

Czynnik hydrodynamiczny
i efektywne współczynniki transportu
zawieszin cząstek sferycznych

Karol Makuch

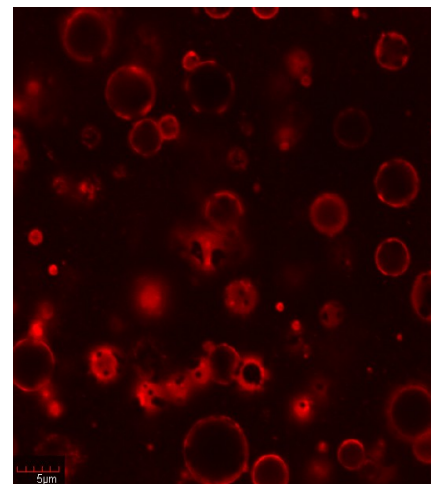


Zawiesiny



Makro:

Lepkość efektywna
Współczynnik sedymentacji
Czynnik hydrodynamiczny



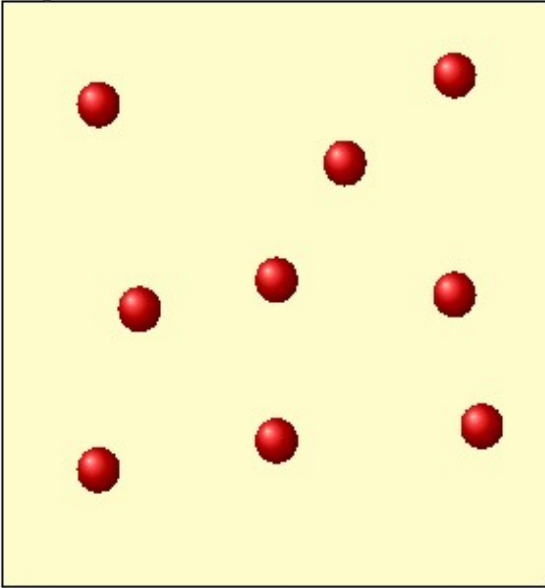
Mikro:

Promień cząstek
Lepkość cieczy
Gęstość liczbowa cząstek

Najprostszy układ:
Zawiesina cząstek sferycznych (sztywne kule)
Problem: Od mikro do makro

Opis zawiesiny na poziomie mikroskopowym

Nieograniczona ciecz,
N cząstek



Siły działające na zawiesinę: $\mathbf{F}_0(\mathbf{r})$ $\mathbf{F}_{\text{part}}(\mathbf{r})$

płyn

cząstki

Reakcja zawiesiny:

$\mathbf{V}_i, \boldsymbol{\Omega}_i,$

$$\sum_{i=1}^N \mathbf{F}_i(\mathbf{r})$$

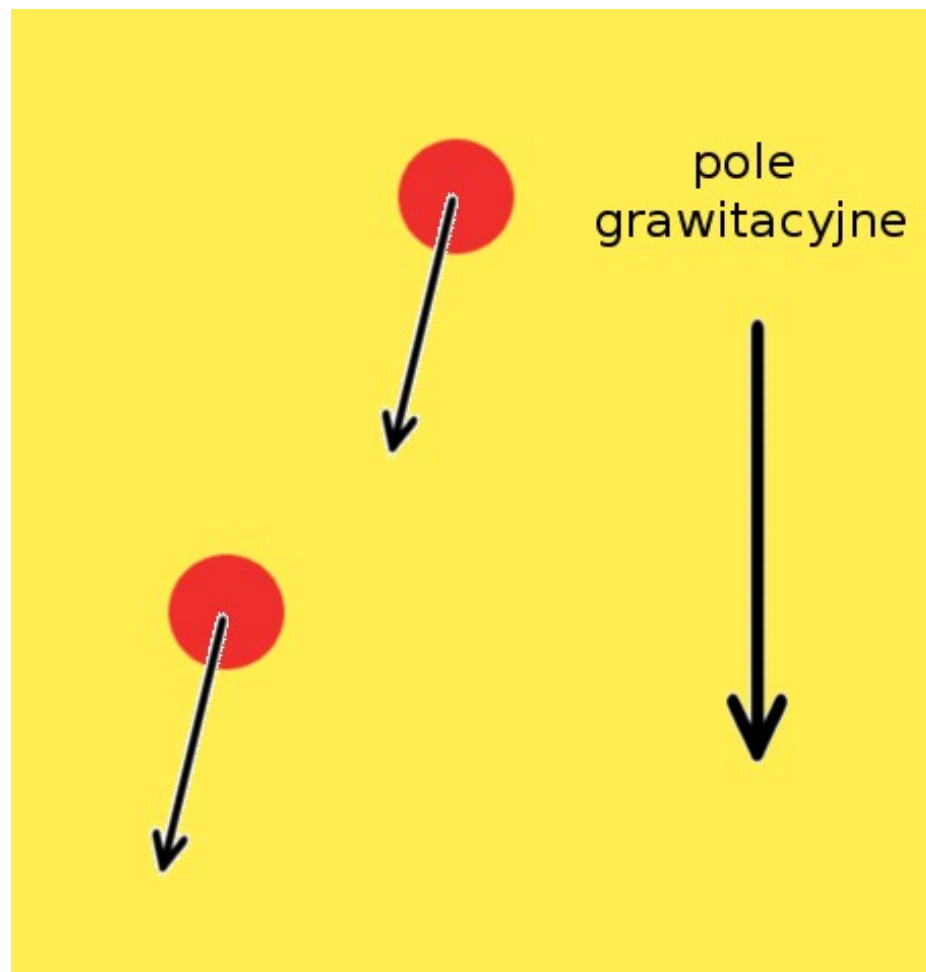
Prędkość translacyjna i kątowna

Siły powierzchniowe

Równania Stokesa:

$$\begin{aligned} \nabla p(\mathbf{r}) - \eta \Delta \mathbf{v}(\mathbf{r}) &= \mathbf{F}_0(\mathbf{r}) + \sum_{i=1}^N \mathbf{F}_i(\mathbf{r}) \\ \nabla \cdot \mathbf{v}(\mathbf{r}) &= 0 \end{aligned}$$

Oddziaływania hydrodynamiczne



Wielociałowe
Długozasięgowe
Silne oddziaływania bliskich cząstek

Uśredniona reakcja zawiesiny a przepływ rzeczywisty

$$\langle F \rangle = T^{irr} \langle v \rangle$$

Operator reakcji zawiesiny w przepływie rzeczywistym

Felderhof, Ford, Cohen (1982):

oddziaływania krótkozasięgowe

$$T^{irr} = \sum_{b=1}^{\infty} \sum_{C_1 \dots C_b} \int dC_1 \dots dC_b b(C_1 | \dots | C_b) S_I(C_1) G \dots G S_I(C_b)$$

blokowe funkcje rozkładu

propagator G (długozasięgowy):

$$G = \frac{1}{8\pi\eta} \frac{\mathbf{1} + \hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{r}}}{r}$$

Gdy środkowe grupy są daleko od C1 i Cb:

$$\sum_{b=2}^{\infty} \sum_{C_2 \dots C_{b-1}} b(C_1 | \dots | C_b) S_I(C_1) G \dots G S_I(C_b) \rightarrow b(C_1 | C_b) S_I(C_1) G_{eff} S_I(C_b)$$

Propagator efektywny G_{eff} dla dużych odległości: $G_{eff} \sim \frac{1}{8\pi\eta_{eff}} \frac{\mathbf{1} + \hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{r}}}{r}$

Ważne oddziaływanie kolektywne trudno uchwytne w wyrażeniu FFC!

Uwzględnienie kolektywnych oddziaływań w zawieszinie

Felderhof, Ford, Cohen:
$$T^{irr} = \sum_{b=1}^{\infty} \sum_{C_1 \dots C_b} \int dC_1 \dots dC_b b(C_1 | \dots | C_b) S_I(C_1) G \dots G S_I(C_b)$$

Rozwinięcie pierścieniowe (2011)

$$T^{irr} = \sum_{b=1}^{\infty} \sum_{C_1 \dots C_b} \int dC_1 \dots dC_b H(C_1 | \dots | C_b) S_I(C_1) G_{eff} \dots G_{eff} S_I(C_b)$$

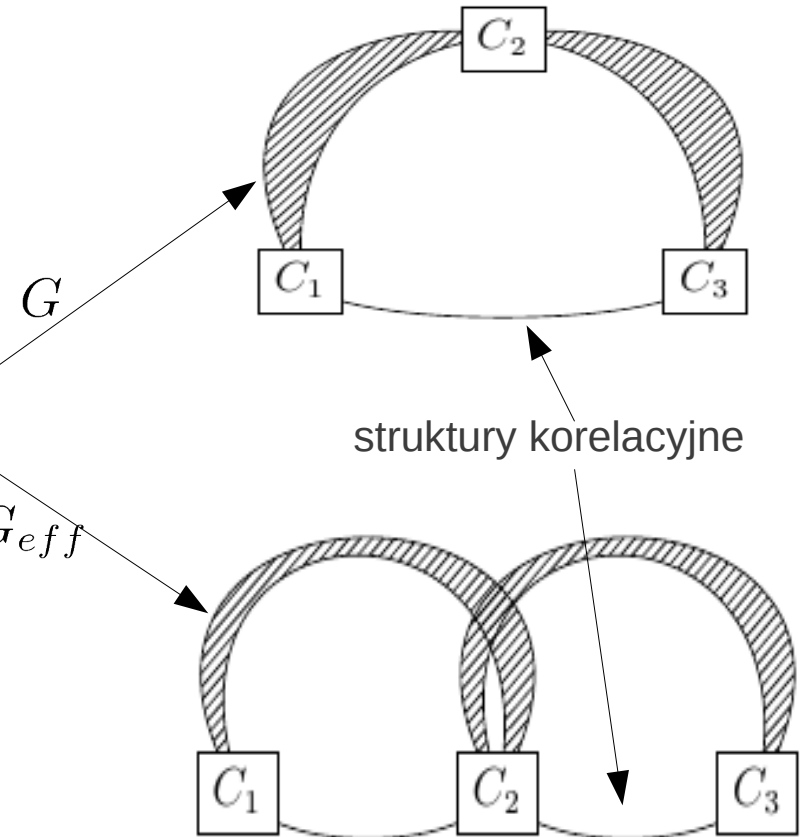
Gdy środkowa grupa oddala się od pozostałych:

$$b(C_1 | C_2 | C_3) \longrightarrow b(C_1 | C_3) b(C_2)$$

$$H(C_1 | C_2 | C_3) \longrightarrow 0$$

propagatory

G_{eff}



Powtarzające struktury T^{irr}

$$T^{irr} = T_{CM}^{irr} (1 - [hG] T_{CM}^{irr})^{-1}$$

Operator Clausiusa-Mossottiego

Przybliżenie Clausiusa-Mossottiego:

$$T_{CM}^{irr} \approx nM$$

$$T^{irr} = T_{RCM}^{irr} (1 - [hG_{eff}] T_{RCM}^{irr})^{-1}$$

Zrenormalizowany operator Clausiusa-Mossottiego

Uogólnione przybliżenie Clausiusa-Mossottiego:

$$T_{RCM}^{irr} \approx nB$$

Metoda przybliżona: w oparciu o przybliżone równanie na T_{RCM}^{irr}

Zrenormalizowany operator Clausiusa-Mossottiego

$$T_{RCM}^{irr} = \sum_{r=0}^{\infty} T_{RCM,r}^{irr},$$

$$T_{RCM,0}^{irr}(\mathbf{R}, \mathbf{R}') = \sum_{C_1} \int dC_1 n(C_1) S_I(C_1; \mathbf{R}, \mathbf{R}'),$$

$$T_{RCM,1}^{irr}(\mathbf{R}, \mathbf{R}') = \sum_{C_1, C_2} \int dC_1 dC_2 \int d^3\mathbf{R}_1 d^3\mathbf{R}_2 [H(C_1|C_2) - h(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2)] \times \\ \times n(C_1) S_I(C_1; \mathbf{R}, \mathbf{R}_1) G_{eff}(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) n(C_2) S_I(C_2; \mathbf{R}_2, \mathbf{R}'),$$

...

Przybliżenie jednopierścieniowe

Conajwyżej jeden pierścień w T_{RCM}^{irr}

Conajwyżej dwuciałowe oddziaływania w S_I

Przybliżenie Kirkwooda na trójciałową funkcję korelacji:

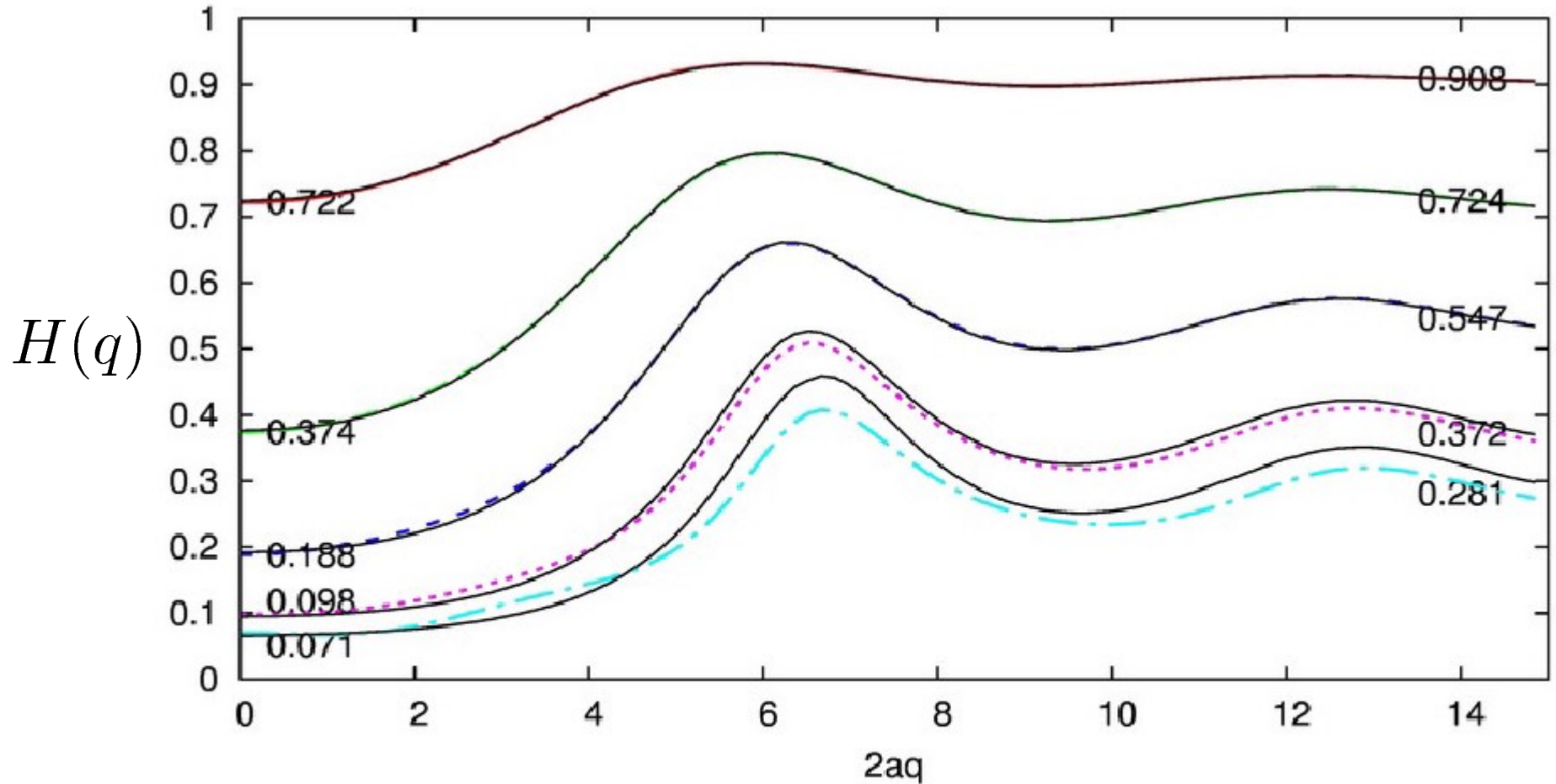
$$n(123) \approx n^3 g(12) g(13) g(23)$$

Renormalizacja oddziaływań dwuciałowych:

$$S_I(12) \rightarrow BS_I(12)B$$

$$T^{irr} = nB + BT^{irr}B$$

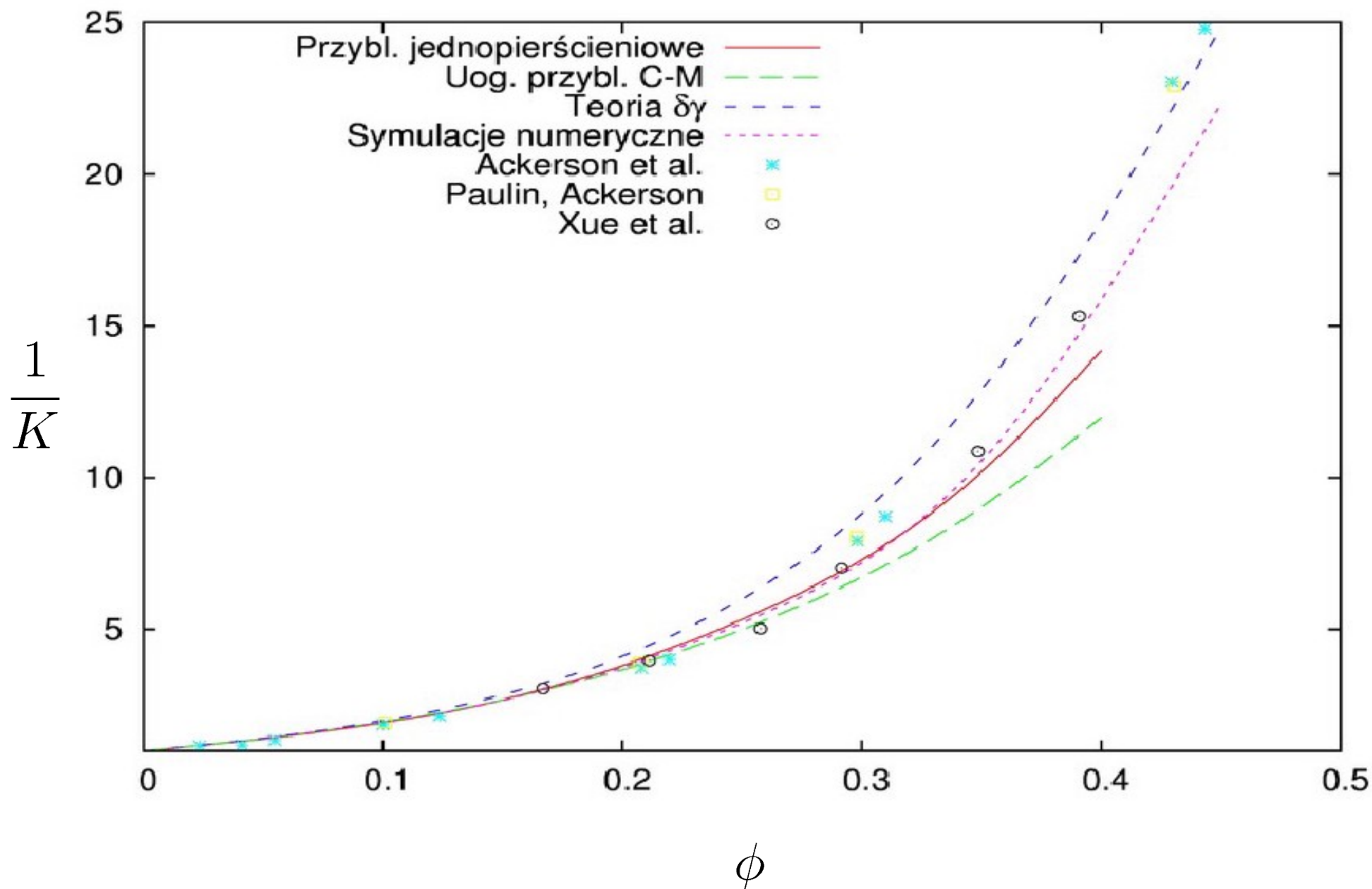
Czynnik hydrodynamiczny – przybliżenie jednopierścieniowe



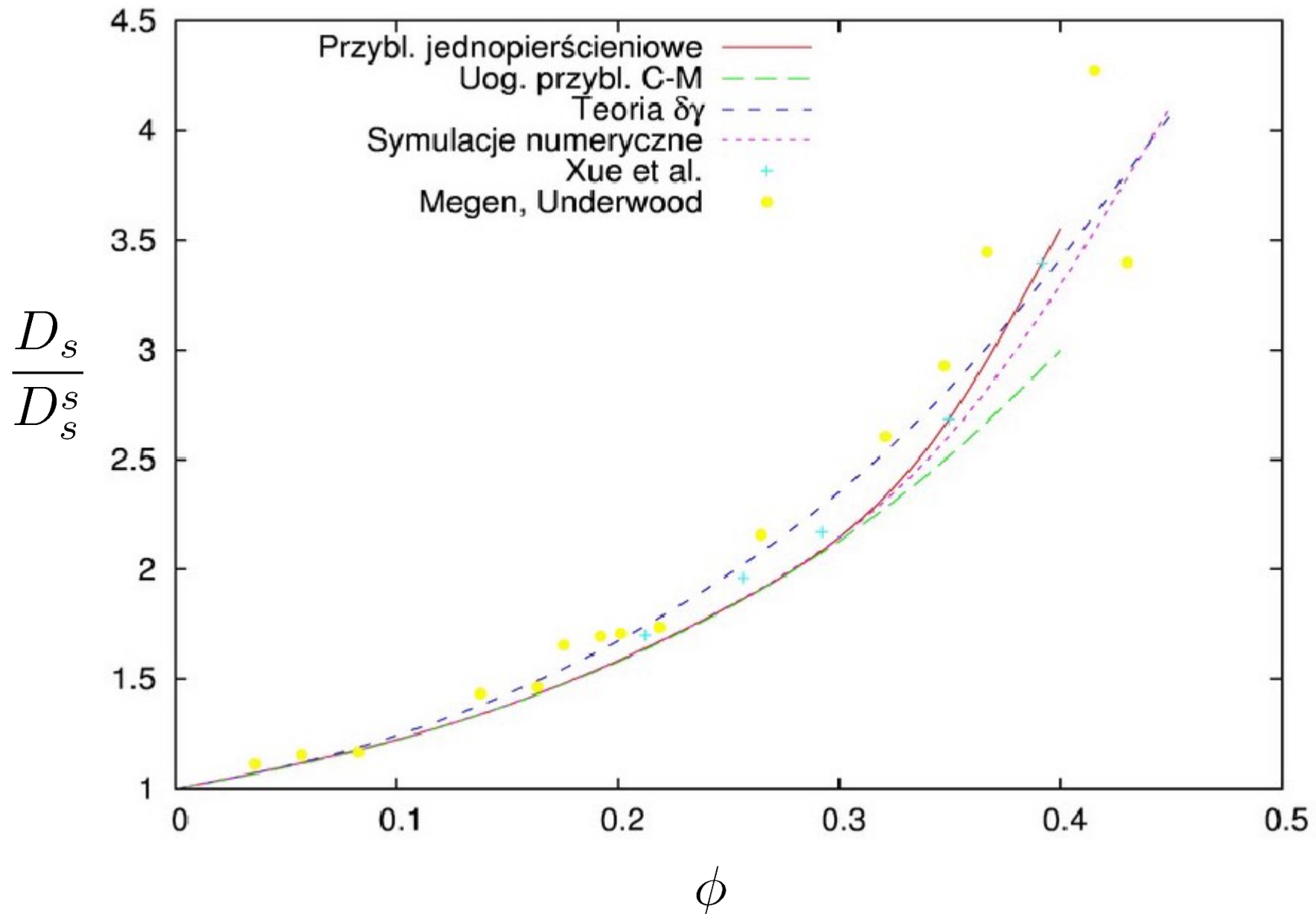
Jednopierścieniowe, $\phi=5\%$ ———
Jednopierścieniowe, $\phi=15\%$ - - -
Jednopierścieniowe, $\phi=25\%$ - · -
Jednopierścieniowe, $\phi=35\%$ ·····
Jednopierścieniowe, $\phi=40\%$ - · - ·

Symulacje, $\phi=5\%$ ———
Symulacje, $\phi=15\%$ ———
Symulacje, $\phi=25\%$ ———
Symulacje, $\phi=35\%$ ———
Symulacje, $\phi=40\%$ ———

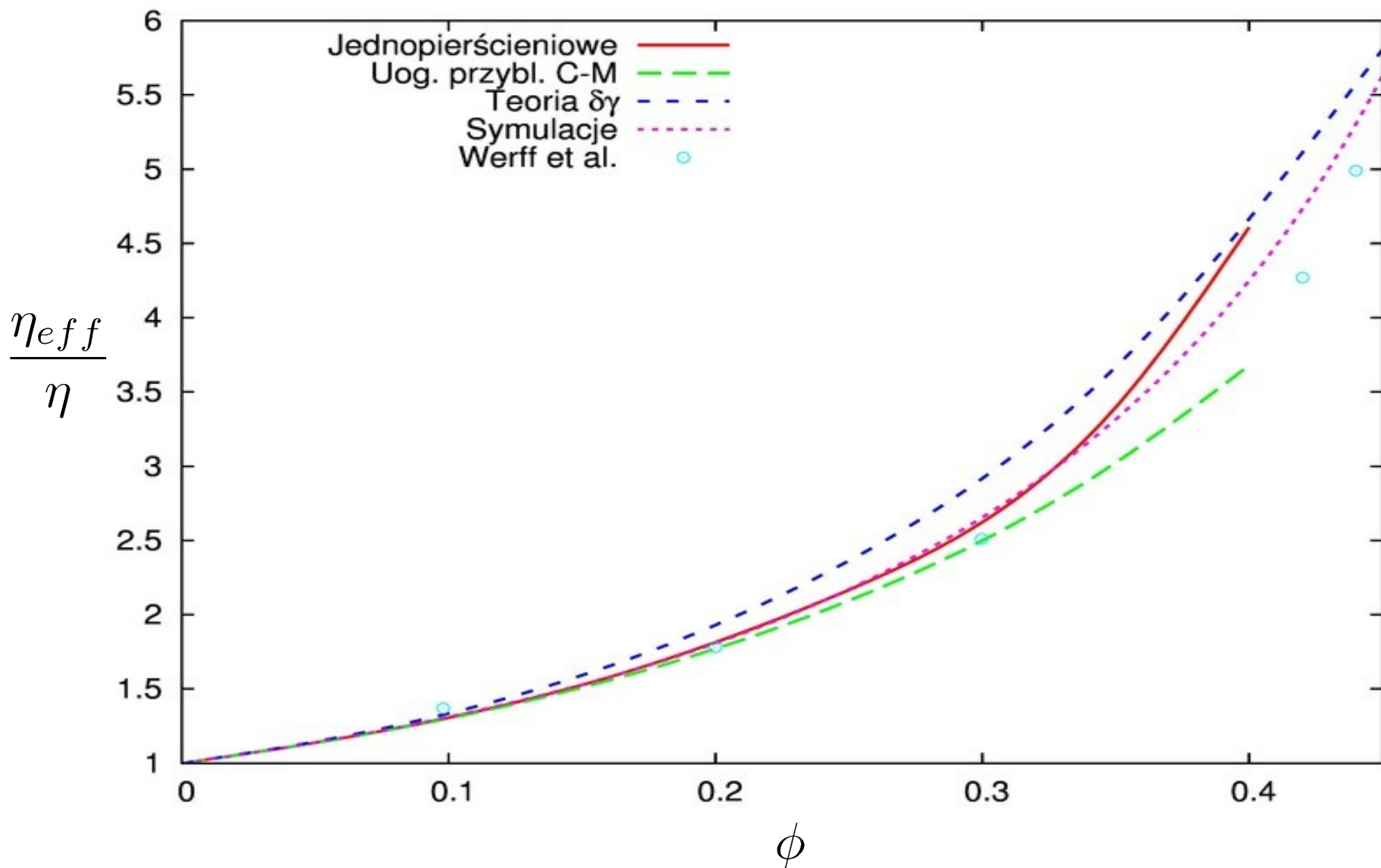
Odwrotność współczynnika sedymentacji $K = H(0)$



Odwrótność współczynnika samodyfuzji $D_s^s = H(\infty)$



Lepkość efektywna



Podsumowanie

- Wprowadzenie rozwinięcia pierścieniowego - renormalizacja propagatora.
- Sformułowanie na jego podstawie dwóch przybliżeń:
 - ♦ uogólnionego przybliżenia Clausiusa-Mossottiego,
 - ♦ przybliżenia jednopierścieniowegoi wyznaczenie na ich podstawie makroskopowych charakterystyk zawiesin.
- Wyznaczenie charakterystyk zawiesin w ramach teorii $\delta\gamma$ Beenakera-Mazura.
- Stworzenie programu komputerowego do rozwiązywania równań występujących w ramach powyższych przybliżeń.
- Możliwość zastosowania programu do innych układów (krople, sferyczne polimery)