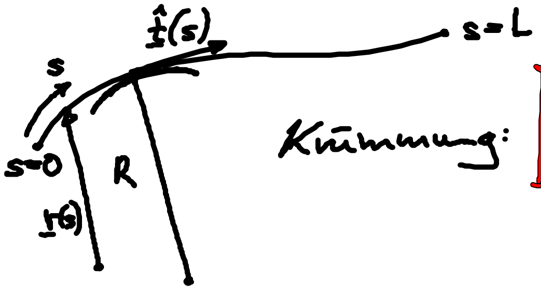
7.2 Elastohydrodynamik dünner Stäbe

a) Kinematik:



Krümmung: $$\boxed{\frac{1}{R} = \left|\frac{d\hat{\underline{t}}}{ds}\right|} \quad (7.1)$$

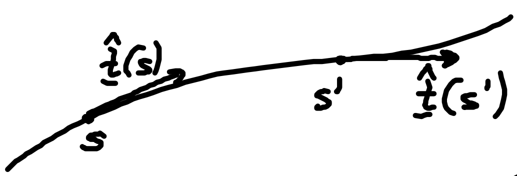
b) Elastizitätstheorie:

- Biegeenergie: harmonische Näherung

$$\boxed{\begin{aligned} F &= \frac{1}{2} k_B T \ell_p \int_0^L \frac{1}{R^2}\, ds \\ &= \frac{1}{2} k_B T \ell_p \int_0^L \left(\frac{d\underline{t}}{ds}\right)^2 ds \quad \text{mit } \hat{\underline{t}} = \frac{d\underline{r}(s)}{ds},\ |\hat{\underline{t}}| = 1! \end{aligned}} \quad (7.2)$$

$k_B T \ell_p$ ... Biegekonstante = $k_B T \times$ Persistenzlänge

- Persistenzlänge:



thermische Fluktuationen des Stabs

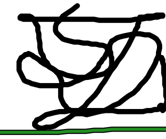
⟶ Tangentkorrelationen im thermodyn. GG:

$$\boxed{\langle \underline{t}(s) \cdot \underline{t}(s') \rangle = e^{-|s-s'|/\ell_p}} \quad (7.3)$$

Beweis: s. Übungen, im kanon. Ensemble

Deutung: (i) $|s-s'| \ll \ell_p \rightarrow \langle \underline{t}(s) \cdot \underline{t}(s') \rangle \approx 1$
Filament ist gerade

(ii) $|s-s'| \gg \ell_p \rightarrow \langle \ldots \rangle \approx 0$
Filament beliebig gebogen!



→ $\boxed{\text{Auf Persistenzlänge } l_p \text{ behält Filament seine Richtung bei}}$

(iii) also: L … Gesamtlänge

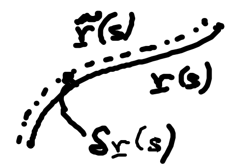
$L \gg l_p$ … flexibles Filament

$L \approx l_p$ … semiflexibles "

$L \ll l_p$ … starres "

· Führe ein: <u>Biegekraft</u>

über Variation der Biegeenergie δF für Variation der Filamentkonfiguration: $\delta \underline{r}(s) = \hat{\underline{r}}(s) - \underline{r}(s)$ mit $\frac{|\delta \underline{r}|}{|\underline{r}|} \ll 1$



$$\boxed{\delta F = \int_0^L \frac{\delta F}{\delta \underline{r}(s)} \cdot \delta \underline{r}(s)\, ds + \text{Oberflächenenergie}} \quad (7.4)$$

$-\frac{\delta F}{\delta \underline{r}(s)}$ … Biegekraft pro Längeneinheit = − Funktionalableitung von F

Bestimmung:

$$\delta F \overset{(7.2)}{=} k_B T l_p \int_0^L \frac{d\hat{t}}{ds} \cdot \underbrace{\delta \frac{d\hat{t}}{ds}}_{= \delta \frac{d\underline{r}^2}{ds^2}} ds$$

$F = \frac{1}{2} k_B T l_p \times \int_0^L \left(\frac{d\hat{t}}{ds}\right)^2 ds$

$$= \delta \frac{d\underline{r}^2}{ds^2} = \delta \left(\lim_{\varepsilon \to 0} \frac{\underline{r}(s+\varepsilon) + \underline{r}(s-\varepsilon) - 2\underline{r}(s)}{\varepsilon^2} \right)$$

Taylorentw.

$$\underline{r}(s \pm \varepsilon) = \underline{r}(s) \pm \frac{d\underline{r}}{ds}\varepsilon + \frac{1}{2}\frac{d^2\underline{r}}{ds^2}\varepsilon^2$$

$$= k_B T \ell_p \int_0^L \frac{d^2 \underline{r}}{ds^2} \cdot \underbrace{\left(\frac{d^2}{ds^2} \delta \underline{r}\right)}_{\text{Kettenregel: } \frac{d}{ds}\left(\frac{d^2 \underline{r}}{ds^2} \cdot \frac{d}{ds}\delta \underline{r}\right) - \frac{d^3 \underline{r}}{ds^3} \cdot \frac{d}{ds}\delta \underline{r}} ds$$

$$= - k_B T \ell_p \int \frac{d^3 \underline{r}}{ds^3} \cdot \left(\frac{d}{ds} \delta \underline{r}\right) ds + k_B T \ell_p \frac{d^2 \underline{r}}{ds^2} \cdot \frac{d}{ds} \delta \underline{r} \Big|_0^L$$

$$\overset{\text{Kettenregel}}{=} k_B T \ell_p \int \frac{d^4 \underline{r}}{ds^4} \cdot \delta \underline{r} + \underbrace{k_B T \ell_p \left[\frac{d^2 \underline{r}}{ds^2} \cdot \left(\frac{d}{ds} \delta \underline{r}\right) - \frac{d^3 \underline{r}}{ds^3} \cdot \delta \underline{r}\right]\Big|_0^L}_{\text{Oberflächenterme (s.u.)}} \quad (7.5)$$

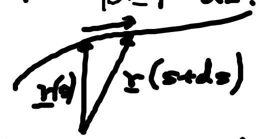
$$\xrightarrow[(7.4)]{\text{vgl. mit}} \quad \boxed{\frac{\delta F}{\delta \underline{r}(s)} = k_B T \ell_p \frac{d^4 \underline{r}}{ds^4}} \quad (7.6)$$

- Führe ein Spannungskräfte:

Dynamik: $\underline{r}(s, t=0) \longrightarrow \underbrace{\underline{r}(s,t)}_{\text{Undehnbarkeit: } L = \text{konstant}}$

s: indiziert Materiepkt.

$\longrightarrow \left|\frac{d\underline{r}}{ds}\right| = 1 \quad |d\underline{r}| = ds!$



$\longrightarrow \underline{t} = \frac{d\underline{r}}{ds}$ immer auf eins normiert

$\longrightarrow$ Variation mit Nebenbedingung!

$$\boxed{F + F_s = F + \frac{1}{2} \int \underbrace{\lambda(s)}_{\text{Lagrange-parameter}} \left(\frac{d\underline{r}}{ds}\right)^2 ds} \quad (7.7)$$

Deutung: F_s ... Dehnungsenergie $\left[\text{relativ zu } \frac{1}{2}\int \lambda(s) ds\right]$

$$\boxed{\underline{\tau}(s) = \lambda(s) \frac{d\underline{r}}{ds}} \quad (7.8) \quad \ldots \text{ Spannung um } \left(\frac{d\underline{r}}{ds}\right)^2 = 1 \text{ zu erfüllen!}$$

Variation:

$$\delta F_s = \int \lambda(s)\,\frac{d\underline{r}}{ds}\left(\delta \frac{d\underline{r}}{ds}\right) ds$$

$$\overset{\text{Kettenregel}}{=} -\int \frac{d}{ds}\left(\lambda(s)\frac{d\underline{r}}{ds}\right)\delta\underline{r}\, ds + \underbrace{\lambda(s)\frac{d\underline{r}}{ds}\,\delta\underline{r}\Big|_0^L}_{\text{Oberflächenterm (s.u.)}} \qquad (7.9)$$

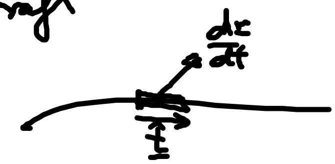
$$\longrightarrow \boxed{-\frac{\delta F}{\delta \underline{r}} = \frac{d}{ds}\,\underline{\tau}(s)} \qquad (7.10)$$

... Spannungskraft

c) Elastohydrodynamik

- Näherung:

  überdampfte Bewegung, „resistive force theory" } lokale Reibungskraft = Biege- + Spannungskraft auf Filament



$\longrightarrow$ Bew.gln. für elastisches Filament:

$$\boxed{\begin{aligned}\left[\zeta_\parallel\, \underline{t}\circ\underline{t} + \zeta_\perp\left(\underline{1}-\underline{t}\circ\underline{t}\right)\right]\frac{d\underline{r}}{dt} &= -\frac{\delta F}{\delta \underline{r}(s)} + \frac{d}{ds}\,\underline{\tau}(s)\\ &= -k_BT\,l_p\,\frac{d^4\underline{r}}{ds^4} + \frac{d}{ds}\left(\lambda(s)\frac{d\underline{r}}{ds}\right)\end{aligned}} \qquad (7.11)$$

mit $\zeta_\parallel, \zeta_\perp$ ... Reibungskoeff. pro Längeneinheit $\parallel, \perp$ Filamentsegment [s. Kap. 4.6]

NB: (7.11) ist hochgradig nicht linear!

- freie Randbedingungen: $\longrightarrow$ $\delta\underline{r}(s)\Big|_{s=0,L}$ und $\delta\frac{d\underline{r}}{ds}\Big|_{s=0,L}$ beliebig

  mit Oberflächenterme in (7.5) & (7.9) plus Kräftefreiheit:

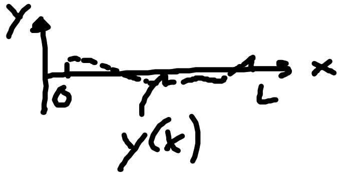
$$\boxed{\begin{aligned}\xrightarrow{\delta\underline{r}}\quad & -k_BT\,l_p\,\frac{d^3\underline{r}}{ds^3} + \underbrace{\lambda(s)\frac{d\underline{r}}{ds}}_{\underline{\tau}(s)} = 0 \qquad (7.12a)\\ \xrightarrow{\delta\frac{d\underline{r}}{ds}}\quad & \frac{d^2\underline{r}}{ds^2} = 0 \qquad (7.12b)\end{aligned}}$$

... Filamentenden sind frei von Kräften (a) und Drehmomenten (b)!

d) Linearisierung um Grundzustand:

$$\underline{r}_0(x) = x\,\underline{e}_x, \quad x = 0\ldots L$$

• Monge-Darstellung



$\underline{r}(x) = x\,\underline{e}_x + y(x)\,\underline{e}_y$

gültig für $|y| \ll L$

(i) Tangentenvektor:

$$\frac{d\underline{r}}{dx} = \underline{e}_x + \frac{dy}{dx}\,\underline{e}_y \longrightarrow \left|\frac{d\underline{r}}{dx}\right| = \sqrt{1+\left(\frac{dy}{dx}\right)^2} = 1 + O\left(\left(\frac{dy}{dx}\right)^2\right)$$

$$\longrightarrow \hat{\underline{t}} = \underline{e}_x + O\left(\frac{dy}{dx}\right)$$

$$\longrightarrow \lambda(x) \simeq 0 + O\left(\left(\frac{dy}{dx}\right)^2\right) \longrightarrow \tau = 0$$

(ii) Geschwindigkeit:

$$\frac{d\underline{r}}{dt} = \frac{d}{dt}\,y(x,t)\,\underline{e}_y \perp \underline{e}_x = \hat{\underline{t}}$$

(iii) $\frac{d^4\underline{r}}{dx^4} = \frac{d^4 y}{dx^4}\,\underline{e}_y$

$$(7.11) \xrightarrow[\text{Linearisierung}]{(i)-(iii)} \boxed{\frac{dy}{dt} = -\frac{k_B T l_p}{\zeta_\perp}\frac{d^4 y}{dx^4}} \quad (7.13)$$

... Hyperdiffusionsgleichung