

# Współczynniki transportu zawiesin - - metoda Beenakera

Karol Makuch

Instytut Fizyki Teoretycznej  
Uniwersytet Warszawski

czerwiec 2007

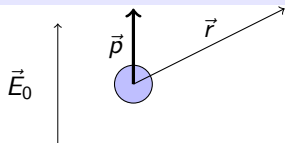
# Dielektryk złożony z polaryzowalnych cząstek

$\vec{p}$  - moment dipolowy     $\alpha$ -polaryzowalność

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

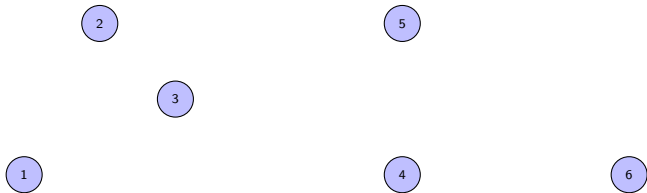
$\vec{E}(\vec{r})$  - pole elektryczne wytworzone przez dipol o momencie  $\vec{p}$

$$\vec{E}(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{-1 + 3\hat{r}\hat{r}}{r^3} \vec{p} = G(\vec{r})\vec{p}$$

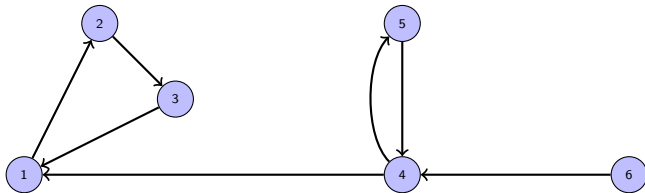


$$\vec{p} = \alpha \vec{E}_0$$

Jaka jest stała dielektryczna?



$$\vec{p}_i = \alpha \left( \vec{E}_0 + \underbrace{\sum_{i \neq j} G(\vec{R}_i - \vec{R}_j) \vec{p}_j}_{\text{pole od pozostałych cząstek}} \right)$$



$$\vec{p}_i = \alpha \left( \vec{E}_0 + \underbrace{\sum_{i \neq j} G(\vec{R}_i - \vec{R}_j) \vec{p}_j}_{\text{pole od pozostałych cząstek}} \right)$$

iteracja



Wielociałowe oddziaływania: przykładowa sekwencja

$$\alpha G(12) \alpha G(23) \alpha G(31) \alpha G(14) \alpha G(45) \alpha G(54) \alpha G(46) \alpha$$

Rozwinięcie wirialne funkcji Clausiusa-Mossottiego:

$$\frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 2} = \frac{\rho\alpha}{3\epsilon_0} \left( 1 + \underbrace{\sum_{n=2}^{\infty} a_n \left( \frac{\rho\alpha}{3\epsilon_0} \right)^n}_C \right)$$

Mazur, Bedeaux -

Ścisłe wyrażenia na operator  $\hat{C}$  (fluktuacje gęstości)

$$\hat{C} = \rho^{-1} \langle \delta n \hat{U} (1 - \Delta \alpha \delta n \hat{U})^{-1} \alpha \delta n \rangle$$

$$\hat{U} = \hat{G} (1 - \alpha \rho \hat{G})^{-1}$$

$\rho$  - gęstość cząstek,

$$\Delta g = g - \langle g \rangle,$$

$\delta n = n(\vec{r}) - \rho$  - fluktuacje gęstości.

$$\text{Operator } \hat{U} = G(1 - \alpha\rho G)^{-1}$$

$$\hat{U} = \text{---} + \text{---} + \text{---} + \dots$$

$\hat{U}$  zawiera wielociałowe oddziaływania.

Oznaczenie:

$$\hat{U}(\vec{r} - \vec{r}') = \overset{\curvearrowright}{\vec{r} \quad \vec{r}'}$$

Mazur, Bedeaux -

Ścisłe wyrażenia na operator  $\hat{C}$  (fluktuacje gęstości)

$$\hat{C} = \rho^{-1} \langle \delta n \hat{U} (1 - \Delta \alpha \delta n \hat{U})^{-1} \alpha \delta n \rangle$$

Przybliżenie (Mazur - Bedeaux):

$$\hat{C} \approx \rho^{-1} \langle \delta n \hat{U} \alpha \delta n \rangle$$

$$\langle \delta n(\vec{r}) \delta n(\vec{r}') \rangle = \underbrace{h(\vec{r}, \vec{r}')}_{\text{dwucząstkowa f. korelacji}} + \underbrace{\rho \delta(\vec{r} - \vec{r}')}_{\text{samokorelacje}}$$

$$\hat{C} = \begin{array}{c} \vec{r} \quad \quad \quad \vec{r}' \\ \curvearrowright \\ h(\vec{r}, \vec{r}') \end{array} + \begin{array}{c} \text{loop} \\ \rho \delta(\vec{r} - \vec{r}') \end{array}$$

# Efektywna polaryzowalność - Mazur, Bedeaux

Mazur - Bedeaux:


$$\alpha_{self} = \alpha + \frac{1}{3} \text{Tr} \alpha^2 \langle G(1 - n\alpha G)^{-1} \rangle (\vec{r} = 0)$$

Rozwinięcie we fluktuacjach

$$\langle G(1 - n\alpha G)^{-1} \rangle = \langle U(1 - \delta n\alpha U)^{-1} \rangle$$

Efektywny propagator:  $U = G(1 - \rho\alpha G)^{-1}$

Przybliżenie:

$$\alpha_{self} \approx \alpha + \frac{1}{3} \text{Tr} \alpha^2 U = \alpha +$$





## Wyższe wyrazy rozwinięcia we fluktuacjach

Fluktuacje gęstości:  $\delta n(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N \delta(\vec{r} - \vec{R}_i) - \rho$

$$\langle \delta n(\vec{r}_1) \delta n(\vec{r}_2) \delta n(\vec{r}_3) \rangle = \sum_{i=k=j=1}^N \delta(\vec{r}_1 - \vec{R}_i) \delta(\vec{r}_2 - \vec{R}_k) \delta(\vec{r}_3 - \vec{R}_j) + \dots$$

$$\langle \delta n \hat{U} \delta n \hat{U} \delta n \rangle = \text{diagram} + \dots$$
A diagram consisting of two overlapping loops, resembling a figure-eight or a pair of wings, drawn with simple black lines.

$$\langle \delta n \hat{U} \delta n \hat{U} \dots \hat{U} \delta n \rangle \ni \text{diagram}$$
A diagram showing a complex multi-loop structure. It features a large bottom loop with several smaller loops branching off from its top edge, resembling a stylized tree or a complex knot.

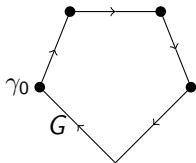
# Efektywna polaryzowalność - Beenakker

$$\alpha_{self} = \alpha + \frac{1}{3} \text{Tr} \alpha^2 \langle G_{\gamma_0} (1 - \delta\gamma \alpha \hat{G}_{\gamma_0})^{-1} \frac{\gamma}{n} \rangle (\vec{r} = 0)$$

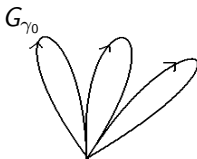
$$\begin{cases} \delta\gamma = \gamma - \gamma_0 \\ G_{\gamma_0} = G(1 - \gamma_0 \alpha G)^{-1} \end{cases}$$

$$\begin{aligned} \gamma &= n(1 - \alpha G_{\gamma_0}(\vec{r} = 0))^{-1} \\ \gamma_0 &= n_0(1 - \alpha G_{\gamma_0}(\vec{r} = 0))^{-1} \end{aligned}$$

$G_{\gamma_0} \sim$



$\gamma_0 \sim$



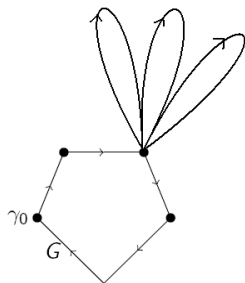
# Efektywna polaryzowalność - Beenakker

$$\alpha_{self} = \alpha + \frac{1}{3} \text{Tr} \alpha^2 \langle G_{\gamma_0} (1 - \delta\gamma \alpha \hat{G}_{\gamma_0})^{-1} \frac{\gamma}{n} \rangle (\vec{r} = 0)$$

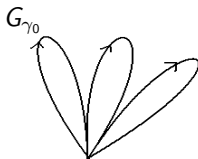
$$\begin{cases} \delta\gamma = \gamma - \gamma_0 \\ G_{\gamma_0} = G(1 - \gamma_0 \alpha G)^{-1} \end{cases}$$

$$\begin{aligned} \gamma &= n(1 - \alpha G_{\gamma_0}(\vec{r} = 0))^{-1} \\ \gamma_0 &= n_0(1 - \alpha G_{\gamma_0}(\vec{r} = 0))^{-1} \end{aligned}$$

$G_{\gamma_0} \sim$

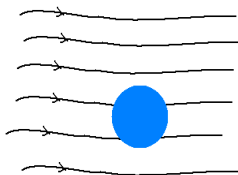


$\gamma_0 \sim$



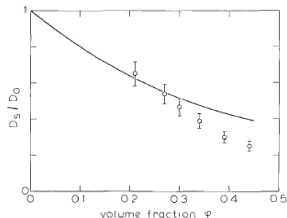
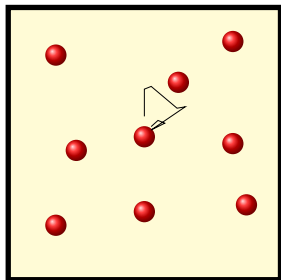
# Zawiesiny

Dielektryki	Zawiesiny
moment dipolowy $\vec{p}$	powierzchniowa gęstość sił $\vec{f}$
pole elektryczne $\vec{E}$	pole prędkości zawiesiny $\vec{v}$
polaryzowalność $\alpha$	jednocząstkowy operator oporu $M : \vec{v} \rightarrow \vec{f}$
$G$ (pole wokół dipola)	tensor Oseena $G : \vec{f} \rightarrow \vec{v}$



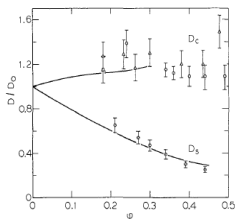
# Współczynnik samodyfuzji

Według metody Mazura - Bedeaux (bez wysumowanych samokorelacji).



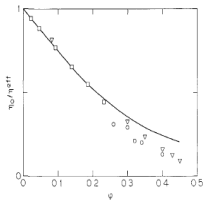
**Rysunek:** Zależność krótkoczasowego współczynnika samodyfuzji od koncentracji cząstek (P N Pusey and W van Meegen, J de Phys 44 (1983) 285)

# Współczynnik samodyfuzji i dyfuzji kolektywnej - metoda Beenakkera.



**Rysunek:** Współczynniki samodyfuzji  $D_s/D_0$  i dyfuzji kolektywnej  $D_c/D_0$  w funkcji koncentracji  $\phi$ . Krzywe ciągłe - wyniki Beenakkera. Wyniki eksperymentalne dla  $D_s$  (P.N. Pusey and W. van Megen); dla  $D_c$ , kropki: M.M.Kops-Werkhoven i H.M.Fijnaut; trójkąty: D.J.Cebula, R.H. Ottweill, J. Ralston oraz P.N.Pusey

# Lepkość efektywna



**Rysunek:** Zależność  $\eta_0/\eta_{eff}$  w funkcji koncentracji. Dane eksperymentalne: F.L.Saunders (kwadraty), I.M.Kneger i M.M. Knops-Werkhoven, H.M.Fijnaut (okręgi)

# Podsumowanie

- ▶ Mazur, Bedeaux - rozwinięcie we fluktuacjach gęstości.
- ▶ Beenakker - przesumowanie samokorelacji.
- ▶ Zgodność z doświadczeniem do 30-40% koncentracji zawiesiny.