

6. Hydrodynamische Wechselwirkungen (HW)

• Motivation:

(i) Kollektive Dynamik von Kolloiden: HW über Strömungsfelder!

Bsp: Sedimentation von Teilchen

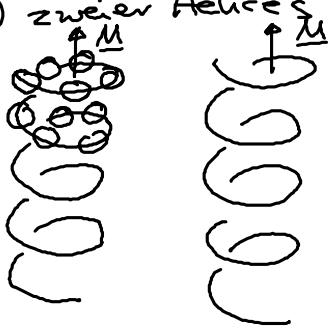
(ii) Polymerdynamik: Kugel-Feder-Modell

$\circ \text{---} \circ \text{---} \circ \text{---} \circ \text{---} \circ \text{---} \circ \dots$

(iii) Modellierung komplexerer Körper über Teilchencluster

→ Effekte durch Strömungsfelder

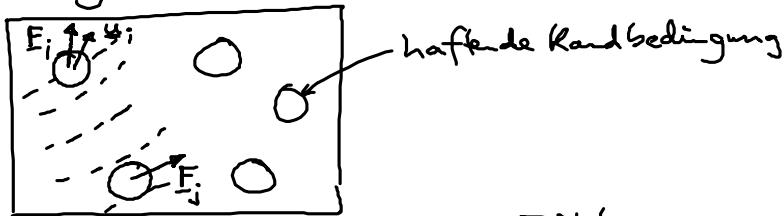
Bsp: HW zweier Helices



⇒ Phasensynchronisation

6.1 Einführung

• Problemstellung:



Kolloidale Suspension von N Teilchen

→ $\underline{u}_i = \underline{u}_i(\underline{F}_i, \dots, \underline{F}_j, \dots)$ → kompliziertes Vielteilchen-Problem

→ Strömungsfelder
anderer Teilchen

NB: i.f. nur Translationen, keine äußeren Drehmomente
= frei rotierende Teilchen

• Stokes-Gln. linear:

$$\rightarrow \underline{u}_i = \sum_j \underline{\mu}_{ij} \underline{F}_j \quad (6.1)$$

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

... Mobilitätstensoren
repräsentieren Vielteilchen-WW

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

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

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

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

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

$\underline{F} = \underline{\zeta} \underline{u}, \underline{\zeta} = \underline{\mu}^{-1}$... Reibungsmatrix (6.6)

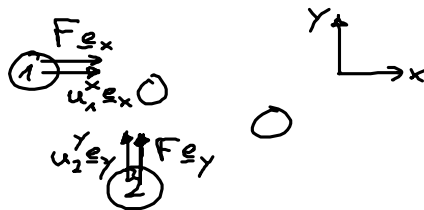
• Symmetrie: (o.B.)

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

("Onsager-Relation")

nichttrivial:

$$u_1^x = \mu_{12}^{yx} F_2^y = \mu_{21}^{yx} F_1^x = u_2^{yx} \quad (6.7)$$



• dissipierte Leistung:

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

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

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

6.2 "Punktteilchen"

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

• Selbstmobilitäten:

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

identische Teilden!

• Kreuzmobilitäten: μ_{ij} ?

2 Teilden mit $E_2 = 0$

E_1, \dots „Punktkraft“
→ Stokeslet

$$u_2 = v(x_2) = \underline{0} (x_2 - x_1) \underline{E}_1$$

Faxe'n für $|x_{ij}| \gg a!$

$$\rightarrow \mu_{ij} = \underline{0} (x_i - x_j) \quad (6.11)$$

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

• 2-Teilden - Mobilitätstensor:

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

Abw als 2-Teilden Abstand

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: Störungsfield von Teilchen j:

„Stokes“:
$$v^{(j)}(x) = \sum^{(k,21)} (x - x_j) u_j^{(6.12)} = \sum (x - x_j) \mu_0 E_j \quad (6.13)$$

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

→ Einfluss auf Teilchen i:

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

$= \mu_0 [F_i + (1 + \frac{a^2}{6} \nabla_i^2) \underline{\underline{v}}(x_i - x_j) F_j]$ (6.15)

→ Mobilitäten

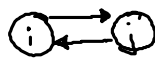
$$\begin{aligned} \underline{\underline{\mu}}_{ii} &= \mu_0 \underline{1} & (6.16) \\ \underline{\underline{\mu}}_{ij} &= \mu_0 (1 + \frac{a^2}{6} \nabla_i^2) \underline{\underline{v}}(x_i - x_j) \stackrel{(6.21)}{=} (1 + \frac{a^2}{6} \nabla_i^2) (1 + \frac{a^2}{6} \nabla_j^2) \underline{\underline{v}}(x_i - x_j) & (6.17) \\ &= \mu_0 \left[\frac{3}{4} \frac{a}{r_{ij}} \left(1 + \frac{x_{ij} \otimes x_{ij}}{r_{ij}^2} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{a}{r_{ij}} \right)^3 \left(1 - 3 \frac{x_{ij} \otimes x_{ij}}{r_{ij}^2} \right) \right] \end{aligned}$$

Oseen!

Bem: (i) nur 2-Teilchen-Ww

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

• Höhere Ordnungen? → Methode der Reflexionen

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

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

→ in Faxén für Teilchen j (mit $F_j = 0$)

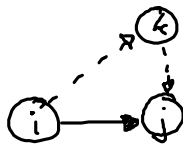
schon bei Rotne-Prager

→ $S u_j =$ Korrektur zu $u_j = \mu_0 F_j$

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

⋮

(ii) Vielteilchen-Ww:



(iii) Systematische Entwicklung:

„Methode der induzierten Kräfte“

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

⇒ Korrekturen zu Rotne-Prager:

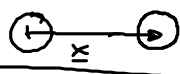
$\underline{\underline{\mu}}_{ii} : O(r_{ij}^{-4})$

$\underline{\underline{\mu}}_{ij} : O(r_{ij}^{-7})$... reine 2-Teilchen-System



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

(6.18)


• reines 2-Teilchen-System:  , $r = |x|$

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

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

6.4 Teilchen nahe Kontakt

• „Kleinheitsparameter“:

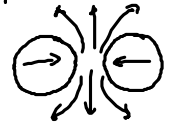
 $\epsilon = \frac{d}{a} \quad (6.20)$

• 4 Situationen:

Relativbewegungen:

(1) „Squeezing“-Bewegung

(2) Scher-Bewegung

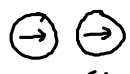


$$u_1 = -u_2 = u$$

$$F_1 = -F_2 = F$$

Kollektivbewegungen:

(3)



(4)



$$u_1 = u_2 = u$$

$$F_1 = F_2 = F$$

• Reibungskoeffizienten:

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

(ii) numerische Redz

⇒ für Situationen:

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

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

"schwache Divergenz"

$$(3),(4): \frac{F}{6\pi\eta a u} < 1$$

(6.21)

"große Gradienten"

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

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

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

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