

## 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

beachte Grundprinzipien (5.1)

1. Linearer Schwimmer:

2. Rotator

3. „push me pull you“

4. Künstl. Anlässe

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!

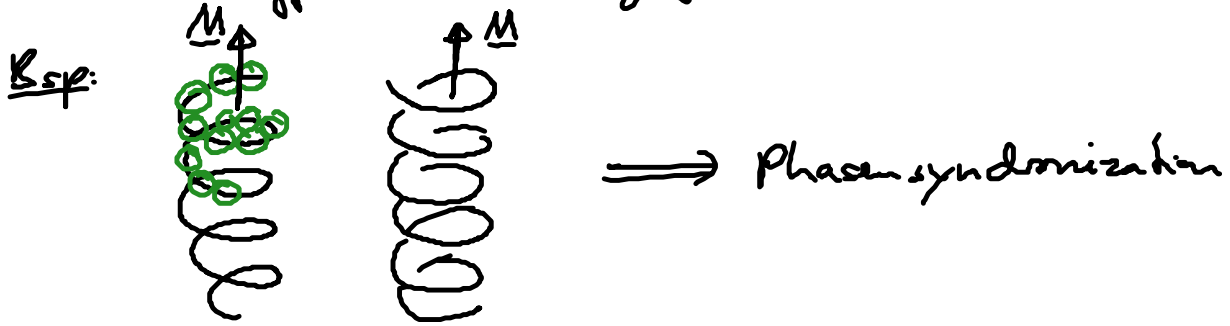
Bsp: Sedimentation von Teilchen

(ii) Polymerdynamik: Kugel-Feder-Modell

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

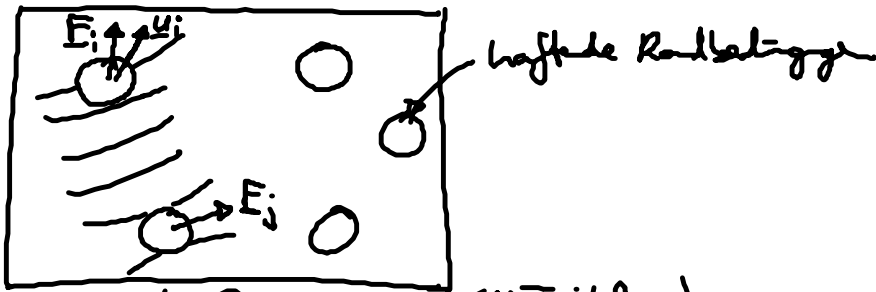
(iii) Modellierung komplexer Körper über Teilchenstruktur

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

(iii)  $\mu_{ij}$  bestimme Kollidodynamik vollständig!

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

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

$\underline{F} = \underline{\xi} \underline{U}, \quad \underline{\xi} = \underline{\mu}^{-1} \dots$  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:

$$W = \sum_i F_i \cdot u_i \stackrel{(6.4)}{=} \underline{F} \cdot \underline{U}$$

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

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

## 6.2 „Punktteilchen“

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

• Selbstmobilitäten:

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

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

identische Teilchen

• Kreuzmobilitäten  $\mu_{ij}$ ?

2 Teilchen mit  $F_2 = 0$

$F_1 \dots$  Punktkraft  
→ Stokeslet

$$\underbrace{u_2 = v(z_2) = \underline{O}(z_2 - z_1) F_1}_{\text{Faxén für } |z_{ij}| \gg a!} \quad (6.10)$$

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

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

• 2-Teilchen-Mobilitäts tensor:

$$\underline{\mu} = \begin{pmatrix} \mu_{11} & \mu_{12} \\ \mu_{21} & \mu_{22} \end{pmatrix} \text{ positiv definit} \rightarrow r_{12} > \underbrace{\frac{3}{2} a}_{\text{Minimals 2-Teilchenabstand}}$$

### 6.3 Rotne-Prager-Näherung

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

• jedoch: Störungsfeld von Teilchen j:

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

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

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

→ Mobilitäten:

$$\underline{\mu}_{ii} = \mu_0 \underline{1}$$

$$\underline{\mu}_{ij} = \mu_0 (1 + \frac{a^2}{6} \nabla_i^2) \underline{\underline{Q}}(x_i - x_j) \stackrel{(6.21)}{=} \mu_0 (1 + \frac{a^2}{6} \nabla_i^2) (1 + \frac{a^2}{6} \nabla_j^2) \underline{\underline{Q}}(x_i - x_j)$$

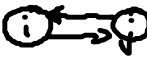
$$= \mu_0 \left[ \frac{3}{4} \frac{a}{r_{ij}} \left( 1 + \frac{x_{ij} \otimes x_{ij}}{r_{ij}^2} \right) + \frac{1}{2} \left( \frac{a}{r_{ij}} \right)^2 \left( 1 - 3 \frac{x_{ij} \otimes x_{ij}}{r_{ij}^2} \right) \right] \quad (6.17)$$

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: 

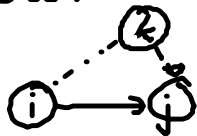
$u_i$  aus (6.15) → Stokesströmung  $\underline{\underline{S}}(x - x_i) u_i$

→ in Faxén für Teilchen j

⋮

→ Korrektur zu  $\underline{\mu}_{ij}$

(ii) Vielteilchen Ww:



(iii) Systematische Entwicklung:

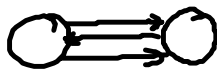
↳ Methode der "induzierten Kräfte"

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)