

5 Radiale Verteilungsfunktion

Wir haben die Dissipationsrate immer unter der Annahme des *Quasigleichgewichts* betrachtet. Das heißt auch, dass zu jedem Zeitpunkt des Abkühlens die Stoßrate identisch ist zu der des zugrundeliegenden *stationären* Systems ohne Dissipation. Im Fall des ungeladenen granularen Systems wäre das korrespondierende nichtdissipative System das Harte-Kugel Gas (HS); sind die granularen Teilchen geladen, so besteht dieser Zusammenhang mit dem Geladenen Harte-Kugel Gas (CHS). Wie wir gesehen haben, ergibt sich aus der Enskog Theorie der dichten Gase die Dissipationsrate für dichte ungeladene Systeme, indem der Wert für verdünnte Systeme mit der radialen Verteilungsfunktion des Harte-Kugel Gases am Kontaktpunkt multipliziert wird, $\gamma = \gamma_0 \cdot g_{\text{hs}}$, Gl. (4.16). Weiterhin ist der Boltzmannfaktor, $\exp(-E_q/mT)$, in der analytischen Lösung für verdünnte geladene System der Grenzwert der Paarkorrelationsfunktion g_{chs} des CHS Modells am Kontaktpunkt für verdünnte Systeme [37]. So ist es einsichtig, dass sich die Dissipationsrate im dichten geladenen granularen System auch alternativ formulieren lässt, durch die Dissipationsrate im vollkommen unkorrelierten System multipliziert mit dem Wert der Paarkorrelationsfunktion des CHS Modells am Kontaktpunkt:

$$\gamma = \gamma_0 \cdot g_{\text{chs}} \quad , \quad (5.1)$$

dabei beinhaltet g_{chs} nun sowohl die Korrelationen durch den Volumenausschluss-effekt des Harte-Kugel Systems, als auch die Korrelationen, die die Coulombwechselwirkungen induzieren. Die Gleichung wird nur dann gelten, wenn Temperatur und Packungsdichte die Beschreibung der Dynamik durch die kinetische Theorie zulassen, wie im Abschnitt 4.4 diskutiert. Aus dem Obigen folgt, dass die radiale Verteilungsfunktion g_{chs} die beiden Limites erfüllen muss:

$$\lim_{\nu \rightarrow 0} g_{\text{chs}} = \exp\left(-\frac{E_q}{mT}\right) \quad \text{und} \quad \lim_{E_q/mT \rightarrow 0} g_{\text{chs}} = g_{\text{hs}} \quad . \quad (5.2)$$

Durch die Einführung der effektiven Coulombbarriere in Kapitel 4.2.2 haben wir demnach mit Gl. (4.18) und (5.1) eine einfache Approximation für die radiale Verteilungsfunktion am Kontaktpunkt gegeben:

$$g_{\text{chs}} \approx g_{\text{hs}} \cdot \exp\left(-\frac{E_{\text{eff}}(\nu)}{mT}\right) \quad . \quad (5.3)$$

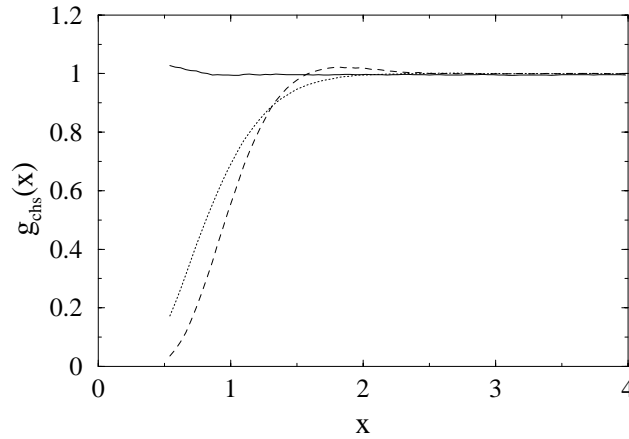


Abbildung 5.1: Radiale Verteilungsfunktion für ein System der Packungsdichte $\nu = 1.5625 \cdot 10^{-2}$ oder $d/a = 0.5$. Die Abstände wurden mit dem Ionensphärenradius skaliert, $x = r/a$. Die durchgezogene Kurve stellt ein Harte-Kugel Gas dar. Für die gepunktete gilt $E_q/m T = 3.9$ und für die gestrichelte $E_q/m T = 7.8$.

Die radiale Verteilungsfunktion des geladenen Harte-Kugel Gases wurde in der Literatur ausgiebig untersucht. 1972 haben Palmer und Weeks [77] mit Hilfe der Mean Spherical Approximation das CHS Modell betrachtet. Sie fanden unter anderem einen analytischen Ausdruck für g_{chs} am Kontaktpunkt. Es zeigte sich aber durch Vergleich mit Simulationsdaten [38], dass ihre Approximation zwar die thermodynamischen Größen gut vorhersagt, die radiale Verteilungsfunktion jedoch stark von den Simulationswerten abweicht. Neuere Arbeiten [84, 57] geben bessere Approximationen für g_{chs} an, wobei jedoch allen gemeinsam ist, dass sie die Paarkorrelationen nicht als analytischen Ausdruck liefern, sondern diese mit Integralgleichungen approximieren, die numerisch gelöst werden müssen. Im Gegensatz zu diesen Theorien gingen wir zur Bestimmung von g_{chs} empirisch vor, indem wir die Simulationen zu Grunde legten und über E_{eff} die radiale Verteilungsfunktion diesen anpassten. Wir erhielten so einen geschlossenen Ausdruck für g_{chs} , was die Formulierung der Dissipationsrate wesentlich kompakter macht. Weiterhin bietet das empirische Vorgehen den Vorteil, dass unsere Approximation dem tatsächlichen Wert exakter entspricht.

5.1 Abhängigkeit vom radialen Abstand

Im Folgenden soll der Verlauf der radialen Verteilungsfunktion bei Abständen größer als der Kugelradius betrachtet werden. Die Abbildungen 5.1, 5.2 und 5.3

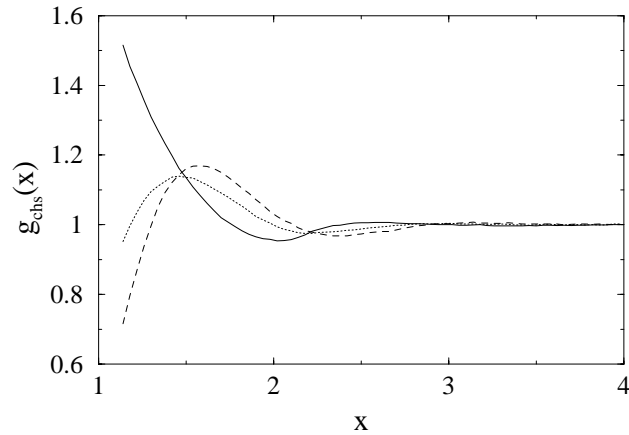


Abbildung 5.2: Radiale Verteilungsfunktion für ein System der Packungsdichte $\nu = 1.6637 \cdot 10^{-1}$ oder $d/a = 1.1$. Die durchgezogene Kurve ist ein Harte-Kugel Gas. Für die gepunktete gilt $E_q/mT = 4.3$ und für die gestrichelte $E_q/mT = 7.8$. Die Skalierung der Abstände ist entsprechend Abb. 5.1.

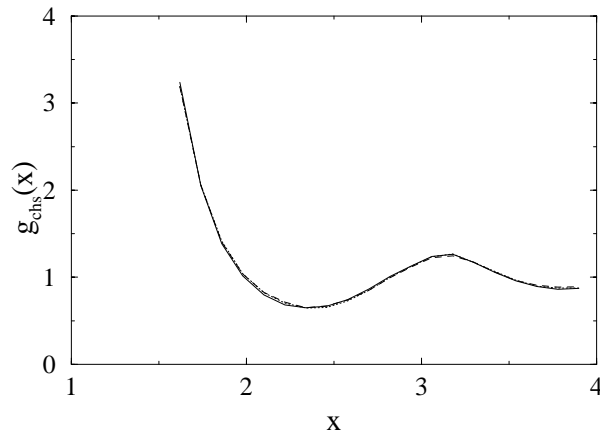


Abbildung 5.3: Radiale Verteilungsfunktion für ein System der Packungsdichte $\nu = 0.45$ oder $d/a = 1.53$. Hier können die Kurven für $E_q/mT = 3.9$ und $E_q/mT = 6.2$ kaum noch von dem Harte-Kugel Ergebnis unterschieden werden. Die Skalierung der Abstände ist entsprechend Abb. 5.1.

stellen diese für simulierte Systeme dar. In den Simulationen haben wir die Dissipation ausgeschaltet, $e_n = 1$, und ließen die Systeme zunächst ins thermodynamische Gleichgewicht relaxieren bevor wir die Messungen der radialen Verteilungsfunktionen starteten. Wir untersuchten Packungsdichten von $\nu = 1.5625 \cdot 10^{-2}$, $\nu = 1.6637 \cdot 10^{-1}$ und $\nu = 0.45$ mit jeweils drei unterschiedlichen Quotienten E_q/mT . Dabei wurde immer ein Quotient als $E_q/mT = 0$ gewählt, also ein reines Harte-Kugel System simuliert. Die radialen Abstände wurden mit dem Ionensphärenradius skaliert, $x = r/a$, wobei der Teilchendurchmesser der kleinstmögliche Abstand ist und weshalb die drei Graphen bei unterschiedlichen Werten starten.

Der Einfluss des Harte-Kugel Anteils im CHS wird für steigende Packungsdichte erwartungsgemäß immer prominenter. Tatsächlich ist es für das System der Abbildung 5.3 kaum noch möglich das CHS vom HS für die gewählten Temperaturen zu unterscheiden. Die weniger dichten Systeme (Abb. 5.1 und 5.2) zeigen ab $x > 3$ keine nennenswerten Korrelationen mehr, während das dritte System langreichweitige Ordnung besitzt (das HS durchläuft bei $\nu \approx 0.5$ [5] einen Phasenübergang erster Ordnung).

An den radialen Verteilungsfunktionen sieht man noch einmal deutlich die Grenzfälle dieses granularen Modells: Für geringe Packungsdichten (Abbildung 5.1) dominiert die Coulombwechselwirkung das System und der Volumenausschlusseffekt des Harte-Kugel Gases hat wenig Einfluss auf den Verlauf der radialen Verteilungsfunktion. Diese ähneln dann auch stark denen des OCP in Abbildung 3.2 auf Seite 30. Für dichtere Systeme, wie in Abbildung 5.3 zu erkennen, wird der Harte-Kugel Einfluss bestimmend und die Ladung hat zumindest für den dargestellten Temperaturbereich keine Auswirkung. An diesen drei Schaubildern wird klar, wie stark die Packungsdichte den effektiven Einfluss der Teilchenladungen reduziert.

5.2 Bestimmung des effektiven Potentials

Mit den gewonnenen radialen Verteilungsfunktionen sollen nun die in Abschnitt 4.2.2 gemachten Annahmen über das effektive Potential untersucht werden.

Gleichung (5.3) approximiert die radiale Verteilungsfunktion am Kontakt durch die effektive Coulombbarriere. Analog lässt sich nun umgekehrt mit der Verteilungsfunktion das effektiv wirkende Paarpotential auch zu größeren Abständen bestimmen. Die radiale Verteilungsfunktion wird approximiert [106, 85, 52, 22] durch das effektive Potential:

$$g_{\text{chs}}(r) \approx g_{\text{hs}}(r) \cdot \exp\left(-\frac{\Phi_{\text{eff}}(r)}{mT}\right) \quad . \quad (5.4)$$

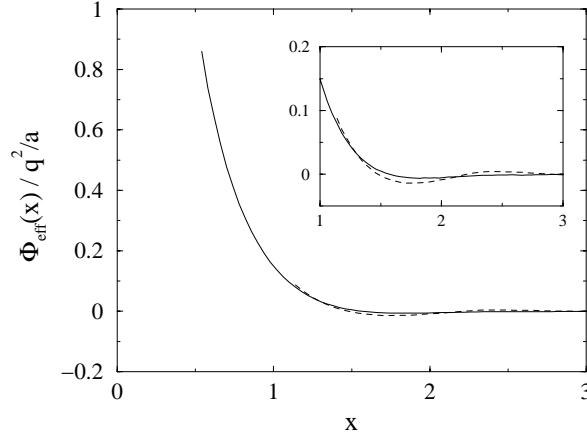


Abbildung 5.4: Das effektive Paarpotential für die Systeme mit $\nu = 1.5625 \cdot 10^{-2}$ (durchgezogene Kurve) und $\nu = 1.6637 \cdot 10^{-1}$ (gestrichelte Kurve) bei $E_q/mT = 7.8$. Der Ausschnitt ist eine Vergrößerung derselben Daten.

Die Form von $g_{\text{hs}}(r)$ hängt nur von der Packungsdichte ab. Das effektive Paarpotential $\Phi_{\text{eff}}(r)$ ist in erster Näherung unabhängig vom Harte-Kugel Einfluss, so dass hier ℓ , der typische Nachbarabstand, die einzige charakteristische Länge ist (dieser Annahme folgen auch die Gleichungen (4.20) und (4.21)). Gemäß Gl. (5.4) kann nun aus den gemessenen Kurven für $g_{\text{hs}}(r)$ und $g_{\text{chs}}(r)$ das effektive Paarpotential gebildet werden:

$$\Phi_{\text{eff}}(r) = mT \cdot \ln \left(\frac{g_{\text{hs}}(r)}{g_{\text{chs}}(r)} \right) . \quad (5.5)$$

Abbildung 5.4 zeigt das effektive Paarpotential für die Systeme der Abbildungen 5.1 und 5.2 zu der skalierten Temperatur $E_q/mT = 7.8$. Um die Systeme unterschiedlicher Packungsdichte vergleichen zu können, wurde Φ_{eff} mit q^2/a skaliert. Man erkennt deutlich, dass das effektive Potential gegenüber dem reinen Coulombpotential verringert ist, letzteres hätte in der Auftragung bei $x = 1$ eine Stärke von q^2/a während sich das effektive Potential zu nur $\approx 0.15 q^2/a$ ergibt. Die Kurven für die Systeme unterschiedlicher Packungsdichte stimmen in erster Näherung überein. Die Nullstelle der ersten Ableitung des effektiven Potentials liegt bei ungefähr $x = 1.7$, womit sich laut Gl. (4.20) der Nachbarabstand zu $\ell = 1.7a$ oder $d/\ell = 1.18 \nu^{1/3}$ ergibt. Dies stimmt erstaunlich gut mit dem Fit an große Dichten in Abbildung 4.6 überein, für den wir ein Verhältnis von $d/\ell = 1.17 \nu^{1/3}$ erhalten hatten.

Der eingesetzte Ausschnitt vergrößert den interessanten Bereich: Das Minimum ist für das System höherer Packungsdichte wesentlich ausgeprägter. Der Grund

für die Abweichung der Kurven ist, dass bei dem System höherer Packungsdichte eine größere Kopplung Γ vorliegt. Beide Systeme wurden zwar im selben Verhältnis $E_q/mT = 7.8$ präpariert, jedoch haben sie gemäß

$$\Gamma = \frac{d}{a} \frac{E_q}{mT} = 2\nu^{1/3} \frac{E_q}{mT} \quad (5.6)$$

eine Kopplung von $\Gamma = 3.9$ b.z.w. $\Gamma = 8.58$. Das effektive Potential weist damit eine schwache Abhängigkeit von der Kopplung auf, eine Tatsache die auch für das OCP Modell bestätigt wird [10, 85]. Für die Kollisionskühlung eines geladenen granularen Systems heißt das, dass bei sinkender Temperatur das effektive Potential stärkere Strukturen zeigt; Wir hatten bisher immer ein von der Temperatur unabhängiges effektives Potential angenommen. Die Temperaturabhängigkeit kann aber in dem von uns betrachteten Temperaturbereich, $E_q/mT < 8$, als eher gering betrachtet werden. Denn der Einfluss auf die aus dem effektiven Potential gebildeten Energiebarriere E_{eff} sollte in den Arrheniusauftragungen (Abbildung 4.4 auf Seite 40) eine Nichtlinearität induzieren. Hier sehen wir jedoch im Rahmen der Streuung keine Abweichung von den Ausgleichsgeraden, weshalb wir die Temperaturabhängigkeit von E_{eff} vernachlässigen können.

Das effektive Potential selbst ist nur bis auf eine additive Konstante bestimmt. Durch die Gleichung (5.5) ergibt diese sich hier so, dass Φ_{eff} für große Abstände verschwindet, obwohl die aufaddierten Coulombwechselwirkungen immer einen positiven Wert ergeben. Diese spezielle Wahl der additiven Konstante erklärt auch, dass im Bereich des Minimums das effektive Potential leicht negativ wird. Das bedeutet, dass dieser Abstand ein bevorzugter Nachbarabstand des Systems ist, was bei der Herleitung der Approximation für das effektive Potential in 4.2.2 benutzt wurde.

Als zweiter Punkt ist nun zu fragen, inwieweit die Näherung der linearen Abhängigkeit des Molekularfelds, $\Phi_{\text{al}}(r)$, von dem Teilchenabstand gerechtfertigt ist. In Abbildung 5.5 haben wir $-\Phi_{\text{al}}(r) = q^2/r - \Phi_{\text{eff}}(r)$ gegen den skalierten Abstand aufgetragen. Man erkennt deutlich, dass das Molekularfeld-Potential für die Systeme unterschiedlicher Packungsdichte in guter Näherung gleich ist. Das heißt die Annahme, dass der Teilchendurchmesser d das Molekularfeld-Potential in erster Näherung nicht beeinflusst, ist bestätigt. Die dennoch leichte Abweichung der Kurven liegt an der unterschiedlichen Kopplung Γ der Systeme, wie bereits oben erwähnt. Der Verlauf von $\Phi_{\text{al}}(x)$ ist im Bereich $1 < x < 1.5$ linear. Für Abstände $x > 1.5$ nähert sich das Molekularfeld-Potential immer mehr dem reinen Coulombpotential $1/x$. Hier würde das effektive Paarpotential verschwinden, was über die Gleichsetzung mit der Korrelationsfunktion, Gleichung (5.4), nur bedeutet, dass hier die Teilchen nicht mehr als Paar ausgezeichnet sind, sondern die gegenseitige Korrelation nicht stärker als zu jedem weiteren Teilchen im System ist.

Im Kapitel 4.2.2 haben wir die lineare Näherung des Molekularfeld-Potentials nur

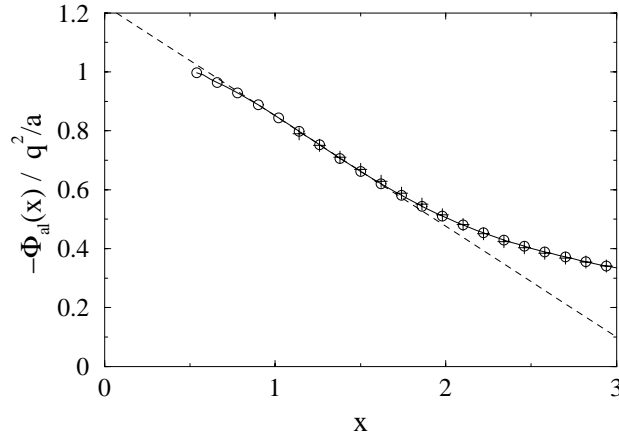


Abbildung 5.5: Molekularfeld Anteil am effektiven Potential. Die Kreise stehen für das System $\nu = 1.5625 \cdot 10^{-2}$, die Kreuze für $\nu = 1.6637 \cdot 10^{-1}$. Für beide Systeme gilt $E_q/mT = 7.8$. Die gestrichelte Gerade dient zur Orientierung.

für kleine Paarabstände als erfüllt angenommen. Nun zeigt sich, dass sie sogar bis $r/a = 1.5$ gilt, was den Bereich der erfassten Packungsdichte auf $d/a = 2\nu^{1/3} < 1.5$ festlegt, das heißt Systeme bis zu einer Packungsdichte von $\nu \approx 0.42$ können durch eine lineare Approximation beschrieben werden. Die für die Bestimmung der effektiven Energiebarriere simulierten Systeme in Abbildung 4.6 liegen somit alle weit unterhalb dieser Bedingung, und Systeme in dem Bereich oberhalb der *kritischen Packungsdichte* wurden nicht betrachtet. Tatsächlich ist es fraglich, ob eine kinetische Beschreibung für derart dichte Systeme überhaupt noch zulässig ist, wie man an der Korrelationsfunktion für das System der Packungsdichte $\nu = 0.45$ in Abbildung 5.3 sieht.

Für kleine Paarabstände, $x \ll 1$, beobachten wir, dass das Molekularfeldpotential ebenfalls nichtlinear wird. Diese Nichtlinearität ist wichtiger als die obige, da sie zu kleinen Abständen hin zunimmt, was bedeutet, dass sie sich für kleine Packungsdichten ν in der effektiven Coulombbarriere auswirken wird: Man sieht, dass eine lineare Approximation das reduzierende Molekularfeld, Φ_{al} , überschätzt, was bedeutet, dass man für kleine Packungsdichten die effektive Energiebarriere, E_{eff} , unterschätzt. Das bewirkt, dass der Fit in Abbildung 4.6 auf Seite 44, den wir für die Datenpunkte hoher Packungsdichte gemacht hatten, bei geringen Packungsdichten über den Messwerten liegt.

Nichtlinearität des reduzierenden Molekularfeldpotentials wird auch in dem OCP Modell beobachtet: Für die geringen Paarabstände, die die Reaktionen der Nukleonen in dichten Sternen bestimmen, sind nichtlineare Korrekturen [85, 46] extrem wichtig, da auch in die nuklearen Reaktionsraten das effektive Potential

über einen Exponentialterm eingeht und so im betrachteten Parameterbereich ein Fehler von nur 2% im effektiven Potential eine Abweichung in der Reaktionsrate von einer Größenordnung bedeuten würde [85]. In unseren Systemen schränken die vergleichsweise geringen Kopplungen Γ die Wirkung dieser Nichtlinearität ein, weshalb sich auch in Abbildung 4.6 keine dramatischen Abweichungen ergeben.

Diskussion

Aus der Betrachtung des effektiven Potentials aus den gemessenen radialen Verteilungsfunktionen lässt sich sagen, dass die in Abschnitt 4.2.2 gemachten Annahmen gerechtfertigt sind. Es bestätigt sich sowohl die Linearität des Molekularfeldpotential $\Phi_{\text{al}}(r)$, als auch, dass dieses in erster Näherung von der Packungsdichte unabhängig ist. Die hier dargestellte nähere Betrachtung macht aber zugleich auch die Grenzen der gemachten Annahmen deutlich:

- *Temperaturunabhängigkeit:*

Die leichte Temperaturabhängigkeit des effektiven Potentials zeigt sich in Abbildung 5.4 an dem für höhere Kopplungen Γ (und damit geringere Temperaturen) ausgeprägterem Minimum beim typischen Nachbarabstand. Das verletzt die gemachte Annahme, dass sich im Boltzmannfaktor der Dissipationsrate die Temperaturabhängigkeit vollkommen durch den Quotienten einer *festen* effektiven Energiebarriere und der granularen Temperatur ausdrücken lässt. Um diese Temperaturabhängigkeit des effektiven Potentials zu berücksichtigen, müsste dort die effektive Energiebarriere selbst als temperaturabhängig betrachtet werden. Zukünftige Untersuchungen sind notwendig, um dieses Phänomen besser zu verstehen.

Allerdings ist die Auswirkung der Temperaturabhängigkeit auf die Dissipationsrate für die von uns untersuchten Systeme als vernachlässigbar anzusehen. Dies erkennt man an den Arrheniusauftragungen in Abbildung 4.4: Die Messwerte liegen innerhalb der statistischen Streuung auf den Ausgleichgeraden, was bedeutet, dass die Temperaturabhängigkeit hier geringer sein muss als das Rauschen. Für den untersuchten Temperaturbereich von $mT > E_{\text{q}}/10$ erwarten wir also, dass die Dissipationsrate gut durch eine feste effektive Energiebarriere beschrieben werden kann.

- *Linearität des Molekularfelds:*

Die Linearität des Molekularfelds ist für moderate Paarabstände durch Abbildung 5.5 bewiesen. Für kleinere Abstände hingegen tritt die aus dem OCP Modell bekannte Nichtlinearität auf. Dies hat stärkere Auswirkungen

5.2 *Bestimmung des effektiven Potentials*

auf die Dissipationsrate bei kleinen Packungsdichten als die obige Temperaturabhängigkeit und führt zu der Abweichung der Werte der effektiven Energiebarriere in Abbildung 4.6 für kleine Packungsdichten. Hier könnte ein Zurückgreifen auf die Literatur des OCP Modells zukünftig helfen, diese Abweichungen quantitativ zu fassen.

