

2 Modell

Für die Untersuchungen der Kollisionskühlung ungeladener granularer Materie wird meistens ein dissipatives Harte-Kugel Gas verwendet. Wir werden dieses einfache Modell erweitern, indem wir geladene harte Kugeln betrachten, deren Stöße dissipativ sind. Das so vorgestellte Modell folgt damit den in der Einleitung skizzierten Ideen.

2.1 Definition

Das Modellsystem bestehe aus N gleichartigen Kugeln, welche jeweils eine Masse m und dieselbe Ladung q besitzen. Die Teilchen sollen den Durchmesser d haben und befinden sich in einem Volumen der Dimension $V = L^3$ (Abb. 2.1).

Wir modellieren den Einfluss der Elektrizität durch eine Punktladung q , welche im Mittelpunkt der Kugeln fixiert ist. Die Teilchen wechselwirken dann über das Coulombpotential:

$$\Phi_{ij} = q^2/r_{ij} \quad , \quad (2.1)$$

r_{ij} ist der Abstand der Mittelpunkte¹. Wir fordern, dass die Teilchen nicht polarisiert werden können und dass kein Ladungsübertrag beim Kontakt stattfindet, d.h. die elektrischen Eigenschaften bestehen allein aus der Wechselwirkung der Punktladungen im Inneren der Teilchen². Teilchengeschwindigkeiten in granularen Gasen sind gering gegen die Lichtgeschwindigkeit, weswegen wir relativistische Effekte (wie Retardation und magnetische Felder) vernachlässigen können.

Da wir nur abstoßende Wechselwirkungen betrachten, würde unser System unaufhaltsam expandieren. So verhalten sich alle Systeme ohne starke anziehende Wechselwirkungen, wie z.B. auch das Harte-Kugel Gas oder das ideale Gas (bei

¹Die obige Darstellung des Coulombpotentials ist im *cgs* System und ist richtigerweise wegen des quadratischen Erscheinens der Ladung eine Energie. Diese Notation geschieht nur, um die Schreibweise zu erleichtern.

²Die durch Ladungen bewirkte Wechselwirkung lässt sich für Metalle nur näherungsweise durch Punktladungen beschreiben. Tatsächlich bilden sich durch die Anwesenheit von äußeren Ladungen bei Metallteilchen Bildladungen, die eine Abweichung vom Punktladungspotential (2.1) bewirken [86].

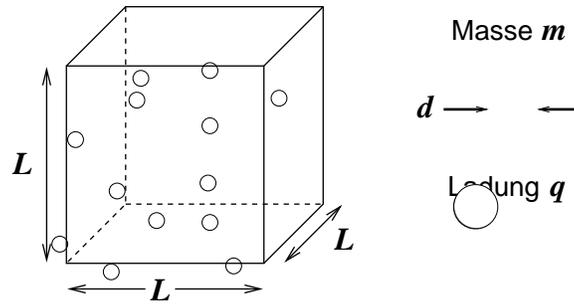


Abbildung 2.1: N granulare Teilchen befinden sich in einer periodischen Box des Volumens $V = L^3$. Die Teilchen haben alle dieselben physikalischen Eigenschaften, gegeben durch die Masse m , den Durchmesser d und die Ladung q .

endlicher Temperatur). Um das System auf ein bestimmtes Volumen V zu beschränken, werden also Systemränder benötigt. Reale Ränder (wie z.B. starre Wände) üben in ihrer Nähe starke Randeffekte aus und das System zeigt dort nicht dieselben Eigenschaften wie weiter im Inneren. Damit diese Randeffekte unterdrückt werden, benutzen wir *periodische Randbedingungen*: Die abgebildete Basiszelle wird mit allen in ihr enthaltenen Teilchen unendlich oft als exakte Kopie fortgesetzt in allen drei Raumrichtungen. Sollte ein Teilchen die Basiszelle in einer Richtung verlassen, so wird statt dessen nun das periodische Bild betrachtet, das durch dieselbe Bewegung die Basiszelle in der entgegengesetzten Ecke betreten hat.

Periodische Randbedingungen sind die einzigen, welche die Betrachtung eines homogenen monopolar geladenen Systems ermöglichen. Später (Kapitel 7) werden wir auch andere Randbedingungen betrachten, die eine inhomogene Dichteverteilung bewirken. Die am periodischen System gefundenen Beziehungen für die Kollisionskühlung lassen sich dann lokal auf das inhomogene System übertragen.

Die Teilchenstöße seien dissipativ, d.h. ein Teil der kinetischen Energie der Relativbewegung wird beim Stoß unwiderbringlich für das System verloren. Die Größe des Energieverlustes wird bestimmt durch den Restitutionskoeffizienten e_n , Gl. (1.1). Der Restitutionskoeffizient sei ein konstanter Materialparameter, unabhängig von der Aufprallgeschwindigkeit, mit $e_n \in [0, 1]$. Die Stöße sollen instantan stattfinden.

Wir betrachten ein reines Harte-Kugel System mit elektrischer Ladung. Das heißt, der Rotationsfreiheitsgrad wird unterdrückt. Dementsprechend macht unser Modell keine Aussage über Tangentialkräfte beim Stoß und ein tangentialer Restitutionskoeffizient ist nicht definiert. Die Einbeziehung tangentialer Kräfte wäre weniger ein Problem für die Computersimulation (Schäfer, Dippel und Wolf [90] geben eine Übersicht zu diesem Thema), sondern dies würde vielmehr die ana-

lytische Betrachtung erschweren und den Blick auf die neue Physik unnötig verstellen.

Das Modell beschreibt ein monopolar geladenes granulares Gas. Die Ladungsverteilung ist singular (alle Teilchen tragen denselben Ladungsbetrag), was der in der Einleitung erwähnten experimentellen Beobachtung [72] entspricht, dass die Oberflächenladungsdichte eines geladenen granularen System annähernd konstant ist und wir Teilchen gleichgroßer Oberfläche annehmen. In Kapitel 6.2 wird dann die Untersuchung auf nicht singuläre monopolare Ladungsverteilungen erweitert werden.

2.2 Größen

An dieser Stelle sollen einige Größen definiert werden, die im Weiteren häufig benutzt werden.

Die in der Einleitung definierte granulare Temperatur, Gl. (1.2), gibt ein Maß für die kinetische Energie des Systems (im Schwerpunktsystem): $E_{\text{kin}} = \frac{3}{2} N m T$. Eine weitere charakteristische Energie, ist die Coulombenergie zweier Teilchen im Kontaktabstand:

$$E_q = \frac{q^2}{d} \quad . \quad (2.2)$$

Das Verhältnis der beiden Energieskalen zueinander wird das Verhalten des granularen Systems bestimmen: Für hohe Temperaturen, $m T \gg E_q$, wird die Kinetik das System bestimmen und die Ladung wird keine Rolle mehr spielen. Für diesen Grenzfall muss die Dynamik der des ungeladenen granularen Systems entsprechen. Niedrige Temperaturen hingegen, $m T \approx E_q$, werden eine andere Physik liefern.

Weiterhin werden wir noch zwei Maße für die Dichte des Systems benutzen: Einmal definieren wir die *Anzahldichte* als

$$n = N/V \quad (2.3)$$

und die *Packungsdichte*

$$\nu = \frac{\pi}{6} n d^3 \quad , \quad (2.4)$$

welche das Verhältnis des Anteils des durch die Teilchen eingenommen Volumens zu dem Gesamtvolumen ausdrückt. Die Packungsdichte nimmt Werte zwischen 0 und 0.74 (*Dichteste Kugelpackung*) an, während die Anzahldichte unbegrenzt ist.

Neben dem Teilchendurchmesser gibt der *Ionen-Sphären Radius* ein zweites Längenmaß an:

$$a = \left(\frac{3V}{4\pi N} \right)^{1/3} \quad . \quad (2.5)$$

Das ist der Radius der N Kugeln, deren Volumen addiert V ausfüllen würde.

Mit dieser Größe lässt sich eine neue typische elektrostatische Energie definieren, q^2/a , wir nehmen diese aber nur als Teil einer abgeleiteten Größe, der sogenannten *Kopplung*

$$\Gamma = \frac{2q^2/a}{3mT} \quad , \quad (2.6)$$

welches das Verhältnis der typischen kinetischen Energie zur typischen elektrostatischen Energie des Systems angibt. Sowohl die Kopplung Γ als auch der Ionen-Sphären-Radius a sind wichtige Größen der Plasmaphysik und kommen aus der Literatur zum *One Component Plasma* (siehe Kapitel 3.2.2).

2.3 Elektrostatische Energie und Kraft im periodischen System

2.3.1 Elektrostatische Energie

Die Definition einer elektrostatischen Energie ist unmöglich für das periodische System. Dies liegt daran, dass alle Teilchen gleich geladen sind und wir keine Gegenladung im System annehmen. Summiert man alle einzelnen elektrostatischen Energien³ auf, so erhält man:

$$U_\infty = \frac{q^2}{2} \sum_{\mathbf{n}'} \sum_{i,j}^N \frac{1}{|\mathbf{r}_{ij} + \mathbf{n}|} \quad . \quad (2.7)$$

Die Summation läuft über alle periodischen Bilder $\mathbf{n} = (lL, mL, nL)$ und in der Basiszelle $\mathbf{n} = \mathbf{0}$ wird das Paar $i = j$ ausgelassen, was durch den Strich im Summationsindex angedeutet wird. Diese unendliche Summe konvergiert nicht, aus denselben Gründen, aus denen auch die harmonische Reihe $\sum 1/k$ nicht konvergiert.

Wie man sieht, besteht dieses Problem deshalb, weil wir periodische Randbedingungen verwenden. Würden wir echte Ränder, also ein abgeschlossenes System verwenden, so wäre die elektrostatische Energie wohldefiniert. Für das verwendete unendliche System lässt sich aber eine geeignete Hilfsgröße definieren:

$$U_{\text{mi}} = \frac{q^2}{2} \sum_{\mathbf{n}} \sum_{i \neq j}^N \frac{f_{\text{mi}}(\mathbf{r}_{ij} + \mathbf{n})}{|\mathbf{r}_{ij} + \mathbf{n}|} \quad , \quad (2.8)$$

³Die elektrostatische Energie ist hier und im Folgenden die elektrostatische Energie, welche durch die Wechselwirkung der Teilchen der Basiszelle untereinander und mit allen periodischen Bildern hervorgerufen wird.

mit

$$f_{\text{mi}}(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0 & \text{für } |r_x| > L/2 \\ 0 & \text{für } |r_y| > L/2 \\ 0 & \text{für } |r_z| > L/2 \\ 1 & \text{sonst} \end{cases} . \quad (2.9)$$

Die Energie ist endlich, da die künstlich eingeführte Funktion f_{mi} dafür sorgt, dass jeweils nur das periodische Bild des Teilchens j mit i berücksichtigt wird, welches ihm am nächsten ist. Dieses Verfahren ist als *Minimum Image* Beschränkung in der Literatur geläufig.

Die Coulombenergie in der Minimum Image Beschränkung hängt davon ab, welchen Abstand die Teilchen voneinander im Durchschnitt haben. Im Grundzustand wird dieser maximiert sein, während für unendliche Temperaturen bis auf den Teilchendurchmesser alle Abstände angenommen werden und die potentielle Energie maximal ist. So können wir also eine einfache obere Schranke für U_{mi} angeben, wenn wir annehmen, dass alle Teilchen homogen verschmiert sind und sogar Abstände kleiner als der Teilchendurchmesser angenommen werden. Für diesen Spezialfall findet man die obere Schranke:

$$U_{\text{mi}} \leq \frac{1}{2} \int_V d^3r \int_{\Omega} d^3r' n^2 \frac{q^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} f_{\text{mi}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') , \quad (2.10)$$

wobei hier Ω das unendliche Volumen der periodischen Bilder bedeutet. Die Minimum Image Funktion f_{mi} beschränkt das Volumen des zweiten Integrals auf den Würfel um \mathbf{r} . Um die Berechnung einfacher zu machen, erweitern wir das Integrationsvolumen auf die Kugel mit dem Radius $\sqrt{3}L/2$, die den Würfel gerade einschließt. Damit wird die obere Schranke noch einmal vergrößert und man erhält:

$$\begin{aligned} U_{\text{mi}} &\leq \frac{1}{2} \int_V d^3r \int_0^{\sqrt{3}L/2} dr' 4\pi n^2 q^2 r' \\ &= \frac{3\pi}{4} N q^2 n L^2 = \frac{3\pi}{4} q^2 n^{1/3} N^{5/3} . \end{aligned} \quad (2.11)$$

Die obere Schranke ist also *nicht extensiv*, sondern U_{mi} wächst stärker als mit der Systemgröße⁴. Dieses Problem wird im Kapitel *Computersimulation* (Abschnitt 3.2) wieder aufgegriffen.

Man sieht also, dass die Definition einer potentiellen Energie in jedem Falle für ein Modell, das die Gegenladungen nicht berücksichtigt, ein Problem bleibt. Im

⁴Natürlich kann argumentiert werden, dass die bloße Existenz einer nicht extensiven oberen Schranke nichts darüber aussagt, ob das, was sie einschränkt, selbst nicht extensiv ist. Hier jedoch sollte mit physikalischer Intuition gesehen werden, dass tatsächlich U_{mi} stärker als mit der Systemgröße anwächst.

Speziell liegt die Wurzel des Problems in den periodischen Randbedingungen, die wir benötigen, um ein monopolar geladenes System im vollkommen homogenen Zustand zu betrachten. In Kapitel 7 werden wir monopolare Systeme unter Randbedingungen betrachten, für die die Definition einer potentiellen Energie möglich ist. Im Folgenden werden wir sehen, dass dennoch für das periodische System eine Dynamik wohldefiniert ist.

2.3.2 Dynamik des Systems

Die Gesamtenergie des Systems ist für das Problem der Kollisionskühlung keine Erhaltungsgröße. Weiterhin soll in dieser Arbeit hauptsächlich der Temperaturbereich betrachtet werden, in dem die Kinetik, also Teilchenstöße, der treibende Mechanismus der Dynamik ist und die Coulombwechselwirkung vielmehr als Störung des dissipativen Harte-Kugel Gases angesehen werden kann. Wir wollen also hier die Nichttextensivität der potentiellen Energie für einen Moment aus dem Blickwinkel schieben und untersuchen, ob die durch die elektrischen Ladungen bewirkten Kräfte auf ein Teilchen im periodischen System wohldefiniert sind.

Ein einzelnes Teilchen spürt die elektrostatische Wechselwirkung aller Teilchen der Basiszelle, sowie die ihrer periodischen Bilder. Dies ergibt für die durch elektrostatische Wechselwirkungen ausgeübte Kraft auf ein Teilchen i den Ausdruck:

$$\mathbf{F}_i^{\text{el}} = -q^2 \sum_{\mathbf{n}'} \sum_j^N \frac{\mathbf{r}_{ij} + \mathbf{n}}{|\mathbf{r}_{ij} + \mathbf{n}|^3} . \quad (2.12)$$

Die Bezeichnungen sind analog zu Gl. (2.7).

Anders als die elektrostatische Energie im System Gl. (2.7), sind die elektrostatischen Kräfte auf die Teilchen auch ohne die Einführung der Minimum Image Beschränkung wohldefiniert. Denn jede Raumkomponente der unendlichen Summe in Gl. (2.12) konvergiert. Somit zeigt das System eine physikalisch sinnvolle Dynamik. Für die im nächsten Kapitel erläuterte Computersimulation des Systems benötigen wir nur die Kräfte auf die Teilchen.