

4 Kollisionskühlung

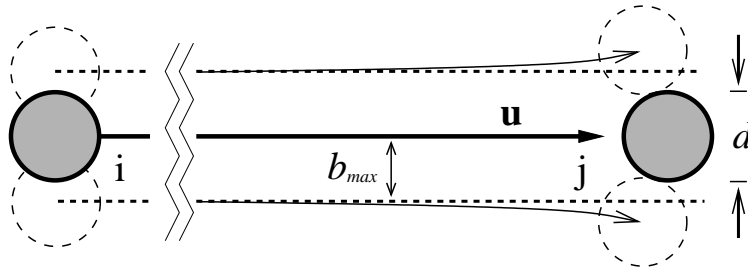
In diesem Kapitel soll die Kollisionskühlung geladener granularer Materie betrachtet werden. Aufgrund der inelastischen Kollisionen wird Energie dissipiert und die granulare Temperatur sinkt, da sie ein Maß für die kinetische Energie ist. Die Kollisionskühlung kann über die *Dissipationsrate* beschrieben werden. Man definiert sie als Energieverlust pro Zeit und Einheitsvolumen:

$$\gamma = \frac{\Delta E}{\text{Zeiteinheit} \cdot \text{Volumen}} \geq 0 \quad (4.1)$$

4.1 Kinetische Theorie

Nun wollen wir eine Näherung für die Dissipationsrate eines verdünnten Systems geladener granularer Kugeln herleiten. Nur der direkte Stoß der Teilchen untereinander führt zur Dissipation von Energie, die Bewegung zwischen den Stößen sei verlustfrei. Wir interessieren uns deshalb für die Teilchenstöße eines Systems gegebener Packungsdichte ν und granularer Temperatur T . In verdünnten Systemen ist es gerechtfertigt anzunehmen, dass die Teilchen nur *binär* stoßen: Dreier- oder Mehrfachstöße werden nicht betrachtet.

Die Korrelationen unter den Teilchen werden zunächst vernachlässigt und wir betrachten im Wesentlichen ein Harte-Kugel Gas, bei dem sich jedoch der Wirkungsquerschnitt des binären Stoßes verkleinert aufgrund der elektrostatischen Abstoßung der jeweiligen Kollisionspartner. Somit folgen wir dem boltzmannschen *Stoßzahlansatz* (auch *molekulares Chaos* genannt), der für verdünnte Systeme mit kurzreichweitigen Wechselwirkungen gut erfüllt ist. Die Anwendung der Boltzmanntheorie auf reine Coulombsysteme ist mit großen Schwierigkeiten verbunden [60], da das Coulombpotential mit $1/r$ nicht hinreichend schnell für große Abstände abfällt. Trotz dieser Beschränkung lässt sich aber der Bereich hoher Temperaturen sehr gut über die kinetische Theorie beschreiben, wie der spätere Vergleich mit Computersimulationen zeigen wird. Der Grund ist, dass hier die Kinetik und damit die Harte-Kugel Wechselwirkung wesentlich prominenter ist als der Einfluss der Elektrostatik.

Abbildung 4.1: Teilchen i kollidiert mit j unter der Relativgeschwindigkeit \mathbf{u} .

Mit diesen Annahmen können wir uns zur Berechnung der Kollisionsrate und später der Dissipationsrate einer einfachen kinetischen Theorie bedienen. Obwohl das durch die Dissipation hervorgerufene Abkühlen ein nichtstationärer Prozess ist, gehen wir davon aus, dass zu jedem Zeitpunkt ein *Quasigleichgewicht* existiert: d.h. das System soll zu jedem Zeitpunkt eine homogene Dichte aufweisen und die Teilchengeschwindigkeiten seien gaußverteilt, wobei die Breite der Verteilung durch die aktuelle granulare Temperatur gegeben ist. Die granulare Temperatur selbst sei eine globale Größe, es möge also keine „heißeren“ oder „kälteren“ Bereiche im System geben. Die Annahme des Quasigleichgewichts ist gut erfüllt, wenn wir das System langsam abkühlen lassen, also entweder ein stark verdünntes System betrachten oder nur sehr schwach inelastische Stöße annehmen ($e_n \rightarrow 1$). Stärker dissipative Systeme entwickeln selbständig Inhomogenitäten, die in der Einführung besprochen wurden.

4.1.1 Stoßrate

Wir starten, indem wir die Kollisionsfrequenz eines bestimmten Teilchens i mit irgendeinem der anderen Teilchen j berechnen. Wenn die Teilchen nicht geladen wären, würden zwei Teilchen stoßen, wenn die Relativgeschwindigkeit \mathbf{u} in Richtung des Distanzvektors $\mathbf{r} = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i$ zeigt, der die Mittelpunkte der Teilchen miteinander verbindet (siehe Abb. 4.1). Die Teilchen kollidieren nur, wenn $\mathbf{u} \cdot \mathbf{r} > 0$ (das Teilchen i fliegt in die Richtung von j) und der *Stoßparameter* $b = |\mathbf{r} \times \mathbf{u}|/u$ kleiner ist als die Summe der Teilchenradien, $b \leq b_{\max} = d$.

Tragen die Teilchen nun jeweils die Ladung q , so stoßen sie sich während der Annäherung ab und der maximale Stoßparameter b_{\max} wird kleiner als d , wie in der Skizze angedeutet. In dem unendlich verdünnten System vernachlässigen wir nun den Einfluss der umgebenden Teilchen. So kann mit den Erhaltungssätzen des Drehimpulses und der Energie¹ der verminderte maximale Stoßparameter

¹Solange die Teilchen nicht stoßen bleibt die Energie erhalten.

berechnet werden. Er ergibt sich zu:

$$b_{\max}^2 = d^2 \left(1 - \frac{2E_q}{\mu u^2} \right) \quad . \quad (4.2)$$

Hierbei ist $\mu = m/2$ die reduzierte Masse. $E_q = q^2/d$ ist die Energiebarriere, die das Teilchenpaar für eine Kollision überwinden muss. Dies ist die Näherung des verdünnten Systems: Hier ist die Energiebarriere der Unterschied der elektrostatischen Energie des Teilchenpaares bei der Kollision zu der Energie, wenn sie unendlich weit voneinander entfernt sind. Gleichung (4.2) ist unabhängig von der tatsächlichen Form des Zweiteilchenpotentials, sofern es radiale Symmetrie besitzt. Nehmen wir den Fall ungeladener Teilchen an ($E_q \rightarrow 0$), so ergibt sich wieder der maximale Stoßparameter des ungeladenen granularen Systems.

Man stelle sich einen Schwarm von Teilchen vor, die alle dieselbe asymptotische Geschwindigkeit \mathbf{u} weit entfernt von Teilchen j haben. Wir fragen uns nun, welche Teilchen dieses Schwarms das Zielteilchen j treffen werden. Nach der obigen Analyse ist klar, dass nur die Teilchen des Schwarms mit einem Stoßparameter kleiner als b_{\max} kollidieren werden. Also nur solche Teilchen, die in dem Zylinder mit Radius b_{\max} um die Achse, die durch den Mittelpunkt von j und die Richtung von \mathbf{u} gegeben ist, sind. Pro Zeitschritt δt trifft damit auf j ein mögliches Stoßvolumen auf, das einem Zylinder des Radius b_{\max} und der Höhe $u \delta t$ entspricht. Die Anzahl der Stöße in diesem Zeitschritt ergibt sich dann aus der Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen i in diesem Stoßvolumen zu finden, welche proportional zur Anzahldichte $n = N/V$ ist. Es wird also $\pi b_{\max}^2 u n$ solcher Kollisionen pro Zeitschritt geben. Integriert man nun über die Verteilung der Relativgeschwindigkeiten $p(\mathbf{u})$, so erhält man die Kollisionsfrequenz eines einzelnen Teilchens im granularen System:

$$f = \pi n \int_{u \geq u_0} d^3u u b_{\max}^2(u) p(\mathbf{u}) \quad . \quad (4.3)$$

$u_0 = \sqrt{2E_q/\mu}$ ist die minimale Relativgeschwindigkeit, für die eine Kollision noch stattfinden kann. Denn wenn die Geschwindigkeit niedriger ist, können die beiden Teilchen die Coulombabstoßung nicht überwinden.

Wir nehmen an, dass die Teilchengeschwindigkeiten gaußverteilt sind mit einer Varianz von $3T$ (siehe Gl. (1.2) auf Seite 4). Dementsprechend werden auch die Relativgeschwindigkeiten gaußverteilt sein, mit

$$\langle u^2 \rangle = 6T \quad . \quad (4.4)$$

Hiermit kann man die Zahl der binären Stöße pro Zeit- und Volumeneinheit berechnen:

$$\dot{N}_g = 1/2 f n = 2\sqrt{\pi} n^2 d^2 \sqrt{T} \cdot \exp\left(-\frac{E_q}{mT}\right) \quad . \quad (4.5)$$

Der Faktor $1/2$ verhindert die Doppelzählung von Stößen. Diese Anzahl der Stöße pro Zeiteinheit entspricht der bekannten Rate für chemische Reaktionen von Molekülen, wie sie z.B. in dem Lehrbuch von Present [79] nachgelesen werden kann.

4.1.2 Dissipationsrate

Im Folgenden werden wir nun die Dissipationsrate unter denselben Annahmen berechnen, die wir im vorherigen Kapitel gemacht haben.

Gemäß der Definition des Restitutionskoeffizienten, Gl. (1.1), wird in einem einzelnen Stoß der Betrag von

$$\delta E(u, b) = \frac{\mu}{2} (1 - e_n^2) u_n^{*2} \quad (4.6)$$

kinetische Energie verloren. Hier ist u_n^* die Normalenkomponente der Relativgeschwindigkeit beim Aufprall (der Stern * bezeichnet Geschwindigkeiten direkt beim Aufprall). Diese kann berechnet werden aus $u_n^{*2} = u^{*2} - u_t^{*2}$, wobei die tangentielle Komponente aus der Drehimpulserhaltung berechnet werden kann:

$$\mu u b = \mu u_t^* d \quad . \quad (4.7)$$

Die Energieerhaltung liefert:

$$u^{*2} = u^2 \left(1 - \frac{2E_q}{\mu u^2} \right) \quad . \quad (4.8)$$

Und das ergibt dann für die Normalgeschwindigkeit beim Aufprall:

$$u_n^{*2} = u^2 \left(1 - \frac{b^2}{d^2} - \frac{2E_q}{\mu u^2} \right) \quad . \quad (4.9)$$

So können wir Gl. (4.6) umschreiben zu:

$$\delta E(u, b) = \frac{\mu}{2} (1 - e_n^2) u^2 \left(1 - \frac{b^2}{d^2} - \frac{2E_q}{\mu u^2} \right) \quad . \quad (4.10)$$

Die Abhängigkeit vom Stoßparameter können wir herausintegrieren, wenn wir eine homogene Verteilung der Teilchen im Stoßzylinder (Abb. 4.1) annehmen, d.h. auf der Kopffläche des Zylinders, πb_{\max}^2 , soll jeder Punkt gleichwahrscheinlich sein:

$$\begin{aligned} \delta E(u) &= \frac{1}{\pi b_{\max}^2} \int_0^{b_{\max}} db 2\pi b \delta E(u, b) \\ &= \frac{\mu}{4} u^2 (1 - e_n^2) \left(1 - \frac{2E_q}{\mu u^2} \right) \quad . \end{aligned} \quad (4.11)$$

Die pro Zeiteinheit dissipierte Energie, die durch Stöße mit der Relativgeschwindigkeit u verursacht wird, ist dann die Anzahl solcher Stöße pro Zeiteinheit, $1/2 n N \pi b_{\max}^2$, multipliziert mit der bei einem solchen Einzelstoß dissipierten Energie δE , Gl. (4.11).

Schließlich erhält man so die Dissipationsrate pro Einheitsvolumen im Limes des verdünnten Systems ($\nu \rightarrow 0$), wenn man wiederum über die Geschwindigkeitsverteilung integriert:

$$\begin{aligned} \gamma &= \frac{\pi}{2} n^2 \int_{u \geq u_0} d^3u b_{\max}^2 u \delta E(u) p(u) \\ &= 2\sqrt{\pi} n^2 d^2 m (1 - e_n^2) T^{3/2} \cdot \exp\left(-\frac{E_q}{mT}\right) \quad . \end{aligned} \quad (4.12)$$

Die Dissipationsrate eines *ungeladenen* granularen Systems im verdünnten Limes ist bereits aus der Literatur bekannt [34, 53, 54]:

$$\gamma_0 = 2\sqrt{\pi} n^2 d^2 m (1 - e_n^2) T^{3/2} \quad . \quad (4.13)$$

Somit ist die Dissipationsrate eines verdünnten geladenen granularen Systems, Gl. (4.12), diejenige eines ungeladenen, Gl. (4.13), multipliziert mit einem Boltzmannfaktor:

$$\gamma = \gamma_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_q}{mT}\right) \quad . \quad (4.14)$$

Man erkennt, dass die Dynamik durch den Quotienten der beiden typischen Energien im System bestimmt wird: Ist die kinetische Energie wesentlich größer als die elektrostatische, $E_q/mT \approx 0$, so geht der Boltzmannfaktor gegen eins und wir sehen das Verhalten eines ungeladenen granularen Systems. Werden hingegen beide Energien vergleichbar, $E_q/mT \geq 1$, so weicht das Verhalten deutlich von dem des ungeladenen Systems ab.

Mit Blick auf das Folgende ist hier erwähnenswert, dass der Boltzmannfaktor der Grenzwert der radialen Verteilungsfunktion dieses Systems im Limes für verdünnte Systeme ist [37]. Dementsprechend also kann Gl. (4.14) auch gesehen werden als:

$$\gamma_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_q}{mT}\right) = \lim_{\nu \rightarrow 0} (\gamma_0 \cdot g_{\text{chs}}) \quad (4.15)$$

wobei g_{chs} die radiale Verteilungsfunktion des geladenen Harten-Kugel Systems (CHS für engl. *Charged Hard Spheres*)² am Kontaktpunkt, $r = d$, ist.

²Das CHS Modell [77, 38] geht, wie auch das OCP Modell, von einer homogenen neutralisierenden Hintergrundladung aus. Bleibt die elektrostatische Wechselwirkung jedoch in den Grenzen von $E_q/mT < 10$ ist im periodischen System das CHS Modell äquivalent zu unserem System bei ausgeschalteter Dissipation.

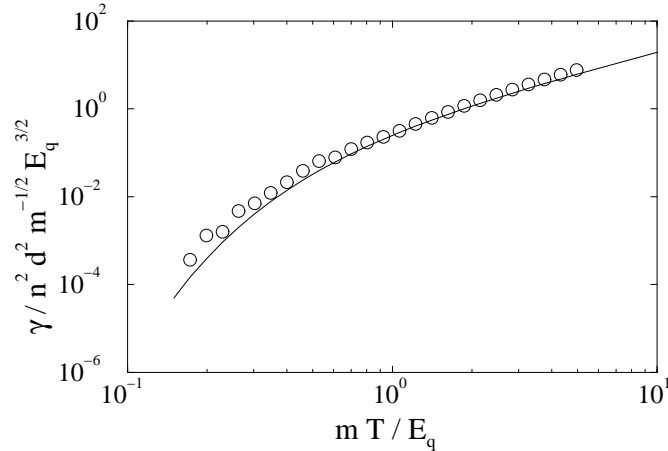


Abbildung 4.2: Doppeltlogarithmische Auftragung der Dissipationsrate γ gegen die granulare Temperatur T . Sowohl die Dissipationsrate als auch die granulare Temperatur wurden durch geeignete Faktoren dimensionslos gemacht. Die Kreise symbolisieren Simulationsergebnisse eines Systems der Packungsdichte $\nu = 0.001$ und mit dem Restitutionskoeffizienten $e_n = 0.9$, die Kurve entspricht Gl. (4.12) mit $e_n = 0.9$.

4.1.3 Vergleich mit der Simulation

Die analytische Herleitung der Dissipationsrate (4.12) geschah unter der Annahme eines vollkommen verdünnten Systems, so konnten wir voraussetzen, dass der boltzmannsche Stoßzahlansatz in guter Näherung erfüllt ist. Nun soll das analytische Ergebnis mit einer Computersimulation eines verdünnten Systems verglichen werden. Leider kann in einer zeitschrittgesteuerten Molekulardynamiksimulation immer nur ein System endlicher Packungsdichte untersucht werden. Weiterhin wird der Rechenzeitbedarf größer, je verdünnter das System wird, weil die Zahl der Stöße in der Simulationszeit mit der Dichte zunimmt (Gleichung (4.5)) und damit umgekehrt: Will man stark verdünnte Systeme betrachten, werden die Zeiten zwischen den einzelnen Kollisionen beliebig lang, so dass die Simulationen praktisch undurchführbar werden, will man eine gegebene Zahl von Stößen betrachten. Dieses Problem, das bei einer ereignisgesteuerten Molekulardynamik nicht besteht, grenzt die praktisch berechenbaren Dichten nach unten hin ab.

Abbildung 4.2 zeigt die Simulation eines Systems der Packungsdichte $\nu = 0.001$. Für hohe Temperaturen $T > E_q/m$ nähert sich die Dissipationsrate asymptotisch der des ungeladenen Gases. Hier ist γ im Wesentlichen proportional zu $T^{3/2}$. Niedrige Temperaturen dagegen bedeuten einen erhöhten Einfluss der elektrostatischen Abstoßung zwischen den Teilchen. Die Simulationsergebnisse fallen unter die $T^{3/2}$ Gerade in der doppeltlogarithmischen Auftragung, d.h. die Dissipationsrate

wird kleiner als die des ungeladenen Systems.

Die analytisch berechnete Dissipationsrate (4.12) ist in Abbildung 4.2 durch die durchgezogene Kurve symbolisiert. Durchweg liegen die analytischen Werte unter den Werten der Simulation, wenn auch die Übereinstimmung für hohe Temperaturen besser ist. Trotz der Abweichung, zeigt die analytische Kurve jedoch qualitativ dasselbe Verhalten wie die Simulationswerte: Die $T^{3/2}$ -Abhängigkeit für hohe Temperaturen und das Einbrechen der Dissipationsrate, wenn Temperaturen kleiner als E_q/m erreicht werden.

Das Abweichen der Simulationsergebnisse von der analytischen Form (4.12) ist auf die endliche, nicht verschwindende Dichte des simulierten Systems zurückzuführen. Die Näherung für verdünnte Systeme unterschätzt die Dissipationsrate. Dies gilt sowohl im Bereich hoher Temperaturen, in dem der Einfluss der Ladung immer geringer wird, als auch im elektrostatisch dominierten Fall niedriger Temperaturen. Dennoch legt die Ähnlichkeit der analytischen Lösung für verdünnte Systeme mit den Simulationsergebnissen nahe, dass auch die Dissipationsrate dichter Systeme in der Form von Gl. (4.12) beschrieben werden kann.

Das Verhalten des elektrisch geladenen granularen Systems wird durch das Verhältnis der beiden Energieskalen $m T$ und E_q zueinander bestimmt. Die Dissipationsraten von Systemen endlicher Dichte weichen leicht von der analytischen Lösung für verdünnte Systeme ab, obwohl diese qualitativ den Verlauf richtig beschreibt.

4.2 Dichte Systeme

Der vorherige Abschnitt zeigte, dass die Dissipationsrate dichter Systeme abweicht von der analytischen Lösung, die unter der Annahme einer verschwindenden Packungsdichte gewonnen wurde. Hier wollen wir nun eine Erweiterung des analytischen Ausdrucks zu höheren Dichten vorstellen.

4.2.1 Enskog Erweiterung

Die erhöhte Dissipation bei großen Temperaturen ($T \gg E_q/m$) ist einzig ein Merkmal des Harten-Kugel Gases, da hier die Ladungen keine Rolle mehr spielen. Dass die Teilchen sich nicht weiter nähern können als bis zum Abstand ihres Durchmessers, führt zu dem sogenannten *Volumenausschlusseffekt*.³ Die möglichen Zustände im Phasenraum werden geringer und so erhöht sich die Zahl der Stöße pro Zeiteinheit. Gehen wir sogar in den Limes der dichtesten Kugelpackung ($\nu \rightarrow 0.74$), so „stoßen“ die Teilchen permanent und eine Stoßfrequenz wäre nicht mehr vernünftig definiert.

³engl.: excluded volume effect.

4 Kollisionskühlung

Quantitativ lässt sich die Erhöhung durch die *radiale Verteilungsfunktion* am Kontaktpunkt fassen. Nach Enskog wird die Zweiteilchenverteilungsfunktion mit der radialen Verteilungsfunktion des Harten-Kugel Gases am Kontaktpunkt multipliziert. Ohne auf Details einzugehen, soll hier kurz die Situation klar gemacht werden: In der Herleitung der Dissipationsrate (4.12) wurden jegliche Korrelationen der Teilchen vernachlässigt. Der Volumenausschlusseffekt eines realen Harte-Kugel Gases führt nun aber zu einer erhöhten Stoßrate oder zu einer erhöhten Wahrscheinlichkeit, zwei Teilchen im Abstand $r = d$ zu finden. Diese Erhöhung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Vergleich zum unkorrelierten (idealen) Gas wird gerade durch die radiale Verteilungsfunktion angegeben. Dementsprechend ist auch die Dissipationsrate damit zu erweitern. Es ergibt sich eine modifizierte Dissipationsrate für das dichte ungeladene granulare Gas von: [65]

$$\gamma = \gamma_0 \cdot g_{\text{hs}}(\nu) \quad (4.16)$$

wobei γ_0 Gleichung (4.13) entspricht und $g_{\text{hs}}(\nu)$ die radiale Verteilungsfunktion des Harten-Kugel Systems am Kontaktpunkt ist. Da im Harte-Kugel Gas keine potentielle Energie definiert ist (die Zweiteilchenwechselwirkung ist entweder null oder unendlich), hängt die radiale Verteilungsfunktion nicht von der Temperatur ab, sondern nur von der Packungsdichte. 1969 haben Carnahan und Starling eine exzellente analytische Approximation gefunden: [15]

$$g_{\text{hs}}(\nu) = \frac{2 - \nu}{2(1 - \nu)^3} \quad (4.17)$$

Da das geladene granulare System für hohe Temperaturen immer ähnlicher dem ungeladenen wird, erwarten wir, dass die Dissipationsrate sich asymptotisch der Kurve von Gleichung (4.16) nähert.

In Abbildung 4.3 sind Simulationen verschiedener Packungsdichte ν dargestellt. Zusätzlich zu der aus Abbildung 4.2 bekannten Normierung wurde die gemessene Dissipationsrate γ entsprechend Gl. (4.16) durch die radiale Verteilungsfunktion geteilt, damit der Bereich hoher Temperaturen — in dem nur noch der Harte-Kugel Anteil zählt — für die verschiedenen Systeme auf eine Kurve zusammenfällt. Man erkennt deutlich, dass dies tatsächlich für $T \gg E_q/m$ zutrifft und der theoretische Wert des ungeladenen granularen Gases, symbolisiert durch die Gerade, erreicht wird.

Bei niedrigeren Temperaturen zeigt sich wie erwartet der Effekt der elektrostatischen Abstoßung: Die Teilchen kollidieren seltener als im ungeladenen Fall und die Dissipationsrate nimmt ab, liegt also in der Auftragung unterhalb der Geraden. Die Stärke dieser Reduzierung hängt aber von der Packungsdichte der Systeme ab! Man beobachtet, dass je dichter ein System ist, desto schwächer wirkt sich der Effekt der elektrostatischen Abstoßung aus und so folgt das dichteste System, $\nu = 0.216$, schon fast der Geraden des ungeladenen granularen Gases.

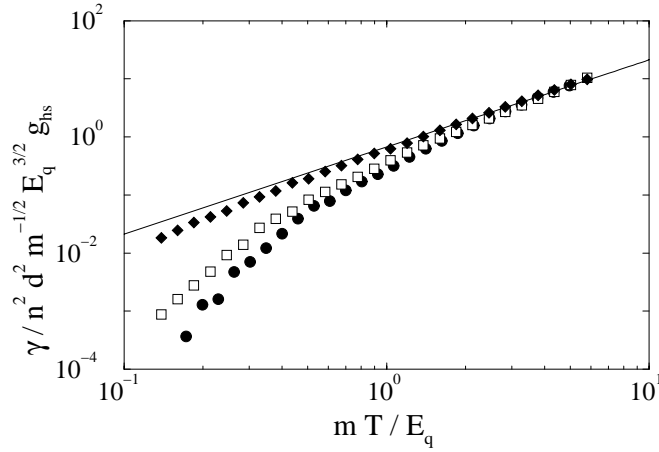


Abbildung 4.3: Auftragung der Dissipationsraten entsprechend Abb. 4.2. Hier wurde γ zusätzlich mit der radiale Verteilungsfunktion aus Gl. (4.17) normiert. Die Kreise entsprechen einem System der Packungsdichte $\nu = 0.001$, die Quadrate $\nu = 0.015625$ und die Rauten $\nu = 0.216$. Alle Systeme haben den Restitutionskoeffizienten $e_n = 0.9$. Die durchgezogene Linie folgt Gl. (4.16).

4.2.2 Reduzierte Coulombbarriere

Durch den Vergleich der Computersimulationen wurde in Abbildung 4.2 deutlich, dass sich der Einfluss der elektrischen Ladung auf die Dissipationsrate über einen Boltzmannfaktor formulieren lässt. Für dichte Systeme erhöht der Volumenausschlusseffekt die Dissipationsrate, was über die Multiplikation der Rate γ_0 im ungeladenen System mit $g_{hs}(\nu)$ berücksichtigt wird. Für das dichte geladene granulare System machen wir somit folgenden Ansatz für die Dissipationsrate:

$$\gamma = \gamma_0 \cdot g_{hs}(\nu) \cdot \exp\left(-\frac{E_{\text{eff}}(\nu)}{m T}\right) \quad . \quad (4.18)$$

Wiederum ist γ_0 durch Gl. (4.13) und g_{hs} durch Gl. (4.17) gegeben.

Der Boltzmannfaktor enthält nun im Gegensatz zu der analytischen Lösung Gl. (4.12) eine *effektive* Energiebarriere $E_{\text{eff}}(\nu)$, die von der Packungsdichte abhängen soll. Wir gehen somit davon aus, dass für tiefe Temperaturen⁴, $T < E_q/m$, die Abhängigkeit der Dissipationsrate von der Temperatur neben dem $T^{3/2}$ -Term in γ_0 weiterhin durch einen Boltzmannfaktor dominiert wird. Die effektive Coulombbarriere ist dann für Systeme endlicher Packungsdichte reduziert und nimmt nur für $\nu \rightarrow 0$ den Wert E_q an. Im Limes verschwindender

⁴Die Temperaturen werden auch weiterhin in Einheiten von E_q/m angegeben und nicht etwa in Abhängigkeit von der effektiven Energiebarriere.

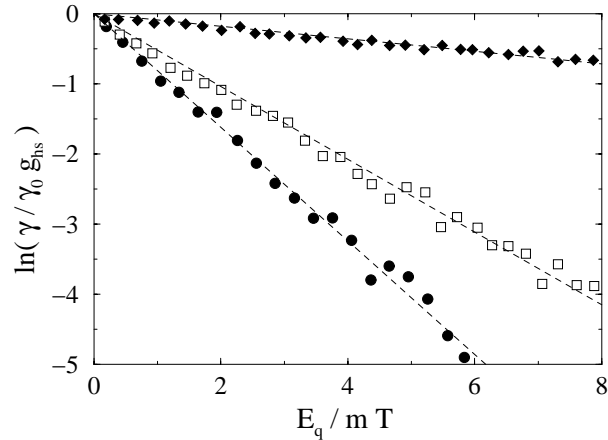


Abbildung 4.4: Arrheniusauftragung der Dissipationsraten. Die Symbole geben dieselben Systeme wie in Abbildung 4.3 an. Die eingezeichneten Ausgleichsgeraden bestimmen das Verhältnis von $-E_{\text{eff}}$ zu E_q und besitzen die Steigungen von -0.80 , -0.52 und -0.09 .

Ladung, $E_{\text{eff}}/mT \rightarrow 0$, gibt der Ansatz auch den Grenzfall des ungeladenen granularen Systems, Gl. (4.16), wieder.

Zur Überprüfung des Ansatzes und zur Bestimmung der effektiven Coulombbarriere bietet sich eine *Arrheniusauftragung* an: In Abbildung 4.4 haben wir die Dissipationsraten der drei Systeme aus Abbildung 4.3 erneut aufgetragen. Auf der Abzisse wurde die skalierte inverse Temperatur, E_q/mT , aufgetragen und auf der Ordinate $\ln(\gamma/\gamma_0 g_{\text{hs}})$, so dass man entsprechend des Ansatzes (4.18) aus der Steigung das Verhältnis von $-E_{\text{eff}}/E_q$ für die jeweilige Packungsdichte ablesen kann.

Die Datenpunkte zeigen im Rahmen der statistischen Streuung eine lineare Abhängigkeit, womit ihre Beschreibung über Gleichung (4.18) gerechtfertigt ist. Die so definierte effektive Coulombbarriere nimmt mit steigender Packungsdichte ab und für das dichteste System ($\nu = 0.216$) beträgt sie nur noch 9% der Barriere des verdünnten Systems.

Eindimensionales Modell

Wie ist diese Reduzierung der Coulombabstoßung zu verstehen? Wir haben bei der Betrachtung des verdünnten Systems uns nur auf die Stoßpartner konzentriert und die übrigen Teilchen vernachlässigt. Im dichten System werden diese dritten Teilchen aber wichtig und bewirken, dass die Coulombbarriere verringert wird. Denn indem die Nachbarn der beiden Kollisionspartner diese von sich abstoßen, führen sie die Kollisionspartner zusammen.

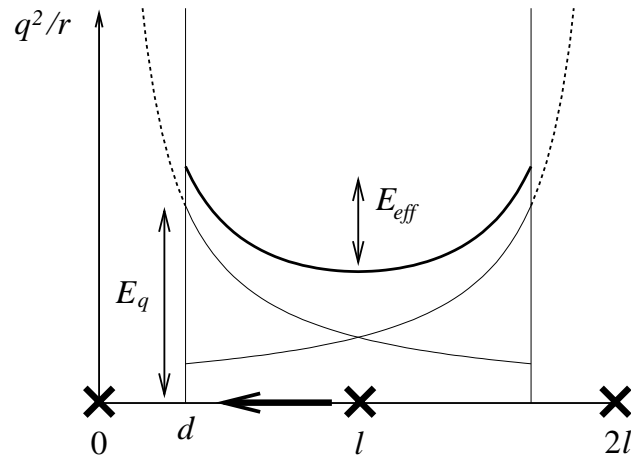


Abbildung 4.5: *Eindimensionale Skizze des dichten Systems. Das Teilchen an der Position ℓ wird mit dem Teilchen im Ursprung kollidieren. Hierbei spürt es nicht nur die abstoßende Coulombkraft des Stoßpartners, sondern auch die treibende Kraft des Teilchens bei 2ℓ .*

Zur Verdeutlichung dieses Effekts soll nun eine eindimensionale Skizze dienen, Abbildung 4.5. Vereinfacht denken wir uns nur den einen Stoßpartner beweglich. Um mit dem im Ursprung sitzenden Teilchen zu stoßen, muss das mittlere Teilchen dessen Coulombabstoßung überwinden. Im verdünnten System sind die Teilchen vor dem Stoß unendlich weit voneinander entfernt, d.h. die zu überwindende Barriere ist die Coulombenergie am Kontaktpunkt, $E_q = q^2/d$, und andere Teilchen zählen nicht. Im dichten System hingegen existiert ein endlicher typischer Abstand ℓ zwischen den Nachbarn und die Coulombwechselwirkung des Nachbarn bei $r = 2\ell$ ist auch am Kontaktpunkt, $r = d$, noch spürbar. Das stoßende Teilchen erfährt nun also die addierte Coulombwechselwirkung von seinem Stoßpartner und dem direkten Nachbarn zur Rechten⁵. Dieses *effektive* Coulombpotential ist in der Skizze fett gezeichnet und man erkennt, dass hier die Energiebarriere E_{eff} gegenüber E_q reduziert ist. Nimmt man den verdünnten Limes an, $\ell \rightarrow \infty$, so nähert sich das effektive Potential immer mehr dem Zweiteilchen Coulombpotential. Das Verhältnis von ℓ zu d bestimmt wie stark die Energiebarriere reduziert ist.

Effektives Potential

Nachdem im letzten Unterabschnitt qualitativ die Reduzierung der Coulombbarriere erklärt wurde, wollen wir nun zu ihrer quantitativen Beschreibung im

⁵Die übrigen Teilchen im System wechselwirken natürlich auch noch mit dem Stoßteilchen, doch ihr Einfluss soll hier der Klarheit wegen vernachlässigt werden.

4 Kollisionskühlung

dreidimensionalen System gelangen. Wir gehen davon aus, dass der Einfluss der übrigen Teilchen auf das Kollisionspaar näherungsweise *isotrop* ist und sich so ein effektives Paarpotential für die kollidierenden Teilchen formulieren lässt:

$$\Phi_{\text{eff}}(r) = \frac{q^2}{r} + \Phi_{\text{al}}(r) \quad . \quad (4.19)$$

Hier ist $\Phi_{\text{al}}(r)$ die Wechselwirkung der Kollisionspartner mit allen anderen Teilchen außer ihnen selbst, wenn das Kollisionspaar den Abstand r hat. Wir bezeichnen $\Phi_{\text{al}}(r)$ im Folgenden als das Molekularfeldpotential. Aus Abbildung 4.5 wird deutlich, dass der typische Nachbarabstand $r = \ell$ einem Minimum des effektiven Potentials gleichkommt, also gilt:

$$\left. \frac{d\Phi_{\text{al}}}{dr} \right|_{r=\ell} = \frac{q^2}{\ell^2} \quad . \quad (4.20)$$

Potentiale sind immer nur bis auf eine additive Konstante bestimmt, und so fordern wir, dass das effektive Potential (4.19) am Punkt $r = \ell$ verschwindet, $\Phi_{\text{eff}}(\ell) = 0$. Diese additive Konstante soll in Φ_{al} enthalten sein, so dass wir eine zweite Bedingung erhalten:

$$\Phi_{\text{al}}(\ell) = -\frac{q^2}{\ell} \quad . \quad (4.21)$$

Die effektive Energiebarriere ergibt sich dann zu:

$$E_{\text{eff}} = \Phi_{\text{eff}}(d) - \Phi_{\text{eff}}(\ell) \quad (4.22)$$

$$= \frac{q^2}{d} + \Phi_{\text{al}}(d) \quad . \quad (4.23)$$

Für Paarabstände von $r < \ell$ machen wir die Annahme, dass eine lineare Entwicklung Φ_{al} gut genug approximiert:

$$\Phi_{\text{al}}(r) \approx \frac{q^2}{\ell} \left(c_0 + c_1 \frac{r}{\ell} \right) \quad , \quad (4.24)$$

wobei die Entwicklungskoeffizienten c_0 und c_1 sich aus den Annahmen (4.20) und (4.21) ergeben zu:

$$c_0 = -2 \quad \text{und} \quad c_1 = 1 \quad . \quad (4.25)$$

So folgt daraus für die effektive Energiebarriere:

$$E_{\text{eff}} = \frac{q^2}{d} - \frac{q^2}{\ell} \left(2 - \frac{d}{\ell} \right) \quad (4.26)$$

oder mit $E_{\text{q}} = q^2/d$:

$$E_{\text{eff}}/E_{\text{q}} = \left(1 - \frac{d}{\ell} \right)^2 \quad . \quad (4.27)$$

Das Verhältnis ist wegen $\ell \geq d$ immer kleiner als eins, was der Beobachtung der effektiv reduzierten Energiebarriere entspricht. Nur im verdünnten Limes $\ell/d \rightarrow \infty$ wirkt die volle Coulombabstoßung, während für die dichteste Packung, $\ell = d$, die effektive Energiebarriere verschwindet.

Abhängigkeit der effektiven Coulombbarriere von der Packungsdichte

Der typische Nachbarabstand ℓ im System skaliert mit der Anzahldichte wie $\ell \propto n^{-1/3}$, so dass das Verhältnis von d/ℓ laut der Definition der Packungsdichte (2.4) gegeben ist durch:

$$d/\ell \propto \nu^{1/3} \quad . \quad (4.28)$$

Das heißt, laut Gleichung (4.27) hängt die effektive Energiebarriere quadratisch von der dritten Wurzel der Packungsdichte ab.

Um die obigen Annahmen zu testen und die Form der Abhängigkeit zu bestätigen, bieten sich Simulationen von Systemen verschiedener Packungsdichte an: In Abbildung 4.6 haben wir die effektiven Energiebarrieren gegenüber der Packungsdichte aufgetragen. Die Barrieren wurden für jedes System durch eine Arrheniusauftragung wie in Abbildung 4.4 ermittelt. Die Auftragung erfolgt wegen (4.28) gegen die dritte Wurzel der Packungsdichte. Die Datenpunkte haben in guter Näherung eine quadratische Abhängigkeit von $\nu^{1/3}$, entsprechend den Gleichungen (4.27) und (4.28). Auch zeigt sich, dass der analytisch berechnete Wert des verdünnten Systems, E_q , als gedachte Fortsetzung der Datenpunkte erreicht wird. Wie bereits in Kapitel 4.1.3 erwähnt, erlaubt uns der Algorithmus keine Simulationen in der Nähe von $\nu \rightarrow 0$.

Um Gleichung (4.27) mit den Simulationsdaten vergleichen zu können, müssen wir eine Annahme über den Nachbarabstand ℓ machen. Durch die Coulombwechselwirkung und den Volumenausschlusseffekt wird dem System eine *Nahordnung* induziert, welche mit einer kurzreichweiten „Gitterstruktur“ verglichen werden kann. Tabelle 4.1 gibt das Verhältnis zwischen d/ℓ an, wenn man ℓ als

Struktur	d/ℓ	ν_{\max}
FCC	$\sqrt{2} \left(\frac{3}{2\pi}\right)^{1/3} \nu^{1/3} \approx 1.11 \nu^{1/3}$	0.74
BCC	$\frac{2}{\sqrt{3}} \left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/3} \nu^{1/3} \approx 1.14 \nu^{1/3}$	0.68
SC	$\left(\frac{6}{\pi}\right)^{1/3} \nu^{1/3} \approx 1.24 \nu^{1/3}$	0.52

Tabelle 4.1: Verhältnis von d/ℓ für verschiedene Nahordnungen. Hierbei gibt ν_{\max} die größte Packungsdichte in der jeweiligen Gitterstruktur an.

den Nächsten-Nachbar-Abstand des einfach kubischen Gitters (SC), des kubisch raumzentrierten Gitters (BCC) oder des kubisch flächenzentrierten Gitters (FCC)

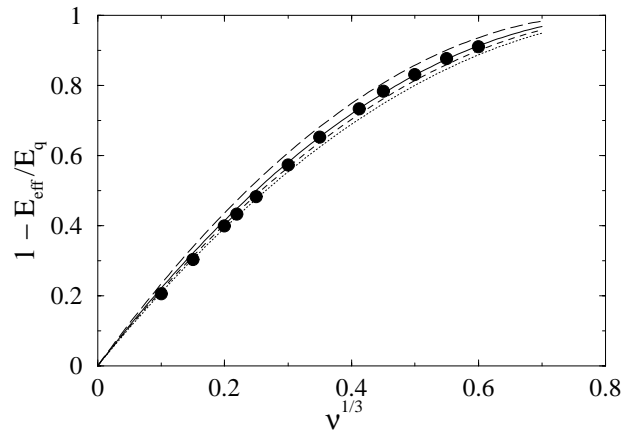


Abbildung 4.6: Abhängigkeit der effektiven Energiebarriere gegenüber der Packungsdichte. Die Punkte geben Simulationsergebnisse für Packungsdichten von $\nu = 0.001$ bis $\nu = 0.216$ an. Die Kurven geben den Verlauf von Gl. (4.27) für verschiedene Nahordnungen an: SC (oberste Kurve), BCC (dritte von oben), FCC (unterste). Die durchgezogene Kurve gibt einen Fit an die Datenpunkte für Systeme hoher Packungsdichte wieder. Sie entspricht einem Verhältnis von $d/\ell = 1.17\nu^{1/3}$.

annimmt. Mit diesen Werten für d/ℓ kann $E_{\text{eff}}/E_{\text{q}}$ entsprechend Gleichung (4.27) berechnet werden. In Abbildung 4.6 sind die Kurven für die drei angegebenen Nahordnungen eingezeichnet. Es wird deutlich, dass das Verhalten nicht durch eine einfach kubische Nahordnung (SC) beschrieben werden kann. Im Bereich geringer Packungsdichten ist die Annahme einer FCC oder BCC Nahordnung gleich gut, für große Packungsdichte hingegen scheint die BCC-Annahme überlegen zu sein. Die zweite Kurve von oben gibt einen Fit an die Punkte für hohe Packungsdichten wieder. Das Verhältnis liegt mit $d/\ell = 1.17\nu^{1/3}$ zwischen dem für SC und BCC. Man sieht allerdings, dass dieser Fit nur für hohe Packungsdichten gut ist und dass die effektiven Energiebarrieren von Systemen niedrigerer Dichte unterschätzt werden. Der Grund dieser Abweichung liegt in der Nichtlinearität des Molekularfeldpotentials, worauf wir in Kapitel 5.2 eingehen werden.

Die Reduktion der Coulombabstoßung für dichte Systeme ist aus der Plasmaphysik bekannt. Sie bestimmt die Reaktionsraten der Nukleonen in dichten Sternen, die für bestimmte Bereiche der Temperatur und Dichte mit dem klassischen One Component Plasma (OCP) Modell betrachtet werden können [87, 22, 49, 52, 4]. In der Literatur zum OCP wurde der Einfluss der benachbarten Ionen (bei uns als Φ_{al} bezeichnet) in einem sogenannten *Screening Potential* zusammengefasst. Diese Bezeichnung ist irreführend, da hier nicht die Abschirmung durch die gegensätzlich geladenen Elektronen gemeint ist, denn diese werden im OCP als homogen verschmiert angenommen und können demnach nicht polarisiert werden. Vielmehr erniedrigen auch im OCP die repulsiven Kräfte der übrigen Ionen effektiv die Coulombbarriere für reagierende Teilchen. Die einfachsten Approximationen für diese Reduktion sind auch im OCP linear [22, 49].

Erwähnenswert ist in diesem Zusammenhang, dass das OCP für hohe Kopplungen, $\Gamma \approx 168$, in eine BCC Struktur kristallisiert [99, 100] und man hier die Reduktion der Coulombabstoßung auch für niedrige Kopplungen über eine BCC Struktur zu erklären versucht [87]. Auch im geladenen granularen System kommt der BCC Wert dem Fit in Abbildung 4.6 am nächsten, obwohl für höhere Packungsdichten der Harte-Kugel Einfluss das System sicherlich von einer BCC-artigen Nahordnung entfernen wird.

Diskussion

Wir haben in diesem Kapitel Simulationen von geladenen granularen Systemen mit der kinetischen Theorie für geringe Packungsdichten verglichen. Es zeigte sich, dass bei endlichen Packungsdichten nicht nur die Dissipationsrate durch den Volumenausschlusseffekt erhöht ist, sondern auch, dass die Coulombbarriere reduziert wird. Dies geschieht durch die Wechselwirkung mit den nicht am Stoß beteiligten Teilchen, die wir in einem Molekularfeld, Φ_{al} , zusammengefasst haben. Der Verlauf der effektiven Coulombbarriere, E_{eff} , von simulierten Systemen konnte durch eine lineare Approximation des Molekularfeldpotentials erklärt

werden.

4.3 Abkühlung

Nachdem die Dissipationsrate bestimmt ist, wollen wir in diesem Kapitel das Abkühlen eines homogenen Systems betrachten, also die Zeitentwicklung der granularen Temperatur, $T(t)$. Im ungeladenen Gas ist die Gesamtenergie vollkommen durch die kinetische Energie ($E_{\text{kin}} = 3NmT/2$) bestimmt. So ergibt sich mit der Dissipationsrate des ungeladenen Systems (4.16) und (4.13) für die Kühlrate der granularen Temperatur [70, 53, 34]:

$$\frac{dT}{dt} = -b \cdot T^{3/2} \quad . \quad (4.29)$$

Diese Differentialgleichung⁶ hat die Lösung [67]:

$$T(t) = T_0 \left(1 + t \frac{b\sqrt{T_0}}{2} \right)^{-2} \quad . \quad (4.30)$$

Hier ist T_0 die Temperatur zum Zeitpunkt $t = 0$. Die skalierte Temperatur $T(t)/T_0$ eines ungeladenen granularen Systems entwickelt sich für große Zeiten also wie t^{-2} . Wegen der dort auftretenden Clusterbildung geht das Potenzgesetz jedoch asymptotisch in ein anderes über.

Abbildung 4.7 zeigt den Verlauf von $T(t)/T_0$ für ein geladenes System in einer doppeltlogarithmischen Auftragung. Die Zeitachse wurde mit einer natürlichen Zeiteinheit f_q^{-1} skaliert. Diese ist das Inverse der Kollisionsfrequenz für die charakteristische granuläre Temperatur E_q/m . Sie ergibt sich mit (4.5) zu:

$$f_q = 4\sqrt{\pi} nd^2 \sqrt{E_q/m} \exp(-1) \quad . \quad (4.31)$$

Die Steigung der Kurve wird mit zunehmender Zeit immer flacher und es zeigt sich nicht der asymptotische t^{-2} -Verlauf des ungeladenen Gases, wie der Vergleich mit der gestrichelten Geraden der Steigung -2 deutlich macht. Das Abkühlen verläuft wegen der geringeren Dissipationsrate wesentlich langsamer als für ein ungeladenes System.

Für die mathematische Beschreibung des Prozesses muss erst die Gl. (4.29) entsprechende Differentialgleichung gefunden werden. Im geladenen System stehen wir vor der Schwierigkeit, dass hier auch die Coulombenergie zur Gesamtenergie beiträgt. Dementsprechend gilt:

$$\gamma = -\frac{1}{V} \frac{d}{dt} (E_{\text{kin}} + U_{\text{mi}}) \quad . \quad (4.32)$$

⁶Die verschiedenen Vorfaktoren wurden der Übersicht wegen in einem Faktor b zusammengefasst.

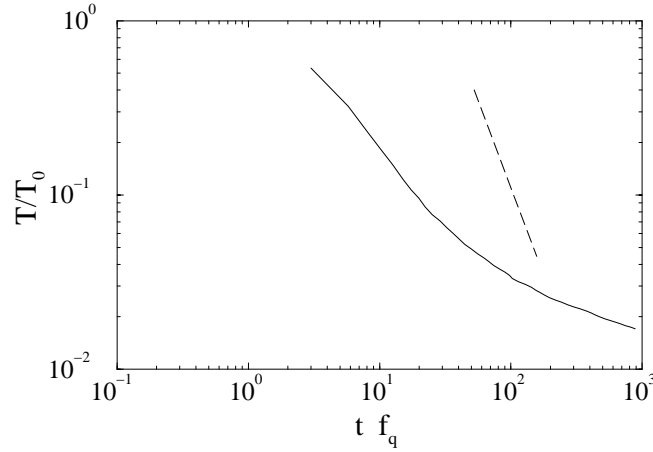


Abbildung 4.7: Abkühlen eines geladenen granularen Systems mit der Packungsdichte $\nu = 3.375 \cdot 10^{-3}$ und dem Restitutionskoeffizienten $e_n = 0.85$. Doppeltlogarithmische Auftragung der skalierten granularen Temperatur gegen die skalierte Zeit. Die gestrichelte Gerade hat die Steigung -2 .

Gehen wir davon aus, dass für langsames Abkühlen (*quasistatisches Gleichgewicht*) gilt:

$$\frac{d}{dt}U_{\text{mi}} = \frac{dT}{dt} \cdot \frac{d}{dT}U_{\text{mi}}(T) \quad . \quad (4.33)$$

Somit ergibt sich für die granulare Temperatur die Differentialgleichung:

$$\frac{dT}{dt} = -\gamma(T) V \left(\frac{3}{2} N m + \frac{dU_{\text{mi}}}{dT}(T) \right)^{-1} \quad . \quad (4.34)$$

Diese Differentialgleichung enthält noch die unbekannte Abhängigkeit der elektrostatischen Energie von der Temperatur. Gehen wir nun in erster Näherung davon aus, dass in dem betrachteten Temperaturbereich die Änderung der elektrostatischen Energie im Vergleich zu der der kinetischen Energie vernachlässigt werden kann, so erhalten wir mit (4.18) und (4.13) folgende Differentialgleichung für die Temperatur:

$$\frac{dT}{dt} = -\frac{4}{3} \sqrt{\pi} n d^2 (1 - e_n^2) T^{3/2} \cdot g_{\text{hs}} \cdot \exp\left(-\frac{E_{\text{eff}}}{m T}\right) \quad . \quad (4.35)$$

Eine Lösung dieser Differentialgleichung ist nur numerisch möglich, doch eine einfache Variablentransformation verhilft zu einer analytisch lösbaren Differentialgleichung: Da laut Gl. (4.5) die Kollisionsrate immer größer als Null ist, ist die

4 Kollisionskühlung

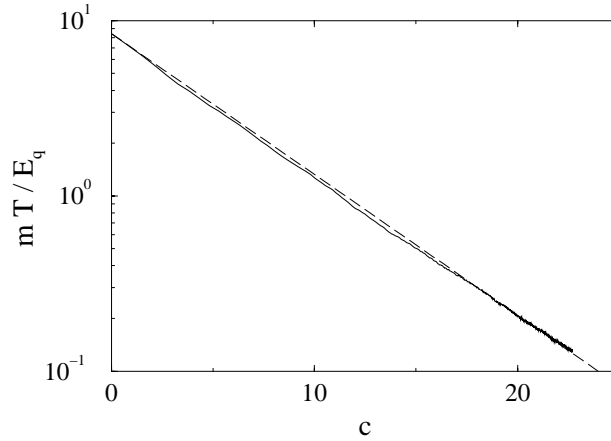


Abbildung 4.8: Die Abbildung bezieht sich auf dieselben Daten wie Abbildung 4.7, $T_0 = 8.4 E_q/m$. Die Auftragung ist halblogarithmisch und auf der Abzisse ist die Anzahl der Stöße pro Teilchen seit Beginn des Abkühlens aufgetragen. Die gestrichelte Gerade gibt den Verlauf gemäß Gleichung (4.39) wieder.

Gesamtzahl der Kollisionen streng monoton wachsend mit der Zeit. Das heißt, wenn man eine Größe $c(t)$ definiert als

$$c(t) := \frac{\text{Zahl der Kollisionen seit } t = 0}{N} \quad , \quad (4.36)$$

so kann man in Gleichung (4.35) die Variablentransformation $dT/dt = (dT/dc)(dc/dt)$ vornehmen, wobei sich dc/dt aus Gl. (4.5) und der Erweiterung für dichte Systeme, Gl. (4.16), ergibt zu:

$$\frac{dc}{dt} = 2\sqrt{\pi} d^2 \sqrt{T} \cdot g_{\text{hs}} \cdot \exp\left(-\frac{E_{\text{eff}}}{mT}\right) \quad . \quad (4.37)$$

Hiermit erhalten wir schließlich für die Differentialgleichung der Temperatur:

$$\frac{dT}{dc} = -\frac{2}{3} (1 - e_n^2) T(c) \quad (4.38)$$

mit der Lösung:

$$T(c) = T_0 \cdot \exp\left(-\frac{2}{3} (1 - e_n^2) c\right) \quad . \quad (4.39)$$

Die Abnahme der granularen Temperatur mit der Anzahl der Stöße ist also vollkommen unabhängig von der Ladung der Teilchen, denn deren Einfluss steckt in der Abhängigkeit dc/dt und wurde durch die Variablentransformation separiert.

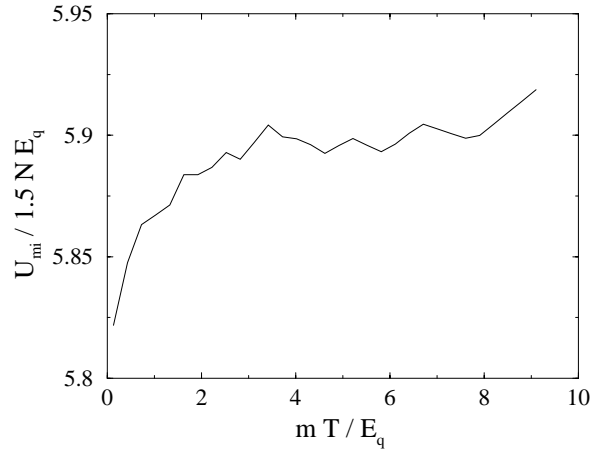


Abbildung 4.9: *Minimum Image Coulombenergie U_{mi} gegen die granulare Temperatur für das System von Abbildung 4.7 und 4.8.*

So ist es nicht verwunderlich, dass Gleichung (4.39) identisch ist für ein ungeladenes Gas [29, 75]. Abbildung 4.8 zeigt die Auftragung der granularen Temperatur gegen die Anzahl der Stöße. Man erkennt, dass der Verlauf des simulierten Systems mit der analytischen Lösung $T(c)$ übereinstimmt. Dies bedeutet, dass für den hier dargestellten Temperaturbereich die Änderung der potentiellen Energie tatsächlich zu vernachlässigen ist.

Abbildung 4.9 gibt die Abhängigkeit der Minimum Image Coulombenergie gegen die granulare Temperatur wieder. Die Energie U_{mi} wurde mit der kinetischen Energie des Systems der Temperatur E_q/m skaliert. Der Kurvenverlauf ist für kleine Temperaturen deutlich steiler als für hohe Quotienten mT/E_q . Dementsprechend wird der dU_{mi}/dT Term in Gleichung (4.34) für zunehmend kühlere Systeme nicht mehr zu vernachlässigen sein. Für den betrachteten Temperaturbereich können wir nun den Fehler durch die Vernachlässigung abschätzen: Während $\Delta T \approx 9 \cdot E_q/m$ ist, steigt U_{mi} um ca. 3% an. Nehmen wir für die potentielle Energie einen Mittelwert von $5.9 \cdot 1.5NE_q$, so erhalten wir

$$\frac{\Delta U_{\text{mi}}}{\Delta T} \approx \frac{0.03 \cdot 5.9}{9} \cdot 1.5Nm \quad (4.40)$$

für die gesamte dargestellte Abkühlphase einen Wert von $\Delta U_{\text{mi}}/\Delta T \approx 0.02 \cdot 1.5Nm$. Das heißt für diesen Temperaturbereich war die Änderung der potentiellen Energie nur 2% der Änderung der kinetischen Energie und somit war die Vernachlässigung gerechtfertigt, was durch die gute Übereinstimmung der simulierten $T(c)$ Kurve und der analytischen Lösung bestätigt wird.

4.4 Diskussion

Wie in der Einleitung beschrieben, treten in abkühlender granularer Materie für bestimmte Parameterbereiche spontane Inhomogenitäten auf und das System beginnt Cluster zu bilden. Derartige Zustände wurden in diesem Kapitel für die analytische Herleitung nicht berücksichtigt und in den Simulationen nicht beobachtet. Es ist dennoch anzunehmen, dass für bestimmte Systeme mit beispielsweise sehr niedrigem Restitutionskoeffizienten solche Zustände auch auftreten können. Diese werden allerdings immer nur Transienten in einen wieder vollkommen homogenen Zustand sein, da bei fallender Temperatur die Coulombabstoßung jegliche Dichteinhomogenität wieder vernichten wird. Über die Zeitskalen kann hier allerdings keine Aussage getroffen werden.

Die Modellierung der Stoßdissipation durch einen konstanten normalen Restitutionskoeffizient ist die einfachste Möglichkeit, vor allem für die theoretische Beschreibung, und erweiterte Modelle finden in der kinetischen Theorie granularer Systeme kaum Verwendung. Reibung und tangential Restitution können nur richtig beschrieben werden, wenn die Theorie auch die Rotationsfreiheitsgrade der Teilchen berücksichtigt. Diese spielen vor allem für Systeme mit langanhaltenden Kontakten eine wichtige Rolle, jedoch dürften sie auf die Dissipationsrate durch binäre Kollisionen in einem nicht zu dichten System nur wenig Einfluss haben, weshalb ihre Vernachlässigung hier gerechtfertigt ist.

Wichtiger scheint hier die Einbeziehung der Geschwindigkeitsabhängigkeit des Restitutionskoeffizienten. Diese hängt stark vom Material ab, jedoch zeigt sich universell, dass der Restitutionskoeffizient für kleinere Aufprallgeschwindigkeiten größer wird, der Stoß also hier elastischer ist [32]. Kürzlich zeigten Schwager und Pöschel [97], dass für einen geschwindigkeitsabhängigen Restitutionskoeffizienten die granulare Temperatur langsamer abkühlt als für den Fall eines konstanten Restitutionskoeffizienten. Die Übertragung ihres Modells auf geladene granulare Teilchen ist noch nicht geschehen, es ist aber wahrscheinlich, dass der Einfluss der Ladung wieder durch einen Boltzmannfaktor ausgedrückt werden kann.

Die Beschreibung der Dissipationsrate über die kinetische Theorie ist begrenzt auf nicht zu tiefe Temperaturen. Wir hatten die Theorie bis $mT \geq E_q/10$ mit Computersimulationen getestet, da für tiefere Temperaturen einerseits die Simulationen sehr langwierig sind wegen der geringen Stoßrate und andererseits nur für diesen Temperaturbereich die Minimum Image Beschränkung gerechtfertigt ist. Für den untersuchten Temperaturbereich stimmt die theoretische Beschreibung mit der Simulation gut überein. Für tiefere Temperaturen werden Stöße immer seltener und die langreichweitige Coulombwechselwirkung dominiert das System, während sie für hohe Temperaturen in der vorgenommenen vereinfachten Betrachtung als Störung des Harte-Kugel Gases approximiert werden kann. Ein von Coulombkräften dominiertes System kann nicht mehr über die Boltzmanntheorie beschrieben werden [60], was die obige Theorie auf hohe Temperaturen

begrenzt.

