Efektywny propagator dla układów z indukowanymi Âźródłami oddziaływań międzycząstkowych

Karol Makuch

Instytut Fizyki Teoretycznej
Uniwersytet Warszawski

styczeń 2006

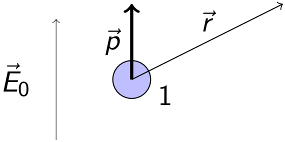
Indukowane Âźródła oddziaływań międzycząstkowych

$\vec{p}$ - moment dipolowy $\quad \alpha$-polaryzowalnoÂść

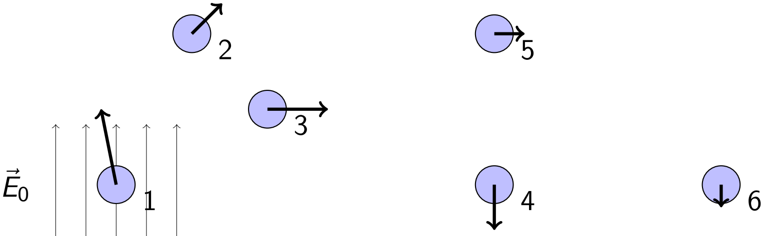
$$\vec{p} = \alpha \vec{E}_0$$

$\vec{E}(\vec{r})$ - pole elektryczne wytworzone przez dipol o momencie $\vec{p}$

$$\vec{E}(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{-1 + 3\hat{r}\hat{r}}{r^3} \vec{p}$$



$$\vec{p} = \alpha \vec{E}_0$$



$\vec{p}_1 = \alpha_{self} \vec{E}_0$ α_{self}-efektywna polaryzowalnoÂść

$\vec{\mathcal{P}} = \epsilon_0 \chi_e \vec{E}$ χ_e-podatnoÂść dielektryczna

$\epsilon = \epsilon_0(1 + \chi_e)$ ϵ - efektywna stała dielektryczna

Indukowane Âźródła oddziaływań międzycząstkowych

$s(\vec{r})$ - intensywnoÂść Âźródła

$$\vec{s}(\vec{r}) = \int \mathrm{d}\vec{r}'\, M(\vec{R}, \vec{r}, \vec{r}')\vec{\Psi}_0(\vec{r}')$$

$\Psi(\vec{r})$ - pole, wytworzone przez cząstkę o intensywnoÂści s

$$\vec{\Psi}(\vec{r}) = \int \mathrm{d}\vec{r}'\, G(\vec{r}, \vec{r}')\vec{s}(\vec{r}')$$

Zapis skrótowy:

$$\vec{s} = M(\vec{R})\vec{\Psi}_0$$

$$\vec{\Psi} = G\vec{s}$$

Jaka jest Âśrednia intensywnoÂść Âźródeł?

Transformata Âśredniej intensywnoÂści:

$$< \hat{s} > (\vec{k}) =< \sum_{i=1}^{N} \vec{s}_i e^{-i\vec{k}\vec{R}_i} >$$

IntensywnoÂść w zależnoÂści od pola zewnętrznego i efektywnego

$$< \hat{s} > (\vec{k}) = \hat{T}(\vec{k})\hat{\Psi}_0(\vec{k})$$

$$< \hat{s} > (\vec{k}) = \hat{X}(\vec{k}) < \hat{\Psi} > (\vec{k})$$

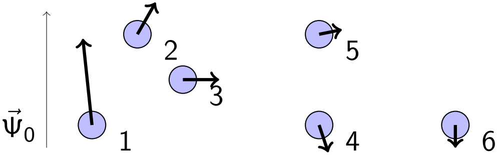
Związek operatorów T i X

$$\hat{X}(\vec{k}) = \hat{T}(\vec{k})(1 + \hat{G}(\vec{k})\hat{T}(\vec{k}))^{-1}$$

Operator T

Cząstka i znajduje się w:

1. zewnętrznym polu $\vec{\Psi}_{0i}$
2. polu pochodzącym od pozostałych cząstek $\sum_{j\neq i}^{N} G(ij)\vec{s}_j$



$$\vec{s}_i = M(i)\left(\vec{\Psi}_{0i} + \sum_{j\neq i}^{N} G(ij)\vec{s}_j\right)$$

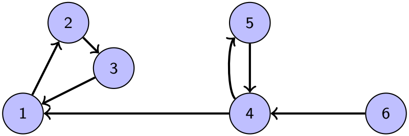
$$\vec{s}_i = M(i)\vec{\Psi}_{0i} + \sum_{j\neq i}^{N} M(i)G(ij)M(j)\vec{\Psi}_{0j} + \sum_{\substack{k\neq j\\ j\neq i}} M(i)G(ij)M(j)G(jk)M(k)\vec{s}_k$$

$$\vec{s}_i = \sum_{j=1}^{N} T_{ij} \vec{\Psi}_{0j}$$

$$T_{ij} = M(i)\delta_{ij} + \sum_{l=2}^{\infty} \sum_{[i_k]}^{l} M(i_1) \prod_{k=2}^{l} [G(i_{k-1} i_k) M(i_k)]$$

Przykładowa sekwencja:

$$M(1)G(12)M(2)G(23)M(3)G(31)M(1)G(14)$$
$$M(4)G(45)M(5)G(54)M(4)G(46)M(6)$$



$T^{(s)}$ - oznacza sekwencje zawierające dokładnie s cząstek.

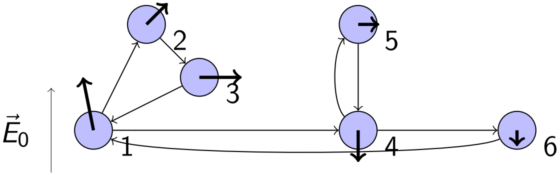
$$< \hat{s} > (\vec{k}) = \hat{T}(\vec{k}) \hat{\Psi}_0(\vec{k})$$

$$T(\vec{k}) = < \sum_{i,j} T_{ij} e^{-i\vec{k}\vec{R}_{ij}} >$$

$$\hat{T}(\vec{k}) = \hat{B} + \hat{A}(\vec{k})$$

WielkoÂści charakteryzujące jedną cząstkę

$$\hat{B} = \sum_{s=1}^{N} \int \mathrm{d}2 \ldots \mathrm{d}s \frac{1}{(s-1)!} n(1\ldots s)\, T_{11}^{(s)}(1\ldots s)$$



$$\vec{p}_1 = \alpha_{self} \vec{E}_0$$

$$\alpha_{self} = \frac{1}{3} \mathrm{Tr} \hat{B}$$

Operator X

Pole w dowolnym punkcie $\vec{R}$ wyraża się przez:

$$\vec{\Psi}(\vec{R}, 1, ..., N) = \vec{\Psi}_0(\vec{R}) + \sum_{i=1}^{N} G(\vec{R} - \vec{R}_i)\vec{s}_i(1, ...N)$$

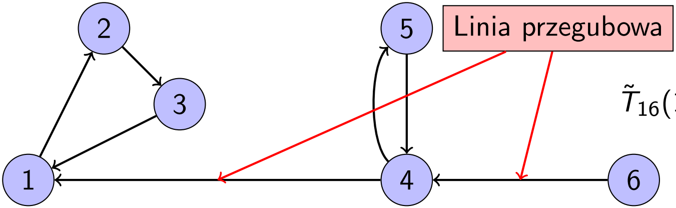
$\downarrow$ uÂśrednienie i transformata

$$< \hat{\Psi} > (\vec{k}) = \hat{\Psi}_0(\vec{k}) + \hat{G}(\vec{k})\hat{T}(\vec{k})\hat{\Psi}_0(k)$$

$\downarrow$ iteracja

$$\hat{\Psi}_0(\vec{k}) = (1 + \hat{G}(\vec{k})\hat{T}(\vec{k}))^{-1} < \hat{\Psi} > (\vec{k})$$

$$< \hat{s} > (\vec{k}) = \hat{X}(\vec{k}) < \hat{\Psi} > (\vec{k})$$
$$\hat{X}(\vec{k}) = \hat{T}(\vec{k})(1 + \hat{G}(\vec{k})\hat{T}(\vec{k}))^{-1}$$



$$\tilde{T}_{16}(123|45|6)$$

$$M(1)G(12)M(2)G(23)M(3)G(31)M(1)\textcolor{red}{G(14)}$$
$$M(4)G(45)M(5)G(54)M(4)\textcolor{red}{G(46)}M(6)$$

$$\boxed{C_1 = 123} \leftarrow \boxed{C_2 = 45} \leftarrow \boxed{C_3 = 6}$$

$$T_{12}^{(s)}(1 \ldots s) = \sum_{k=1}^{s} \sum_{C_1 \ldots C_k} \tilde{T}_{12}(C_1|\ldots|C_k)$$

$$\hat{T}(\vec{k}) = \hat{B} + A(\vec{k})$$

$$\hat{A}(\vec{k}) = \sum_{s=2}^{N} \int \mathrm{d}2 \ldots \mathrm{d}s \frac{1}{(s-2)!} n(1 \ldots s)\, T_{12}^{(s)}(1 \ldots s) e^{-i\vec{k}\vec{R}_{12}}$$

$$\frac{n(1 \ldots s)}{n(1) \ldots n(s)} = \prod_{i=1}^{s} \prod_{C_i} (1 + h(C_i)) \qquad \sum_{k=1}^{s} \sum_{C_1 \ldots C_k} \tilde{T}_{12}^{(s)}(C_1 | \ldots | C_k)$$

$$H \quad \tilde{T}_{12}(C_1 | \ldots | C_k)$$

Dla $s = 2$:

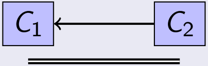
$$n(12) = n(1) n(2) (1 + h(12))$$

$$T_{12}(12) = \tilde{T}_{12}(1|2) + \tilde{T}_{12}(12)$$

$$n(12)\, T_{12}(12) = \\ n(1) n(2) [\tilde{T}_{12}(1|2) + \tilde{T}_{12}(12) + h(12)\, \tilde{T}_{12}(1|2) + h(12)\, \tilde{T}_{12}(12)]$$

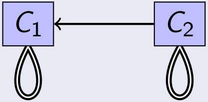
Dla dwóch grup cząstek C_1, C_2

$$n(C_1 C_2)\,\tilde{T}_{12}(C_1|C_2) =$$



$$b(C_1|C_2)\,\tilde{T}_{12}(C_1|C_2)$$

$$+$$

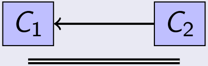


$$(n(C_1 C_2) - b(C_1|C_2))\,\tilde{T}_{12}(C_1|C_2)$$

redukowalny

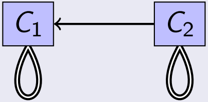
Dla dwóch grup cząstek C_1, C_2

$$n(C_1 C_2)\,\tilde{T}_{12}(C_1|C_2) =$$

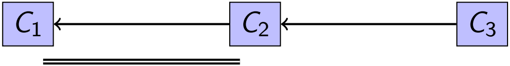


$$b(C_1|C_2)\,\tilde{T}_{12}(C_1|C_2)$$

$$+$$



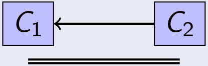
$$(n(C_1 C_2) - b(C_1|C_2))\,\tilde{T}_{12}(C_1|C_2)$$



redukowalny

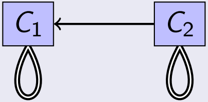
Dla dwóch grup cząstek C_1, C_2

$$n(C_1 C_2)\,\tilde{T}_{12}(C_1|C_2) =$$

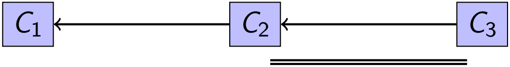


$$b(C_1|C_2)\,\tilde{T}_{12}(C_1|C_2)$$

$$+$$



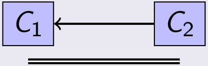
$$(n(C_1 C_2) - b(C_1|C_2))\,\tilde{T}_{12}(C_1|C_2)$$



redukowalny

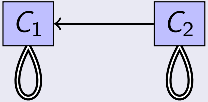
Dla dwóch grup cząstek C_1, C_2

$$n(C_1 C_2)\,\tilde{T}_{12}(C_1|C_2) =$$

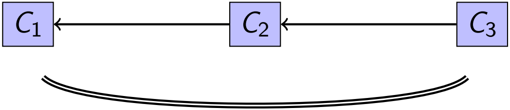


$$b(C_1|C_2)\,\tilde{T}_{12}(C_1|C_2)$$

$$+$$



$$(n(C_1 C_2) - b(C_1|C_2))\,\tilde{T}_{12}(C_1|C_2)$$



nieredukowalny

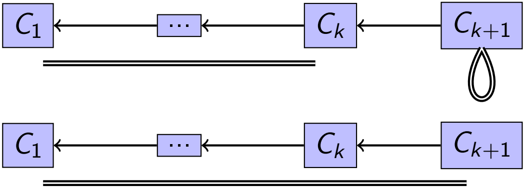
Nieredukowalność

$b(C_1|C_2|\dots|C_k)$-oznacza wszystkie wyrazy w $n(C_1 C_2 \dots C_k)$, takie, że

$$b(C_1|C_2|\dots|C_k)\tilde{T}_{12}(C_1|C_2|\dots|C_k)$$

są nieredukowalne.

$$b(C_1|...|C_k C_{k+1}) = b(C_1|...|C_k|C_{k+1}) + b(C_1|...|C_k)b(C_{k+1})$$



$b(C_1|...|C_k)b(C_{k+1})$

$b(C_1|...|C_k|C_{k+1})$

Operator X

$$[n(1\ldots s)\,T_{12}(1\ldots s)]^{irr} = \sum_{k=1}^{s} \sum_{C_1\ldots C_k} b(C_1|\ldots|C_k)\,\tilde{T}_{12}(C_1|\ldots|C_k)$$

$$\hat{X}(\vec{k}) = \underbrace{\sum_{s=1}^{\infty} \frac{1}{(s-1)!} \int \mathrm{d}2\ldots\mathrm{d}s\ n(1\ldots s)\,T_{11}^{(s)}(1\ldots s)}_{\hat{B}=\hat{X}_{self}} + \underbrace{\sum_{s=2}^{\infty} \frac{1}{(s-2)!} \int \mathrm{d}3\ldots\mathrm{d}s\ [n(1\ldots s)\,T_{12}^{(s)}(1\ldots s)]^{irr} e^{-i\vec{k}\vec{R}_{12}}}_{\hat{X}_0(\vec{k})}$$

$\vec{p}$ - moment dipolowy α-polaryzowalnoÂść

$$\vec{p} = \alpha \vec{E}_0$$

$E(\vec{r})$ - pole elektryczne wytworzone przez dipol o momencie $\vec{p}$

$$\vec{E}(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{-1 + 3\hat{r}\hat{r}}{r^3} \vec{p}$$

$\epsilon_{eff} = \epsilon_0 + \frac{4\pi}{3} Tr(\hat{B} + \hat{X}_0(\vec{k} = 0))$

Zawiesiny

$\vec{v}(\vec{r})$-pole prędkoÂści zawiesiny
$\vec{f}(\vec{r})$-gęstoÂść sił na powierzchni cząstki
$G(\vec{r}) = \frac{1}{8\pi\eta r}(1 + \hat{r}\hat{r})$-tensor Ossena

$$\vec{f}(\vec{r}) = \int \mathrm{d}\vec{r}' \mathcal{Z}(\vec{r}, \vec{r}')\vec{v}(\vec{r}')$$

$$\vec{v}(\vec{r}) = \int \mathrm{d}\vec{r}' G(\vec{r} - \vec{r}')\vec{f}(\vec{r}')$$

WspóÂłczynniki transportu (sedymentacji, lepkoÂści efektywnej, dyfuzji kolektywnej) wyrażają się przez diagramy nieredukowalne $\hat{X}(\vec{k} = 0)$.

ÂŚcisłe związki

Związek operatorów T i X

$$\hat{T}(\vec{k}) = \hat{X}(\vec{k})(1 - \hat{G}(\vec{k})\hat{X}(\vec{k}))^{-1}$$

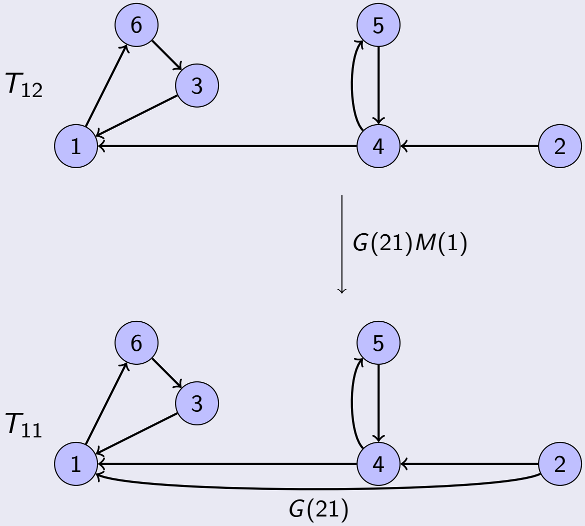
$$T = X(1 - GX)^{-1} = X + XGX(1 - GX)^{-1}$$

$$X = X_0 + B \Bigg\downarrow T = B + A$$

Związek I

$$A = \underbrace{X_0}_{\textit{nieredukowalne}} + \underbrace{XGX(1 - GX)^{-1}}_{\textit{redukowalne}}$$

ZnajomoÂść T_{12} pozwala na wyznaczenie T_{11}



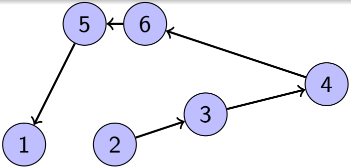
$$\hat{B} = \sum_{s=1}^{\infty} \frac{1}{(s-1)!} \int \mathrm{d}2 \ldots \mathrm{d}s \; n(1 \ldots s) T_{11}^{(s)}(1 \ldots s)$$

$$T_{11}^{(s)}(1 \ldots s) = \sum_{i=2}^{s} T_{1i}^{(s)}(1 \ldots s) G(i1) M(1)$$

$$\hat{B} = nM + \sum_{s=2}^{\infty} \int \mathrm{d}2 \ldots \mathrm{d}s \frac{1}{(s-1)!} (s-1) T_{12}^{(s)}(1 \ldots s) n(1 \ldots s) G(21) M(1)$$

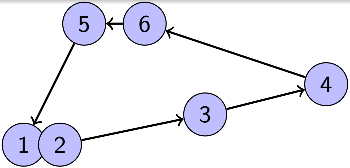
Związek II

$$B = nM + \int \mathrm{d}\vec{R}_{12} A(\vec{R}_{12}) G(\vec{R}_{21}) M$$



$R_{21} > 2a$ -pierwsza i ostatnia cząstka nieprzekrywają się

nonoverlap



$R_{21} < 2a$ -pierwsza i ostatnia cząstka przekrywają się

overlap

Cząstki nie mogą się przekrywać w pełnej Âśredniej

$$\downarrow$$

$$f(\vec{R}_{12})A(\vec{R}_{12}) = 0$$

$$1 - W(R) = -f(\vec{R}) = \begin{cases} 0 & R > 2a \\ 1 & R < 2a \end{cases}$$

$$A(\vec{R}_{21}) = \sum_{s=2}^{N} \int \mathrm{d}3\ldots\mathrm{d}s \frac{1}{(s-2)!} n(1\ldots s) T_{12}^{(s)}(1\ldots s)$$

$$A = X_{ov} + X_{nov} + XGX(1 - GX)^{-1}$$

$$X = B + X_{ov} + X_{nov}$$

$$\hat{X}_{ov}(\vec{k}) = \sum_{s=2}^{\infty} \frac{1}{(s-2)!} \int \mathrm{d}2 \ldots \mathrm{d}s \, [n(1 \ldots s)\, T_{12}(1 \ldots s)]^{irr} \, e^{-i\vec{k}\vec{R}_{12}} (-f(\vec{R}_{12}))$$

$$\hat{X}_{nov}(\vec{k}) = \sum_{s=2}^{\infty} \frac{1}{(s-2)!} \int \mathrm{d}2 \ldots \mathrm{d}s \, [n(1 \ldots s)\, T_{12}(1 \ldots s)]^{irr} \, e^{-i\vec{k}\vec{R}_{12}} W(\vec{R}_{12})$$

Związek III

$$X_{ov}(\vec{R}) = \left[XGX(1 - GX)^{-1}\right](\vec{R}) f(\vec{R})$$

$$T(\vec{R}) = B(\vec{R}) + A(\vec{R})$$
$$X(\vec{R}) = B(\vec{R}) + X_{ov}(\vec{R}) + X_{nov}(\vec{R})$$

ÂŚcisłe związki w przestrzeni położeniowej

I: $$B(\vec{R}) = nM(\vec{R}) + \int \mathrm{d}\vec{R} A(\vec{R}) G(-\vec{R}) M$$

II: $$A(\vec{R}) = X_{ov}(\vec{R}) + X_{nov}(\vec{R}) + \left[XGX(1 - GX)^{-1}\right](\vec{R})$$

III: $$X_{ov}(\vec{R}) = \left[XGX(1 - GX)^{-1}\right](\vec{R}) f(\vec{R})$$

- wspóÂłczynniki transportu wyrażają się przez $\hat{B}$ i $X_0(\vec{k}=0)$
- $\hat{X}_{nov}(\vec{k})$ pozwala na wyznaczenie $\hat{B}$ i $X_0(\vec{k})$

$$\downarrow$$

Proste przybliżenie na $\hat{X}_{nov}(\vec{k})$ oznacza bogatą klasę diagramów

$$\downarrow$$

Przybliżona metoda wyznaczania wspóÂłczynników transportu