指出的，这些交叉关联函数可以与扩散率张量联系起来。我们的式（46）在相等时刻，即 $\delta t = 0$，形式上是对处于谐振陷阱中的粒子在有限时间 t 下计算的格林–久保积分。由于系统在晚期达到稳态，我们得到相应的输运系数为 $t \to \infty$。因此，各向同性（活性）扩散率为

$$2D_\parallel = \lim_{t\to\infty} \langle \vec{q}(t) \cdot v_0 \vec{n}(t) \rangle = \frac{v_0^2(\alpha + D_\vartheta)}{(\alpha + D_\vartheta)^2 + \Omega^2}. \quad (49)$$

总有效各向同性扩散率还包含来自热浴的另一个加性项 $2D_q$ 。此外，粒子的手性会产生奇异（活性）扩散率

$$2D_\perp = \lim_{t\to\infty} \langle \vec{q}(t) \times v_0 \vec{n}(t) \rangle = \frac{v_0^2 \Omega}{(\alpha + D_\vartheta)^2 + \Omega^2}. \quad (50)$$

因此，即使在稳态下，分布的梯度垂直方向上仍存在非零通量。当 Ω $= \alpha + D_\vartheta$时，奇扩散率达到最大值。另一方面，当 Ω $= 0$ 时，奇扩散率消失，这符合非手性游动粒子的预期。

我们注意到，文献 [41], 也报告了自由 cABP 在二维和三维中的时变矩，研究者通过对福克-普朗克方程进行拉普拉斯变换，求得了位置和取向矢量的四阶矩。对于 $\alpha \to 0$ ，我们的表达式与他们的结果一致。

B. 概率分布

如前所述，空间概率分布可以通过生成泛函在傅里叶空间中计算为

$$\hat{\mathrm{p}}(t, \vec{k}) = \mathcal{Z}[\vec{h}_q = -\mathrm{i}\vec{k}\delta_t, 0]. \quad (51)$$

$\vec{}$ $\vec{}$在位移源 $h_q = -\mathrm{i}k\delta_t$ 处取值，其中 $\delta_t = \delta(t - t')$，意味着关于活性的微扰展开不会自然终止。在这里，我们给出关于 v_0的二阶时间依赖概率分布。对于无手性的活性布朗粒子，该展开已在文献 [19]中给出。为简单起见，我们假设初始条件为 $\vec{q}_0 = (0,0)^\intercal$ 以及 $\vartheta_0 = 0$。

参考运动是奥恩斯坦-乌伦贝克过程

过程具有众所周知的概率分布

$$\hat{\mathrm{p}}_{\mathrm{free}}(t,\vec{k}) = \mathcal{Z}^{\alpha}[-\mathrm{i}\vec{k}\delta_t, 0] = \exp\left[-\frac{D_q\vec{k}^2}{2\alpha}\left(1-\mathrm{e}^{-2\alpha t}\right)\right] \tag{52}$$

由刚度 α 和扩散系数 D_q给出。

ˆ 根据式 (21) 的定义应用活性算符 $S_{\mathrm{A}} = -\mathrm{i}v_0 A$ ，我们得到一个冗长的线性修正表达式；仔细检查后发现，它实际上就是

$$\Delta^{(1)}\hat{\mathrm{p}}(t,\vec{k}) = \mathrm{i}\vec{k}\cdot\langle\vec{q}(t)\rangle\hat{\mathrm{p}}_0(t,\vec{k}) \tag{53}$$

对于 $\vec{q}_0 = (0,0)^{\intercal}$。这一贡献完全是各向异性的，因为自推进使粒子位置偏离高斯参考态。总体而言，线性修正——对概率密度的修正描述了早期粒子向外自推进时分布的各向异性扩展。在中间阶段，手性和谐势约束抑制了进一步扩展，参见图 1 b）。最后，在后期，旋转扩散和谐势约束使线性修正衰减至零，这与预期一致，因为稳态（后期）分布是各向同性的。

因此，长时间极限下的主导效应包含在 v_0 的二阶项中，而这已经很难计算。它涉及一些积分，我们将其简记为

$$(\sigma\varepsilon) := \int \mathrm{d}t' \int \mathrm{d}t'' G_\alpha(t,t')G_\alpha(t,t'')\mathcal{Z}^{\vartheta}[-\mathrm{i}\sigma\delta_{t'} - \mathrm{i}\varepsilon\delta_{t''}, 0] \tag{54}$$

其中 G_α 为奥恩斯坦-乌伦贝克传播子。我们得到如下表达式

$$\Delta^{(2)}\hat{\mathrm{p}}(t,\vec{k}) = -\frac{v_0^2}{8}\mathrm{e}^{-2\alpha t}\left\{\vec{k}^2\left[(+-)+(-+)\right] + (k_x^2-k_y^2)\left[(++)+(--)\right] - 2\mathrm{i}k_xk_y\left[(++)-(--)\right]\right\}\hat{\mathrm{p}}_0(t,\vec{k}). \tag{55}$$

二阶修正包含一个各向同性项（$\propto\vec{k}^2$）和两个各向异性项。求解 $(\sigma\varepsilon)$ 积分——详见文献 [19] 中关于 $\Omega = 0$ 的附录B——我们发现，各向异性项仅在中间时段有影响，在长时间极限下会消失。

有趣的是，各向同性贡献再次与某种关联有关

$$\Delta^{(2)}\hat{\mathrm{p}}(t,\vec{k}) = \frac{\vec{k}^2}{4}\left(\Delta^{(2)}\langle\vec{q}^2(t)\rangle\right)\hat{\mathrm{p}}_0(t,\vec{k}), \tag{56}$$

即对 $\langle\vec{q}^2(t)\rangle$ 的二阶修正。因此，这一项会导致分布在中间时刻发生各向同性呼吸。由于均方位移在晚期为常数，这是第一个对稳态分布有贡献的微扰项。变换回构型空间后，$t\to\infty$ 的分布展开至 v_0 的二阶为

$$\mathrm{p}_\infty^{(2)}(\vec{q}) = \frac{\alpha}{2\pi D_q}\left[1 - \frac{(\alpha+D_\vartheta)v_0^2}{2D_q[(\alpha+D_\vartheta)^2+\Omega^2]} + \frac{\alpha(\alpha+D_\vartheta)v_0^2}{4D_q^2\left[(\alpha+D_\vartheta)^2+\Omega^2\right]}\vec{q}^2\right]\mathrm{e}^{-\frac{\alpha}{2D_q}\vec{q}^2}. \tag{57}$$

该分布的形状为调制高斯分布。根据参数的选择，分布可以是峰值位于陷阱中心的单峰分布，也可以变为环形。我们将这两种形状之间的转变称为“甜甜圈”转变。判断这种形状转变是否发生的一个初步判据是，观察分布在 $q=0$ 处的曲率何时变为零；单峰分布对应中心处的极大值，而环形分布对应中心处的极小值。这便得到了一个关于速度的“经验法则”判据

$$v_0^2 > D_q(\alpha+D_\vartheta) + \frac{D_q\Omega^2}{\alpha+D_\vartheta}. \tag{58}$$

当自推进速度足够大时，v_0 分布呈环形。正如从第二项可以看出的，手性会抑制形状转变，也就是说，手性粒子需要以比非手性粒子更高的速度推进自身。

在图 2 左上方的面板中，我们将阶数为 $\mathcal{O}(v_0^2)$ 的近似结果与使用 $v_0 = 3$ 进行的模拟进行比较。正如预期的那样，在 v_0 中采用二阶近似无法很好地拟合模拟结果，甚至在分布中心处变为负值。

C. 福克-普朗克方程

为了将稳态概率分布的分析从二阶$\mathcal{O}(v_0^2)$推广到更高阶，我们可以使用由稳态福克–普朗克方程推导出的傅里叶空间幂级数展开——

第 II B 节中的

$$\hat{P}(\vec{k}) = 2\pi \hat{P}_{m=0}(k) = \left(\sum_{j=0}^{\infty} g_{0,j} k^j \right) \mathrm{e}^{-\frac{D_q}{2\alpha} k^2}. \tag{59}$$

展开系数 $g_{0,j}$ 由递推关系式（式（35））得出，其结构为

$$g_{m,j} \propto \left(g_{m-1,j-1} + g_{m+1,j-1} \right). \tag{60}$$

有趣的是，这意味着系数 $g_{m,j}$ 满足一组“选择定则”。首先考虑 $j = 0$，$g_{m,0}$ 必须为零，因为 $m \neq 0$，而 $g_{m,j} \neq 0$ 仅当 $j \geq 0$ 时成立。$g_{0,0}$ 是一个例外，因为它的递推关系自动成立，并且根据概率密度的归一化条件，$g_{0,0} = 1$ 必须成立。对于 $j > 0$，$g_{m,j}$ 由 $m \pm 1$ 和 $j - 1$ 对应的系数决定。不难看出，如果 $|m|$ 大于 j，相应的系数就为零。此外，j 与 m 必须始终具有相同的奇偶性（j 增加 1 会使 m 恰好改变 ± 1，因此每当 j 改变奇偶性时，m 也会改变奇偶性）。这尤其意味着，对于所有奇数 j，$g_{0,j} = 0$，这反映了稳态分布的各向同性。总之，我们得出了这些规则：$|m| \leq j$，且 $j - |m|$ 必须为偶数。

对于二阶（$j = 2$），式（59）恰好给出式（57），即与通过路径积分形式计算得到的结果相同。我们还在稳态极限下分别进行路径积分计算，验证了这种一致性一直到四阶。展开系数之所以具有这种一致性，源于所选的幂级数试探形式：高斯因子完美地反映了路径积分方法中的参考运动。

傅里叶逆变换在所有阶数上都可以进行解析求值。代入变量 $c = \frac{r^2}{4a}$ 后，可以应用拉盖尔多项式的罗德里格斯公式L_n，例如参见 [43]，

$$\frac{\partial^n}{\partial a^n} \left(\frac{1}{a} \mathrm{e}^{-\frac{c}{a}} \right) = (-1)^n \frac{n!}{a^{n+1}} \mathrm{e}^{-\frac{c}{a}} L_n \left(\frac{c}{a} \right) \tag{61}$$

以及拉盖尔多项式的生成函数性质。随后，傅里叶逆变换给出

$$\mathcal{F}^{-1}[k^{2n} \mathrm{e}^{-ak^2}](\vec{x}) = \frac{n!}{4\pi a^{n+1}} \mathrm{e}^{-\frac{r^2}{4a}} L_n \left(\frac{\vec{x}^2}{4a} \right), \tag{62}$$

也就是说，微扰展开的 n^{th} 阶是一个封闭的解析表达式，无需进行数值傅里叶分析。

精确表达式相当繁复，因此此处不予列出。重要的是，在非手性极限（$\Omega = 0$）下，它们与此前得到的结果一致[17, 18]。图 2 展示了径向概率分布的对比：幂级数近似至某一阶数 v_0^n（虚线）与底层朗之万方程的欧拉–丸山模拟（实线）在不同角速度下的结果

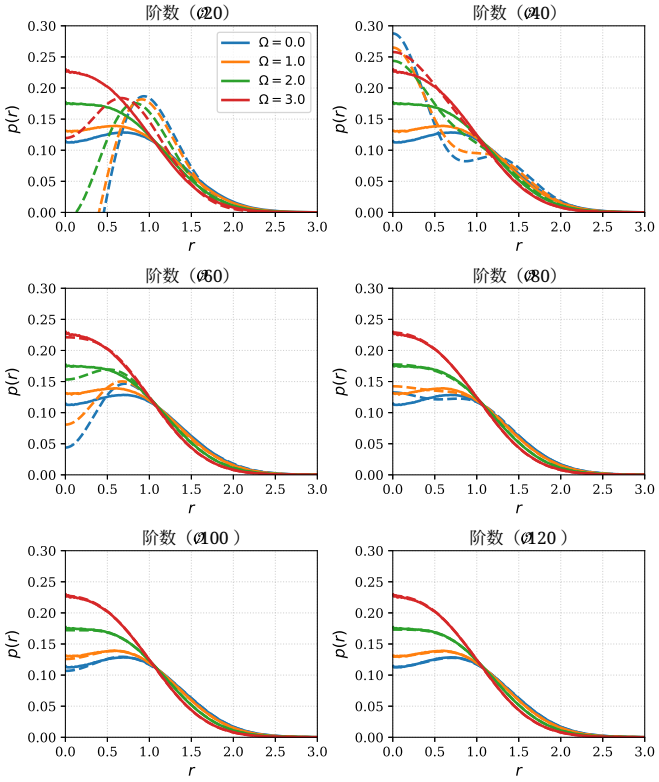

图 2. 不同手性 Ω 下，谐振陷阱中手性主动粒子的稳态径向概率分布。随着阶数 v_0^n 增大，解析近似（虚线）收敛于欧拉–丸山模拟（实线）。参数：$D_q = 1$, $D_\vartheta = 0.1$, $\alpha = 3$, $v_0 = 3$; 模拟时间步长 $\Delta t = 0.001$。

Ω。低阶时，两者吻合较差，且截断解析表达式呈现振荡偏差；但当阶数 v_0^n 足够大时，近似收敛性非常好。

观察收敛良好的最后一个面板，我们现在可以得出结论：手性会抑制甜甜圈转变——即在有限半径 r 处呈现最大值的分布——：对于较大的 Ω（红色和绿色曲线），概率密度仍在陷阱中心达到峰值。

D. 相图

利用收敛的稳态分布微扰展开，我们可以确定任意手性 Ω 下甜甜圈转变的“相图”。迄今为止，这一转变仅针对非手性粒子进行过研究，方法或与此相同 [17]，或通过计算峰度 [44]。由于稳态具有旋转对称性，只需沿 x-轴对一维径向截面计算 $\partial_x^2 \mathrm{p}(0)$ 即可。现在，通过在一个 (v_0, α) 参数网格上评估这一判据，便可得到相图

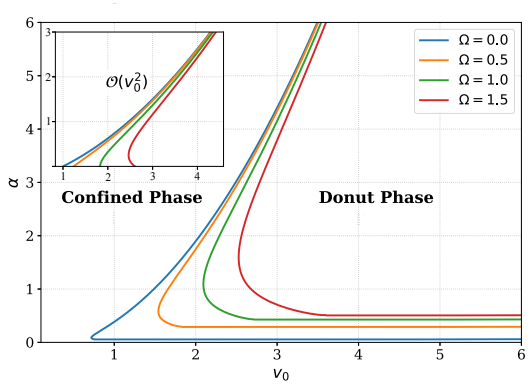

图3. 不同 Ω 值下甜甜圈转变的相图，其结果是在足够高的阶数下获得的，因此解析展开与朗之万模拟相吻合。随着 Ω 增大，可能出现径向峰的最小速度 v_0 也随之增大，这表明手性抑制了“甜甜圈形”分布的形成。子图展示了二阶近似，即对应于方程（58）的最低阶近似。

在自推进速度v_0^n的某个阶数下进行数值计算。然而，需要注意一些细节，即收敛并非在以下意义上“连续”：一方面，当取到阶数 v_0^4时，甜甜圈转变又消失了。另一方面，如果将微扰级数截断在任意一个双偶数阶 $n = 4m$, $m = 2,3,...$，通过求解原点处曲率为零的条件，对于给定的 α甚至会得到两个临界速度，即 v_0 和 v_0^*。这表明还存在第二次转变：当自推进速度足够高时，粒子会回到受限相。然而，这只是微扰展开产生的伪象，因为随着 n的增加， v_0^* 会趋于无穷大。

最终的相图如图3所示。可以看出，在约束较弱（ α 较小）时不会发生转变，并且随着角速度 Ω 增大，需要更大的自推进速度 v_0。子图展示了对应于方程（58）的二阶近似，这是一个简洁优美的公式，但并不准确。只有在 α 和 v_0 足够大时，它才能定性地再现这一行为。

E. 讨论：方法比较

从刚才讨论的处理方法中，两种互补方法各自的优势应已显而易见：路径积分方法更适合计算矩。原因在于，参考运动及其完整的时间演化都得到了解析处理。矩的计算是一项直接的场论任务，而且矩会在较低的有限阶终止。相比之下，若要通过福克-普朗克方法求得矩，就必须求解其完整的时间演化，而这极其困难。（针对非手性情形）这项工作已在文献 [18] 中完成，其中涉及特殊函数的复杂组合。还要注意，在路径积分情形下，手性只会对参考运动产生一种相当简单的改变（即解中增加一项 $\propto \Omega t$），而展开在形式上保持不变，传播子也相同。在福克-普朗克方法中，手性则意味着特征函数结构发生变化。

另一方面，对于稳态概率分布而言，使用路径积分方法有些过度：必须在每一阶都求得完整的含时解，这一过程会变得越来越困难，然后还要取趋于无穷时间的极限。在这里，求解定态福克-普朗克方程要容易得多。

但请注意，如果关注概率分布随时间的（早期）变化，路径积分或许再次具有优势：它至少考虑了被动参考运动的完整时间依赖性，因此有望通过对活性（或粒子间相互作用）进行微扰处理，获得合理的近似结果。

IV. 手性主动布朗哑铃粒子

A. 模型

为展示该方法的通用性，我们现在将这一方法推广至手性主动布朗哑铃（cABD）。这种哑铃由一个手性主动布朗粒子（下文称为游动体珠子（s））和一个被动布朗粒子（下文称为货物珠子（c））组成，两者通过刚度为 κ 的谐振弹簧连接。需要指出的是，这里讨论的方法也很容易推广到由两个以上粒子组成的活性聚合物。

我们进一步假设该哑铃被限制在刚度为 α 的全局谐振陷阱中。因此，两个坐标 $\vec{q}_s(t)$ $\vec{q}_c(t)$ 的朗之万方程（对于游动体，还包括其取向 ϑ）为

$$\begin{cases} \dot{\vec{q}}_s(t) &= -\alpha\vec{q}_s(t) - \kappa(\vec{q}_s - \vec{q}_c)(t) + v_0\vec{n}(\vartheta) + \sqrt{2D_s}\vec{\eta}_s(t), \\ \dot{\vartheta}(t) &= \Omega + \sqrt{2D_\vartheta}\eta_\vartheta(t), \\ \dot{\vec{q}}_c(t) &= -\alpha\vec{q}_c(t) - \kappa(\vec{q}_c - \vec{q}_s)(t) + \sqrt{2D_c}\vec{\eta}_c(t). \end{cases} \tag{63}$$

噪声再次假设为高斯白噪声$\langle\eta_{\mu m}(t)\eta_{\nu n}(t')\rangle = \delta_{\mu\nu}\delta_{mn}\delta(t-t')$，其中 $m,n \in \{s,c\}$和 ϑ。除非另有说明，我们假设货物的扩散系数小于游动体的扩散系数 $D_c \leq D_s$，例如，这是由于货物体积较大所致；不过，相反的情况也很有意思，下面还会简要讨论。

引入质心 $\vec{S}(t)$ 和相对

坐标 $\vec{R}(t)$,

$$\vec{S}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{q}_s + \vec{q}_c)(t), \tag{64}$$

$$\vec{R}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{q}_s - \vec{q}_c)(t), \tag{65}$$

动力学的确定性部分发生解耦,

$$\begin{cases} \dot{\vec{S}}(t) &= -\alpha\vec{S}(t) + \frac{v_0}{\sqrt{2}}\vec{n}(\vartheta) + \vec{\xi}_S(t) \\ \dot{\vec{R}}(t) &= -(\alpha+2\kappa)\vec{R}(t) + \frac{v_0}{\sqrt{2}}\vec{n}(\vartheta) + \vec{\xi}_R(t) \\ \dot{\vartheta}(t) &= \Omega + \sqrt{2D_\vartheta}\eta_\vartheta(t), \end{cases} \tag{66}$$

引入有效陷阱刚度 $\lambda_S = \alpha$ 和$\lambda_R = \alpha + 2\kappa$。根据相互独立的随机过程的方差可加性，变量 $\vec{S}$ 和 $\vec{R}$ 的噪声具有方差 $\langle \xi_{\mu p}(t)\xi_{\nu q}(t')\rangle = 2\mathcal{D}_{pq}\delta_{\mu\nu}\delta(t-t')$，其扩散张量 $\mathcal{D}$ 呈现交叉扩散（非对角项）：

$$\mathcal{D}_{pq} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} D_s + D_c & D_s - D_c \\ D_s - D_c & D_s + D_c \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} D_+ & D_- \\ D_- & D_+ \end{pmatrix} \tag{67}$$

对于 $p,\ q \in \{S, R\}$。还应注意，自推进项 $v_0\vec{n}(\vartheta)$现在出现在$\vec{}$ $\vec{}$两个自由度的 S 和 R的运动方程中。

对于 cABP，我们现在分别采用路径积分方法和 FPE 方法，以获得完整的时间依赖矩以及陷阱中的稳态分布。

B. 生成泛函

由 $v_0 = 0$ 的被动参考运动定义的自由生成泛函为以下乘积

$$\mathcal{Z}_0[h, g] = \mathcal{Z}^\kappa[\vec{h}_p, \vec{g}_p] \cdot \mathcal{Z}^\vartheta[h_\vartheta, g_\vartheta], \tag{68}$$

$\vec{}$其中， h_p 和 $\vec{g}_p$ 表示模式$\vec{S}$ 和 $\vec{R}$的源场，即 $p \in \{S, R\}$。角度的生成泛函 $\mathcal{Z}^\vartheta$ 与之前相同（旋转扩散）。被动哑铃的空间动力学由 $\mathcal{Z}^\kappa$ 描述。由于朗之万方程（66）定义了一个奥恩斯坦–乌伦贝克过程，因此也可以立即写出:

$$\mathcal{Z}^\kappa[\vec{h}_q, \vec{g}_q] = \exp\left[\frac{1}{2}\big(\vec{h}\big|C_\kappa\big|\vec{h}\big) + \big(\vec{h}\big|G_\kappa\big|\vec{g}\big)\right], \tag{69}$$

其中我们假设游动体和货物从原点出发。我们还定义了一种新的括号记号

$$\Big(\vec{h}\Big|C_\kappa\Big|\vec{h}\Big) = \sum_{p,q}\int_t\int_{t'} \vec{h}_p(t)C_{pq}(t,t')\vec{h}_q(t') \tag{70}$$

对 $p \in \{S, R\}$ 的贡献求和，并假定向量之间采用标量积。带有响应传播子 G_κ 的括号记号以类似方式定义。最后，传播子的分量为

$$C_{pq}(t,t') = 2\mathcal{D}_{pq}\mathrm{e}^{-\lambda_p t - \lambda_q t}\int_0^{\min\{t,t'\}} \mathrm{d}\tau\, \mathrm{e}^{(\lambda_p+\lambda_q)\tau}, \tag{71}$$

$$G_{pq}(t,t') = -i\Theta(t-t')\mathrm{e}^{-\lambda_p(t-t')}\delta_{pq}. \tag{72}$$

由于后一个传播子是对角的，我们引入$G_{pq}(t,t') \equiv G_p(t,t')\delta_{pq}$。

自推进项在作用量的活性部分中产生以下贡献

$$S_A(\vec{\chi}, \vartheta) = -\frac{iv_0}{2\sqrt{2}}\sum_p \int \mathrm{d}t\ \vec{\chi}_p(t)\cdot\vec{n}(\vartheta). \tag{73}$$

如前所述，为了按自推进速度 v_0的阶数逐阶计算关联函数，我们将$S_A(\vec{\chi}, \vartheta)$作为算子作用于其上，并用 $\vec{\chi}_p$和 ϑ 的泛函导数替换它们。这将得到与 cABP 相同结构的活性算符，但现在我们必须对 $p = S, R$求和

$$A = \frac{1}{2}\sum_p \left\{\left(a_p^+|\phi^+\right) + \left(a_p^-|\phi^-\right)\right\} = \sum_p A_p\,. \tag{74}$$

算子 $a_p^\sigma(t)$对被动参考运动的作用定义为

$$a_p^\sigma(t)\mathcal{Z}_0[h,g] = \left[\left(\vec{h}|G_p\right)_x(t) + \mathrm{i}\sigma\left(\vec{h}|G_p\right)_y(t)\right]\mathcal{Z}_0[h,g]. \tag{75}$$

注意，由于 $G_{pq} = G_p\delta_{pq}$ ，我们只需有$\left(\vec{h}|G_p\right)_x(t)$ $= \int_{t'} h_{p,x}(t')G_p(t',t)$，其中指标$(x,y)$$\vec{}$ $\vec{}$表示 S 和 R 的分量。

C. 矩

$\vec{}$ $\vec{}$如前所述，通过将活性算符作用于自由生成泛函，可以精确计算 S 和 R 的矩。随后，根据变换规则（方程（64、65）），可得到构成哑铃的粒子的位置 $\vec{q}_s$ 和 $\vec{q}_c$。这里我们将讨论平均位移、相对坐标的投影（用于研究哑铃取向）以及均方位移。与 cABP 一样，位置$\vec{q}_{s,c}(t)$的 N 阶关联函数可以精确计算，因为关于 v_0 的展开在 v_0^N阶终止。为简单起见，我们选择初始条件 $\vec{q}_s(0) = \vec{q}_c(0) = 0$ 和$\vartheta(0) = 0$，即游动体和货物均从原点（陷阱中心）出发，且初始自推进沿 x方向。

1. *Mean Position*

由此得到的平均质心坐标 $\langle\vec{S}(t)\rangle$和相对坐标 $\langle\vec{R}(t)\rangle$ 与单个

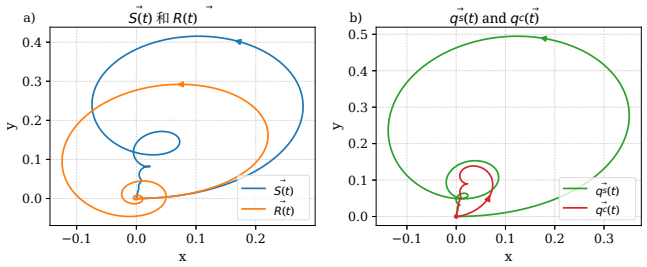

图4. a) 质心矢量 $\langle\vec{S}\rangle$ 和相对矢量 $\langle\vec{R}\rangle$的平均值轨迹。b) 构成主动哑铃的游动体 $\langle\vec{q}_s\rangle$和货物 $\langle\vec{q}_c\rangle$的平均位移。参数： $v_0 = 1$，$\Omega = 2$，$D_\vartheta = 0.5$，$\alpha = 0.2$ $\kappa = 0.3$ 和。

cABP 的平均位移相同。一般表达式见方程（42），但其中的陷阱刚度 α 由有效刚度 λ_R 和 λ_S取代，自推进速度也经过了重新缩放

$$\langle\vec{R}(t)\rangle = \frac{v_0}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{-(\alpha+2\kappa)t}\int_0^t \mathrm{d}\tau\,\vec{n}(\Omega\tau)\mathrm{e}^{(\alpha+2\kappa-D_\vartheta)\tau}. \quad (76)$$

同样的表达式也适用于 S，但此时为 $\kappa = 0$。此处$\vec{n}(\Omega\tau) = (\cos\Omega\tau,\ \sin\Omega\tau)$。随后利用式（64、65）可以得到两个粒子——游动体和货物——的平均位置，具体而言，图4显示了平均位移，由此可以得出几项结论：由于 $\alpha + 2\kappa > \alpha$（以及 $\kappa > 0$），相对模态的平均值比质心模衰减至零的速度更快。游动体的平均位移所经历的圆周也比货物更大。由于游动体是携带活性的粒子，因此它在谐振陷阱中能够到达更远的位置。尽管货物是一个被动粒子，但由于与游动体的耦合，它也表现出类似但幅度更小、持续时间更短的行为。当然，可以通过增大 κ 连接弹簧的刚度来增加货物偏离陷阱中心的距离，因为此时货物必须更靠近游动体。

2. *Projections of the Relative Vector*

由于游动体是主动的，而货物是被动的，因此人们预计货物平均而言会“跟在”游动体后面。可以通过考察相对矢量与自推进方向之间的夹角来分析这一点。为此，我们定义沿相对矢量方向和平行于其正交方向的两个（平均）投影

$$\langle R^{\parallel}(t)\rangle = \langle\vec{R}(t)\cdot\vec{n}(\vartheta)\rangle\,,\ \langle R^{\perp}(t)\rangle = \langle\vec{R}(t)\times\vec{n}(\vartheta)\rangle. \quad (77)$$

在零阶时，两个投影都恒为零，因为我们选取了 $\vec{q}_s(0) = \vec{q}_c(0) = (0,\ 0)$。在 v_0的一阶项中，我们得到

$$\langle R^{\parallel}(t)\rangle = \frac{v_0}{\sqrt{2}}\frac{1}{\Omega^2+(\lambda_1+D_\theta)^2}\left((\lambda_1+D_\theta) + \mathrm{e}^{-(\lambda_1+D_\theta)t}\left[\Omega\sin(\Omega t) - (\lambda_p+D_\theta)\cos(\Omega t)\right]\right) \quad (78)$$

$$\langle R^{\perp}(t)\rangle = \frac{v_0}{\sqrt{2}}\frac{1}{\Omega^2+(\lambda_1+D_\theta)^2}\left(\Omega - \mathrm{e}^{-(\lambda_1+D_\theta)t}\left[(\lambda_p+D_\theta)\sin(\Omega t) + \Omega\cos(\Omega t)\right]\right) \quad (79)$$

这就是精确结果（所有更高阶项再次消失）。两个值都以角频率 Ω 进行简谐振荡，类似于针对 cABP 计算得到的 $\langle\vec{q}\times\vec{n}\rangle$。图5a) 展示了与朗之万模拟的比较。长时间下的渐近值为

$$\langle R^{\parallel}(\infty)\rangle = \frac{v_0(\alpha+2\kappa+D_\vartheta)}{\sqrt{2}\left[\Omega^2+(\alpha+2\kappa+D_\vartheta)^2\right]}, \quad (80)$$

$$\langle R^{\perp}(\infty)\rangle = \frac{v_0\Omega}{\sqrt{2}\left[\Omega^2+(\alpha+2\kappa+D_\vartheta)^2\right]}. \quad (81)$$

由于 $\langle R^{\parallel}(\infty)\rangle > 0$，自推进在平均矢量上的投影为正，即相对矢量与自推进方向一致。因此，平均而言，货物确实落在游动体后方。根据式（81），手性会导致方向偏离，因为当 $\Omega \neq 0$ 时，法向投影 $\langle R^{\perp}(\infty)\rangle$ 不为零（并且符号与 Ω 相同）。

3. *Mean Square Displacement*

游动体和货物的均方位移可由 S 和 R 的矩计算得出，如下所示：

$$\mathrm{MSD}_s(t) = \langle\vec{q}_s^{\,2}(t)\rangle = \frac{1}{2}\langle\vec{S}^2\rangle + \langle\vec{S}\cdot\vec{R}\rangle + \frac{1}{2}\langle\vec{R}^2\rangle, \quad (82)$$

$$\mathrm{MSD}_c(t) = \langle\vec{q}_c^{\,2}(t)\rangle = \frac{1}{2}\langle\vec{S}^2\rangle - \langle\vec{S}\cdot\vec{R}\rangle + \frac{1}{2}\langle\vec{R}^2\rangle\rangle. \quad (83)$$

）。正如预期，游动粒子的手性会使哑铃整体呈现手性，这一点也可从 S 中的平均位置和均方位移看出，不过，若要准确说明 $\vec{n}$ 与 R 的偏离程度，则必须计算互相关 $\langle R^{\parallel}R^{\perp}\rangle$。

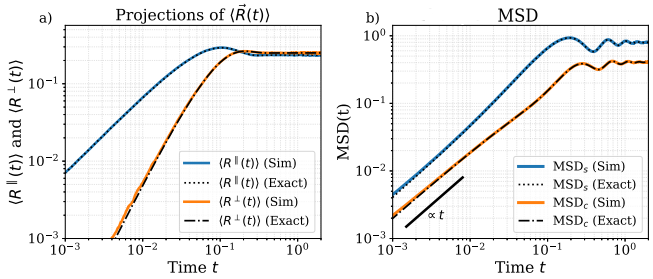

图5. 底层朗之万方程的解析表达式（实线）与欧拉–丸山模拟（虚线）的比较。a）相对矢量在自推进方向上的投影，见方程（78）、（79）。b）cABD 的完整时变均方位移，稳态表达式见方程（94）、（95）。

对于被动参考运动， S 和 R 的二次相关函数可以很容易地读出，

$$\langle \vec{S}^2(t)\rangle^{(0)} = \frac{D_c + D_s}{\alpha}\big(1 - \mathrm{e}^{-2\alpha t}\big), \tag{84}$$

$$\langle \vec{R}^2(t)\rangle^{(0)} = \frac{D_c + D_s}{\alpha + 2\kappa}\big(1 - \mathrm{e}^{-2(\alpha+2\kappa)t}\big), \tag{85}$$

$$\langle \vec{S}(t)\cdot\vec{R}(t)\rangle^{(0)} = \frac{D_s - D_c}{\alpha + \kappa}\big(1 - \mathrm{e}^{-2(\alpha+\kappa)t}\big), \tag{86}$$

因为它们是等时扩散传播子的分量， $C_{pq}(t,\ t)$，见方程（71）。

对于平凡的初始条件 $\vec{q}_{s,\ c}(0) = 0$ 和 $\vartheta(0) = 0$，一阶修正为零，因为该修正与 $\vec{S}(0)$ 和 $\vec{R}(0)$ 呈线性关系。最后，在二阶时，我们必须应用算子

$$\hat{A}^2 = \sum_{p,q}\big(A_p^2 + 2A_pA_q + A_q^2\big) \tag{87}$$

于方程 (68) 中的 $\mathcal{Z}_0[h,g]$ 。对于不同的 $p,\ q \in \{S,R\}$，算子 A_p 和 A_q 彼此对易，因为它们作用于角度 ϑ 的自由生成泛函时，对于两个指标都会得到相同的表达式。利用积分

$$(\sigma\varepsilon)_{pq} = \int \mathrm{d}t' \int \mathrm{d}t'' G_p(t,t')G_q(t,t'')\mathcal{Z}^{\vartheta}[-\mathrm{i}\sigma\delta_{t'} - \mathrm{i}\varepsilon\delta_{t''}, 0], \tag{88}$$

其中 $\sigma,\ \epsilon = \pm 1$ 和 $p,\ q \in \{R,S\}$，关联函数在 v_0^2 阶的修正为

$$\Delta^{(2)}\langle \vec{S}^2\rangle = -\frac{v_0^2}{4}\big\{(+-)_{SS} + (-+)_{SS}\big\} \tag{89}$$

$\Delta^{(2)}\langle \vec{R}^2\rangle$的情况也类似。混合关联函数的修正为

$$\Delta^{(2)}\langle \vec{S}\cdot\vec{R}\rangle = -\frac{v_0^2}{2}\big\{(+-)_{SR} + (-+)_{SR}\big\}. \tag{90}$$

需要指出的是，这种非零交叉关联并非源于扩散系数不同，而是由二阶时活性算子 A_S和 A_R 的混合引起的。

二阶表达式的积分很简单，但结果冗长。因此，我们仅明确给出长时间极限，其形式如下：

$$\langle \vec{S}^2\rangle(\infty) = \frac{D_s + D_c}{\alpha} + \frac{v_0^2(\alpha + D_\vartheta)}{2\alpha\big((\alpha + D_\vartheta)^2 + \Omega^2\big)}, \tag{91}$$

$$\langle \vec{R}^2\rangle(\infty) = \frac{D_s + D_c}{\alpha + 2\kappa} + \frac{v_0^2(\alpha + 2\kappa + D_\vartheta)}{(2\alpha + 4\kappa)\big((\alpha + 2\kappa + D_\vartheta)^2 + \Omega^2\big)}. \tag{92}$$

这里可以注意到，货物与游动体之间的相对距离 $\langle \vec{R}^2(\infty)\rangle$ 因活性而增大，也就是说，与被动情形相比，哑铃弹簧被拉伸了。

在长时间极限下，交叉关联以及最终的均方位移为

$$\langle \vec{S}\cdot\vec{R}\rangle(\infty) = \frac{D_s - D_c}{\alpha + \kappa} + \frac{v_0^2}{4\alpha + 4\kappa}\left(\frac{\alpha + D_\vartheta}{(\alpha + D_\vartheta)^2 + \Omega^2} + \frac{\alpha + 2\kappa + D_\vartheta}{(\alpha + 2\kappa + D_\vartheta)^2 + \Omega^2}\right), \tag{93}$$

$$\mathrm{MSD}_s^{\infty} = \frac{(D_c + D_s)(\alpha + \kappa)}{\alpha(\alpha + 2\kappa)} + \frac{D_s - D_c}{\alpha + \kappa} + \frac{v_0^2}{4(\alpha + \kappa)}\left(\frac{(2\alpha + \kappa)(\alpha + D_\vartheta)}{\alpha\big((\alpha + D_\vartheta)^2 + \Omega^2\big)} + \frac{(2\alpha + 3\kappa)(\alpha + 2\kappa + D_\vartheta)}{(\alpha + 2\kappa)\big((\alpha + 2\kappa + D_\vartheta)^2 + \Omega^2\big)}\right), \tag{94}$$

$$\mathrm{MSD}_c^{\infty} = \frac{(D_c + D_s)(\alpha + \kappa)}{\alpha(\alpha + 2\kappa)} - \frac{D_s - D_c}{\alpha + \kappa} + \frac{v_0^2\kappa}{4(\alpha + \kappa)}\left(\frac{\alpha + D_\vartheta}{\alpha\big((\alpha + D_\vartheta)^2 + \Omega^2\big)} - \frac{\alpha + 2\kappa + D_\vartheta}{(\alpha + 2\kappa)\big((\alpha + 2\kappa + D_\vartheta)^2 + \Omega^2\big)}\right), \tag{95}$$

其中，后者是通过代入渐近

将 $\vec{S}$、$\vec{R}$ 模式的渐近关联函数代入方程（82）、（83）。

可以看出，游动体的稳态均方位移大于货物的稳态均方位移，这是由于 MSD$_c$ 的解析表达式中有两个负号，且所有参数均为正值。这再次表明，活性使游动体能够比被动货物在谐势中扩散得更远。增大 Ω 时，这一事实并不会改变，但会导致两者的长时间均方位移整体减小。此外，对于 $\kappa = 0$ 和 $D_s = D_c$，游动体重新得到 cABP 的长时间均方位移，而货物则重新得到奥恩斯坦-乌伦贝克过程的长时间结果。

图5b)展示了式(82)、(83)与底层朗之万方程直接模拟结果的比较。请注意，对于给定参数，弹道区间在此处几乎不可见（与图1c)相反），因为我们在此聚焦于被良好捕捉的振荡。

D. 福克-普朗克方程

手性主动布朗哑铃（cABD）概率分布的路径积分计算随着 v_0阶数的增加，路径积分计算将变得十分繁琐。与第 II B 节中的 cABP 一样，我们因此转而求解稳态福克-普朗克方程。再次由于长时间极限下概率分布具有旋转对称性，我们可以在傅里叶空间进行模展开，并通过线性递推关系构造概率分布。为便于说明，我们将分析简化为扩散系数相同的情形 $D_q \equiv D_s = D_c$，并在后文讨论一般情形。

与cABP一样，我们从质心模、相对模态和角度的联合概率的傅里叶变换出发

$$\hat{\mathrm{P}}(\vec{\ell}_S, \vec{\ell}_R, \vartheta) = \int \mathrm{d}^2R\, \mathrm{d}^2S\, \mathrm{P}(\vec{R}, \vec{S}, \vartheta) \mathrm{e}^{-i(\vec{S}\cdot\vec{\ell}_S + \vec{R}\cdot\vec{\ell}_R)}, \tag{96}$$

$\vec{}$，波矢为$\ell_{S,R}$。由此得到傅里叶空间中的稳态福克–普朗克方程

$$0 = -\alpha\vec{\ell}_S \cdot \nabla_{\ell_s}\hat{\mathrm{P}} - (\alpha + 2\kappa)\vec{\ell}_R \cdot \nabla_{\ell_R}\hat{\mathrm{P}} - D_q(\vec{\ell}_S^{\,2} + \vec{\ell}_R^{\,2})\hat{\mathrm{P}} - \Omega\partial_\vartheta\hat{\mathrm{P}} + D_\vartheta\partial_\vartheta^2\hat{\mathrm{P}} - \frac{iv_0}{\sqrt{2}}\vec{n}(\vartheta)\cdot(\vec{\ell}_S + \vec{\ell}_R)\hat{\mathrm{P}}. \tag{97}$$

为了利用稳态分布的旋转对称性，我们将波矢分解为极坐标形式

$$\vec{\ell}_{S,R} = \ell_{S,R}\begin{pmatrix}\cos\varphi_{S,R}\\ \sin\varphi_{S,R}\end{pmatrix}. \tag{98}$$

与自推进相关的耦合项随后可写为

$$\vec{n}(\vartheta)\cdot\vec{\ell}_{S,R} = \frac{\ell_{S,R}}{2}\left(\mathrm{e}^{i(\vartheta-\varphi_{S,R})} + \mathrm{e}^{-i(\vartheta-\varphi_{S,R})}\right). \tag{99}$$

与 cABP 不同，现在我们必须对两个角度进行模分解，

$$\hat{\mathrm{P}}(\vec{\ell}_S, \vec{\ell}_R, \vartheta) = \sum_{m_S, m_R=0}^{\infty} \hat{\mathrm{P}}_{m_S,m_R}(\ell_S, \ell_R)\mathrm{e}^{-im_S(\vartheta-\varphi_S) - im_R(\vartheta-\varphi_R)} \tag{100}$$

这是按 $v_0^{j_S+j_R}$阶进行的微扰展开

模系数的形式为

$$\hat{\mathrm{P}}_{m_S,m_R}(\ell_S, \ell_R) = \left(\sum_{j_S,j_R=0}^{\infty} g_{m_S,m_R}^{j_S,j_R}\ell_S^{j_S}\ell_R^{j_R}\right)\hat{\mathrm{P}}_{0,0}(\ell_S, \ell_R). \tag{101}$$

ˆ 被动各向同性态 P$^{(0,0)}$ 的求法与 cABP 类似，结果为

$$\hat{\mathrm{P}}_{0,0}(\ell_S, \ell_R) = \mathrm{e}^{-\frac{D_q}{2\alpha}\ell_S^2 - \frac{D_q}{2(\alpha+2\kappa)}\ell_R^2}. \tag{102}$$

根据稳态福克–普朗克方程，我们得到模展开系数的递推关系

$$\left[\alpha j_S + (\alpha+2\kappa)j_R + D_\vartheta(m_S+m_R)^2 - i(m_S+m_R)\Omega\right]g_{m_Sm_R}^{j_Sj_R} = \frac{-iv_0}{2\sqrt{2}}\left[g_{m_S-1,m_R}^{j_S-1,j_R} + g_{m_S+1,m_R}^{j_S-1,j_R} + g_{m_S,m_R-1}^{j_S,j_R-1} + g_{m_S,m_R+1}^{j_S,j_R-1}\right], \tag{103}$$

中心模在傅里叶空间中的概率密度

→ →S 和相对模态 R。

为了获得游动体和货物位置的概率密度，我们将各向同性（m_S，m_R）=(0，0)-模态的坐标从（$\vec{S}$，$\vec{R}$）变换为（$\vec{q}_s$，$\vec{q}_c$）。由于这是一个正交变换，雅可比行列式为平凡值，因此我们得到

$$\hat{\mathrm{P}}_{0,0}(\vec{k}_s,\vec{k}_c)=\hat{\mathrm{P}}_{0,0}\left(\vec{\ell}_S=\frac{\vec{k}_s+\vec{k}_c}{\sqrt{2}},\vec{\ell}_R=\frac{\vec{k}_s-\vec{k}_c}{\sqrt{2}}\right). \tag{104}$$

→ →将 k_s 或 k_c 设为零，我们分别得到 $\vec{q}_c$ 或 $\vec{q}_s$ 的分布的傅里叶变换。

与 cABP 类似，由递推关系构造的分布会收敛于模拟结果，如图 6a) 与 b) 所示。有趣的是，现在可以观察到一系列甜甜圈相变：当自推进速度较小时，游动体（橙色）和货物（蓝色）都在陷阱中心达到峰值，见图 6b)。当速度超过某一阈值后，游动体首先进入径向峰值甜甜圈相，参见图 6c)，因为它是哑铃的活性部分。只有当速度超过第二个阈值后，被动货物才会感受到或“继承”活性，并同样呈现径向峰状，见图 6d)。

在图7中，我们构建了

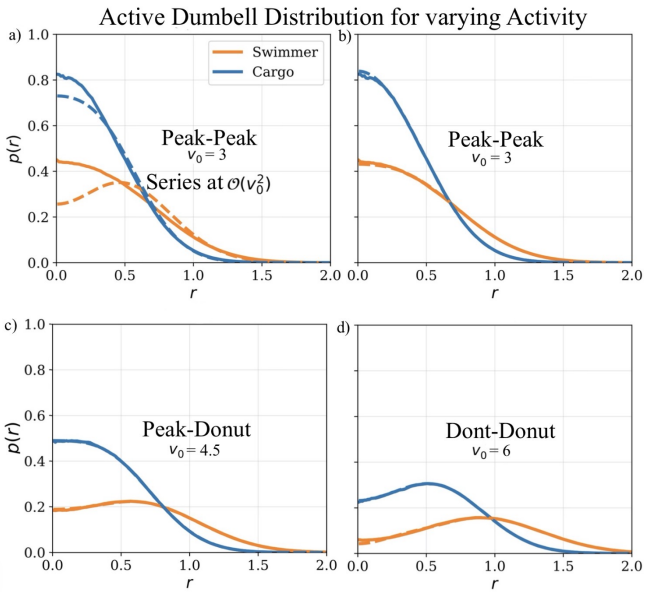

图 6. 不同活性（即推进速度 v_0）下，谐势约束的手性活性布朗哑铃的概率分布：解析表达式（虚线）与欧拉–丸山模拟（实线）的比较。游动珠的分布以橙色表示，货物珠的分布以蓝色表示。活性参数值的选取使三种不同的定性状态清晰可见，另见图 7 中的相图。作为参照，a) 显示了 $v_0=3$ 对应的二阶微扰理论结果。其他图中，展开的阶数经过选择，使解析展开结果接近模拟结果。参数值为 $\kappa=6$，$\Omega=3$，$D_s=1$，$D_c=0.5$，$D_\vartheta=0.1$。

游动体和货物分布的相图，分别对应于 a) 中的非手性情形和 b) 中的手性情形。应将其与图3中 cABP 的相图进行比较。甜甜圈相同样是通过原点处二阶导数的符号变化确定的。如图6所示，现在存在三种不同的相：在速度较小时，游动体和货物都以陷阱中心为分布中心。当游动体的速度首次达到阈值时，游动体进入甜甜圈相，但货物并未进入，因为它是被动粒子，从游动体继承的活性还不够高。只有在速度较大时，两个粒子才都处于甜甜圈相。

随着弹簧刚度 κ 增大（参见图 7c)），混合的峰-甜甜圈相变得更窄，两个相边界最终汇合。在这一刚性极限下，哑铃实际上表现得如同一个单独的 cABP，正如预期。

现在我们来讨论一般情形，即游动体与货物的扩散系数不相等。这里有两处重要变化：首先，被动参考态（参见式（102））不再是纯粹的高斯分布，而是包含一个修正贝塞尔函数因子

$$\hat{\mathrm{P}}_{0,0}(\ell_S,\ell_R)=I_0\!\left(\tfrac{D_s-D_c}{2(\alpha+\kappa)}\ell_S\ell_R\right)\,\mathrm{e}^{-\frac{D_s+D_c}{4\alpha}\ell_S^2-\frac{D_s+D_c}{4(\alpha+2\alpha)}\ell_R^2}. \tag{105}$$

其次，系数的递推关系 $g^{g_S,\ m_S}{}^{g_R,\ m_R}$中增加了一项，用以描述（$\vec{S}$，$\vec{R}$）系统中游动体与货物涨落之间的交叉扩散。因此，展开的选择定则也随之改变，使得 j_s+j_c 不再与 v_0中的展开阶数一致。稍微调整模展开即可解决这一问题，但我们认为这超出了本文的讨论范围。

我们在此转而讨论另一种有趣的效应，这种效应可基于已得到的矩结果进行分析。请注意，在 A 至 C 节中，我们假设货物的平移扩散系数小于游动体的平移扩散系数。这对应于一个经典例子：例如，分子马达携带囊泡等大型货物。不过，活性扬氏粒子也可以通过柔性聚合物连接体携带较小的被动粒子。在这种情况下，D_c 也可能大于 D_s。有趣的是，存在一个阈值 D_c，当超过该阈值时，货物的均方位移会大于游动体的均方位移。该阈值由以下条件给出

$$D_c^*=D_s+\frac{v_0^2}{2}\left[\frac{\alpha+D_\vartheta}{(\alpha+D_\vartheta)^2+\Omega^2}+\frac{\alpha+2\kappa+D_\vartheta}{(\alpha+2\kappa+D_\vartheta)^2+\Omega^2}\right], \tag{106}$$

正如方程（94）、（95）所示。尽管沿自推进方向的相对矢量平行分量保持不变（因为它不依赖于平移扩散），但哑铃的运动现在由货物的强扩散主导，因此其扩散范围可以超过游动体。有趣的是，这种效应可能非常强烈：当货物扩散较小时，游动体的分布处于甜甜圈相，即呈径向峰值；而当货物扩散较大时，其分布则会再次在

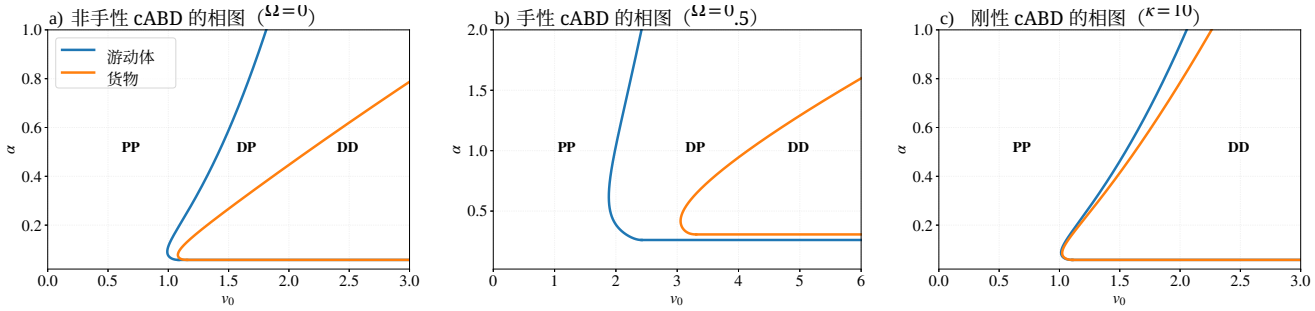

图 7。分别标示 cABD 的游动体和货物的甜甜圈相变的相图。在所有面板中，均采用了足够高的阶数（$\mathcal{O}(v_0^{24})$），使得解析展开与朗之万模拟相吻合。面板 a）展示了非手性 ABD 的情形以及三种不同的相：PP（峰-峰，即两者均呈峰状）、DP（游动体处于甜甜圈相、货物呈峰状）和 DD（游动体与货物均处于甜甜圈相）。所选参数值为 $D_q = 1.0$、$D_\vartheta = 0.1$、$\kappa = 1$ $= 0$ 和 Ω。面板 b）展示了角速度为 $\Omega = 0.5$ 、其他参数不变的手性情形。两条相边界均向更大的速度移动，且 DP 相区域扩大。面板 c）展示了刚度非常大的非手性哑铃情形，其中 $\kappa = 10$。DP 相缩小，表明随着弹簧刚度增加，哑铃的行为越来越类似于单个 cABP。

陷阱中心处达到峰值。因此，对于 $D_c > D_c^*$，货物主导着系统的涨落动力学，这种转变可以称为“尾巴摇狗”转变：打个比方，如果狗的尾巴摇得太猛烈，狗基本上就会被自己的尾巴带着摇摆。

随着手性 Ω 增强，D_s与 D_c^* 之间的差异变小，因为游动体沿越来越小的圆周运动，此时只需较小的货物扩散系数即可主导扩散运动。

V. 结论与展望

我们证明，将 MSRJD 路径积分形式与福克-普朗克方法相结合，能够构成一种多用途工具，以全面分析受谐势束缚的活性布朗粒子，包括手性活性布朗粒子，以及由一个主动珠粒和一个被动珠子组成的哑铃粒子。MSRJD 方法最适合用于计算时间依赖矩。通过对活性/速度进行微扰，并且微扰在矩的阶数处终止，该方法能够得到精确结果。FPE 方法最适合用于获得稳态概率分布，因为它会导出一个级数表达式的递推关系，并且该表达式易于以解析方式计算到任意阶数。

我们首先将该方法应用于谐振陷阱中的手性活性布朗粒子（cABP）。我们精确求得了位置（直到均方位移）和取向的各阶矩，以及与奇扩散相关的交叉关联。采用 FPE 方法，我们通过级数展开求得了稳态概率分布。通过与底层朗之万方程的数值解进行比较，我们展示了收敛性，并得到了从陷阱中心分布向环状“甜甜圈”分布转变的“相图”。我们表明，手性使这一转变更加困难，也就是说，需要更高的自推进速度 v_0。这将此前针对受限非手性粒子 [17, 44] 得到的解析结果推广了。

随后，我们将结合方法应用于受限主动布朗哑铃（cABD）；据我们所知，迄今为止尚未有人对其进行研究。我们发现，主动（“游动体”）珠粒的均方位移大于被动（“货物”）珠子的均方位移。平均而言，与完全被动的哑铃相比，连接两个粒子的弹簧处于伸长状态。相对矢量与自推进方向平均保持一致，即货物拖在游动体后方，而手性会减弱这一效应。当活性粒子具有手性时，被动珠子也会继承这种手性。关于陷阱中的转变，我们发现了一系列新的转变：首先，主动珠粒转变为环形分布，而被动珠子只有在更高活性下才发生转变。最后，我们发现，对于扩散系数高于主动珠粒的货物，这一转变可以逆转，即被动珠子的涨落主导系统行为，而活性粒子再次以陷阱中心为中心分布。

未来，将这种方法推广到更长的活性聚合物（包括环形聚合物和不同的边界条件）将会很有意义。需要指出的是，与本文通过引入质心和相对坐标的做法类似，引入正则模的概念后，Rouse链动力学可以被对角化，因此MSRJD路径积分也可以完全以相同的方式应用。

其他有趣的问题包括将势推广至包含非谐贡献的情形，以及研究粒子间的相互作用。这些拓展要困难得多

——在 MSRJD 方法中，这需要在活性之外引入额外的微扰级数；而在 FPE 方法中，则会产生非线性——但尽管如此，这仍是一条值得尝试的途径，有望为活性物质的基本系统带来新的认识。

致谢

我们感谢德国研究联合会（DFG，德国研究基金会）通过德国卓越战略 EXC 2181/1–390900948（海德堡 STRUCTURES 卓越集群）提供的支持，以及欧盟通过 MSCA 博士生网络 CAFE-BIO （ 101226762 ）提供的支持。

[1] M. te Vrugt、B. Liebchen 和 M. E. Cates，究竟什么是“活性物质”？（2025），arXiv:2507.21621 [cond-mat.soft]。[2] J. Elgeti、R. G. Winkler 和 G. Gompper，微型游动体的物理学——单粒子运动与集体行为：综述，《物理学进展报告》**78**，056601（2015）。[3] C. Bechinger、R. Di Leonardo、H. L¨owen、C. Reichhardt、G. Volpe 和 G. Volpe，复杂及拥挤环境中的活性粒子，《现代物理评论》**88**，045006（2016）。[4] S. Van Teeffelen 和 H. L¨owen，布朗圆周游动体的动力学，《物理评论E》**78**，020101（2008）。[5] F. J. Sevilla，活性手性粒子的扩散，《物理评论E》**94**，062120（2016）。[6] F. K¨ummel、B. ten Hagen、R. Wittkowski、G. V. Ivo Buttinoni、H. L¨owen 和 C. Bechinger，不对称自驱动粒子的圆周运动，《物理评论快报》**110**，198302（2013）。[7] A. Kirvin、D. Gregory、A. Parnell、A. I. Campbell 和 S. Ebbens，通过掠射角蒸发制备旋转椭球形催化微型游动体，《材料进展》**2**，7045（2021）。[8] B. M. Friedrich、I. H. Riedel-Kruse、J. Howard 和 F. J¨ulicher，对精子游动精细结构的高精度追踪为阻力力理论提供了有力检验，《实验生物学杂志》**213**，1226（2010）。[9] J. Elgeti、U. B. Kaupp 和 G. Gompper，表面附近精子细胞的流体动力学，《生物物理学杂志》**99**，1018（2010）。[10] L. Lettermann、F. Ziebert、M. Singer、F. Frischknecht 和 U. S. Schwarz，用于描述微生物螺旋运动的三维手性活性奥恩斯坦-乌伦贝克模型，《物理评论快报》**135**，128403（2025）。[11] L. Lettermann、M. Singer、S. Steinbr¨uck、F. Ziebert、S. Kanatani、P. Sinnis、F. Frischknecht 和 U. S. Schwarz，疟原虫的手性决定其运动模式，《自然·物理》**22**，112（2026）。[12] S. Jahanshahi、C. Lozano、B. Liebchen、H. L¨owen 和 C. Bechinger，活性粒子运动性陷阱的实现，《通讯·物理》**3**，127（2020）。[13] A. Militaru、M. Innerbichler、M. Frimmer、F. Tebbenjo-hanns、L. Novotny 和 C. Dellago，多稳态势中活性粒子的逃逸动力学，《自然·通讯》**12**，2446（2021）。[14] A. Pototsky 和 H. Stark，二维陷阱中的活性布朗粒子，《欧洲物理快报》**98**，50004（2012）。[15] A. Takatori、R. De Dier、J. Vermant 和 J. F. Brady，活性物质的声学捕获，《自然·通讯》**7**，10694 (2016). [16] U. Basu, S. Majumdar, A. Rosso, 和 G. Schehr，《物理评论E》**100**, 062116 (2019). [17] K. Malakar, A. Das, A. Kundu, K. V. Kumar, 和 A. Dhar，二维谐振陷阱中活性布朗粒子的稳态，《物理评论E》**101**, 022610 2020( ). [18] M. Caraglio 和 T. Franosch，谐势阱中活性布朗粒子的解析解，《物理评论快报》**129**, 158001 (2022). [19] C. Littek, M. Brandt, 和 F. Ziebert，谐势中活性布朗粒子的随机路径积分，《新物理学杂志》**28**, 014401 (2025). [20] S. Jahanshahi, H. L¨owen, 和 B. T. Hagen，谐振陷阱中圆周游动者的布朗运动，《物理评论E》**95**, 022606 (2017). [21] L. Caprini, H. L¨owen, 和 U. Marconi，外势中的手性活性物质，《软物质》**19**, 6234 (2023). [22] A. Suma, G. Gonnella, G. Laghezza, A. Lamura, A. Mossa, 和 L. F. Cugliandolo，均匀活性哑铃系统的动力学，《物理评论E》**90**, 052130 (2014). [23] L. F. Cugliandolo, P. Digregorio, G. Gonnella, 和 A. Suma，二维被动与活性哑铃系统中的相共存，《物理评论快报》**119**, 268002 2017( ). [24] C. Tiwari 和 S. P. Singh，圆形障碍物附近活性哑铃的集体动力学，《软物质》**20**, 4816 (2024). [25] R. G. Winkler，剪切流存在与否时柔性主动布朗哑铃的动力学，《软物质》**12**, 3737 (2016). [26] R. G. Winkler 和 G. Gompper，活性聚合物与丝状物的物理学，J. Chem. Phys. **153**, 040901 (2020). [27] L. Caprini, E. Hern´andez-Garc´ıa, C. L´opez, 和 U. M. B. Marconi，活性团簇晶体两种模型的比较研究，《科学报告》**9**, 16687 (2019). [28] M. Bothe 和 G. Pruessner，自由活性奥恩斯坦-乌伦贝克粒子的 Doi–Peliti场论，《物理评论E》**103**, 062105 2021( ). [29] Z. Zhang, L. Feh´ert´oi-Nagy, M. Polackova, 和 G. Pruessner，《新物理学杂志》**26**, 013040 (2024). [30] G. Pruessner 和 R. Garcia-Millan，活性粒子系统的场论及其熵产生，《物理学进展报告》**88**, 097601 (2025).

[31] A. Crisanti 和 M. Paoluzzi，活性奥恩斯坦-乌伦贝克粒子的最概然路径，《物理评论E》**107**, 034110 (2023). [32] N. Silvano 和 D. G. Barci，活性布朗物质中的涌现规范对称性，《物理评论E》**109**, 044605 (2024). [33] P. C. Martin, E. D. Siggia, 和 H. Rose，经典系统的统计动力学，《物理评论A》**8**, 423 (1973). [34] H.-K. Janssen，关于经典场动力学的拉格朗日量及动力学临界性质的重整化群计算，Z. Phys. B **23** (1976). [35] C. De Dominicis，场论重整化技术与临界现象动力学，J. Phys. Colloq.**37**, C1 (1976). [36] A. D. Fokker，辐射场中旋转电偶极子的平均能量，Ann. Phys. (Leipzig) **348**, 810 (1914).

[37]M. Planck, ¨关于统计动力学的一个定理及其在量子理论中的推广，《普鲁士科学院柏林会议报告》**24**，324（1917）。[38] H. Risken, *Fokker-Planck equation*（Springer，1989）。[39] J. Zinn-Justin, *Quantum field theory and critical phenomena* 2002（牛津大学出版社，）。[40] F. Darabi 和 J. R. Gomez-Solano，自推进胶体在光学限域下振荡态的涌现，《新物理学杂志》**28**，034604（2026）。[41] A. Pattanayak、A. Shee、D. Chaudhuri 和 A. Chaudhuri，转矩对活性布朗粒子的影响：二维和三维中的精确矩，《新物理学杂志》**26**，083024（2024）。[42] C. Hargus、J. M. Epstein 和 K. K. Mandadapu，手性随机运动的奇扩散率，《物理评论快报》**127**，178001（2021）。[43] V. Balakrishnan, *Mathematical Physics*（Springer，2020）。[44] D. Chaudhuri 和 A. Dhar，谐振陷阱中的活性布朗粒子：矩的精确计算与再入转变，《统计力学杂志》**2021**，013207（2021）。