

5.3 Theoretische Studien

• 2 Möglichkeiten:

(i) „Lernen von der Natur“ = „top-down“-Zugang
= Verständnis der physikal. Mechanismen

(ii) entwickle neue Mechanismen = „bottom-top“-Zugang
betrachte Grundprinzipien (5.1)

1. Linearer Schwimmer:

2. Rotator

3. „push me pull you“

4. Künstl. Anläufe

Klasse Riemannscher Abbildungen des Einheitskreises
→ optimaler Schwimmer

5. „Squimmer“: (engl: to squirm = sich drehen und winden)

6. Hydrodynamische Wechselwirkungen (HW)

• Motivation:

(i) Kollektive Dynamik von Kollidern:
Was über Strömungsfelder!

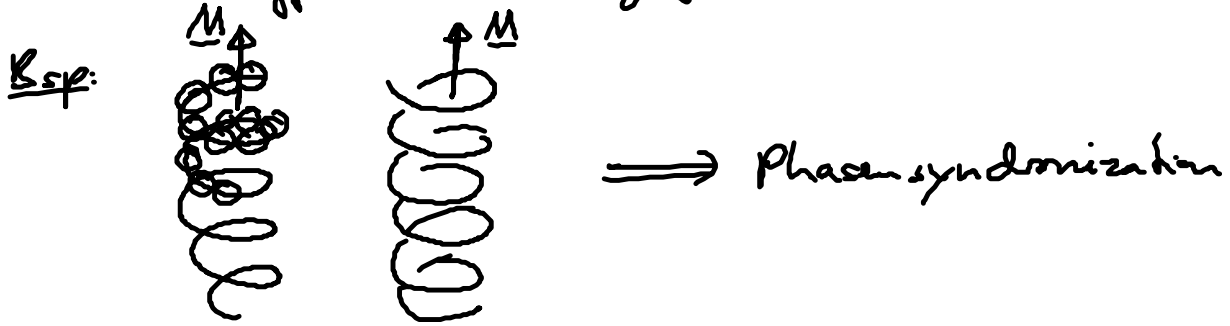
Bsp: Sedimentation von Teilchen

(ii) Polymerdynamik: Kugel-Feder-Modell

$\bigcirc - \text{---} - \bigcirc - \text{---} - \bigcirc - \text{---} - \bigcirc - \text{---} - \bigcirc$

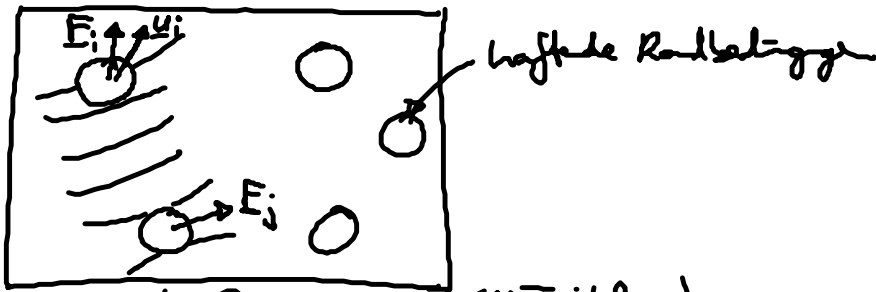
(iii) Modellierung komplexer Körper über Teilchenstruktur

→ Effekte durch Strängsfelder



6.1. Einführung

• Problemstellung:



kolloidale Suspensionen (N Teilchen)

→ $\underline{u}_i = \underline{u}_i(E_i, \dots, E_j, \dots)$ → kompliziertes Vielteilchenproblem
 → Strängsfelder
 andere Teilchen

NB: i.F. nur Translation, keine äußere Drehmomente
 ≙ frei rotierende Teilchen

• Stokes-Gln. linear:

$$\Rightarrow \underline{u}_i = \sum_j \underline{M}_{ij} E_j \quad (6.1)$$

$$\underline{M}_{ij} = \underline{M}_{ij}(z_1, \dots, z_i, \dots, z_j, \dots, z_N) \quad (6.2)$$

... Mobilitätstensoren
 repräsentieren Vielteilchen-WW

(i) \underline{M}_{ii} ... Selbstmobilitäten
 isoliertes Teilchen: $\underline{M}_{ii} = \frac{1}{6\pi\eta a} \underline{1}$ (6.3)

(ii) $\mu_{ij}^{(i+j)}$ „Kreuz“- Mobilitäten

(iii) μ_{ij} bestimme Kollidodynamik vollständig!

• Kurzform:
$$\underline{U} = \begin{pmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_N \end{pmatrix}, \underline{F} = \begin{pmatrix} F_1 \\ \vdots \\ F_N \end{pmatrix}, \underline{\mu} = \begin{pmatrix} \mu_{11} & \mu_{12} & \dots \\ \vdots & & \ddots \\ \vdots & \dots & \mu_{NN} \end{pmatrix} \quad (6.4)$$

(6.1) $\rightarrow \underline{U} = \underline{\mu} \underline{F} \quad (6.5)$

$\underline{F} = \underline{\zeta} \underline{U}, \underline{\zeta} = \underline{\mu}^{-1} \dots$ Reibmatrix (6.6)

• Symmetrie: (o.k.)

$$\underline{\mu} = \underline{\mu}^t \iff \mu_{ij}^t = \mu_{ji} \quad (6.7)$$

(„Onsager Relation“)

nichttrivial:



$$u_1^x = \mu_{12}^{xy} F = \mu_{21}^{yx} F = u_2^y \quad !!!$$

• dissipierte Leistung:

$$W = \sum_i \underline{F}_i \cdot \underline{u}_i \stackrel{(6.4)}{=} \underline{F} \cdot \underline{U}$$

$$\rightarrow \underline{W} = \underline{F} \cdot \underline{\mu} \underline{F} = \underline{U} \cdot \underline{\zeta} \underline{U} \quad (6.8)$$

$W > 0 \rightarrow \underline{\mu}, \underline{\zeta} \dots$ positiv definit!

6.2 „Punktteilchen“

• Grenzfall: $x_j - x_i = x_{ij}, r_{ij} = |x_{ij}| \gg a \dots$ Teilchenradius

• Selbstmobilitäten:

$$\mu_{ii} = \frac{1}{6\pi\eta a} \underline{1} \quad (6.9)$$

[keine Korrektur $\sim \frac{1}{r}$]

identische Teilchen

• Kreuzmobilitäten μ_{ij} ?

2 Teilchen mit $F_2 = 0$

$E_1 \dots$ Punktkraft
→ Stokeslet

$$\underbrace{u_2 = v(z_2) = \underline{O}(z_2 - z_1) E_1}_{\text{Faxén für } |z_{ij}| \gg a!} \quad (6.10)$$

$$\rightarrow \boxed{\mu_{ij} = \underline{O}(z_i - z_j)}$$

NB: $\mu_{ij} \sim \frac{1}{r_{ij}} \iff$ HW sind weitreichend!

• 2-Teilchen-Mobilitäts tensor:

$$\underline{\mu} = \begin{pmatrix} \mu_{11} & \mu_{12} \\ \mu_{21} & \mu_{22} \end{pmatrix} \text{ positiv definit} \rightarrow r_{12} > \underbrace{\frac{2}{2} a}_{\text{Minimals 2-Teilchenabstand}}$$

6.3 Rotne-Prager-Näherung

• ohne HW:
$$\left. \begin{aligned} u_i &= \frac{1}{6\pi\eta a} E_i = \mu_0 E_i \\ u_j &= \dots = \mu_0 E_j \end{aligned} \right\} (6.12)$$

• jedoch: Störungsfeld von Teilchen j:

„Stokes“:
$$v^{(j)}(z) \stackrel{(4.21)}{=} \underline{S}(z - z_j) u_j \stackrel{(6.12)}{=} \underline{S}(z - z_j) \mu_0 E_j \quad (6.13)$$

mit
$$\underline{S}(z) = \frac{3}{4} \frac{a}{r} \left(1 + \frac{z \otimes z}{r^2} \right) + \frac{1}{4} \left(\frac{a}{r} \right)^3 \left(1 - 3 \frac{z \otimes z}{r^2} \right) \quad (6.14)$$

→ Einfluß auf Teilchen i:

Faxén-Reform:
$$u_i \stackrel{(4.15)}{=} \mu_0 E_i + \left(1 + \frac{a^2}{6} \nabla_i^2 \right) v^{(j)}(z_i)$$

$$\stackrel{(6.13)}{=} \mu_0 \left[E_i + \left(1 + \frac{a^2}{6} \nabla_i^2 \right) \underline{S}(z_i - z_j) E_j \right] \quad (6.15)$$

→ Mobilitäten:

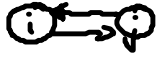
$$\begin{aligned} \underline{\mu}_{ii} &= \mu_0 \underline{1} \\ \underline{\mu}_{ij} &= \mu_0 (1 + \frac{a^2}{6} \nabla_i^2) \underline{\underline{Q}}(x_i - x_j) \stackrel{(6.21)}{=} \mu_0 (1 + \frac{a^2}{6} \nabla_i^2) (1 + \frac{a^2}{6} \nabla_j^2) \underline{\underline{Q}}(x_i - x_j) \\ &= \mu_0 \left[\frac{3}{4} \frac{a}{r_{ij}} \left(1 + \frac{x_{ij} \otimes x_{ij}}{r_{ij}^2} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{a}{r_{ij}} \right)^2 \left(1 - 3 \frac{x_{ij} \otimes x_{ij}}{r_{ij}^2} \right) \right] \end{aligned} \quad (6.17)$$

Oseen

Kern: (i) nur 2-Teilchen-Ww

(ii) Entwicklung der $\underline{\mu}_{ij}$ bis $\frac{1}{r_{ij}^3}$

• Höhere Ordnungen? → Methode der Reflexionen

(i) Reflexion von $\underline{\underline{S}}(x_i - x_j) u_j$ an Teilchen i: 

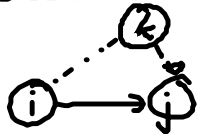
u_i aus (6.15) → Stokeslösung $\underline{\underline{S}}(x - x_i) u_i$

→ in Faxen $f =$ Teilchen j

⋮

→ Korrektur zu $\underline{\mu}_{ij}$

(ii) Vielteilchen Ww:



(iii) Systematische Entwicklung:

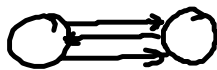
↳ Methode der "induzierten Kräfte"

s. B. Cichocki, B.U. Felderhof, ... J. Chem. Phys. **100**, 3780 (1994)

⇒ Korrektur zu Reihe-Prüfung:

$$\underline{\mu}_{ii}: O(r_{ij}^{-4})$$

$$\underline{\mu}_{ij}: O(r_{ij}^{-7}) \dots \text{reihe 2-Teilchen-Systeme}$$



$$O(r_{ik}^{-2} r_{jk}^{-2}) \dots \text{3-Teilchen-Ww}$$

(6.18)