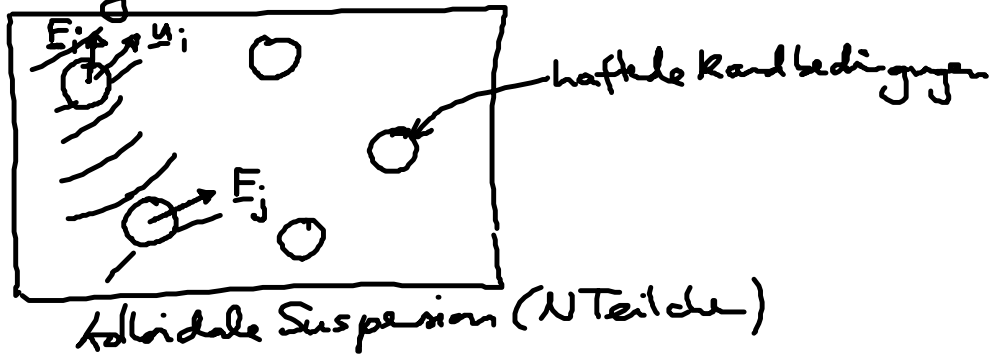


6. Hydrodynamische Wechselwirkungen

6.1 Einführung

• Problemstellung:



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

→ Störungsfelder anderer Teilchen

NB: i.f. Translationen, keine äußeren Drehmomente
 ≙ freierotierende Teilchen

• Stokes-Gln. linear:

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

$$\underline{\mu}_{ij} = \underline{\mu}_{ij} (x_1, \dots, x_i, \dots, x_j, \dots, x_N) \quad (6.2)$$

... Mobilitätskoeffizienten
 repräsentieren Vielteilchen-WW

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

(ii) $\underline{\mu}_{ij} (i \neq j)$... „Kreuz“-Mobilitäten

(iii) $\underline{\mu}_{ij}$ bestimmen Kolloiddynamik vollständig!

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

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

$\underline{F} = \underline{Z} \underline{U}, \underline{Z} = \underline{M}^{-1} \dots$ Reibungsmatrix (6.6)

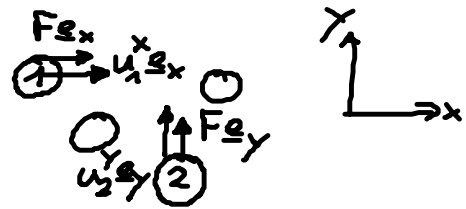
• Symmetrie: (o.B.)

$$\underline{M} = \underline{M}^t \iff M_{ij}^t = M_{ji} \quad (6.7)$$

(„Onsager-Relation“)

multivariat:

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



• dissipierte Leistung:

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

$$\rightarrow \underline{W} = \underline{F} \cdot \underline{M} \underline{F} = \underline{U} \cdot \underline{Z} \underline{U} \quad (6.8)$$

$W > 0 \rightarrow \underline{M}, \underline{Z} \dots$ positiv definit

6.2 „Punktteilchen“

• Grenzfall: $\underline{x}_j - \underline{x}_i = \underline{x}_{ij}, r_{ij} = |\underline{x}_{ij}| \gg a \dots$ Teilchenradius

• Selbstmobilitäten:

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

identische Teilchen!

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

• Kreuzmobilitäten: $M_{ij}?$

2 Teilchen mit $F_2 = 0$
 $F_1 \dots$ „Punktkraft“
 \rightarrow Stokeslet

$$\underline{u}_2 = \underline{v}(z_2) = \underline{O}(z_2 - z_1) F_1$$

Faxén für $|z_j| \gg a$!!!

$$\rightarrow \boxed{\mu_{ij} = \underline{O}(z_i - z_j)} \quad (6.11)$$

NB: $\mu_{ij} \sim \frac{1}{r_{ij}} \leftrightarrow$ HW sind weit räumlich!

• 2-Teilchen - Mobilitätstensor:

$$\underline{M} = \begin{pmatrix} \mu_{11} & \mu_{12} \\ \mu_{21} & \mu_{22} \end{pmatrix} \text{ positiv definit} \rightarrow r_{12} > \frac{3}{2} a$$

← kleiner als
2-Teilchen Abstand

6.2 Rotne-Prager-Näherung

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

• jedoch: Stömungsfeld von Teilchen j:

„Stokes“: $\underline{v}^{(j)}(z) \stackrel{(6.11)}{=} \underline{O}(z - z_j) u_j = \underline{O}(z - z_j) \mu_0 F_j \quad (6.13)$

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

→ Einfluß auf Teilchen i:

Faxén-Theorem: $\stackrel{(6.15)}{u_i} = \mu_0 F_i + \left(1 + \frac{a^2}{6} \nabla_i^2\right) \underline{v}^{(j)}(z_i)$

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

→ Mobilitäten

$$\begin{aligned}
 \underline{\mu}_{ii} &= \mu_0 \underline{1} \\
 \underline{\mu}_{ij} &= \mu_0 \left(1 + \frac{a^2}{6} \nabla_i^2\right) \underline{\Sigma}(\underline{x}_i - \underline{x}_j) \stackrel{(6.17)}{=} \left(1 + \frac{a^2}{6} \nabla_i^2\right) \left(1 + \frac{a^2}{6} \nabla_j^2\right) \underline{O}(\underline{x}_i - \underline{x}_j) \\
 &= \mu_0 \left[\frac{3}{4} \frac{a}{r_{ij}} \left(1 + \frac{\underline{x}_{ij} \otimes \underline{x}_{ij}}{r_{ij}^2}\right) + \frac{1}{2} \left(\frac{a}{r_{ij}}\right)^3 \left(1 - 3 \frac{\underline{x}_{ij} \otimes \underline{x}_{ij}}{r_{ij}^2}\right) \right]
 \end{aligned}$$

Oseen!

(6.17)

- Bem: (i) nur 2-Teilchen-Ww
 (ii) Entwicklung der $\underline{\mu}_{ij}$ bis $\frac{1}{r_{ij}^3}$

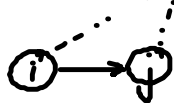
• Höhere Ordnungen? → Methode der Reflexionen

(i) Reflexion von $\underline{\Sigma}(\underline{x} - \underline{x}_j) \underline{u}_j$ an Teilchen i: $\textcircled{i} \leftrightarrow \textcircled{i}$



→ Korrektur zu $\underline{\mu}_{ij}$

(ii) Vielteilchen-Ww: \textcircled{k}



(iii) Systematische Entwicklung:
 „Methode der induzierten Kräfte“

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

⇒ Korrektur zu Rohne-Prager:

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

$$\underline{\mu}_{ij} : O(r_{ij}^{-7}) \dots \text{reine 2-Teilchen-Systeme} \quad \left. \vphantom{\underline{\mu}_{ij}} \right\} (6.18)$$



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


reines 2-Teilchen-System: $\textcircled{1} \text{---} \textcircled{2}$

$$\underline{\underline{\mu_{ij}}} = \mu_{ij}^{\parallel} (r) \frac{\underline{x} \otimes \underline{x}}{r^2} + \mu_{ij}^{\perp} (r) \left(\underline{1} - \frac{\underline{x} \otimes \underline{x}}{r^2} \right), \forall ij \quad (6.19)$$

$\mu_{ij}^{\parallel/\perp} (r)$... Mobilitäten für Bewegung \parallel/\perp zu z !

6.4 Teilchen nahe Kontakt

Kleinheitsparameter ϵ :

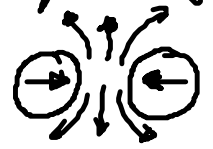


$$\epsilon = \frac{d}{a} \quad (6.20)$$

4 Situationen:

Relativbewegungen:

(1) „Squeezing“-Bew.



$$u_1 = -u_2 = u$$

$$F_1 = -F_2 = F$$

(2) Slv-Bew.



Kollektivbewegung

(3)



$$u_1 = u_2 = u$$

$$F_1 = F_2 = F$$

(4)



• Reibungskoeffizienten:

(i) Lubrikationstheorie: asymptotische Entwicklung in ε^{-1}
(divergente Terme bei analyt. Reduz.)

(ii) numerische Rechnung

⇒ für Situationen:

$$(1) \frac{F}{6\pi\eta a u} = \boxed{\frac{1}{2\varepsilon}} + \frac{9}{20} \ln \frac{1}{\varepsilon} + O(1) + \frac{3}{28} \varepsilon \ln \frac{1}{\varepsilon} + O(\varepsilon)$$

$$(2) \frac{F}{6\pi\eta a u} = -\frac{1}{3} \boxed{\ln \varepsilon} + O(1) + O(\varepsilon)$$

↳ "schwere Divergenz"
↳ "große Gradienten"

$$(3), (4) \frac{F}{6\pi\eta a u} < 1 \quad (\text{s.u.})$$

• Mobilitäten: $O(1)$, aber teilweise divergente Ableitungen

Bsp: Situation (1):
$$u = \varepsilon \frac{F}{3\pi\eta a} + \dots \quad (6.22)$$

NB: $u \rightarrow 0$, für $\varepsilon \rightarrow 0!!$

Situation (2):
$$u = -\frac{1}{\ln \varepsilon} \frac{F}{2\pi\eta a} + \dots \quad (6.23)$$

• Programm HydroLib: Cluster von Teilchen $\rightarrow \underline{M}, \underline{Z}$

K. Hinzen, Comput. Phys. Commun. 98, 327 (1995)

Fortran-Quellcode: <http://dirac.cnrs-orleans.fr/HYDROLIB>

• Bsp: 2-Teilchen-System: $\mu_{11}^{||/L}, \mu_{12}^{||/L}$ s. Folie

Lit: S. Kim & J.S. Karrila, Microhydrodynamics...

6.5. Beispiele

- Sedimentation:
 - 2 Teilchen: Sedimentationsgeschw. \rightarrow Folie
 - 3 Teilchen: verschiedene Geometrie
beide Teilchen
transientes Quers

- Cluster Oszillationen

• „hydrodynamischer Stoß.“