

3 Computersimulation

Die Computersimulation hat sich in den letzten Jahren als ein drittes „Standbein“ der Physik etabliert. Sie vermittelt zwischen dem Experiment und der Theorie und so sprechen einige von Computersimulationen, andere von Computerexperimenten.

3.1 Molekulardynamik

Molekulardynamik (MD) ist zweifellos die meist angewandte Methode, granulare Materie zu simulieren. In den 50er Jahren des 20. Jahrhunderts wurde sie von Alder und Wainwright zur Untersuchung eines Harte-Kugel Gases eingeführt [5]. Für nichtsinguläre Teilchenwechselwirkungen erweiterte dann Rahman [83] 1964 diese Methode. Schließlich fand sie in der Physik granularer Materie 1979 erstmalig Verwendung [18].

3.1.1 Überblick über das Verfahren

Die Molekulardynamik ist eine mikroskopische Simulation der N Systemteilchen, in dem Sinne, dass sie die vollständige zeitliche Entwicklung aller Teilchenorte \mathbf{r}_i und Teilchengeschwindigkeiten \mathbf{v}_i nachvollzieht bei gegebenen Anfangsbedingungen. Sie ist — bei ausgeschalteter Dissipation — eine *mikrokanonische* Simulation, da die angenommenen Punkte des $6N$ -dimensionalen Phasenraums auf eine Hyperfläche konstanter Gesamtenergie liegen. Ist das System ergodisch, so entspricht ein Zeitmittel für große Zeiten $t_\infty \rightarrow \infty$ einem Ensemblemittel des thermodynamischen Systems.

Die Bewegung des klassischen Systems auf der Hyperfläche konstanter Energie wird dadurch gewährleistet, dass die Dynamik der einzelnen Teilchen gemäß der newtonschen Bewegungsgleichung beschrieben wird:

$$\begin{aligned}
 m_i \dot{\mathbf{v}}_i &= \sum_{j \neq i}^N \mathbf{F}_{ij} \\
 \dot{\mathbf{r}}_i &= \mathbf{v}_i \quad ,
 \end{aligned}
 \tag{3.1}$$

für konstante Teilchenmassen mit den Geschwindigkeiten \mathbf{v}_i .

Die Molekulardynamik gibt anders als andere Simulationsverfahren (wie z.B. Simulationen der kanonischen Gesamtheit mithilfe der Monte-Carlo Methode [12]) zeitlich korrekt die Dynamik der N -Teilchen wieder. Sie lässt sich deshalb auch für granulare Systeme einsetzen, bei denen die Gesamtenergie durch die dissipativen Teilchenstöße nicht mehr erhalten ist.

In der MD Simulation wird die Zeit in diskrete Intervalle der Länge Δt unterteilt. Man benutzt nun die gegebenen Größen für Ort, Impuls und Kraft am Zeitpunkt t_0 , um mithilfe von Gl. (3.1) die Werte für den Zeitpunkt $t_0 + \Delta t$ zu erhalten. Für diese diskrete Integration der newtonschen Bewegungsgleichung werden in der Literatur [6] verschiedene Integrationsverfahren benutzt. Im nächsten Abschnitt wird das von uns verwendete Verfahren kurz vorgestellt.

3.1.2 Simulation elektrisch geladener granularer Materie

Ein Simulationsalgorithmus für elektrisch geladene granulare Systeme muss sowohl die langreichweitigen Coulombwechselwirkungen als auch die extrem kurzreichweitigen Kontaktkräfte der Teilchen korrekt berücksichtigen. Ein naiver Zugang wäre eine konsequente Implementierung eines Integrationsalgorithmus für die newtonsche Bewegungsgleichung, wobei in den Paarwechselwirkungen \mathbf{F}_{ij} nun sowohl die elektrostatischen Wechselwirkungen und die inelastischen Kontaktkräfte enthalten wären:

$$\mathbf{F}_{ij}(\mathbf{r}_{ij}) = \mathbf{F}_{ij}^{\text{coulomb}}(\mathbf{r}_{ij}) + \mathbf{F}_{ij}^{\text{kontakt}}(\mathbf{r}_{ij}) \quad .
 \tag{3.2}$$

Diese Vorgehensweise ist prinzipiell möglich, nur führt die extreme Kurzreichweitigkeit der Kontaktkräfte $\mathbf{F}_{ij}^{\text{kontakt}}(\mathbf{r}_{ij})$ zu dem Phänomen des *Bremsversagens*, das eine Simulation granularer Gase mit dieser Methode unmöglich macht.

Bremsversagen

Bremsversagen [91, 89] bezeichnet ein methodisches Artefakt der Molekulardynamiksimulation granularer Materie mit kontinuierlichen Kontaktkräften. Es beruht auf der nur unvollständig aufintegrierten Kontaktkraft während eines Stoßes. Das Problem soll nun kurz erläutert werden.

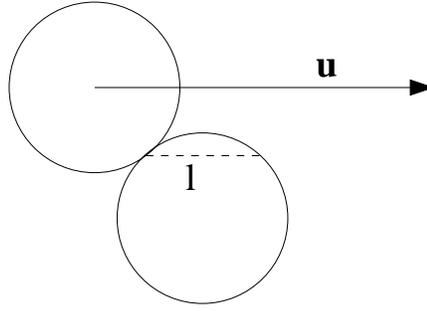


Abbildung 3.1: Skizze zum Bremsversagen.

Zwei Teilchen stoßen mit der Relativgeschwindigkeit \mathbf{u} (siehe Abbildung 3.1). Ohne Wechselwirkung würde das linke Teilchen das rechte durchfliegen und dabei eine Strecke $2l \leq 2d$ im Überlapp zurücklegen. Dies würde in der Zeit von $t_b = 2l/u$ geschehen. Die in MD-Simulationen verwendeten Kontaktkräfte modellieren einen Stoß in einer Stoßzeit t_n , die unabhängig vom Einfallswinkel und damit von der Länge l ist [90]. Wird nun $t_b < t_n$, so kann der Stoß vom Kraftmodell nicht mehr vollständig wiedergegeben werden. D.h. die repulsive Kraft wird nicht vollständig aufintegriert und der gesamte Kraftstoß ist zu klein. Die Zeit t_b hängt entscheidend von der Länge l und der Relativgeschwindigkeit u ab, so dass für besonders schiefe Stöße ($l \ll d$) oder für hohe Relativgeschwindigkeiten die Teilchen nahezu ungebremst einander durchdringen.

Die Lösung des Problems verlangt eine Minimierung der Stoßzeit t_n . Dies ist ohne weiteres durch eine Modifizierung der Kraftmodelle möglich, nur muss im gleichen Maße die Zeitschrittweite der Integration Δt sinken, damit der Integrationsalgorithmus den Stoß richtig aufintegriert. Eine Verringerung der Zeitschrittweite bedeutet aber unweigerlich starke Einbußen in der Effizienz der Simulation.

Das Verfahren der *Event Driven (ED)* Molekulardynamik geht den Weg, dass es Kollisionszeiten von $t_n = 0$ annimmt und somit ein Harte-Kugel System simuliert. Die Kontaktkräfte werden nicht mehr modelliert und die Integration der newtonschen Bewegungsgleichung (3.1) vollzieht sich folgendermaßen: Für gegebene Teilchenpositionen und Geschwindigkeiten zum Zeitpunkt t_0 kann die nächste Kollision analytisch berechnet werden [6]. Man kann nun die Teilchentrajektorien bis zum nächsten Stoß analytisch weiterführen. Der Stoß des Teilchenpaares $\{i, j\}$ wird dann dadurch modelliert, dass ihre Geschwindigkeiten in Richtung der Stoßnormalen entsprechend des Restitutionskoeffizienten e_n (siehe Gl. (1.1)) angepasst werden.¹

Die ED-Molekulardynamik umgeht somit das Problem des Bremsversagens

¹Für Stoßmodelle bei denen auch tangentialer Kräfte berücksichtigt werden, reicht dieses einfache Verfahren nicht aus. Man definiert hier einen *Kollisionsoperator* [89], der die zusätzlichen Parameter tangentialer Restitutionskoeffizient, e_s , und Gleitreibungskoeffizient, μ , enthält.

vollständig und ist die effizienteste Simulationsmethode granularer Gase. Für die Simulation des elektrisch geladenen granularen Systems kann die ED-MD jedoch nicht verwendet werden, da die Teilchentrajektorien aufgrund der langreichweitigen Coulombwechselwirkungen zwischen zwei Stößen nicht analytisch berechnet werden können. Andererseits kann eine Modellierung mittels kontinuierlicher Kontaktkräfte nicht greifen, da dann das Problem des Bremsversagens auftreten würde. Im nächsten Abschnitt wird deshalb ein Hybridalgorithmus vorgestellt, den wir zur Simulation benutzen. Er vereint eine herkömmliche Molekulardynamiksimulation der Coulombwechselwirkungen mit einer ereignisgesteuerten Behandlung der Teilchenstöße.

Hybridalgorithmus

Wie oben erwähnt ist eine analytische Lösung der newtonschen Bewegungsgleichung im Falle der Coulombwechselwirkung für ein Vielteilchensystem nicht möglich. Deshalb muss die Integration numerisch in diskreten Zeitschritten Δt erfolgen. Das von uns hierfür verwendete Verfahren ist der *Verlet-Algorithmus* [6]. Hier erhält man eine Approximation der neuen Teilchenorte und Geschwindigkeiten folgendermaßen:

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_i(t + \Delta t) &= \mathbf{r}_i(t) + \Delta t \mathbf{v}_i(t) + \frac{1}{2} \Delta t^2 \mathbf{a}_i(t) \\ \mathbf{v}_i(t + \Delta t) &= \mathbf{v}_i(t) + \frac{1}{2} \Delta t [\mathbf{a}_i(t) + \mathbf{a}_i(t + \Delta t)] \quad , \end{aligned} \quad (3.3)$$

wobei \mathbf{a}_i die Beschleunigung des Teilchens i bezeichnet. Man geht dabei technisch so vor, dass zunächst die neuen Teilchenorte $\mathbf{r}_i(t + \Delta t)$ berechnet werden und mit diesen dann die neuen Beschleunigungen $\mathbf{a}_i(t + \Delta t)$, so dass die neuen Geschwindigkeiten im zweiten Schritt berechnet werden können (wobei man die alten Beschleunigungen $\mathbf{a}_i(t)$ zwischenspeichert). Dieses Verfahren benötigt nur eine Kraftberechnung pro Zeitschritt und ist tolerant gegen Modifikation der Zeitschrittweite Δt .

Die Kraftberechnung selbst muss nun für langreichweitige Potentiale über alle $N(N - 1)/2$ Teilchenpaare durchgeführt werden und ist damit der Schritt der Integration, der die meiste Rechenzeit verlangt. Für kurzreichweitige Potentiale kann dieser Aufwand durch die Einführung von Nachbarschaftslisten [6] verringert werden, in denen nur die Teilchenpaare aufgeführt werden, die prinzipiell während eines Zeitschritts wechselwirken können. Die Methode der Nachbarschaftslisten verbietet sich für das Coulombpotential, jedoch existieren hier andere Möglichkeiten (siehe Abschnitt 3.3) den Rechenaufwand zu vermindern.

Wir betrachten in jedem Zeitschritt alle $N(N - 1)/2$ Coulombwechselwirkungen für die Berechnung der Beschleunigungen. Hierbei werden die Kräfte gemäß der Minimum Image Beschränkung nur für das jeweils nächste periodische Bild eines

Nachbarteilchens j zu dem Teilchen i betrachtet. Diese Einschränkung ist für den von uns betrachteten Temperaturbereich gerechtfertigt, wie in Abschnitt 3.2 gezeigt werden wird.

Nachdem so nun die neuen Teilchenorte bestimmt worden sind, prüft der Algorithmus, ob für diese ein Überlapp zwischen zwei Teilchen besteht. Ist dies der Fall, so hätte in dem Zeitintervall $[t, t + \Delta t]$ ein Stoß stattfinden müssen. Dieser wird nun modelliert, indem die Relativgeschwindigkeiten in Richtung der Stoßnormalen für die stoßenden Teilchen entsprechend des Restitutionskoeffizienten, Gl. (1.1), angepasst werden und danach die Zeitintegration fortgesetzt wird. Hierdurch wird ein dissipativer Harte-Kugel Stoß simuliert, für den aber kurzzeitige Überlappungen auftreten, welche einen kleinen Fehler verursachen. In unseren Simulationen wurde der Zeitschritt Δt derart gewählt, dass diese Überlappungen im Extremfall ein Prozent des Durchmessers betragen haben.

Der vorgestellte Algorithmus behandelt die Coulombwechselwirkungen korrekt und ist gleichzeitig unempfindlich gegen das Bremsversagen. Ähnliche Verfahren wurden von McNeil und Madden [71] und von Hopkins und Louge [61, 44] entwickelt.

3.2 Systemgrößen

3.2.1 Problem des thermodynamischen Limes

Wie in Kapitel 2.3.1 besprochen, ist die potentielle Energie des Systems nicht extensiv. In diesem Sinne ist das Modell kein thermodynamisches System, da kein thermodynamischer Limes existiert und die Ergebnisse für Systeme endlichen Volumens sich nicht ohne weiteres auf ein System übertragen lassen, das sich im thermodynamischen Limes befindet. Nun ist das Konzept eines unendlichen Systems gerade für elektrisch geladene granulare Systeme von zumindest fragwürdiger Bedeutung, sind diese doch immer durch äußere Begrenzungen auf endliche Volumen eingeschränkt. Dennoch ist die mit dem thermodynamischen Limes verbundene Frage wichtig, ob die erzielten Beobachtungen unabhängig von der gewählten Systemgröße sind oder nicht.

Tatsächlich ist diese Frage nicht trivial und stellt sich bereits für das Verhalten *ungeladener* granularer Gase: Die in der Einleitung beschriebene Bildung von Clustern beim Abkühlen granularer Gase hängt entscheidend von der Systemgröße ab [29, 69, 70]. Die typische Längeskala der Cluster hängt von der Packungsdichte, dem Teilchendurchmesser und dem Restitutionskoeffizienten ab und ergibt sich zu [29]:

$$L_0 \propto \frac{d}{\nu \sqrt{1 - e_n^2}} . \quad (3.4)$$

Ist die Systemgröße kleiner als L_0 wird die Bildung von Clustern unterdrückt und das System kühlt homogen ab.²

Betrachtet man allerdings das kinetische Regime (*siehe Einleitung*) der Kollisionskühlung, so ist das System homogen und die Dynamik sollte systemgrößenunabhängig sein. Zur theoretischen Beschreibung des kinetischen Regimes führt man den Begriff des *Quasigleichgewichts* ein: Die Kollisionsraten der Teilchen (die letztendlich die Energiedissipation bestimmen) werden für ein Harte-Kugel Gas berechnet, dass sich im thermischen Gleichgewicht mit der Temperatur $T(t)$ befindet. Die granulare Temperatur selbst ist zeitabhängig und der Abkühlprozess wird als langsam genug angenommen,³ so dass das System sich nach jedem dissipativen Stoß entsprechend der neuen granularen Temperatur thermalisieren kann. Für das Harte-Kugel Gas ist der thermodynamische Limes gegeben und so greift das Konzept des Quasigleichgewichts für ungeladene granulare Gase im kinetischen Regime.

Das in Kapitel 2 vorgestellte Modell geht für hohe Temperaturen $E_q/mT \rightarrow 0$ in das Modell des ungeladenen Gases über. Die Dynamik wird also in diesem Limes unabhängig von der Systemgröße sein. Sinkt dagegen die Temperatur in einen Bereich, in dem die kinetische Energie nicht mehr ausreichend ist, um die Coulombabstoßung der Teilchen zu überwinden, finden praktisch keine Stöße mehr statt und das Problem der nichtextensiven elektrostatischen Energie wird dominant. Als Folge davon wird die beobachtete Dynamik abhängig von der Systemgröße werden. Es muss nun geklärt werden, bis zu welchem Verhältnis der typischen Energieskalen E_q/mT die Betrachtung des periodischen Systems noch gerechtfertigt ist und die Ergebnisse als teilchenzahl-unabhängig angesehen werden können. Anders formuliert kann für den gesuchten Temperaturbereich die Coulombwechselwirkung als lokale Störung des dissipativen Harte-Kugel Systems gesehen werden.

3.2.2 Äquivalenz zum klassischen Plasmamodell OCP

Für die Bestimmung des zulässigen Temperaturbereichs konzentrieren wir uns nun auf die Coulombwechselwirkung der Punktladungen im Inneren der granularen Teilchen und lassen die dissipativen Harte-Kugel Wechselwirkung außer Betracht. D.h. in diesem Fall ist die Gesamtkraft auf ein Teilchen vollständig gegeben durch die addierten Coulombkräfte, Gl. (2.12). Dieses System ist dann analog dem klassischen Plasmamodell des *One Component Plasma* (OCP) [10, 13]. In diesem Modell werden nur die Ionen einzeln aufgelöst, die Elektronen dagegen werden

²Dies ist eine vereinfachte Darstellung der Dynamik. Für eine eingehende Betrachtung sei der Leser auf die zitierten Artikel verwiesen. Das Problem soll hier nur beispielhaft die Systemgrößenabhängigkeit in dissipativen Systemen verdeutlichen.

³Das stellt eine Einschränkung der Beschreibung auf hohe Restitutionskoeffizienten ($e_n \rightarrow 1$) dar. In der Literatur ist dies auch bekannt als Näherung des quasi-elastischen Stoßes.

als homogen verschmierte Hintergrundladung angenommen. Das OCP Modell ist elektrisch neutral und es besitzt einen thermodynamischen Limes [10]. Das heisst, kann hier gezeigt werden, dass für einen bestimmten Temperaturbereich die Dynamik beider Modelle äquivalent ist, hat man die Bedingung gefunden, für die die Dynamik des Modells elektrisch geladener granularer Materie N -unabhängig ist.

Die potentielle Energie des periodischen OCP Modells mit N Ionen lautet:

$$\begin{aligned}
 U_{\text{ocp}}^{\text{per}} &= \frac{q^2}{2} \sum_{\mathbf{n}'} \sum_{i,j}^N \frac{1}{|\mathbf{r}_{ij} + \mathbf{n}|} - \frac{Nq^2}{V} \sum_{\mathbf{n}} \sum_i^N \int_V d^3r \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r} + \mathbf{n}|} \\
 &\quad + \frac{N^2q^2}{V^2} \sum_{\mathbf{n}} \int_V d^3r \int_V d^3r' \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}' + \mathbf{n}|} \quad . \quad (3.5)
 \end{aligned}$$

Hier ist q die Ladung und \mathbf{r}_i der Ort der einzelnen Ionen. Der erste Term ist die Wechselwirkung der N Ionen in der Basiszelle des Volumens V miteinander und mit allen ihren periodischen Bildern, wobei der gestrichene Index \mathbf{n}' der ersten Summation wieder bedeutet, dass in der Basiszelle die Paarkombination $i = j$ ausgelassen wird. Der zweite Term stellt die Wechselwirkung der Ionen mit den homogen verschmierten Elektronen dar. Der letzte Term schließlich ist die Selbstwechselwirkung der Elektronen. Die Gesamtenergie $U_{\text{ocp}}^{\text{per}}$ ist bedingt konvergent, d.h. der Wert hängt von der Reihenfolge ab, in der die einzelnen Terme aufaddiert werden.[20]

Nun interessiert die Kraft auf das i -te Teilchen im periodischen OCP. Diese ergibt sich aus der Ableitung nach den Ortskoordinaten des i -ten Teilchens, $-\nabla_i U_{\text{ocp}}^{\text{per}}$, zu:

$$\begin{aligned}
 -\nabla_i U_{\text{ocp}}^{\text{per}} &= -\frac{q^2}{2} \sum_{\mathbf{n}'} \nabla_i \sum_{j,k}^N \frac{1}{|\mathbf{r}_{jk} + \mathbf{n}|} + \frac{Nq^2}{V} \sum_{\mathbf{n}} \nabla_i \sum_j^N \int_V d^3r \frac{1}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r} + \mathbf{n}|} \\
 &= +q^2 \sum_{\mathbf{n}'} \sum_j^N \frac{\mathbf{r}_{ij} + \mathbf{n}}{|\mathbf{r}_{ij} + \mathbf{n}|^3} - \frac{Nq^2}{V} \sum_{\mathbf{n}} \int_V d^3r \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r} + \mathbf{n}}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r} + \mathbf{n}|^3} \quad . \quad (3.6)
 \end{aligned}$$

Ein direkter Vergleich mit der Kraft in unserem Modell, Gl. (2.12), zeigt, dass beide noch um den letzten Term der rechten Seite differieren. Dies ist nun der wichtige Punkt, der die Dynamik unseres Modells von der des OCP unterscheidet und es sind die Bedingungen gesucht, unter denen dieser sich zu Null ergibt. Dies gelingt, wenn man die Coulombwechselwirkung gemäß der Minimum Image Beschränkung beschneidet. D.h. alle Coulombwechselwirkungen sind mit den Minimum Image Funktion f_{mi} , Gl. (2.9), zu modifizieren und man erhält so für den zweiten Term:

$$\frac{Nq^2}{V} \sum_{\mathbf{n}} \int_V d^3r f_{\text{mi}}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r} + \mathbf{n}) \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r} + \mathbf{n}}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r} + \mathbf{n}|^3} =$$

3 Computersimulation

$$\frac{Nq^2}{V} \int_{V_{L^3}} d^3r \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}|^3} = \mathbf{0} \quad , \quad (3.7)$$

wobei das Integrationsvolumen V_{L^3} im zweiten Schritt den Würfel des Volumens L^3 mit i im Zentrum darstellt, weshalb die in allen drei Raumrichtungen symmetrische Integration sich zu Null aufhebt.

Die Kraft auf das Teilchen i ist demnach für beide Modelle unter der Minimum Image Beschränkung dieselbe und gegeben durch:

$$\mathbf{F}_i^{\text{mi}} = -q^2 \sum_{\mathbf{n}} \sum_{i \neq j}^N f_{\text{mi}}(|\mathbf{r}_{ij} + \mathbf{n}|) \frac{\mathbf{r}_{ij} + \mathbf{n}}{|\mathbf{r}_{ij} + \mathbf{n}|^3} \quad . \quad (3.8)$$

Nun bleibt noch die Frage offen, wann die Minimum Image Beschränkung der Wechselwirkungen gerechtfertigt ist. Hierzu haben Brush, Sahlin und Teller bereits 1966 Untersuchungen durchgeführt [13] und sie fanden, dass die Kopplung Γ , Gl. (2.6), nicht größer als 10 sein darf.

Hieraus können zwei wichtige Schlussfolgerungen für unser System gezogen werden:

1. Solange die granulare Temperatur hoch genug ist, so dass $\Gamma < 10$ erfüllt ist, kann die elektrostatische Wechselwirkung der Punktladungen gemäß der Minimum Image Beschränkung modelliert werden.
2. In diesem Temperaturbereich sind die Ergebnisse von der Systemgröße unabhängig.

Die erste Schlussfolgerung hat einen praktischen Nutzen für die Computersimulation, denn die Wechselwirkungen mit den unendlichen Bildern müssen nicht berücksichtigt werden. Gerade deren Einbeziehung würde komplexere Simulationsmethoden erfordern (siehe 3.3). Der zweite Punkt legt die Grenzen der Näherung vom gestörten Harte-Kugel Gas fest: Für den Bereich hoher Temperaturen, $T > 10 \cdot (2q^2/3am)$, ist die Störung durch die Coulombwechselwirkung äquivalent dem OCP, welches einen thermodynamischen Limes besitzt. D.h. ein endliches periodisches System kann im Sinne der Dynamik als Repräsentation eines Ausschnitts eines großen Systems gesehen werden.⁴ Dies ist wichtig, da die an dem periodischen System gewonnenen Erkenntnisse später (Kapitel 7) zur Beschreibung lokaler Gebiete benutzt werden sollen.

Der oben beschriebenen Simulationsalgorithmus muss in jedem Zeitschritt alle $N(N - 1)/2$ -Wechselwirkungsterme berücksichtigen. Dies schränkt die Größe

⁴Eine elektrostatische Energie des geladenen granularen Systems würde natürlich weiterhin divergieren. Diese wird jedoch für das Problem der Kollisionskühlung nicht betrachtet.

der effektiv berechenbaren Systeme zu großen Teilchenzahlen hin ein. Die im Rahmen dieser Arbeit simulierten Systeme lagen alle in der Größenordnung von $100 < N < 1100$. Für diesen Wertebereich konnte keine Systemgrößenabhängigkeit der Ergebnisse gefunden werden. Alle Simulationen befanden sich auch in dem oben definierten „erlaubten“ Temperaturbereich. Tatsächlich waren für die von uns durchgeführten Abkühlsimulationen Temperaturen am unteren Rand des erlaubten Temperaturbereichs praktisch nicht zu erreichen, da in diesem Bereich Kollisionen kaum noch vorkommen. Dies liegt daran, dass die Kollisionsrate exponentiell mit der inversen Temperatur abnimmt, Gl. (4.5). Die Temperatur kann nur durch Stöße sinken, weshalb das System, von hohen Temperaturen her abkühlend, den „verbotenen“ Temperaturbereich nur für sehr große Zeiten erreicht.

In diesem Kapitel wurde gezeigt, dass die Coulombwechselwirkungen des vorgestellten Modells sich für den gegebenen Temperaturbereich gemäß des OCP Modells verhalten. D.h. das OCP Modell stellt einen Grenzfall für das geladene granulare System dar. Die Dynamik beider Modelle wird dann ähnlich sein, wenn die granularen Teilchen als Punktteilchen betrachtet werden können. Dies ist der Fall, wenn der Ionen-Sphären Radius wesentlich größer als der Teilchendurchmesser ist, $a \gg d$. Oder mit der Packungsdichte ausgedrückt, $\nu \rightarrow 0$. Aber schon im Bereich endlicher Packungsdichten zeigen beide Modelle große Ähnlichkeiten, wie eine effektiv reduzierte Coulombwechselwirkung stoßender Teilchen, welche in Kapitel 4.2.2 besprochen wird.

3.3 Andere Methoden zur Simulation periodischer elektrostatischer Systeme

Der oben besprochene Algorithmus berechnet zu jedem Zeitschritt die $N(N-1)/2$ Coulombwechselwirkungen in der Minimum Image Beschränkung. Wie gezeigt wurde, ist dieses Verfahren für Systeme hoher Temperatur gerechtfertigt, wenn die elektrostatische Wechselwirkung als eine Störung des Harte-Kugel System angesehen werden kann. Wird eine genauere Behandlung der Coulomb Wechselwirkungen wichtig, so bieten sich zwei Simulationsmethoden an:

Ewald Summe: Dies ist eine Methode, die ursprünglich für die Untersuchung von Ionenkristallen entwickelt wurde [27, 6, 33]. Man legt um jede Ladung i des Systems, positiv oder negativ, eine verschmierte Gegenladung ρ_- (für gewöhnlich eine Gaußverteilung) der Form:

$$\rho_-(\mathbf{r}) = -q\kappa^3 \exp(-\kappa^2(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)^2) / \pi^{3/2} \quad , \quad (3.9)$$

wobei der Parameter κ die inverse Breite der Ladungsverteilung ρ angibt. Diese schirmt die Ladung des Teilchen i nun ab, so dass die kombinierten

Wechselwirkungen von Ladung und verschmierter Gegenladung kurzreichweitig sind. Um die korrekte Beschreibung des Systems zu bewahren, wird die oben eingeführte Gegenladung wieder positiv aufaddiert, ρ_+ , so dass sich insgesamt eine Nullsumme ergibt.

Die Berechnung der Wechselwirkung im periodischen System wird nun so durchgeführt, dass die Summation über die periodischen Ladungen ρ_+ durch eine Fourierreihe erfolgt, während die kombinierte Wechselwirkung der Punktladung und der Ladungsdichte ρ_- in der Minimum Image Beschränkung erfolgen kann, da diese nun kurzreichweitig ist.

Details dieses Verfahrens können den oben genannten Quellen entnommen werden.

Particle-Particle Particle-Mesh (PPPM): Dieser Algorithmus ist ähnlich der Ewald Summe. Auch hier wird das periodische Problem durch eine Fouriertransformation gelöst und auch dieser Algorithmus wurde zuerst für die Untersuchung ionischer Kristalle genutzt [6, 24]. Man geht zur Berechnung der Wechselwirkungen in drei Schritten vor:

1. Die Ladungen in der Basiszelle werden mit einem Approximationsverfahren auf die Gitterpunkte eines feinen Gitters verteilt (Mesh).
2. Mithilfe der Fast-Fourier-Transformation wird die Poisson Gleichung auf dem Gitter gelöst und man erhält das Potential an jedem Gitterpunkt.
3. Das elektrische Feld am Ort der Teilchen wird durch eine Approximation der Felder an den benachbarten Gitterpunkten ermittelt.

Der Vorteil dieses Verfahrens liegt darin, dass die Rechenzeit für große Teilchenzahlen nur mit $O(N)$ skaliert, statt mit $O(N^2)$ bei den herkömmlichen Verfahren wie Minimum Image Beschränkung oder Ewald Summe.

3.4 Radiale Verteilungsfunktion

In einem idealen Gas wechselwirken die Teilchen nicht miteinander und sie verhalten sich vollkommen unkorreliert. In einem Harte-Kugel Gas dagegen ist es ihnen verboten, sich zu durchdringen. Diese Wechselwirkung führt für dichte Systeme dazu, dass die Teilchen sich gegenseitig in der Bewegung behindern und so räumliche Korrelationen der Teilchen entstehen. Für ein dicht gepacktes Harte-Kugel System ist schließlich jede Relativbewegung unmöglich und die Kugeln sind auf einem Gitter angeordnet. Ähnlich induziert elektrostatische Wechselwirkung zwischen den Teilchen eine Korrelation. Ihre Stärke hängt von dem Verhältnis der elektrostatischen Wechselwirkung zur Temperatur ab: Für hohe Temperaturen

ist die kinetische Energie der Relativbewegung im Vergleich zur elektrostatischen Energie dominierend und die Teilchen sind ähnlich unkorreliert wie in einem idealen Gas. Sinkt die Temperatur jedoch, so steigen die Korrelationen im System und eine räumliche Struktur wird bemerkbar.

Ein geeignete Größe, um die räumliche Korrelation eines Systems zu messen, ist die *Paarkorrelationsfunktion*. Sie ist für ein homogenes stationäres klassisches System definiert durch:

$$\begin{aligned} \rho^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \left\langle \sum_{i \neq j} \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_1) \delta(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_2) \right\rangle \\ &= n \rho(\mathbf{r}_2 | \mathbf{r}_1) \quad . \end{aligned} \quad (3.10)$$

Hier gibt $\rho(\mathbf{r}_2 | \mathbf{r}_1) d^3r_2$ die Anzahl der Teilchen im Volumenelement d^3r_2 um \mathbf{r}_2 an, wenn bei \mathbf{r}_1 ein Teilchen zu finden ist.

Ein ideales Gas besitzt die Paarkorrelationsfunktion:

$$\rho_{\text{id}}^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{N(N-1)}{V^2} \quad . \quad (3.11)$$

Für ein isotropes System hängt die Paarkorrelationsfunktion nur vom radialen Abstand $|\mathbf{r}|$ der Teilchen 1 und 2 ab. Man nimmt hier das ideale Gas als unkorreliertes Vergleichssystem und definiert die *radiale Verteilungsfunktion* als:

$$\begin{aligned} g(r) &= \frac{1}{4\pi} \int d\Omega \rho^{(2)}(\mathbf{0}, \mathbf{r}) / \rho_{\text{id}}^{(2)} \\ &= \frac{1}{4\pi} \frac{V^2}{N(N-1)} \int d\Omega \rho^{(2)}(|\mathbf{r}|) \quad , \end{aligned} \quad (3.12)$$

wobei $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$ den Raumwinkel mit Teilchen 1 im Zentrum angibt. Die radiale Verteilungsfunktion ist normiert mit

$$V = \int d^3r g(r) \quad . \quad (3.13)$$

Für das ideale Gas ergibt sich $g_{\text{id}}(r) \equiv 1$ und so misst die radiale Verteilungsfunktion eines Systems die Stärke der radialen Korrelation verglichen mit dem unkorrelierten idealen Gas.

Abbildung 3.2 zeigt die radiale Verteilungsfunktion des OCP. Für hohe Temperaturen (Γ niedrig) sind die Teilchen in großen Abständen unkorreliert, ähnlich einem idealen Gas, und die radiale Verteilungsfunktion ist hier gleich eins. Lediglich für sehr kleine Paarabstände macht sich die Coulombabstoßung bemerkbar und führt dazu, dass im Mittel weniger Teilchen in direkter Nähe zueinander zu finden sind als im idealen Gas. Hier wird die radiale Verteilungsfunktion kleiner

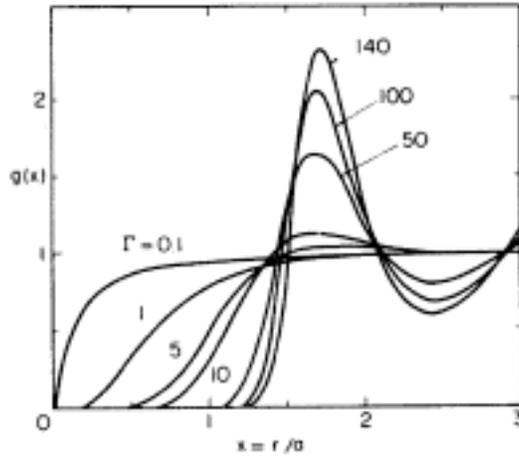


Abbildung 3.2: Radiale Verteilungsfunktion des OCP aus [46].

als der Wert des idealen Gases. Besitzt das System eine große Kopplung, bewirken die Coulombkräfte eine stärkere Korrelation der Teilchen und bevorzugte Paarabstände bilden sich heraus; Zu erkennen an dem Maximum bei $x \approx 1.7$.

Korrelationen werden im geladenen granularen System erzeugt, sowohl durch die Packungsdichte ν (wie im Harte-Kugel Gas) als auch durch das Verhältnis der Temperatur zur elektrostatischen Wechselwirkung (wie im OCP). Die Dynamik des Systems wird durch die Korrelationen beeinflusst und so werden im Kapitel 5 radiale Verteilungsfunktionen gemessen, um die Bedeutung der Korrelationen zu untersuchen. Hierzu bestimmt man in der Molekulardynamik alle $N(N - 1)/2$ Paarabstände r_{ij} in einem Zeitschritt und sortiert sie in einem Histogramm der Rasterung Δr . Einen Näherungswert für die radiale Verteilungsfunktion $g(r)$ erhält man nun durch

$$g(r + \Delta r/2) \approx h(r, \Delta r)/h_{\text{id}}(r, \Delta r) \quad , \quad (3.14)$$

wobei $h(r, \Delta r)$ die Anzahl der gefundenen Paarabstände mit $r_{ij} \in [r, r + \Delta r]$ angibt. Normiert wird dieser Wert mit der Anzahl der Paarabstände, die sich für ein ideales Gas ergeben würden:

$$h_{\text{id}}(r, \Delta r) = \frac{N - 1}{2} \frac{4\pi}{3} n [(r + \Delta r)^3 - r^3] \quad . \quad (3.15)$$

Für eine bessere Statistik wird dabei im Allgemeinen noch über mehrere Simulationsschritte gemittelt.