

Kinetik Granularer Gase

Diplomarbeit

vorgelegt von
Till Kranz
aus Mainz

angefertigt am
Institut für Theoretische Physik der
Georg-August-Universität zu Göttingen
2006

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	5
2. Grundlagen	7
2.1. Das Modell	7
2.2. Einige Konsequenzen	10
2.3. Der Liouville-Operator	13
2.4. Ereignisgesteuerte Simulationen	15
3. Binäre Gemische inelastischer harter Kugeln	19
3.1. Einleitung	19
3.2. Das Modell	20
3.3. Analytische Berechnung der Temperaturentwicklung	21
3.4. Diskussion	23
3.4.1. Der Tracer-Limit	29
3.4.2. Kopplung an ein elastisches Bad	30
3.5. Zusammenfassung	31
3.6. Ausblick	32
4. Korrelation von Rotation und Translation in granularen Gasen	33
4.1. Einleitung	33
4.2. Das Modell	34
4.3. Analytische Ergebnisse	35
4.4. Diskussion	37
4.5. Zusammenfassung	41
4.6. Ausblick	42
A. Anhang	49
A.1. Die Stoßgesetze	49
A.1.1. Für gleiche Massen	49
A.1.2. Für verschiedene Massen	49
A.2. Der gemischte Term in $d = 2$	50
A.3. Der gemischte Term in $d = 3$	54
A.4. Das Temperaturverhältnis γ	57
A.5. Berechnung von Δ	57
A.5.1. Der Anteil Δ_1	58
A.5.2. Der Anteil Δ_0	62
A.5.3. Einige Mittelwerte	66

Inhaltsverzeichnis

A.6. Der Zusammenhang zwischen Δ und $b(t)$	69
A.7. Korrekturen erster Ordnung der Temperaturen	70
A.8. Der mittlere Winkel θ	71
A.8.1. Der mittlere Winkel für $t \rightarrow \infty$	72

1. Einleitung

Unter granularer Materie versteht man Systeme aus einer großen Anzahl makroskopischer Teilchen, wie z. B. Sand und Getreide, aber auch Tabletten [JNB96] und Graphitkugeln in Kugelhaufen-Reaktoren [RGLB06]. Ein grundlegender Aspekt ist hier, dass die Teilchen kinetische Energie dissipieren können. Dies kann z. B. durch die Anregung von inneren Schwingungen, durch plastische Verformung oder auch durch (teilweise) Zerstörung der Teilchen geschehen.

Allein die Dissipation führt schon dazu, dass sich granulare Systeme ganz wesentlich von klassischen Gasen unterscheiden. Betrachtet man isolierte Systeme, so kommen diese durch die fortgesetzte Dissipation mit der Zeit zur Ruhe (granulares Kühlen [Haf83]). Will man dies verhindern, so muss man dem System kontinuierlich Energie zuführen (z. B. durch Schütteln oder Scheren). Bei der theoretischen Behandlung granularer Materie hat man es also zwangsläufig mit Systemen fern des Gleichgewichts zu tun.

Aus Alltag und Technik sind eine Vielzahl von Phänomenen im Zusammenhang mit granularer Materie bekannt. Sand z. B. bietet in vielen Fällen einen verlässlichen Untergrund. Im Falle von Sandburgen lassen sich mit ihm sogar filigrane Strukturen realisieren. Unter veränderten Bedingungen kann derselbe Sand aber in Form von Lawinen und Erdbeben ins Fließen geraten. In Sanduhren macht man sich explizit zu Nutze, dass sich Sand ganz wie eine Flüssigkeit verhalten kann. In Staublawinen und Sandstürmen, aber auch den Ringen der großen Planeten erinnert das Verhalten der granularen Teilchen sehr an das eines Gases. Für industrielle Anwendungen wiederum beschäftigt man sich intensiv mit der Neigung von Gemischen granularer Teilchen, sich zu *entmischen*. Ebenfalls von Interesse für die technische Verarbeitung von granularen Medien ist, dass sich bei Strömungen granularer Teilchen durch Röhren und Trichter leicht stabile Kraft-Brücken ausbilden die zu Verstopfungen führen.

Auch auf Seiten der Physik unterscheidet man zwischen der Beschreibung statischer bzw. quasi-statischer granularer Systeme, granularer Flüsse (*granular flows*) und granularer Gase [JNB96]. Bei genauerer Betrachtung zeigt sich noch eine Fülle weiterer Phänomene. Exemplarisch seien hier nur der Paranuss-Effekt [Kud04], entropische Kräfte [CBM⁺06] und die singenden Dünen [Her05b] genannt. Einen Einstieg in die Thematik können die Reviews [Raj00, Gol03, Her05a, GNB05] bieten. Einen Überblick über die aktuelle Forschung gibt z. B. [GHM05].

In der vorliegenden Arbeit sollen zwei Aspekte der Kinetik granularer Gase näher beleuchtet werden. Im Vordergrund stehen die Herleitung analytischer Ausdrücke. Darüber hinaus soll die Gültigkeit der theoretischen Ergebnisse jedoch durch den Vergleich mit Simulationen überprüft werden.

1. Einleitung

Die Arbeit gliedert sich wie folgt: In Kapitel 2 soll eine allgemeine Einführung in das hier verwendete Modell gegeben werden. Beginnen will ich mit den zugrundeliegenden Annahmen. Dabei sollen auch die im Weiteren verwendeten Parameter und Observablen definiert werden. Anschließend will ich kurz einige Ergebnisse aus der Literatur darstellen, die im Folgenden verwendet werden. Eine kurze Einführung in den Liouville-Operator-Formalismus, sowie das verwendete Simulations-Verfahren sollen dieses Kapitel abschließen.

Kapitel 3 ist der Untersuchung binärer Mischungen von inelastischen harten Kugeln gewidmet. Betrachtet werden sollen hier die Temperaturen T_α der einzelnen Komponenten sowie ihr Verhältnis $\gamma = T_1/T_2$. Im ersten Abschnitt soll das allgemeine Modell aus Kapitel 2 entsprechend erweitert werden. Im Zuge dessen will ich auch erläutern, wie man durch qualitative Überlegungen auf die Zeitentwicklung der Temperaturen schließen kann. Im zweiten Abschnitt wird man sehen, dass diese Überlegungen durch die analytischen Rechnungen bestätigt werden. Im dritten Abschnitt sollen dann die Lösungen der Differentialgleichungen diskutiert werden, zum einen durch Betrachtung ihrer Abhängigkeit von den Systemparametern, zum anderen durch die Einschränkung auf zwei interessante Spezialfälle. Durch den Vergleich mit Simulationen wird gezeigt werden, dass die Theorie in der Lage ist, die physikalischen Phänomene zu beschreiben. Nach einer kurzen Zusammenfassung soll ein Ausblick auf einige Fragestellungen gegeben werden, die von dieser Arbeit ihren Ausgang nehmen könnten.

In Kapitel 4 soll es um die Frage gehen, inwiefern die Rotationsachse und die Flugrichtung von rauen inelastischen harten Kugeln korreliert sind. Auch hier soll im ersten Abschnitt das Modell zunächst geeignet erweitert werden. Anschließend soll ein Vorschlag gemacht werden, wie man sich einen Teil der Ergebnisse in qualitativer Weise verständlich machen kann. Der zweite Abschnitt ist dann der Herleitung der analytischen Ergebnisse gewidmet, die im dritten Abschnitt diskutiert werden sollen. Der Vergleich mit Simulationen wird zeigen, dass die wesentlichen Effekte durch das Modell reproduziert werden. Eine Zusammenfassung sowie ein Ausblick auf mögliche zukünftige Untersuchungen soll wieder den Abschluss bilden.

Die z. T. sehr umfangreichen Rechnungen habe ich nach Möglichkeit in den Anhang ausgelagert, um den Lesefluß nicht zu stören. Der interessierte Leser möge sich dort über die Details informieren.

2. Grundlagen

2.1. Das Modell

Es stellt sich die Frage, wie sich die wesentlichen Eigenschaften granularer Materie in einem physikalischen Modell einfangen lassen. Hier soll das Modell inelastischer harter Kugeln (IHS: *Inelastic Hard Spheres*) zugrundegelegt werden.

Da Stöße zwischen irregulär geformten Körpern beliebig kompliziert werden können [PB95], sollen die Teilchen als perfekte harte Kugeln angenommen werden. Die Kugeln (Kreisscheiben¹) sind vollständig charakterisiert durch ihren Radius a , ihre Masse m und ihr Trägheitsmoment I . *Harte Kugel* bedeutet in diesem Zusammenhang, dass das Wechselwirkungspotential U an der Kugeloberfläche von $U = 0$ für den Außenraum auf $U = \infty$ für das Innere der Kugel springt. Es liegen also keine langreichweitigen Wechselwirkungen vor, und die Kugeln können sich auch nicht durchdringen.²

Der Stoß zweier makroskopischer Kugeln wurde ausgehend von [Her82] in zahlreichen Arbeiten studiert [BSHP96, LRD97, AGZ98, GZ99]. Es zeigte sich, dass das Ausmaß der Dissipation in nichttrivialer Weise von den Materialeigenschaften und der Relativgeschwindigkeit der Stoßpartner abhängt. Hier soll ein sehr einfacher Ansatz Verwendung finden. Mit den Bezeichnungen aus Abb. 2.1 definiert man zunächst die Relativgeschwindigkeit am Kontaktpunkt $\mathbf{g} := \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2 + a\hat{\mathbf{n}} \times (\boldsymbol{\omega}_1 + \boldsymbol{\omega}_2)$. Gestrichene Variablen bezeichnen Größen nach dem Stoß. Es soll dann gelten

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{g}' &= -\epsilon \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{g} \\ \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{g}' &= -\beta \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{g}.\end{aligned}\tag{2.1}$$

Der Koeffizient $\epsilon \in [0, 1]$ beschreibt also die *normale Restitution* [LSJC84], während $\beta \in [-1, 1]$ die *tangentiale Restitution* [JR85] parametrisiert.³ Die Werte $\epsilon = 1$ und $\beta = -1$ entsprechen dem Fall vollständig elastischer und glatter Teilchen. Hin zu kleineren Werten von ϵ nimmt die Dissipation zu. Steigenden Werten

¹Im Folgenden werde ich aus Gründen der Übersichtlichkeit meist nur den Fall $d = 3$ explizit erwähnen. Die entsprechenden Aussagen für $d = 2$ sollten aber immer leicht abzuleiten sein.

²Weitere Möglichkeiten die einen analytischen Zugang erlauben, hier aber nicht weiter betrachtet werden sollen, sind dünne Stäbchen [HAZ99, VT04] und abgerundete Rechtecke [GTV05].

³Die normale und tangentielle Restitution sind also völlig unabhängig voneinander. Dieser Ansatz ist so zunächst sicherlich unphysikalisch. Das Walton-Modell [WB86] stellt hier eine Verknüpfung her und wurde ebenfalls schon zur Beschreibung granularer Materie verwendet [HHZ00, JZ02]. Eine weitere Modifikation hin zu einer realistischeren Beschreibung der Dissipation sind die sogenannten viskoelastischen Teilchen [BSHP96] mit geschwindigkeitsabhängigen Restitutionskoeffizienten $\epsilon = \epsilon(v)$.

2. Grundlagen

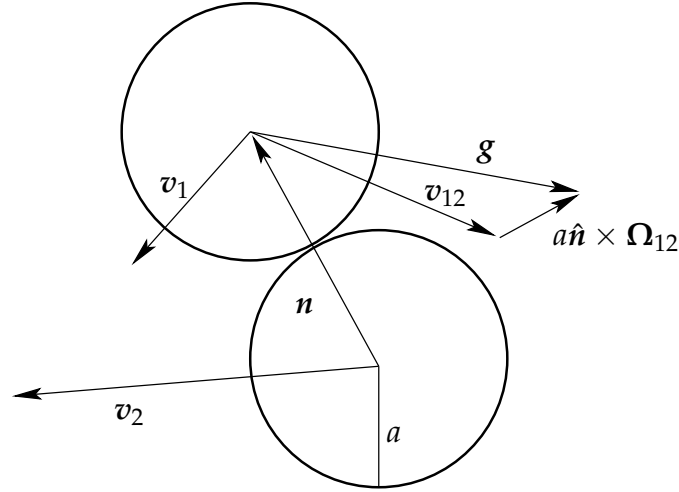


Abbildung 2.1. Stoßprozess in $d = 2$. Gezeigt sind zwei Kreisscheiben im Moment vor dem Stoß. Die Mittelpunkte der Teilchen sollen sich bei r_1 bzw. r_2 befinden, die Winkelgeschwindigkeiten ω_i stehen senkrecht auf der Bildebene. Im Folgenden werden die Relativgeschwindigkeit $v_{12} := v_1 - v_2$, die relative Winkelgeschwindigkeit $\Omega_{12} := \omega_1 + \omega_2$ und die effektive Relativgeschwindigkeit am Kontaktpunkt g die wesentliche Rolle spielen. Die relative Orientierung der Stoßpartner wird durch den Vektor $n \equiv r_{12} := r_1 - r_2$ beschrieben.

von β entsprechen zunehmend rauere Teilchen bis hin zu perfekter Rauigkeit bei $\beta = 1$.

Trotz der starken Vereinfachungen, die diesem Ansatz zugrundeliegen, lässt sich damit eine reiche Phänomenologie beobachten [SK89, GZ93, BT02a, CM04, GNB05]. Besonders prominent sind die hydrodynamischen Instabilitäten, die in zahlreichen Arbeiten untersucht wurden [GZ93, NE00, BDSM06], die uns hier aber nicht weiter beschäftigen sollen.

Zusammen mit der Impulserhaltung $v'_1 + v'_2 = v_1 + v_2$ und der Drehimpulserhaltung bezüglich des Kontaktpunktes

$$\begin{aligned} ma\hat{n} \times (v'_1 - v_1) + I(\omega'_1 - \omega_1) &= 0 \\ ma\hat{n} \times (v'_2 - v_2) - I(\omega'_2 - \omega_2) &= 0. \end{aligned} \quad (2.2)$$

kann man wie in Abschnitt A.1.1 ausgeführt den Zusammenhang zwischen den Geschwindigkeiten vor und nach dem Stoß angeben

$$\begin{aligned} v'_1 &= v_1 - \delta, & \omega'_1 &= \omega_1 + \frac{1}{qa}(\hat{n} \times \delta) \\ v'_2 &= v_2 + \delta, & \omega'_2 &= \omega_2 + \frac{1}{qa}(\hat{n} \times \delta) \end{aligned} \quad (2.3)$$

wobei

$$\delta := \eta_t \mathbf{v}_{12} + (\eta_n - \eta_t)(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v}_{12})\hat{\mathbf{n}} + a\eta_t \hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\Omega}_{12} \quad (2.4)$$

und $\eta_t := \frac{q}{2} \frac{1+\beta}{1+q}$ sowie $\eta_n := \frac{1+\epsilon}{2}$. Hier und im Folgenden soll das Trägheitsmoment in seiner dimensionslosen Darstellung $q := I/ma^2$ eingehen. Die Werte von q liegen zwischen Null für eine punktförmige Masse und $2/3$ für eine Kugelschale. Für den Fall einer Kugel mit homogener Massenverteilung gilt $q = 2/5$.

Da es noch nicht gelungen ist, für das Harte-Kugel-Gas eine exakte analytische Darstellung der Verteilungsfunktion $\rho(\{\mathbf{r}_l\}, \{\mathbf{v}_l\}, \{\boldsymbol{\omega}_l\}, t)$ anzugeben (siehe aber den Fall von Maxwell-Molekülen [BNK00]), soll hier ein Ansatz verwendet werden, der sich zwar im allgemeinen nicht streng begründen lässt, der sich aber schon in zahlreichen Vergleichen mit Simulationen bewährt hat.

In der Literatur ist dieser Ansatz unter dem Namen *Homogeneous Cooling State* (HCS) bekannt [GS95]. Man geht davon aus, dass die räumliche Verteilung der N Kugeln zu jeder Zeit homogen ist. Die Geschwindigkeiten sollen gaußverteilt sein, wobei die Breite der Verteilungen die granularen Temperaturen

$$\frac{d}{2} T_{tr}(t) := \frac{1}{N} \sum_i \frac{m}{2} \mathbf{v}_i^2, \quad \frac{d}{2} T_{rot}(t) := \frac{1}{N} \sum_i \frac{I}{2} \boldsymbol{\omega}_i^2 \quad (2.5)$$

definiert.

Für verdünnte Systeme relativ harter realer Teilchen ist unmittelbar einsichtig, dass die Dauer eines Stoßes τ_c viel kürzer ist als die mittlere Zeit zwischen zwei Stößen τ . Für das Modell harter Kugeln lässt man nun das Verhältnis $\tau_c/\tau \ll 1$ vollständig gegen Null gehen. Die Stöße werden also als instantan angenommen. Als Nebeneffekt dieser Approximation genügt es nun, sich auf Zweikörper-Stöße zu beschränken. Die Wahrscheinlichkeit, dass drei oder mehr Teilchen zugleich stoßen geht mit τ_c ebenfalls gegen Null. Zusätzlich wird angenommen, dass die Korrelation zwischen Stößen vernachlässigbar klein ist (molekulares Chaos).

Als Verteilungsfunktion setzt man also an

$$\rho_{HCS}(\{\mathbf{v}_l\}, \{\boldsymbol{\omega}_l\}, t) \sim \prod_{l=1}^N \exp \left[-\frac{m\mathbf{v}_l^2}{2T_{tr}(t)} - \frac{I\boldsymbol{\omega}_l^2}{2T_{rot}(t)} \right]. \quad (2.6)$$

Die Verteilung ist natürlich auf 1 normiert, d. h. $\int d\Gamma \rho_{HCS} = 1$. Im Phasenraumelement

$$d\Gamma := \prod_{j \neq l} \Theta(r_{jl} - 2a) d^{3N} r d^{3N} \mathbf{v} d^{3N} \boldsymbol{\omega} \quad (2.7)$$

dienen die Θ -Funktionen dazu, den Volumenausschluss zu berücksichtigen. Integriert wird dabei über ein thermodynamisches System, d. h. $N \rightarrow \infty$ Teilchen in einem unendlich ausgedehnten Volumen V , sodass die Teilchendichte $n := N/V$ einen endlichen Wert annimmt. Ensemble-Mittelwerte sind dann durch Mittelung über die HCS-Verteilung definiert

$$\langle \dots \rangle_t := \int d\Gamma \rho_{HCS}(\{\mathbf{v}_l\}, \{\boldsymbol{\omega}_l\}, t). \quad (2.8)$$

2. Grundlagen

Die Annahme von molekularem Chaos und instantanen Stößen schränkt die Theorie auf granulare Gase, d. h. relativ verdünnte Systeme ein. Aus hydrodynamischen Betrachtungen und Simulationsstudien [GZ93, LH99, BRC99, DP03], geht hervor, dass eine räumlich homogene Verteilung nur auf relativ kurzen Zeit- und auch Längenskalen erhalten bleibt.

Die Theorie bleibt also auf die anfängliche Entwicklung beschränkt oder man muss durch äußeres Treiben räumliche Korrelationen zerstören. Die experimentell relevanten Formen des Treibens, wie Schütteln [FM02], Schwenken [KWG97] und Vibrationen der Wände [HYC⁺04] beruhen alle auf endlichen Systemen, und sind damit nur schwer in die hier verwendete Theorie zu integrieren. Analytisch am einfachsten zu handhaben ist das sogenannte Volumentreiben [NETP99]. Mit einer Treibfrequenz f_{dr} wird zu den Geschwindigkeiten v_i der Teilchen eine zufällige Komponente $v_{dr}\xi_i(t)$ addiert. Dabei gibt v_{dr} die Stärke des Treibens an, und die $\xi_i(t)$ sind gaußverteilte Zufallsvektoren mit Mittelwert Null und Varianz 1. Dem Treiben entspricht so eine Temperatur

$$\frac{d}{2}T_{dr} := \frac{1}{2}mv_{dr}^2. \quad (2.9)$$

Für Simulationen genügt es, die Systemgröße kleiner als eine kritische Längenskala λ_c [MY96] zu halten. Alternativ kann man auf den DSMC-Algorithmus [Bir76] ausweichen.

Detaillierte Simulationsstudien zeigten, dass die exakte Geschwindigkeitsverteilung vom gaußschen Fall abweicht [BRC96, MSS01, BT02b]. Analytisch versucht man diesem Umstand Rechnung zu tragen, indem man die Verteilungsfunktion um eine Reihe $1 + a_1(t)S_1(mv^2/T_{tr}) + \dots$ von Laguerre-Polynomen⁴ [JZ00] S_n erweitert [GS95, HOB00]. Die $a_n(t)$ müssen dann selbstkonsistent bestimmt werden. Damit kann die Theorie hin zu dichteren und stärker dissipativen Systemen erweitert werden [NE98, BP00, HOB00], siehe aber auch [BP06]. In der vorliegenden Arbeit wird diese Erweiterung aber nicht weiter berücksichtigt werden. Stattdessen wird eine ähnliche Erweiterung für die Betrachtung der Korrelationen zum Einsatz kommen.

2.2. Einige Konsequenzen

Was lässt sich nun aus diesem Modell ableiten? Zunächst sei der Fall völlig glatter Kugeln ($\beta = -1$) betrachtet.

Konzentrieren wir uns (in Anlehnung an [BP04]) auf ein Teilchen welches, sich gegenüber den anderen Teilchen in seiner Nähe mit einer typischen Geschwindigkeit $\langle v_{12} \rangle$ bewegt (siehe Abb. 2.2). Die thermische Geschwindigkeit $v_{th} \equiv \sqrt{2T/m}$ liefert hier die naheliegendste Geschwindigkeitsskala.

Mit dem Streuquerschnitt für harte Kugeln von $\sigma_{3D} = 4\pi a^2$ wird die betrachtete Kugel im Zeitintervall Δt im Mittel mit $v_c = 4\pi n a^2 \langle v_{12} \rangle \Delta t$ anderen Kugeln

⁴in diesem Zusammenhang meist als Sonine-Polynome bezeichnet

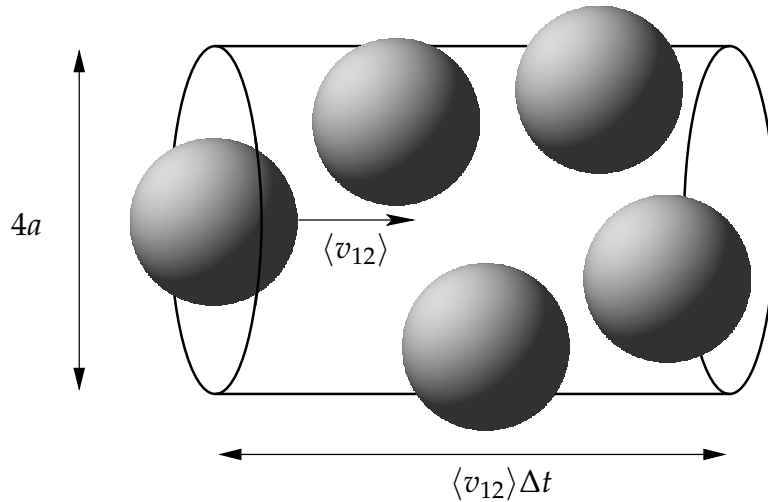


Abbildung 2.2. Die Kugel ganz links im Bild wird in der Zeit Δt mit allen Kugeln stoßen, deren Mittelpunkte im angegebenen Zylinder liegen. Diese Zeichnung basiert auf der Abbildung 5.1 in [BP04].

stoßen. Teilt man nun durch Δt und lässt das Zeitintervall gegen Null gehen, so erhält man die Stoßfrequenz

$$\omega \sim na^2\sqrt{T}. \quad (2.10)$$

Im Zuge eines Stoßes ändert sich die kinetische Energie eines Teilchens typischerweise um den Betrag

$$\begin{aligned} \Delta T &= \frac{m}{2} \langle v'_{12}{}^2 - v_{12}^2 \rangle \\ &\sim -(1 - \epsilon^2)T \end{aligned} \quad (2.11)$$

wenn man wieder davon ausgeht, dass die typische Geschwindigkeit durch v_{th} abgeschätzt werden kann. Weiter wurden hier alle möglichen Stoßparameter auf den Fall des zentralen Stoßes reduziert. Dies erlaubt es die gestrichelten Geschwindigkeiten direkt über Gl. (2.1) auszudrücken.

Nimmt man Gl. (2.10) und Gl. (2.11) zusammen, so erhält man also die Temperaturänderung pro Zeit

$$\frac{dT}{dt} \sim -na^2(1 - \epsilon^2)T^{\frac{3}{2}}. \quad (2.12)$$

Analytische Rechnungen (siehe z. B. [AHZ01]) bestätigen diese Abschätzung durch das Ergebnis

$$\frac{dT}{dt} = -GA'T^{\frac{3}{2}} \quad (2.13)$$

mit $G := 32na^2\sqrt{\frac{\pi}{m}\chi}$ und $A' := \frac{1-\epsilon^2}{4}$.

2. Grundlagen

Der einzige interessante neue Faktor ist hier die *Paarkorrelation bei Kontakt* $\chi \equiv g(2a)$ mit der Paarkorrelationsfunktion [CC60]

$$g(R_{12})/V^2 := \langle \delta(\mathbf{R}_1 - \mathbf{r}_1)\delta(\mathbf{R}_2 - \mathbf{r}_2) \rangle_t. \quad (2.14)$$

Aus der Theorie *elastischer*⁵ harter Kugeln ist χ in Form von Virialentwicklungen bekannt [CS69]. Es gilt

$$\begin{aligned} \chi &= \frac{1 - 7\nu/16}{(1 - \nu)^2} \quad \text{für } d = 2 \\ \chi &= \frac{1 - \nu/2}{(1 - \nu)^3} \quad \text{für } d = 3 \end{aligned} \quad (2.15)$$

mit dem Volumenbruch⁶ (*filling fraction*) $\nu = \pi n a^2$ in $d = 2$ und $\nu = 4/3\pi n a^3$ für $d = 3$. In jüngerer Zeit sind weitere Terme in dieser Entwicklung vorgeschlagen worden [LS04, SYH05]. Es handelt sich dabei aber um kleine Beiträge, die erst bei hohen Dichten eine merkliche Rolle spielen. Letztlich ist die nichttriviale Form der Korrelationsfunktion ein Resultat der endlichen Teilchengröße. Diese hat zur Folge, dass nur eine endliche Zahl von weiteren Kugeln gleichzeitig mit einer bestimmten in Kontakt stehen können.

Gleichung (2.13) lässt sich leicht integrieren und man erhält

$$T(t) = \frac{T_0}{(1 + \omega_0 t)^2} \quad (2.16)$$

mit $\omega_0 = 1/2G\sqrt{T_0}$ und $T_0 \equiv T(0)$. Die (Enskog-)Kollisionsfrequenz [CC60] der Teilchen ist in dieser Notation $\omega = 1/2G\sqrt{T}$. Für große Zeiten ($\omega_0 t \gg 1$) folgt der Zerfall der Energie also einem Potenzgesetz mit dem Exponenten -2 (*Haff's Cooling Law* [Haf83]).

Geht man nun zu rauen Kugeln über, so wird zum einen die Rotationsenergie in einem ähnlichen Prozess zerfallen, zum anderen sind nun aber auch die Rotations- und Translationsfreiheitsgrade gekoppelt. In [AHZ01] wurde gezeigt, dass die Temperaturen den folgenden Gleichungen genügen

$$\begin{aligned} \frac{3}{2} \frac{dT_{tr}}{dt} &= -GAT_{tr}^{\frac{3}{2}} + BGT_{tr}^{\frac{1}{2}}T_{rot} \\ \frac{3}{2} \frac{dT_{rot}}{dt} &= GBT_{tr}^{\frac{3}{2}} - CGT_{tr}^{\frac{1}{2}}T_{rot} \end{aligned} \quad (2.17)$$

mit

$$A := \frac{1 - \epsilon^2}{4} + \eta_t(1 - \eta_t), \quad B := \frac{\eta_t^2}{q}, \quad C := \frac{\eta_t}{q} \left(1 - \frac{\eta_t}{q}\right). \quad (2.18)$$

⁵Es ist zunächst nicht klar, dass die Paarkorrelationsfunktion im inelastischen Fall mit der für elastische Teilchen übereinstimmt [BP04]. Der gewählte Ansatz hat sich aber als erfolgreich erwiesen.

⁶Bei dichtester (Kugel-)Packung sind maximal $\nu_{2D} = \pi/\sqrt{12} \approx 0.907$ bzw. $\nu_{3D} = \pi/\sqrt{18} \approx 0.740$ möglich [CS99].

In der Kollisionszeitskala τ , die über $d\tau := \omega dt$ definiert ist, gilt

$$\begin{aligned}\frac{3}{4} \frac{T_{tr}}{d\tau} &= -AT_{tr} + BT_{rot} \\ \frac{3}{4} \frac{T_{rot}}{d\tau} &= BT_{tr} - CT_{rot}.\end{aligned}\tag{2.19}$$

In [LHMZ98] und nachfolgenden Arbeiten [HHZ00, AHZ01] wurde gezeigt, dass sich für große Zeiten ein festes Temperaturverhältnis $R := T_{rot}/T_{tr}$ einstellt und die Gleichungen (2.19) entkoppeln. Es gilt

$$\frac{3}{4} \frac{dR}{d\tau} = B + (A - C)R - BR^2.\tag{2.20}$$

Setzt man die rechte Seite dieser Gleichung gleich Null, so erhält man den stationären Wert

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} R(\tau) \equiv R^* = \frac{A - C}{2B} + \sqrt{1 + \frac{(A - C)^2}{4B^2}}.\tag{2.21}$$

Im Gegensatz zu klassischen, elastischen Gasen liegt also i. A. keine Gleichverteilung der Energie zwischen den Translations- und Rotationsfreiheitsgraden (entsprechend $R^* = 1$) vor. Nur für Paare von Restitutionskoeffizienten für die $A = C$ erfüllt ist, gilt wieder $R^* = 1$.

Die Verletzung der Gleichverteilung ist ein Phänomen, dass im Zusammenhang mit dissipativen granularen Systemen wiederholt auftritt. Zunächst wurde man im Kontext binärer Mischungen (siehe Kapitel 3) darauf aufmerksam. Es findet sich aber z. B. auch als richtungsabhängige Temperatur in Systemen unter dem Einfluss der Schwerkraft wieder [MR06]. Siehe aber auch z. B. den Fall von Teilchen, die leicht von der Kugelform abweichen in [GTV05].

2.3. Der Liouville-Operator

Die analytischen Rechnungen im Zuge dieser Arbeit beruhen ganz wesentlich auf dem Liouville-Operator-Formalismus [EDHL69]. In der Literatur wird häufig die Boltzmann-Gleichung im Rahmen der verbesserten Enskog-Theorie (RET: *Revised Enskog Theory*) [BE79] als Ausgangspunkt gewählt. In [Hut99] wurde gezeigt, dass beide Herangehensweisen letztlich äquivalent sind. Die Entwicklung des Systems hin zu einem stationären Zustand scheint aber über den Liouville-Operator leichter zugänglich.

Der Liouville-Operator \mathcal{L} beschreibt die zeitliche Änderung einer Observablen A . D. h. $i\mathcal{L}A := \frac{dA}{dt}$. Insbesondere kann man ihn für nicht explizit zeitabhängige Observablen über die Poissonklammer $\{\cdot, \cdot\}$ [Gol01] mit der Hamiltonfunktion \mathcal{H} definieren: $i\mathcal{L}A := \{\mathcal{H}, A\}$.

Mit der Hamiltonfunktion \mathcal{H} eines Systems von Teilchen, die über ein Paarpotential $U = U(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$ wechselwirken

$$\mathcal{H} = \sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \sum_{i < j} U(r_{ij})\tag{2.22}$$

2. Grundlagen

erhält man so den zugehörigen Liouville-Operator

$$i\mathcal{L} = \sum_i \frac{\mathbf{p}_i}{m} \nabla + \sum_{i<j} \nabla U(r_{ij}) \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_j} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i} \right). \quad (2.23)$$

Die Gleichung $\frac{dA}{dt} = i\mathcal{L}A$ lässt sich formal in der Form $A(t) = e^{i\mathcal{L}t}A(0)$ lösen. Dieser Ansatz soll aber im Folgenden so gar nicht verwendet werden. Stattdessen werde ich mich damit begnügen, $i\mathcal{L}A \equiv \frac{dA}{dt}$ zu berechnen um dann erst in einem zweiten Schritt die daraus entstehende Differentialgleichung (numerisch) zu lösen.

Eine weitere Komplikation ist der Umstand, dass das Wechselwirkungs-Potential der harten Kugeln nicht differenzierbar ist. Die oben angegebene Herleitung aus einem differenzierbaren Potential ist also nicht anwendbar. Dafür kann man sich aber leicht direkt überlegen, wie der Pseudo-Liouville-Operator \mathcal{L}^+ für ein Harte-Kugel-Gas aussehen muss [NEB98].

Zunächst setzt er sich aus zwei Anteilen zusammen: $\mathcal{L}^+ = \mathcal{L}_0 + \mathcal{L}_I$. Der Anteil $i\mathcal{L}_0 = \sum_i \frac{\mathbf{p}_i}{m} \nabla$ beschreibt dabei das freie Strömen der Teilchen zwischen den Stößen. Da das System keinen äußeren Kräften ausgesetzt ist, gilt für das freie Strömen die Energieerhaltung, d. h. insbesondere hat \mathcal{L}_0 keinen Einfluss auf die Temperaturentwicklung.

Die Stöße selbst werden durch den Operator $i\mathcal{L}_I = \sum_{i<j} i\mathcal{J}_{ij}$ beschrieben, der in eine Summe aus Zweiteilchen-Wechselwirkungen zerfällt.⁷ Stöße finden genau dann statt, wenn sich zwei Teilchen berühren ($\delta(r_{ij} - 2a)$) und in diesem Moment aufeinander zufliegen ($\Theta(-\hat{\mathbf{r}}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij})$). Weiter ist die Stoßrate proportional zum Teilchenfluss $\hat{\mathbf{r}}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij}$. Die Änderung der Größen durch den Stoß selbst (Gl. (2.3)) sei durch den Operator b_{ij}^+ beschrieben, der in der obigen Notation ungestrichene durch gestrichene Größen ersetzt. Zusammengenommen gilt also

$$i\mathcal{J}_{ij} = -(\hat{\mathbf{r}}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij})\Theta(-\hat{\mathbf{r}}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij})\delta(r_{ij} - 2a)(b_{ij}^+ - 1) \quad (2.24)$$

wobei die 1 im Sinne des Identitätsoperators zu verstehen ist.

Statt über die Verteilungsfunktion $\rho(\Gamma, t)$ zur Zeit t zu mitteln, könnte man auch gleichwertig über die anfängliche Verteilung $\rho(\Gamma_0, 0)$ mitteln. Man hat es dann aber mit einer explizit zeitabhängigen Observablen $A(\Gamma(\Gamma_0; t)) \equiv A(\Gamma_0; t)$ zu tun

$$\langle A \rangle_t \equiv \int d\Gamma \rho(\Gamma, t) A(\Gamma) = \int d\Gamma_0 \rho(\Gamma_0, 0) A(\Gamma_0; t) \quad (2.25)$$

Betrachtet man nun die Zeitableitung der gemittelten Größe (und nennt die Integrationsvariable wieder Γ), so gilt

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle_t = \int d\Gamma \rho(\Gamma, 0) \frac{d}{dt} e^{i\mathcal{L}t} A(\Gamma) = \int d\Gamma \rho(\Gamma, 0) e^{i\mathcal{L}t} i\mathcal{L}A(\Gamma) \quad (2.26)$$

⁷Im Ansatz wurden ja m-Körper-Stöße für $m > 2$ ausgeschlossen.

In [EDHL69] wurde gezeigt, dass zu $i\mathcal{L}$ ein adjungierter Operator $i\mathcal{L}^\dagger$ gehört, der die Zeitentwicklung der Verteilungsfunktion bestimmt. Es gilt also

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle_t = \int d\Gamma \left[e^{i\mathcal{L}^\dagger t} \rho(\Gamma, 0) \right] i\mathcal{L} A(\Gamma) = \int d\Gamma \rho(\Gamma, t) i\mathcal{L} A(\Gamma) \quad (2.27)$$

Diese Identität ist Ausgangspunkt für fast alle Rechnungen in der vorliegenden Arbeit.

2.4. Ereignisgesteuerte Simulationen

Begleitend zu den in dieser Arbeit beschriebenen analytischen Rechnungen wurden Molekular-Dynamik-Simulationen [AT96] durchgeführt. Als besonders geeignet für Hardcore-Potentiale hat sich hier (neben *direct simulation Monte-Carlo* DSMC [Bir76]) der ereignisgesteuerte Ansatz (ED: *event driven*) [Lub91] herausgestellt. Konkret habe ich auf eine Implementierung aus [HAZ99] zurückgegriffen, die in der Vergangenheit schon erfolgreich eingesetzt wurde.

Da es relativ schwierig ist, die Bedingungen des IHS-Gases (vernachlässigbare Randeﬀekte, keine Gravitation, etc.) experimentell zu realisieren, existieren nur wenige Arbeiten, die dies explizit versuchen [HYC⁺04, EGL⁺05]. Der Vergleich mit mehr oder weniger stark abweichenden Versuchsbedingungen [FM02, KWG97] bleibt mit Unwägbarkeiten behaftet. Simulation stellen hier also ein wichtiges Werkzeug dar, um die physikalische Aussagekraft der theoretischen Modelle zu überprüfen.

Die wesentlichen Schritte des ED-Algorithmus sind die folgenden:

1. Bestimme den Zeitpunkt t_{ij} des nächsten Stoßes zwischen allen Paaren von Teilchen.
2. Bestimme das Paar von Teilchen, das als erstes (zur Zeit t_{ij}^*) stoßen wird.
3. Führe diesen Stoß unter Berücksichtigung der unvollständigen Restitution aus (Gl. (2.3)).
4. Integriere die Bewegungsgleichung der anderen (freien) Teilchen bis t_{ij}^* .

und dann wieder weiter mit 1.

Für die zahlreichen Optimierungsmöglichkeiten, die auch in das benutzte Programm eingeflossen sind, will ich hier nur auf die Literatur verweisen [AT96]. Lediglich auf einen weiteren Punkt will ich näher eingehen, da er auch von allgemeinem Interesse ist: Den inelastischen Kollaps [SK89]. Teilchen in relativ dichten Regionen des Systems können in endlicher Zeit u. U. unendlich viele Kollisionen erleiden. Über diesen Zeitpunkt würde also auch der ED-Algorithmus nicht hinaus kommen.

Um dieses Problem zu umgehen, sind verschiedene Lösungsmöglichkeiten vorgeschlagen worden [Gro97, LM98]. In dem hier verwendeten Programm ist das

2. Grundlagen

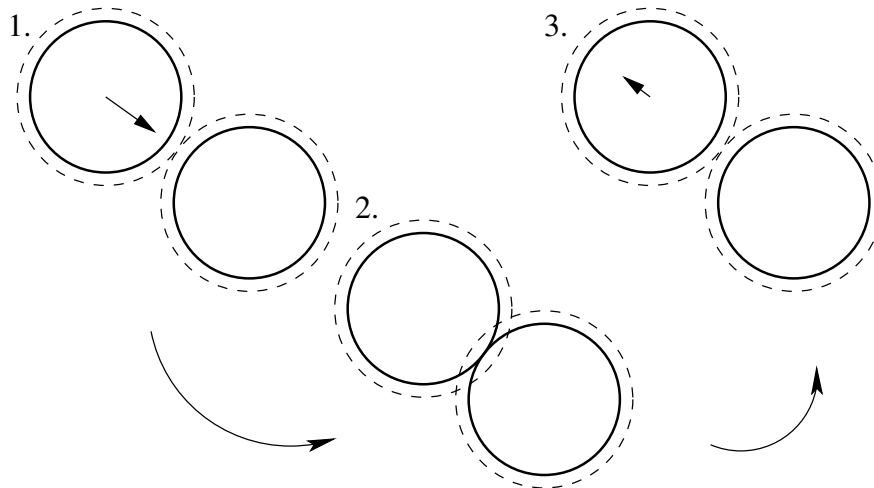


Abbildung 2.3. Ablauf einer Kollision in der ED-Simulation (siehe Text).

eigentliche Teilchen in geringem Abstand von einer weiteren, virtuellen Hülle umgeben (Abb. 2.3). Der ursprünglich instantane Stoß wird nun in mehrere Schritte zerlegt:

1. Der Stoßpartner durchdringt die virtuelle Hülle von außen: Dieser Vorgang ist völlig wechselwirkungsfrei.
2. Die Stoßpartner „berühren“ sich: Nun wird die tangentielle Restitution (unter Berücksichtigung von β) ausgeführt. Die normale Restitution erfolgt zunächst vollständig elastisch ($\epsilon = 1$).
3. Der Stoßpartner passiert erneut die virtuelle Hülle: Erst jetzt wirkt der normale Restitutionskoeffizient $\epsilon \neq 1$.

Befinden sich die Teilchen nun also in einer Region stark erhöhter Dichte, die normalerweise zum inelastischen Kollaps führen könnte, so trennen sie sich gar nicht mehr so weit, dass Punkt 3 zur Anwendung kommen könnte. Im Effekt stoßen die Teilchen bei drohendem inelastischen Kollaps vollständig elastisch und man vermeidet so den unbeschränkten Anstieg der Kollisionsfrequenz.

Die Bedingung eines unendlich ausgedehnten Systems wird wie üblich durch periodische Randbedingungen approximiert.

Eine konkrete Simulation startet, indem die Teilchen auf einem Gitter angeordnet werden. Um eine homogene Durchmischung zu erreichen, lässt man das System zunächst mittels völlig elastischer Stöße ($\epsilon = 1$ und $\beta = -1$) für einige Zeit equilibrieren. Erst dann werden die gewünschten Restitutionskoeffizienten aktiviert. Aus der Ausgabe des Programms lässt sich die Trajektorie des Systems

2.4. Ereignisgesteuerte Simulationen

durch den Phasenraum vollständig rekonstruieren. Damit sind im Prinzip auch sämtliche Observablen zugänglich.

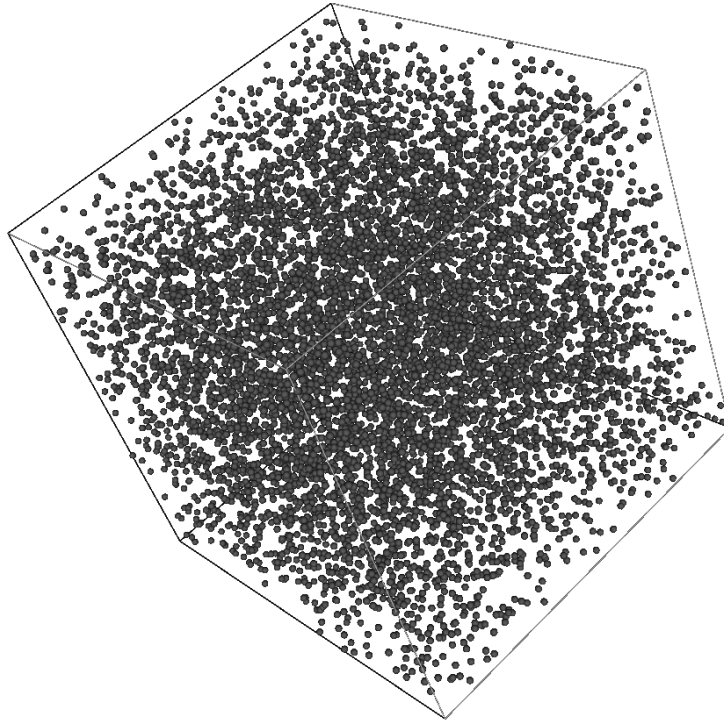


Abbildung 2.4. Typischer Snapshot eines Systems mit 8000 Teilchen wie es den meisten hier verwendeten Simulationen zugrunde liegt.

2. Grundlagen

3. Binäre Gemische inelastischer harter Kugeln

3.1. Einleitung

Die meisten Modelle granularer Materie gehen von nur einer einheitlichen Sorte von Teilchen aus [JR85, HHZ00, BP04]. Betrachtet man dagegen reale granulare Systeme, wie z. B. Sand und Geröll, so ist (im Unterschied zu realen *molekularen* Gasen) zu bezweifeln, dass auch nur zwei gleiche Teilchen vorliegen. Im Prinzip müsste man also Systeme von Teilchen betrachten, deren Eigenschaften bestimmten Verteilungen folgen [Zam95, LB05]. Ein erster Schritt auf diesem Weg stellt die Betrachtung binärer Mischungen dar [WA99, GD99, VNM99, DHGD02, DHGD02, PMP02, GD02, WJM03, AJ04].

Die zwei Sorten Teilchen sollen sich zum einen durch ihre mechanischen Eigenschaften — Radius¹ a_α und Masse m_α —, dann aber auch durch ihre Restitutionskoeffizienten $\epsilon_{\alpha\alpha}$ unterscheiden können. Dazu kommt ein dritter Restitutionskoeffizient ϵ_{12} , der Stöße zwischen den Teilchensorten parametrisiert. Schließlich soll auch noch die Konzentration $x_\alpha := N_\alpha / N$ der Teilchensorten variiert werden können. Dabei ist N_α die Anzahl der α -Teilchen und $N = N_1 + N_2$ die Gesamtzahl der Teilchen. Im thermodynamischen Limes ($N_\alpha \rightarrow \infty$) sind natürlich nur die Konzentrationen x_α von Bedeutung. Von einer unvollständigen tangentialen Restitution wird hier abgesehen — es gilt also stets $\beta = -1$.

In Simulationen [CH02, AL02, AL03] und Experimenten [WP02, FM02], aber auch in theoretischen Modellen [GD99, BT02a] zeigte sich, dass die beiden Teilchensorten auch für lange Zeiten i. A. *nicht* die gleiche Temperatur annehmen. Aus diesem Grund — und um auch die transiente Entwicklung von beliebigen Anfangsbedingungen $T_1(0) \neq T_2(0)$ aus studieren zu können —, wird hier jeder Teilchensorte eine eigene Temperatur T_α zugewiesen.

Auf welche Weise können die Teilchen der Sorte α Energie verlieren? Zum einen durch Stöße mit anderen α -Teilchen, zum anderen aber auch durch Stöße mit Teilchen der Sorte β . Das Verhalten im ersten Fall ist bereits bekannt: Im Mittel geht ein Anteil der mittleren Energie $\sim T_\alpha$ pro Stoß verloren. Stöße wiederum ereignen sich mit der Stoßfrequenz $\omega_{\alpha\alpha} = \omega_{\alpha\alpha}(T_\alpha) \sim \sqrt{T_\alpha}$ (Gl. (2.10)). Im Unterschied zum Fall einer Teilchensorte sind damit aber nicht alle Stöße abgedeckt, sondern (unter der Annahme einer homogenen Durchmischung) nur der Bruchteil x_1 .

¹Hier und im Folgenden bezeichnen griechische Indizes die Teilchensorte, während lateinische Indizes die einzelnen Teilchen durchnummerieren.

3. Binäre Gemische inelastischer harter Kugeln

Zur Annahme der räumlich homogenen Dichteverteilung kommt jetzt noch die Forderung, dass die Teilchensorten zu jeder Zeit in einer homogenen Mischung vorliegen. Es wurde gezeigt [AW98, CM04, RESM04, AJ04, DH04, ESR05], dass sich dichte Systeme auf langen Zeitskalen in vielfältiger Weise entmischen können. Dies ist ein weiterer Hinweis darauf, dass die hier verwendeten Modelle auf verdünnte Systeme zugeschnitten sind.

Für die Stöße mit β -Teilchen (die einen Anteil $x_2 \equiv 1 - x_1$ der Stöße ausmachen) wird nun erneut ein Anteil proportional zu T_α dissipiert werden. Stöße werden aber mit einer anderen Stoßfrequenz $\omega_{\alpha\beta} = \omega_{\alpha\beta}(T_\alpha, T_\beta)$ auftreten.

Liegt eine Mischung von Teilchen mit unterschiedlichen Temperaturen vor, so wird auch bei völlig elastischen Teilchen ein Wärmestrom einsetzen, der die Temperaturdifferenz auszugleichen sucht. Ein solcher Effekt ist im dissipativen Fall ebenfalls zu erwarten. Es wird also ein weiterer Term proportional zum Temperaturgradienten $T_\beta - T_\alpha$ und zur Stoßfrequenz $\omega_{\alpha\beta}$ auftreten. Insgesamt erwartet man somit eine Gleichung der Form

$$\frac{d}{dt} T_1 - H_{dr} = -x_1 G A_{11} T_1^{\frac{3}{2}} - x_2 \mathcal{A} \omega_{12} T_1 + x_2 (T_2 - T_1) \mathcal{B} \omega_{12} \quad (3.1)$$

mit noch unbestimmten Konstanten $\mathcal{A}, \mathcal{B} \geq 0$ und der Treibleistung $H_{dr} := f_{dr} T_{dr}$. Dabei sollte \mathcal{A} im elastischen Limes verschwinden, während \mathcal{B} zumindest in diesem Limes einen endlichen Wert annehmen muss.

3.2. Das Modell

Die Temperaturen sind, wie üblich, als

$$\frac{d}{2} T_\alpha = \frac{1}{N_\alpha} \sum_{i=1}^{N_\alpha} \frac{m_\alpha}{2} v_i^2 \quad (3.2)$$

definiert. Geht man davon aus, dass sich jede Teilchensorte für sich im HCS befindet

$$\rho_\alpha(\{\mathbf{r}_l\}_{N_\alpha}, \{\mathbf{v}_l\}_{N_\alpha}, t) \sim \prod_l \exp \left[-\frac{m v_l^2}{2 T_\alpha} \right] \quad (3.3)$$

so stellt der Ansatz $\rho(\{\mathbf{r}_l\}, \{\mathbf{v}_l\}, t) \sim \rho_1 \rho_2$ eine unmittelbare Verallgemeinerung des HCS für eine Teilchensorte dar. Bei der Rückführung des Phasenraumelements $d\Gamma$ auf die Phasenraumelemente $d\Gamma_\alpha := \prod_{j \neq l} \Theta(r_{jl} - 2a_\alpha) d^{3N} r d^{3N} v$ der einzelnen Teilchensorten ist zu berücksichtigen, dass der Volumenausschluss auch zwischen den Teilchensorten gilt

$$d\Gamma := d\Gamma_1 d\Gamma_2 \prod_{j=1}^{N_1} \prod_{l=N_1+1}^N \Theta(r_{jl} - a_1 - a_2). \quad (3.4)$$

Dabei wurde ohne Beschränkung der Allgemeinheit angenommen, dass die ersten N_1 Teilchen sämtlich der ersten Sorte angehören.

3.3. Analytische Berechnung der Temperaturentwicklung

Der Pseudo-Liouville-Operator \mathcal{L}^+ , der dieses Modell beschreibt setzt sich aus den folgenden Summanden zusammen: $\mathcal{L}^+ = \mathcal{L}_0 + \mathcal{L}_H^+ + \mathcal{L}_{11}^+ + \mathcal{L}_{22}^+ + \mathcal{L}_{12}^+$. Der Term \mathcal{L}_0 beschreibt dabei wieder das freie Strömen und braucht uns hier nicht weiter zu interessieren. Für ein eventuell vorhandenes Volumentreiben ist der Term \mathcal{L}_H^+ zuständig. Die Stöße zwischen den Teilchen werden schließlich durch die letzten drei Summanden beschrieben: \mathcal{L}_{11}^+ im Falle, dass beide Teilchen der ersten Spezies angehören, \mathcal{L}_{22}^+ für den Fall, dass beides Teilchen der zweiten Sorte sind und \mathcal{L}_{12}^+ für Stöße zwischen Teilchen verschiedener Sorten.

Die $\mathcal{L}_{\alpha\beta}^+$ sind nun wie in Abschnitt 2.3 wiederum als Summe über Stoßoperatoren für zwei Teilchen zu verstehen: $\mathcal{L}_{\alpha\beta}^+ = \frac{1}{2} \sum_{k \neq l} \mathcal{J}_{kl}^{\alpha\beta+}$. Sei $\Lambda(k)$ die Funktion, die den Index k eines Teilchens auf seine Sorte α abbildet, so gilt also

$$\begin{aligned} i\mathcal{J}_{kl}^{\alpha\alpha+} &:= -(\mathbf{v}_{kl} \cdot \hat{\mathbf{r}}_{kl}) \Theta(-\mathbf{v}_{kl} \cdot \hat{\mathbf{r}}_{kl}) \delta(r_{kl} - 2a_\alpha) \delta_{\Lambda(k)\alpha} \delta_{\Lambda(l)\alpha} (b_{kl}^{\alpha\alpha+} - 1) \\ i\mathcal{J}_{kl}^{12+} &:= -(\mathbf{v}_{kl} \cdot \hat{\mathbf{r}}_{kl}) \Theta(-\mathbf{v}_{kl} \cdot \hat{\mathbf{r}}_{kl}) \delta(r_{kl} - a_1 - a_2) (1 - \delta_{\Lambda(k)\Lambda(l)}) (b_{kl}^{12+} - 1). \end{aligned} \quad (3.5)$$

Die $b_{kl}^{\alpha\alpha+}$ sind von derselben Form wie in Gl. (2.24) und implementieren die Stoßgesetze (Gl. (2.3)) für $\beta = -1$. Für den gemischten Stoß b_{kl}^{12+} ist das Stoßgesetz in Abschnitt A.1.2 hergeleitet. Man erhält

$$\mathbf{v}'_1 = \mathbf{v}_1 + \frac{\Delta \mathbf{p}}{m_1}, \quad \mathbf{v}'_2 = \mathbf{v}_2 - \frac{\Delta \mathbf{p}}{m_2} \quad (3.6)$$

mit $\Delta \mathbf{p} := -\mu(1 + \epsilon_{12})(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v}_{12})\hat{\mathbf{n}}$ und der reduzierten Masse $\mu := \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$.

3.3. Analytische Berechnung der Temperaturentwicklung

Wie weiter oben schon erwähnt, hat der Anteil \mathcal{L}_0 keinen Einfluss auf die Temperaturentwicklung. Der Beitrag des Treibens lässt sich wieder durch die Treibleistung H_{dr} erfassen. Man erhält also folgende Differentialgleichung für die Zeitentwicklung der Temperaturen

$$\frac{3}{2} \frac{d}{dt} T_\alpha - H_{dr} = \langle i\mathcal{L}^+ E_\alpha \rangle_t = \langle i\mathcal{L}_{\alpha\alpha}^+ E_\alpha \rangle + \langle i\mathcal{L}_{\alpha\beta}^+ E_\alpha \rangle_t. \quad (3.7)$$

Der Term $\langle i\mathcal{L}_{\alpha\alpha}^+ E_\alpha \rangle_t$ ist identisch mit dem, der in der Behandlung einer Teilchensorte auftritt. Da diese Rechnung in der Literatur (siehe z. B. [AHZ01]) schon wiederholt dargestellt worden ist, will ich sie hier nicht noch einmal ausführen.

Die Berechnung des gemischten Terms $\langle i\mathcal{L}_{\alpha\beta}^+ E_\alpha \rangle_t$ ist in den Abschnitten A.2 und A.3 im Detail dargelegt. Durch die Annahme von molekularem Chaos ist kein Paar von Teilchen ausgezeichnet. Anstatt über alle möglichen Paare von Stoßpartnern zu mitteln, kann man somit auch ein Paar von Teilchen herausgreifen und mit der Verteilungsfunktion ρ über alle möglichen Stoßszenarien mitteln. Es bleibt dabei aber immer noch das Problem, dass der Phasenraum durch den Volumenausschluss in komplizierter Form durchlöchert ist. Im Rahmen der

3. Binäre Gemische inelastischer harter Kugeln

hier betrachteten Mittelwerte kann man das Integrationsvolumen durch Einführen der Paarkorrelationsfunktion (Gl. (2.14)) auf den ganzen Raum ausdehnen. In einem dritten Schritt nutzt man nun die Symmetrien des Problems aus und geht zu Relativkoordinaten über, wie sie in Abb. 2.1 angedeutet sind. An diesem Punkt hat man das Problem im wesentlichen auf eine Reihe von Gaußintegralen und solche über trigonometrische Funktionen reduziert, die elementar ausführbar sind.

Um den Überblick nicht zu verlieren, soll das Ergebnis der Rechnungen hier zunächst für den Fall mechanisch gleicher Teilchen ($m_1 = m_2, a_1 = a_2$) angegeben werden:

$$\begin{aligned} \frac{1}{G} \frac{d}{2} \frac{d}{dt} T_1 - H_{dr} &= -x_1 A_{11} T_1^{\frac{3}{2}} - x_2 A_{12} T_1 \sqrt{\frac{T_1 + T_2}{2}} + x_2 A_{12}^+ (T_2 - T_1) \sqrt{\frac{T_1 + T_2}{2}} \\ \frac{1}{G} \frac{d}{2} \frac{d}{dt} T_2 - H_{dr} &= -x_2 A_{22} T_2^{\frac{3}{2}} - x_1 A_{12} T_2 \sqrt{\frac{T_1 + T_2}{2}} + x_1 A_{12}^+ (T_1 - T_2) \sqrt{\frac{T_1 + T_2}{2}} \end{aligned} \quad (3.8)$$

mit

$$A_{\alpha\beta} := \frac{1 - \epsilon_{\alpha\beta}^2}{4}, \quad A_{12}^+ := \frac{(1 + \epsilon_{12})^2}{8} \quad (3.9)$$

und

$$\begin{aligned} G &:= 8an \sqrt{\frac{\pi}{m}} \chi \quad \text{für } d = 2 \\ G &:= 32a^2 n \sqrt{\frac{\pi}{m}} \chi \quad \text{für } d = 3. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Die Gleichungen Gl. (3.8) sind also tatsächlich von der Form von Gl. (3.1), wobei die Kollisionsfrequenz $\omega_{12}(T_1, T_2) \sim \sqrt{T_1 + T_2}$ ist.

Nun sollen auch verschiedene Massen m_α und Radien a_α zugelassen werden. Da die absoluten Massen bzw. Radien nur von untergeordnetem Interesse sind, sollen sie hier in erster Linie in Form des Massenverhältnisses $\Delta := m_1/m_2$ und des Radienverhältnisses $\sigma = a_1/a_2$ in Erscheinung treten. Es gilt

$$\begin{aligned} \frac{d}{2} \frac{d}{dt} T_1 - H_{dr} &= -x_1 G_{11} A_{11} T_1^{\frac{3}{2}} - \frac{2}{1 + \Delta} x_2 G_{12} A_{12} T_1 \sqrt{\frac{T_1 + T_2 \Delta}{2}} \\ &\quad + \frac{2\Delta}{1 + \Delta} x_2 G_{12} \tilde{A}_{12}^+ (T_2 - T_1) \sqrt{\frac{T_1 + T_2 \Delta}{2}} \\ \frac{d}{2} \frac{d}{dt} T_2 - H_{dr} &= -x_2 G_{22} A_{22} T_2^{\frac{3}{2}} - \frac{2\Delta}{1 + \Delta} x_1 G_{12} A_{12} T_2 \sqrt{\frac{T_1 + T_2 \Delta}{2}} \\ &\quad + \frac{2\Delta}{1 + \Delta} x_1 G_{12} \tilde{A}_{12}^+ (T_1 - T_2) \sqrt{\frac{T_1 + T_2 \Delta}{2}} \end{aligned} \quad (3.11)$$

mit

$$\tilde{A}_{12}^+ := \frac{1}{4} \frac{(1 + \epsilon_{12})^2}{1 + \Delta} \quad (3.12)$$

und

$$\begin{aligned} G_{\alpha\beta} &:= 4(a_\alpha + a_\beta)n\sqrt{\frac{\pi}{m_\alpha}}\chi_{\alpha\beta} \quad \text{für } d = 2 \\ G_{\alpha\beta} &:= 8(a_\alpha + a_\beta)^2n\sqrt{\frac{\pi}{m_\alpha}}\chi_{\alpha\beta} \quad \text{für } d = 3 \end{aligned} \quad (3.13)$$

Auch für die Korrelationsfunktion $\chi_{\alpha\beta}$ existiert eine Virialentwicklung aus der Theorie elastischer harter Kugeln² [MCSL71, LS04]:

$$\chi_{\alpha\beta} = \frac{1}{1-\nu} + \frac{3\zeta}{(1-\nu)^2} \frac{a_1 a_2}{a_1 + a_2} \quad (3.14)$$

mit

$$\begin{aligned} \nu &= \pi n a_2^2 (x_1 \sigma^2 + x_2), \quad \zeta := \frac{3}{4} \pi n a_2 (x_1 \sigma + x_2) \quad \text{für } d = 2 \\ \nu &= \frac{4}{3} \pi n a_2^3 (x_1 \sigma^3 + x_2), \quad \zeta := \frac{4}{3} \pi n a_2^2 (x_1 \sigma^2 + x_2) \quad \text{für } d = 3 \end{aligned} \quad (3.15)$$

Die Herleitung von Gl. (3.11) stellt das Hauptergebnis dieses Abschnitts dar.

3.4. Diskussion

Ein exemplarisches Temperaturverhalten zeigt Abb. 3.1. Insbesondere ist zu erkennen, dass sich die Temperaturen auseinander entwickeln, und auch für große Zeiten nicht wieder zu einem gemeinsamen Wert zurückfinden. Vielmehr stellt sich ein konstantes Temperaturverhältnis $\gamma := T_1/T_2$ ein. Schließlich gehorchen auch binäre Mischungen noch dem Haffschen Gesetz (Gl. (2.16)). Auf alle diese Punkte soll im Folgenden noch genauer eingegangen werden.

Anhand des Vergleichs mit den Simulationsdaten in Abb. 3.2 ist zu erkennen, dass die Theorie die Effekte des Modells außerordentlich gut wiedergibt. Insbesondere sind also die ungleichen Temperaturen und das konstante Verhältnis γ keine Artefakte der Theorie.

Da das Temperaturverhältnis γ offenbar auch für große Zeiten nicht gegen den trivialen Wert 1 konvergiert, soll es hier näher betrachtet werden. Wie in Abschnitt A.4 skizziert, gelingt es, auch für γ eine Differentialgleichung aufzustellen. Nun allerdings nicht in der natürlichen Zeitskala t sondern in der Stoßzeitskala τ_{12} , die über die Stoßfrequenz $\omega_{12} = 1/2 G_{12} \sqrt{(T_1 + T_2 \Delta)/2}$ für gemischte

²Für Massenverhältnisse Δ , die stark von 1 abweichen, scheint diese Näherung von $\chi_{\alpha\beta}$ ihre Gültigkeit zu verlieren [AL05].

3. Binäre Gemische inelastischer harter Kugeln

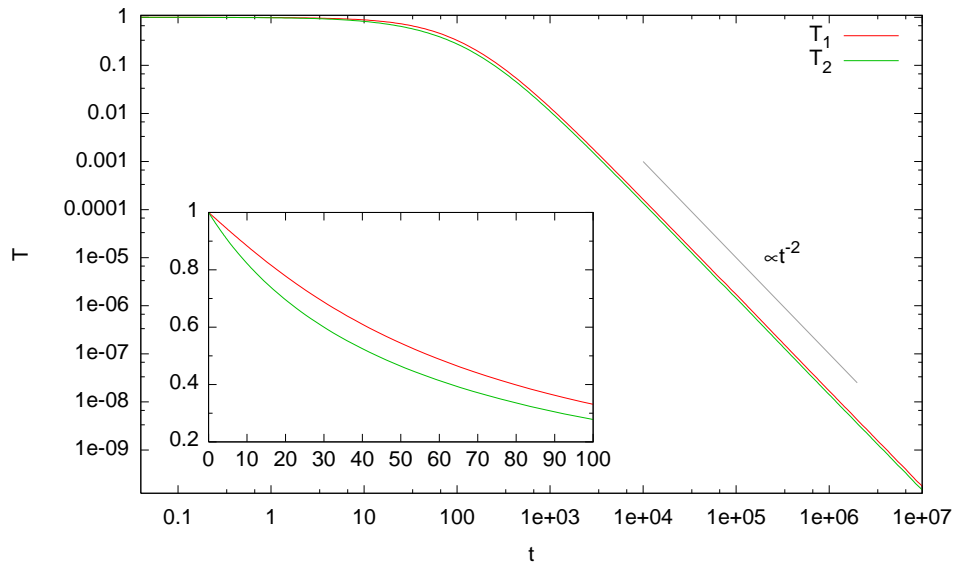


Abbildung 3.1. Zeitentwicklung der Temperaturen einer Mischung mit $\epsilon_{11} = 0.9$, $\epsilon_{22} = 0.5$ & $\epsilon_{12} = 0.7$ sowie $\Delta = \sigma = 1$ und $x_1 = 1/2$, $\nu = 0.0146$ gemäß Gl. (3.8). Die Anfangsbedingungen sind $T_1(0) = T_2(0) = 1$. Das System ist ungetrieben ($H_{dr} = 0$). Man beachte die doppellogarithmische Auftragung und den Übergang zu einem Potenzgesetz mit Exponenten -2 . Der Inset zeigt die anfängliche Entwicklung auf linearer Skala.

Stöße³ definiert ist: $d\tau_{12} := \omega_{12}dt$

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta} \frac{d\gamma}{d\tau_{12}} = & -\frac{2^{d+1}}{d} \frac{\gamma}{\Delta} (1 + \gamma/\Delta)^{-\frac{1}{2}} (1 + \sigma)^{1-d} \left(x_1 \frac{\chi_{11}}{\chi_{12}} A_{11} \sigma^{d-1} \sqrt{\gamma/\Delta} - x_2 \frac{\chi_{22}}{\chi_{12}} A_{22} \right) \\ & - \frac{2\sqrt{2}}{d} \frac{\Delta}{1 + \Delta} \left(x_1 \tilde{A}_{12}^+ \Delta (\gamma/\Delta)^2 \right. \\ & \left. + \frac{\gamma}{\Delta} \left(\tilde{A}_{12}^+ (x_2 - x_1) + A_{12} (\Delta^{-1} x_2 - x_1) \right) - x_2 \Delta^{-1} \tilde{A}_{12}^+ \right). \quad (3.16) \end{aligned}$$

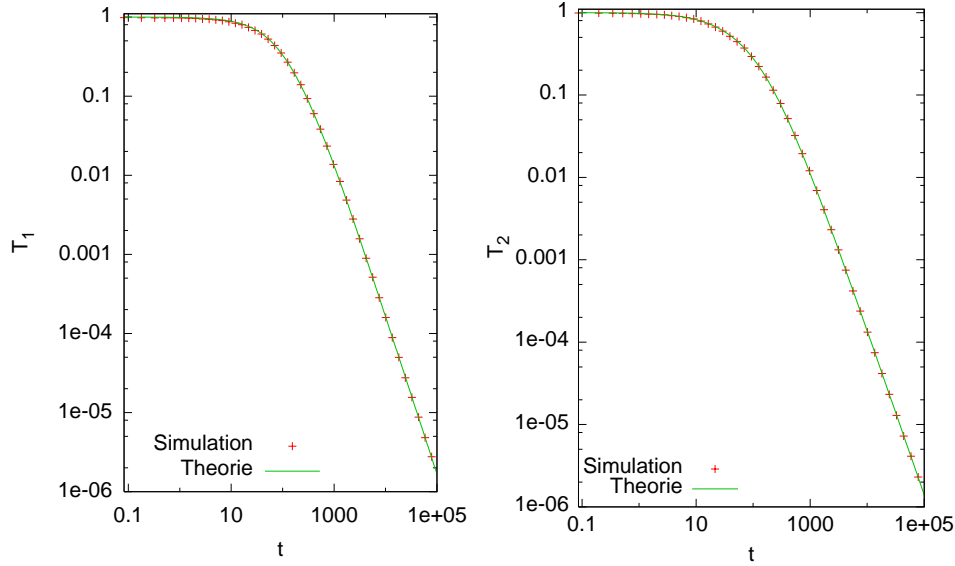


Abbildung 3.2. Das System aus Abb. 3.1 im Vergleich mit Simulationsdaten für $N = 8000$ Teilchen. Um die Übersichtlichkeit zu erhalten, sind die Temperaturverläufe hier separat dargestellt. Ebenso wurde nur eine repräsentative Auswahl der Datenpunkte aus der Simulation aufgetragen.

Die suggestive Schreibweise legt nahe, dass $\phi := \gamma/\Delta$ eventuell die fundamentalere Größe ist [BRM05]:

$$\begin{aligned} \frac{d\phi}{d\tau_{12}} = & -\frac{2^{d+1}}{d} \frac{\phi}{\sqrt{1 + \phi}} (1 + \sigma)^{1-d} \left(x_1 \frac{\chi_{11}}{\chi_{12}} A_{11} \sigma^{d-1} \sqrt{\phi} - x_2 \frac{\chi_{22}}{\chi_{12}} A_{22} \right) \\ & - \frac{2\sqrt{2}}{d} \frac{\Delta}{1 + \Delta} \left(x_1 \tilde{A}_{12}^+ \Delta \phi^2 \right. \\ & \left. + \phi \left(\tilde{A}_{12}^+ (x_2 - x_1) + A_{12} (\Delta^{-1} x_2 - x_1) \right) - x_2 \Delta^{-1} \tilde{A}_{12}^+ \right). \quad (3.17) \end{aligned}$$

³Natürlich könnte man auch τ_{11} oder τ_{22} verwenden. Die getroffene Wahl ermöglicht aber die größte Vereinfachung der Gleichungen.

3. Binäre Gemische inelastischer harter Kugeln

Im Folgenden kann nur ein grober Überblick über den Parameterraum gegeben werden, der durch $\epsilon_{11}, \epsilon_{12}, \epsilon_{22}, \Delta, \sigma, q, x_1, H_{dr}$ und n (und wenn man nicht nur die stationären Zustände betrachten will, auch noch $\gamma(0)$) aufgespannt wird. Insbesondere sollen nur ungetriebene Systeme betrachtet werden. Weiterhin will ich mich auf homogene Kugeln ($q = 2/5$) und symmetrische Mischungen ($x_1 = 1/2$) beschränken.

Die Zeitentwicklung von $\gamma(t)$ in Abb. 3.3 zeigt, dass sich der stationäre Wert schon nach sehr kurzer Zeit (entsprechend wenigen Kollisionen pro Teilchen) einstellt. Dies geschieht offenbar auf denkbar direktem Weg. Deshalb soll uns im Folgenden nur noch der stationäre Wert γ_∞ interessieren.

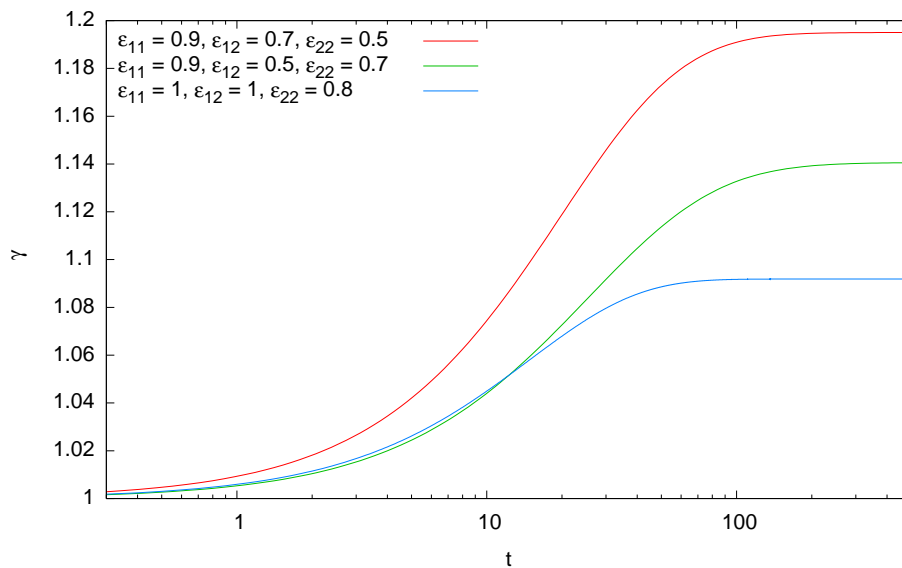


Abbildung 3.3. Die Zeitentwicklung des Temperaturverhältnisses γ für verschiedene Tripel von Restitutionskoeffizienten. Die weiteren Parameter sind $\Delta = \sigma = 1, \nu = 0.0146$. Der Startwert ist jeweils $\gamma(0) = 1$.

Anhand von Abb. 3.4 erkennt man, dass im völlig elastischen Fall ($\epsilon = 1$) die Gleichverteilung der Temperatur und damit auch $\gamma_\infty = 1$ zurückgewonnen wird. Für steigende Dissipation weicht γ_∞ mehr und mehr vom elastischen Fall ab. Ein Massenverhältnis $\Delta \neq 1$ scheint den Effekt meist noch zu verstärken [AL02, GDH05]. Allerdings zeigt das Beispiel $\Delta = 2$, dass das Minimum nicht bei $\Delta = 1$ liegen kann.

Wie in Abb. 3.5 gezeigt, hat auch das Größenverhältnis σ einen Einfluss auf das Temperaturverhältnis. Größere inelastische Kugeln bedingen über den größeren Wirkungsquerschnitt eine erhöhte Stoßrate, und damit eine verstärkte Dissipation. Diese vergrößert offenbar auch den Temperaturunterschied.

Abb. 3.6 lässt nun explizit erkennen, wie ein stark ungleiches Massenverhältnis

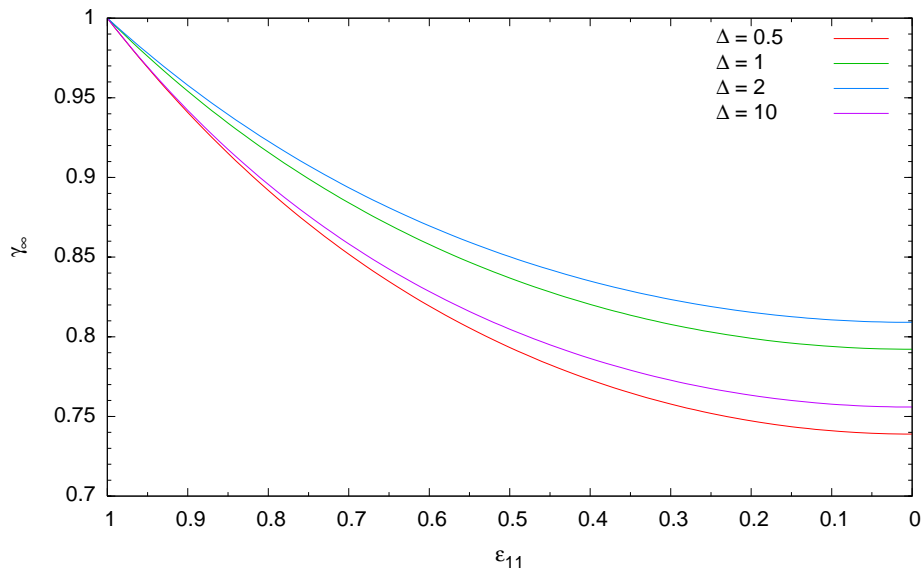


Abbildung 3.4. Stationärer Wert des Temperaturverhältnisses γ als Funktion des Restitutionskoeffizienten ϵ_{11} für verschiedene Massenverhältnisse Δ . Die restlichen Parameter sind $\nu = 0.0146$, $\sigma = 1$, $x_1 = 1/2$ und $\epsilon_{22} = \epsilon_{12} = 1$.

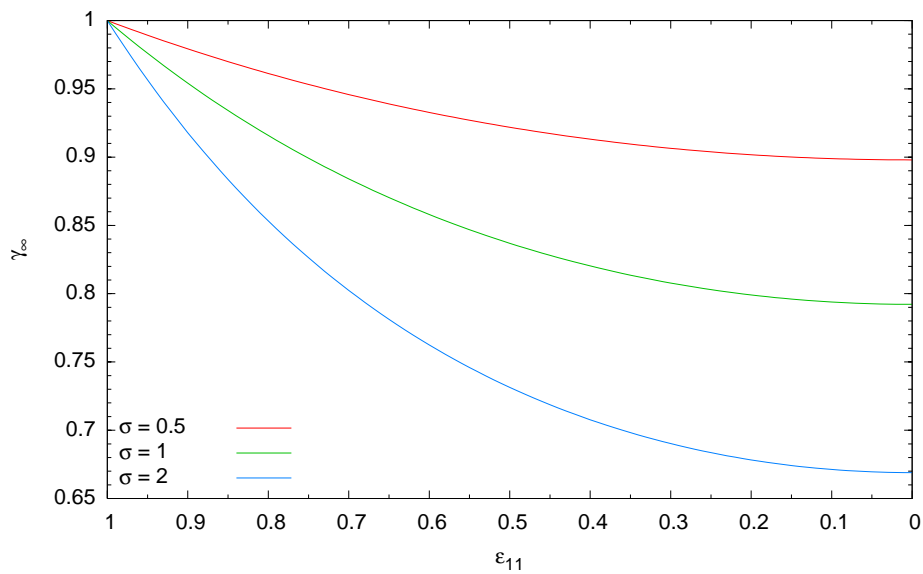


Abbildung 3.5. Stationärer Wert des Temperaturverhältnisses γ als Funktion des Restitutionskoeffizienten ϵ_{11} für verschiedene Größenverhältnisse σ . Die restlichen Parameter sind $\nu = 0.0146$, $\Delta = 1$, $x_1 = 1/2$ und $\epsilon_{22} = \epsilon_{12} = 1$.

3. Binäre Gemische inelastischer harter Kugeln

Δ i. A. auch den Temperaturunterschied verstärkt. Der vorläufige⁴ Vergleich mit Simulationen lässt eine gute Übereinstimmung von Theorie und Simulation auch für $\Delta \neq 1$ erkennen. Insbesondere scheint die oben angesprochene Unsicherheit bezüglich des genauen Wertes von $\chi_{\alpha\beta}$ hier keine Rolle zu spielen.

Gleiches zeigt Abb. 3.7 für das Größenverhältnis σ . Für $\sigma \rightarrow 0$ geht tatsächlich auch $\gamma_\infty \rightarrow 1$, da in diesem Fall die Stoßrate der immer kleiner werdenden inelastischen Teilchen — und damit auch ihr Beitrag zur Temperaturentwicklung — verschwindet. Die etwas größeren Abweichungen zwischen Theorie und Simulation hin zu größeren σ sind verständlich, wenn man beachtet, dass größere Teilchen bei konstanter Teilchendichte n einen größeren Volumenbruch mit sich bringen. Wie weiter oben schon erwähnt, werden die Annahmen von homogener Dichte und molekularem Chaos für dichtere Systeme aber zunehmend verletzt.

Der Inset von Abb. 3.7 zeigt den physikalisch interessanten Fall, dass die Teilchen alle die gleiche Massendichte $\rho \sim m/a^3$ besitzen und lediglich in ihrer Größe variieren. Das Verhalten wird hier allerdings durch den starken Einfluss des Massenverhältnisses Δ dominiert, sodass sich ein qualitativ ähnliches Bild zu Abb. 3.6 ergibt.

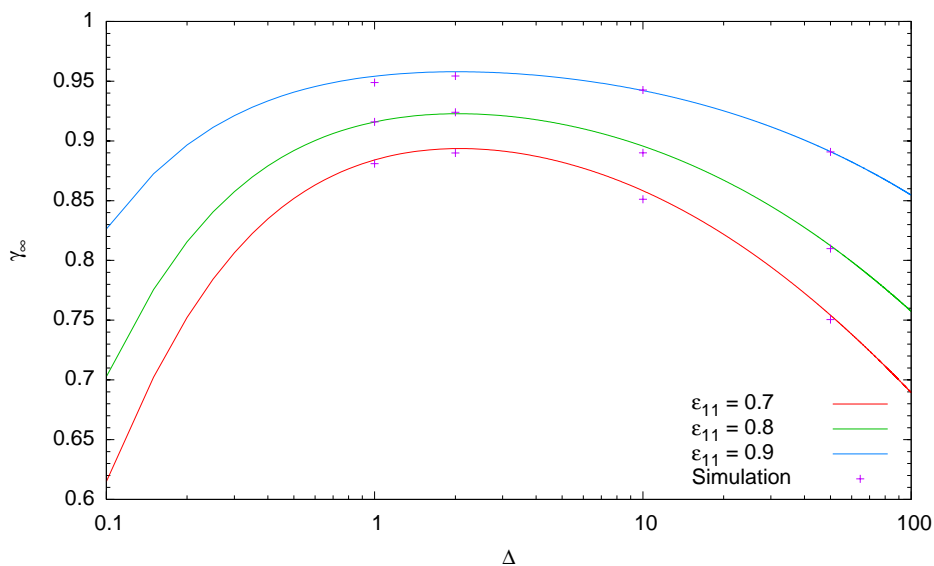


Abbildung 3.6. Stationärer Wert des Temperaturverhältnisses γ als Funktion des Massenverhältnisses Δ für verschiedene Restitutionskoeffizienten ϵ_{11} . Die restlichen Parameter sind $\nu = 0.0146$, $\sigma = 1$, $x_1 = 1/2$ und $\epsilon_{22} = \epsilon_{12} = 1$. Man beachte die logarithmische Massenskala. Die Simulationsdaten wurden für $N = 8000$ Teilchen gewonnen.

⁴Insbesondere liegt den einzelnen Werten nur jeweils ein einziger Simulationslauf zugrunde.

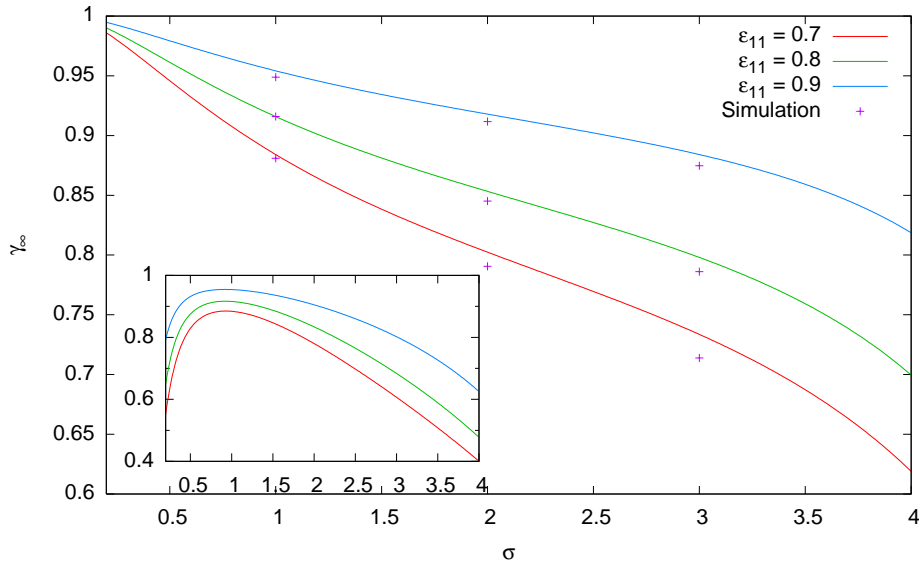


Abbildung 3.7. Stationärer Wert des Temperaturverhältnisses γ als Funktion des Größenverhältnisses σ für verschiedene Restitutionskoeffizienten ϵ_{11} . Die restlichen Parameter sind $n = 0.00348$ (entsprechend $\nu = 0.0146$ bei $\sigma = 1$), $\Delta = 1$, $x_1 = 1/2$ und $\epsilon_{22} = \epsilon_{12} = 1$. Die Simulationsdaten wurden für $N = 8000$ Teilchen gewonnen. Im Inset wurde statt Δ die Massendichte konstant gehalten, d. h. es gilt $\Delta \sim \sigma^3$

Im Folgenden sollen noch zwei Spezialfälle näher beleuchtet werden, die auch in der Literatur schon diskutiert wurden [MP99, BMP02].

3.4.1. Der Tracer-Limit

Hierunter versteht man den Fall, dass die erste Spezies in verschwindender Konzentration $x_1 \rightarrow 0$ in einem Bad aus elastischen Teilchen ($\epsilon_{22} = 1$) schwimmt. Die Spezifikation von ϵ_{11} erübrigt sich hier, da sich die Tracer-Teilchen im thermodynamischen Limes nie treffen. In diesem Fall nimmt Gl. (3.17) die Form

$$\frac{d\phi}{d\tau_{12}} = -\frac{2\sqrt{2}}{d} \frac{\Delta}{1+\Delta} \left(\phi(\tilde{A}_{12}^+ + A_{12}\Delta^{-1}) - \Delta^{-1}\tilde{A}_{12}^+ \right) \quad (3.18)$$

an. Als stationärer Wert wird hier das Ergebnis aus [MP99] bestätigt:

$$\gamma_\infty = \frac{1 + \epsilon_{12}}{2 + (1 - \epsilon_{12})\Delta^{-1}} \quad (3.19)$$

unabhängig von σ . Insbesondere sind also die Tracer-Teilchen im inelastischen Fall stets kühler als das Bad.

3. Binäre Gemische inelastischer harter Kugeln

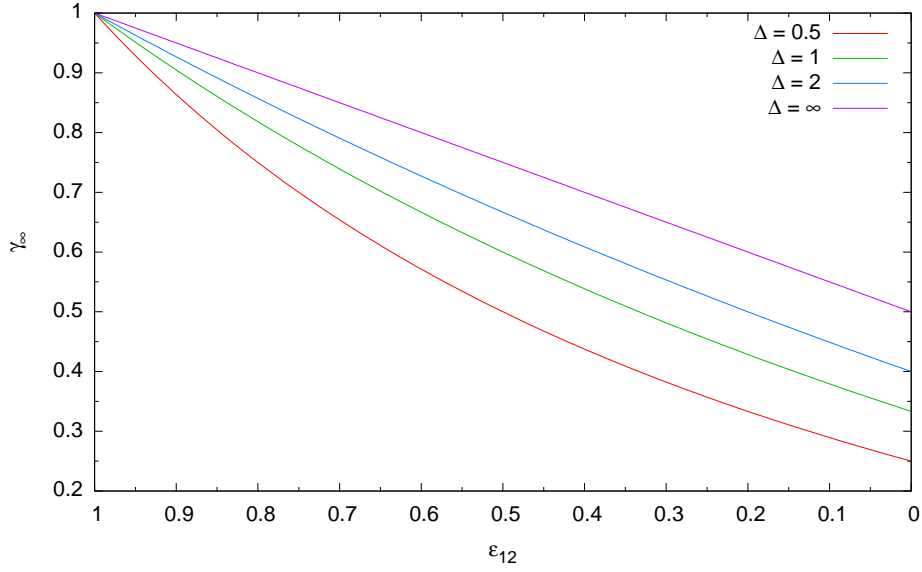


Abbildung 3.8. Stationärer Wert der Temperatur des Tracer-Teilchens im Verhältnis zur Bad-Temperatur als Funktion des Restitutionskoeffizienten ϵ_{12} für Kollisionen von Bad- und Tracer-Teilchen für verschiedene Werte des Massenverhältnisses Δ .

Für Brownsche Teilchen [BRG99] mit $\Delta \rightarrow \infty$ lässt sich Gl. (3.19) noch einmal zu $\gamma_\infty = \frac{1+\epsilon_{12}}{2}$ vereinfachen.

Auch das Erreichen des stationären Wertes lässt sich hier analytisch darstellen:

$$\phi(\tau) - \phi_\infty = (\phi_0 - \phi_\infty)e^{-\omega\tau} \quad (3.20)$$

mit $\omega := \frac{2\sqrt{2}}{d} \frac{\Delta}{1+\Delta} (\tilde{A}_{12}^+ + A_{12}\Delta^{-1})$. In der Stoßzeitskala wird das konstante Temperaturverhältnis also exponentiell schnell erreicht [BRG99].

Der Tracer-Limit ist auch noch aus einem anderen Grund interessant: In [MP99] wurde gezeigt, dass für die Tracer-Teilchen der HCS die exakte Verteilungsfunktion darstellt.

3.4.2. Kopplung an ein elastisches Bad

Eine weitere Möglichkeit ist, die Temperatur der einen Teilchensorte fest vorzugeben und die andere, inelastische Sorte damit zu treiben [BMP02, BT02a, San03].

Mit $\epsilon_{22} = \epsilon_{12} = 1$ und $T_2 = \text{const.}$ gilt

$$\frac{d\phi}{d\tau_{12}} = -\frac{2^{d+1}}{d} x_1 \frac{\sigma^{d-1}}{(1+\sigma)^{d-1}} \frac{\chi_{11}}{\chi_{12}} A_{11} \frac{\phi^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{1+\phi}} + \frac{2\sqrt{2}}{d} \frac{\Delta}{(1+\Delta)^2} x_2 (\Delta^{-1} - \phi). \quad (3.21)$$

Setzt man die rechte Seite gleich Null, so erhält man eine implizite Gleichung für den stationären Wert $\phi_\infty = \phi(\tau_{12} \rightarrow \infty)$.

Anhand von Abb. 3.9 ist zu erkennen, dass auch in diesem Fall die Temperatur der inelastischen Teilchen hinter der Temperatur des Bades zurück bleibt.

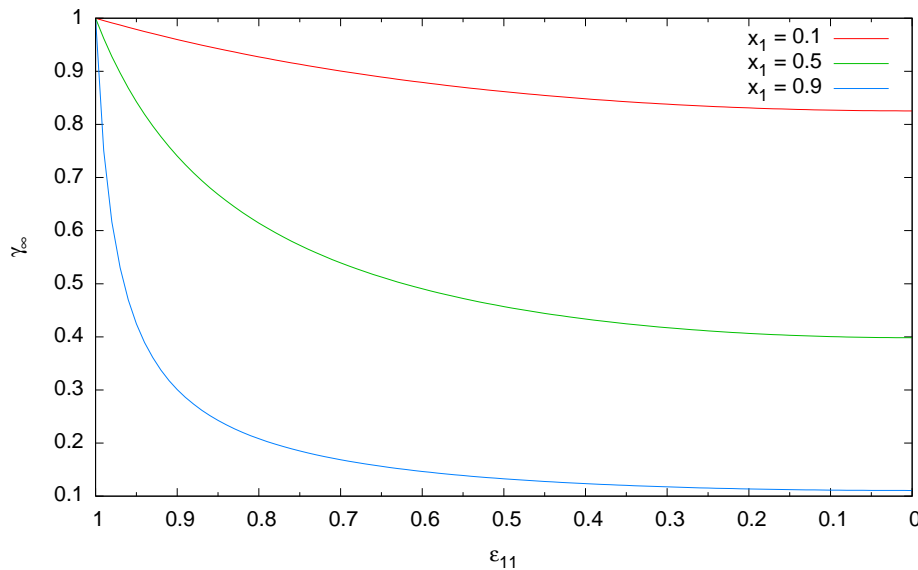


Abbildung 3.9. Temperatur der inelastischen Teilchen im Verhältnis zur Bad-Temperatur als Funktion des Restitutionskoeffizienten ϵ_{12} für verschiedene Konzentrationen der inelastischen Teilchen x_1 . Es gilt stets $\sigma = \Delta = 1$.

3.5. Zusammenfassung

Im vorangehenden Kapitel habe ich gezeigt, wie man ausgehend vom Modell der inelastischen harten Kugeln zu einer analytischen Beschreibung der Temperaturentwicklung binärer Mischungen kommen kann. Der Vergleich mit ED-Simulationen zeigte eine gute Übereinstimmung. Diese gilt insbesondere über die ganze Zeitentwicklung und auch für nicht-stationäre Zustände.

Im Unterschied zu elastischen Gasen liegt i. A. keine Gleichverteilung der Energie vor. Stattdessen stellt sich ein stationäres Temperaturverhältnis ein. Die Abweichungen von der Gleichverteilung wachsen i. A. mit dem Grad der Dissipation und mit der mechanischen Verschiedenheit der Teilchen.

Für lange Zeiten folgen auch die Komponenten einer binären Mischung wieder dem Haffschen Gesetz. Im Tracer-Limes konnte eine besonders einfache Darstellung gewonnen werden. Im Ergebnis besitzen die Tracer-Teilchen stets eine geringere Temperatur als das Bad. Schließlich kann auch die von Biben [BMP02] vorgeschlagene Variante des granularen Treibens im Rahmen der vorgestellten Theorie behandelt werden.

3.6. Ausblick

Ausgehend von dieser Arbeit sind eine ganze Reihe von Erweiterungen denkbar. Auf der technischen Seite sollte man zunächst sicher die Abweichungen von der Gaußverteilung über die Sonine-Polynome berücksichtigen. Unabhängig davon könnte man auch versuchen, die Theorie auf raue Kugeln mit tangentialen Restitutionskoeffizienten β oder gar mit Coulombscher Reibung auszudehnen. Die Untersuchung viskoelastischer Teilchen wäre ebenfalls eine naheliegende Verallgemeinerung.

Als unabhängiges Projekt könnte man versuchen, eine bessere Näherung für die Paarkorrelationsfunktion $\chi_{\alpha\beta}$ im Falle $\Delta \neq 1$ zu finden. Vorbereitend hierzu wäre sicher eine systematische Simulationsstudie hilfreich.

Weiter könnte man über die zwei Sorten hinausgehen und Systeme betrachten, deren Parameter vorgegebenen (evtl. schmalen) Verteilungen folgen. Unabhängig davon könnte man sich überlegen, ob man das Zerbrechen [KH99] oder Verschmelzen von Teilchen in vereinfachter Form berücksichtigen könnte.

Die Berücksichtigung von Systemgrenzen (Container) und äußeren Feldern (allen voran der Schwerkraft) [SGNT06] sind sicher ebenfalls lohnende Ansatzpunkte. In diesen Bereich würden auch realistischere Mechanismen des Treibens — wie etwa vibrierende Wände u. ä. — fallen.

Ebenfalls hochinteressant wäre es, inhomogene Systeme (Stichwort Clusterbildung [LH99]) quantitativ zu beschreiben. Dies würde wahrscheinlich auch eine Behandlung der Segregation [Kud04] erlauben.

4. Korrelation von Rotation und Translation in granularen Gasen

4.1. Einleitung

Im Folgenden soll untersucht werden, ob eine Korrelation zwischen Drehimpuls ω_i und Translationsgeschwindigkeit v_i in einem granularen Gas vorliegt. Als Observable, die das Vorliegen einer solchen Korrelation anzeigt, soll der mittlere Winkel θ zwischen der Winkelgeschwindigkeit ω und der linearen Geschwindigkeit v in der Form

$$\langle \cos^2 \theta \rangle_t := \frac{1}{N} \sum_i \frac{(v_i \cdot \omega_i)^2}{v_i^2 \omega_i^2} \quad (4.1)$$

dienen. Im unkorrelierten Fall gilt $\langle \cos^2 \theta \rangle_t = 1/3$. Abweichungen nach oben weisen auf eine bevorzugt parallele Stellung der Geschwindigkeiten hin, während Abweichungen nach unten bedeuten, dass die Geschwindigkeiten bevorzugt senkrecht aufeinander stehen.

Was wird man erwarten? Die Entwicklung vollzieht sich auf drei Zeitskalen. Ein typisches Szenario beginnt mit einer endlichen anfänglichen Translationstemperatur T_{tr} und einer kleinen ($T_{rot} \ll T_{tr}$) oder verschwindenden ($T_{rot} = 0$) Rotationstemperatur. Die ersten Stöße der Teilchen werden also zwischen den beiden Extremfällen, wie sie in der ersten und zweiten Zeile von Tabelle 4.1 dargestellt sind, liegen. Es ist auch intuitiv klar, dass die Rotation zunächst durch streifende Stöße aufgebaut werden wird und deshalb um eine Achse senkrecht zur Bewegungsrichtung einsetzt. In einer Anfangsphase wird also die Rotationsachse bevorzugt senkrecht auf der Richtung der Geschwindigkeit stehen: $\langle \cos^2 \theta \rangle_t < 1/3$. Gleichzeitig maximiert die senkrechte Ausrichtung aber auch die Dissipation der Rotationsenergie.

Für Stöße von schon rotierenden Teilchen ist die Situation wesentlich komplizierter. Wie in den weiteren Zeilen von Tabelle 4.1 zu erkennen ist, wird i. A. eine nichttriviale Kombination von Rotations- und Translationsachse hergestellt. Wenn man bedenkt, dass molekulares Chaos vorausgesetzt wurde, d. h. dass \hat{n} weder mit v noch mit ω korreliert ist, wird man erwarten, dass hierbei jegliche Korrelation mit der Zeit zerfallen wird: $\langle \cos^2 \theta \rangle_t \rightarrow 1/3$.

Nun ist aber zu bedenken, dass sich ein stationäres Temperaturverhältnis R^* (Gl. (2.21)) einstellt, welches i. A. von 1 verschieden ist. D. h. für die meisten Parameterwerte überwiegt für lange Zeiten entweder die Translations- oder die Rotationsenergie. In Tabelle 4.1 erkennt man nun, dass in den meisten Stoßsitua-

4. Korrelation von Rotation und Translation in granularen Gasen

tionen wieder eine senkrechte Ausrichtung von \mathbf{v} und $\boldsymbol{\omega}$ angestrebt wird. Nach einer komplizierten, weitgehend unkorrelierten Übergangsphase wird sich also im Falle von $R \gg 1$ bzw. $R \ll 1$ wieder ein Wert $\langle \cos^2 \theta \rangle_t < 1/3$ einstellen.

Ist dagegen $R \approx 1$, so wird die dritte Zeitskala nie erreicht und man wird allenfalls eine schwache Korrelation erwarten. Es gilt also $\langle \cos^2 \theta \rangle_t \approx 1/3$, und auch die Situation $\langle \cos^2 \theta \rangle_t \gtrsim 1/3$ ist nicht mehr ausgeschlossen.

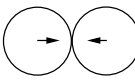
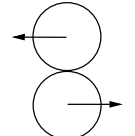
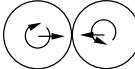
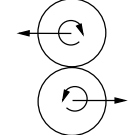
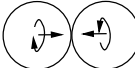
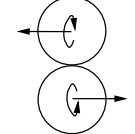
		$T_{tr} \gg T_{rot}$	$T_{rot} \gg T_{tr}$
	$\delta = \eta_n \mathbf{v}$ $\hat{\mathbf{n}} \times \delta = 0$	$\delta \rightarrow \eta_n \mathbf{v}$ $\hat{\mathbf{n}} \times \delta \rightarrow 0$	$\delta \rightarrow \eta_n \mathbf{v}$ $\hat{\mathbf{n}} \times \delta \rightarrow 0$
	$\delta = \eta_t \mathbf{v}$ $\hat{\mathbf{n}} \times \delta = \eta_t \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{v}$	$\delta \rightarrow \eta_t \mathbf{v}$ $\hat{\mathbf{n}} \times \delta \rightarrow \eta_t \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{v}$	$\delta \rightarrow \eta_t \mathbf{v}$ $\hat{\mathbf{n}} \times \delta \rightarrow \eta_t \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{v}$
	$\delta = \eta_n \mathbf{v} + a\eta_t \hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\Omega}$ $\hat{\mathbf{n}} \times \delta = -a\eta_t \boldsymbol{\Omega}$	$\delta \rightarrow \eta_n \mathbf{v}$ $\hat{\mathbf{n}} \times \delta \rightarrow -a\eta_t \boldsymbol{\Omega}$	$\delta \rightarrow a\eta_t \hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\Omega}$ $\hat{\mathbf{n}} \times \delta \rightarrow -a\eta_t \boldsymbol{\Omega}$
	$\delta = \eta_t \mathbf{v} + a\eta_t \hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\Omega}$ $\hat{\mathbf{n}} \times \delta = \eta_t \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{v} - a\eta_t \boldsymbol{\Omega}$	$\delta \rightarrow \eta_t \mathbf{v}$ $\hat{\mathbf{n}} \times \delta \rightarrow \eta_t \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{v}$	$\delta \rightarrow a\eta_t \hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\Omega}$ $\hat{\mathbf{n}} \times \delta \rightarrow -a\eta_t \boldsymbol{\Omega}$
	$\delta = \eta_n \mathbf{v}$ $\hat{\mathbf{n}} \times \delta = 0$	$\delta \rightarrow \eta_n \mathbf{v}$ $\hat{\mathbf{n}} \times \delta \rightarrow 0$	$\delta \rightarrow \eta_n \mathbf{v}$ $\hat{\mathbf{n}} \times \delta \rightarrow 0$
	$\delta = \eta_t \mathbf{v} + a\eta_t \hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\Omega}$ $\hat{\mathbf{n}} \times \delta = \eta_t \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{v} - a\eta_t \boldsymbol{\Omega}$	$\delta \rightarrow \eta_t \mathbf{v}$ $\hat{\mathbf{n}} \times \delta \rightarrow \eta_t \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{v}$	$\delta \rightarrow a\eta_t \hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\Omega}$ $\hat{\mathbf{n}} \times \delta \rightarrow -a\eta_t \boldsymbol{\Omega}$

Tabelle 4.1. Die wesentlich verschiedenen Stoßszenarien anhand von Extrembeispielen. Die erste Spalte stellt die Situation dar. Die zweite Spalte gibt die Änderung der v_i bzw. ω_i an. Dabei ist $\mathbf{v} := \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2$ und $\boldsymbol{\Omega} := \boldsymbol{\omega}_1 + \boldsymbol{\omega}_2$. In der dritten und vierten Spalte sind die Grenzfälle für eine überwiegende Energieform angegeben.

4.2. Das Modell

Das ursprüngliche IHS-Modell (siehe Abschnitt 2.1) geht davon aus, dass keine Korrelation zwischen den linearen Geschwindigkeiten v_i und den Winkelge-

schwindigkeiten ω_i vorliegt. Die Verteilungsfunktion ρ_{HCS} (Gl. (2.6)) muss also erweitert werden, um den Korrelationen Rechnung zu tragen.¹

Analog zu den Abweichungen der Geschwindigkeitsverteilung vom gaußschen Fall [GS95] (siehe auch Abschnitt 2.1), werden auch hier die Effekte der Korrelation in Form einer Entwicklung um die ursprüngliche HCS-Verteilung angesetzt. Die Abweichungen des mittleren Winkels θ sollen hier in eine Reihe von Legendre-Polynomen $P_n(\cos \theta)$ [JZ00] entwickelt werden

$$\rho \sim \prod_{j \neq l} \Theta(r_{jl} - 2a) \left(\sum_n b_n(t) v_l^n \omega_l^n P_n(\theta_l) \right) \exp \left[-\frac{mv_l^2}{2T_{tr}(t)} - \frac{I\omega_l^2}{2T_{rot}(t)} \right] \quad (4.2a)$$

mit zeitabhängigen Entwicklungskoeffizienten $b_n(t)$.

Die Legendre-Polynome ungerader Ordnung würden erlauben, zwischen einer parallelen und einer antiparallelen Ausrichtung der Vektoren zu unterscheiden und können daher keinen Beitrag liefern. In niedrigster Ordnung muss die Summe also bis $n = 2$ mitgeführt werden. Mit $b(t) \equiv b_2(t)$ setzt man somit an

$$\rho \sim \prod_{j \neq l} \Theta(r_{jl} - 2a) (1 + b(t) v_l^2 \omega_l^2 P_2(\cos \theta_l)) \exp \left[-\frac{mv_l^2}{2T_{tr}(t)} - \frac{I\omega_l^2}{2T_{rot}(t)} \right] \quad (4.2b)$$

mit $P_2(\cos \theta) = 3/2(\cos^2 \theta - 1/3)$. Die Idee ist wie üblich, dass die Terme höherer Ordnung schnell kleiner werden. Man hat auch Grund zur Annahme, dass $b(t) v_l^2 \omega_l^2 P_2(\cos \theta_l) \ll 1$, da die Verteilungsfunktion ja auch ohne diesen Term z. B. die Temperaturentwicklung hervorragend beschreiben kann. Aus diesem Grund sollen in der folgenden Rechnung Terme der Ordnung $\mathcal{O}(b^2(t))$ vernachlässigt werden. Die unbekannte Funktion $b(t)$ muss nun selbstkonsistent bestimmt werden.

4.3. Analytische Ergebnisse

Der Ausdruck im Nenner von $\langle \cos^2 \theta \rangle_t$ erschwert einen analytischen Zugang beträchtlich. Deshalb soll zunächst die alternative Größe

$$\Delta := \frac{1}{N} \sum_i \left\{ (v_i \cdot \omega_i)^2 - \frac{1}{3} v_i^2 \omega_i^2 \right\} \quad (4.3)$$

betrachtet werden. Wie weiter unten gezeigt werden wird, lässt sich daraus der mittlere Winkel zurückgewinnen.

Man überzeugt sich leicht, dass im unkorrelierten Fall $\Delta = 0$ gilt. Positive Werte entsprechen wieder einer bevorzugt parallelen Stellung, während negative Werte durch eine senkrechte Ausrichtung der Geschwindigkeitsvektoren hervorgerufen werden. Da Δ nicht normiert ist, ist eine quantitative Interpretation schwierig.

¹In die (unbekannten) exakte Verteilungsfunktion ρ würden natürlich auch die Korrelationen eingehen.

4. Korrelation von Rotation und Translation in granularen Gasen

Zunächst kann man Δ einfach mit der neuen Verteilungsfunktion mitteln und erhält so den Zusammenhang zwischen $b(t)$ und $\langle \Delta \rangle_t$. Wie in Abschnitt A.6 hergeleitet, gilt

$$qm^2 a^2 \langle \Delta \rangle_t = \frac{30}{qm^2 a^2} b(t) T_{tr}^2 T_{rot}^2. \quad (4.4)$$

Bildet man hiervon die Zeitableitung, so gilt

$$qm^2 a^2 \frac{d}{dt} \langle \Delta \rangle_t = \frac{30}{qm^2 a^2} T_{tr} T_{rot} (\dot{b}(t) T_{tr} T_{rot} + 2b(t) (\dot{T}_{tr} T_{rot} + T_{tr} \dot{T}_{rot})). \quad (4.5)$$

Wenn es nun also gelingt, $\frac{d}{dt} \langle \Delta \rangle_t$ unabhängig über den Liouville-Operator-Formalismus zu berechnen, so erhält man eine selbstkonsistente Gleichung für $b(t)$. Kennt man einmal $b(t)$, so auch mit Gl. (4.4) $\langle \Delta \rangle_t$ und wie in Abschnitt A.8 gezeigt

$$\langle \cos^2 \theta \rangle_t = \frac{1}{3} + \frac{6}{5} b(t) \frac{T_{tr} T_{rot}}{qm^2 a^2}. \quad (4.6)$$

Wie durch den Ansatz nahe gelegt, parametrisiert die Funktion $b(t)$ also die Abweichung vom unkorrelierten Verhalten. Der Term $\frac{T_{tr} T_{rot}}{qm^2 a^2}$ dient im Wesentlichen nur dazu, $b(t)$ einheitenlos zu machen.

Nach umfangreichen Rechnungen, die im Abschnitt A.5 skizziert sind, erhält man

$$\begin{aligned} qm^2 a^2 \langle i\mathcal{L}_+ \Delta \rangle_t = & - \left(A^{(0)} + A^{(1)} b(t) \frac{T_{tr} T_{rot}}{qm^2 a^2} \right) G T_{tr}^{\frac{3}{2}} T_{rot} \\ & - \left(B^{(0)} + B^{(1)} b(t) \frac{T_{tr} T_{rot}}{qm^2 a^2} \right) G T_{tr}^{\frac{1}{2}} T_{rot}^2 - C^{(0)} G T_{tr}^{\frac{5}{2}} \end{aligned} \quad (4.7)$$

mit den etwas unhandlichen Konstanten $A^{(0)}, A^{(1)}, B^{(0)}, B^{(1)}$ und $C^{(0)}$ aus Gl. (A.83) und G aus Gl. (3.11).

Anhand der Rechnungen in Abschnitt A.7 erhält man die Bestimmungsgleichungen für die Temperaturen in der folgenden modifizierten Form

$$\begin{aligned} \frac{3}{2} \frac{dT_{tr}}{dt} = & -G A T_{tr}^{\frac{3}{2}} + G B \left(1 - \frac{b(t)}{2} \frac{T_{tr} T_{rot}}{qm^2 a^2} \right) T_{tr}^{\frac{1}{2}} T_{rot} \\ \frac{3}{2} \frac{dT_{rot}}{dt} = & G B T_{tr}^{\frac{3}{2}} - G C \left(1 - \frac{b(t)}{2} \frac{T_{tr} T_{rot}}{qm^2 a^2} \right) T_{tr}^{\frac{1}{2}} T_{rot} \end{aligned} \quad (4.8)$$

mit A, B, C aus Gl. (2.18). Interessanterweise beeinflussen die Korrelationen nur die Terme proportional zu T_{rot} . D. h. der Einfluss der Rotationstemperatur T_{rot} auf die Änderung der Translationstemperatur T_{tr} erfährt eine Korrektur, nicht aber die Änderung von T_{rot} bedingt durch T_{tr} .

Setzt man nun Gl. (4.7) in Gl. (4.5) ein, so gilt

$$\begin{aligned} 30 \frac{T_{tr} T_{rot}}{qm^2 a^2} \dot{b}(t) = & -b(t) \frac{T_{tr} T_{rot}}{qm^2 a^2} \left(G A^{(1)} T_{tr}^{\frac{1}{2}} + G B^{(1)} T_{tr}^{\frac{1}{2}} \frac{T_{rot}}{T_{tr}} + 60 \frac{\dot{T}_{tr}}{T_{tr}} + 60 \frac{\dot{T}_{rot}}{T_{rot}} \right) \\ & - G A^{(0)} T_{tr}^{\frac{1}{2}} - G B^{(0)} T_{tr}^{\frac{1}{2}} \frac{T_{rot}}{T_{tr}} - G C^{(0)} T_{tr}^{\frac{1}{2}} \frac{T_{tr}}{T_{rot}}. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Die Gleichungen (4.8) und (4.9) bilden also ein System gekoppelter Differentialgleichungen für die Unbekannten T_{tr}, T_{rot} & $b(t)$. Durch numerische Integration lässt sich daraus dann die Zeitentwicklung für beliebige Systemparameter bestimmen. Damit ist das Hauptziel dieses Kapitels erreicht, nämlich einen analytischen Ausdruck für $\langle \cos^2 \theta \rangle_t$ zu gewinnen.

4.4. Diskussion

Zunächst ist in Abb. 4.1 ein exemplarischer Verlauf von $\Delta(t)$ dargestellt. Der Vergleich mit den Ergebnissen der Simulation zeigt, dass der gewählte Ansatz offenbar in der Lage ist, die wesentlichen Korrelationseffekte einzufangen. Insbesondere bauen sich tatsächlich auch aus einem anfänglich unkorrelierten System mit der Zeit Korrelationen auf, die einer Bevorzugung von $\omega \perp v$ entsprechen. Der Vergleich mit der Temperaturentwicklung (ebenfalls in Abb. 4.1) zeigt, dass die stärkste Korrelation wie erwartet mit der Phase des stärksten Anstiegs von T_{rot} zusammen fällt.

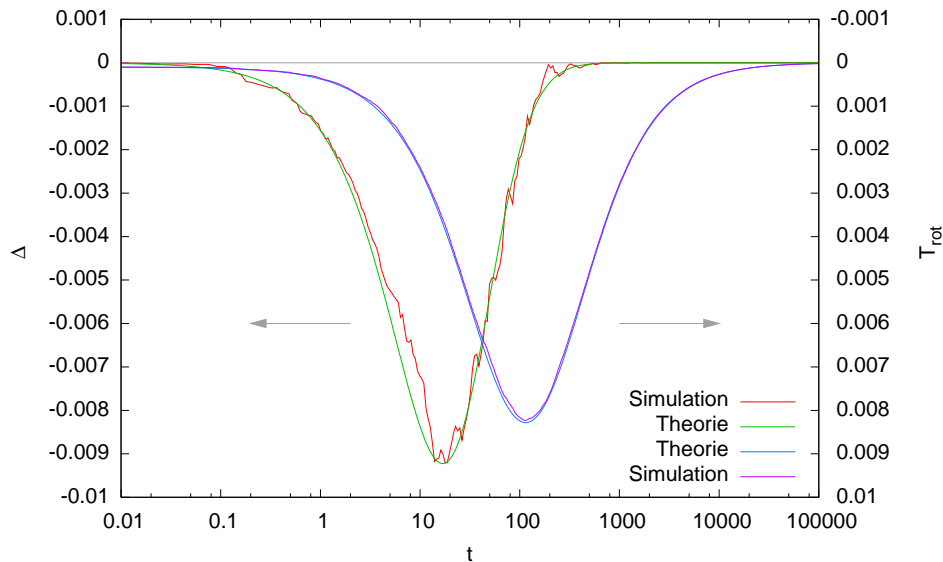


Abbildung 4.1. Die Korrelationsfunktion $\Delta(t)$ und die Rotationstemperatur T_{rot} für ein System mit $\epsilon = 0.8$, $\beta = -0.8$ und $\nu = 0.0146$. Als Anfangswerte wurden $T_{tr}(0) = 1$, $T_{rot}(0) = 10^{-4}$ und $\Delta(0) = 0$ gewählt. Die Simulation wurde mit 8000 Teilchen durchgeführt. Man beachte die verschiedenen Skalen für die beiden Observablen und die logarithmische Zeitskala.

Wie oben erwähnt, lässt sich Δ kaum quantitativ interpretieren. Wenden wir uns also der Größe $\langle \cos^2 \theta \rangle_t$ zu. In Abb. 4.2 ist zunächst erneut ein Vergleich von Simulation und Theorie dargestellt. Man beachte vor allem das angesichts der

4. Korrelation von Rotation und Translation in granularen Gasen

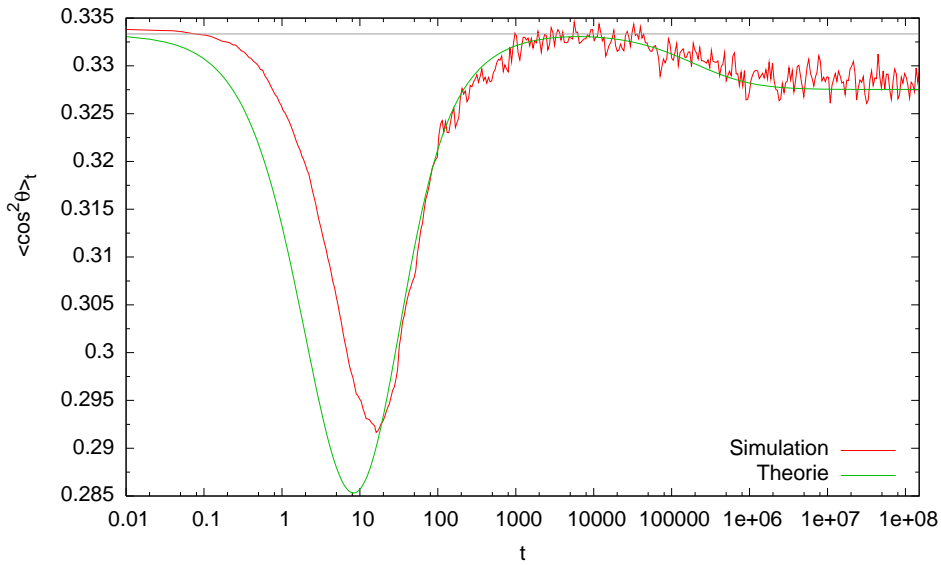


Abbildung 4.2. Vergleich zwischen Simulation und Theorie des mittleren Winkels für $\epsilon = 0.8$, $\beta = -0.8$, $\nu = 0.0146$ und den Anfangsbedingungen $T_{tr}(0) = 1$ & $T_{rot}(0) = 0.001$. Die Simulation wurde mit 8000 Teilchen durchgeführt. Dargestellt ist der Mittelwert aus zehn Läufen.

Teilchenzahl unverhältnismäßig starke Rauschen. Es deutet darauf hin, dass die Korrelation nur durch eine relativ kleine Auswahl an Teilchen bestimmt wird. Die relativ großen Abweichungen für kleine Zeiten sind Ausdruck der großen Empfindlichkeit der anfänglichen Entwicklung von $\langle \cos^2 \theta \rangle_t$ gegenüber kleinen Störungen in den Anfangsbedingungen.

Durch Abb. 4.3 wird die Annahme die Korrelation werde durch wenige Teilchen dominiert unterstützt. Man erkennt, dass auch zum Zeitpunkt der stärksten Korrelation die langsamen Teilchen in der verfügbaren (zugegebenermaßen groben) Auflösung nicht von einer isotropen Winkelverteilung abweichen. Die schnellen Teilchen dagegen zeigen eine Konzentration um die senkrechte Orientierung ($\cos \theta = 0$) und bestimmen damit die Korrelationsfunktion $\langle \cos^2 \theta \rangle_t$. Im Falle verschwindender Korrelation weisen auch die schnellen Teilchen wieder eine isotrope Winkelverteilung auf.

Abb. 4.4 zeigt den zeitlichen Verlauf von $\langle \cos^2 \theta \rangle_t$ für einige Paare von Restitutionskoeffizienten. Auch diese Observable zeigt also den erwarteten anfänglichen Aufbau einer Korrelation im Sinne von $\omega \perp v$. Anschließend fällt der mittlere Winkel wieder auf einen nahezu unkorrelierten Wert ab, um für große Zeiten gegen einen stationären Wert ungleich $1/3$ zu konvergieren. Die drei Zeitskalen aus der qualitativen Überlegung finden sich also auch in der analytischen Betrachtung wieder. Ob die Bereiche mit $\langle \cos^2 \theta \rangle_t \approx 1/3$ durch die Theorie ad-

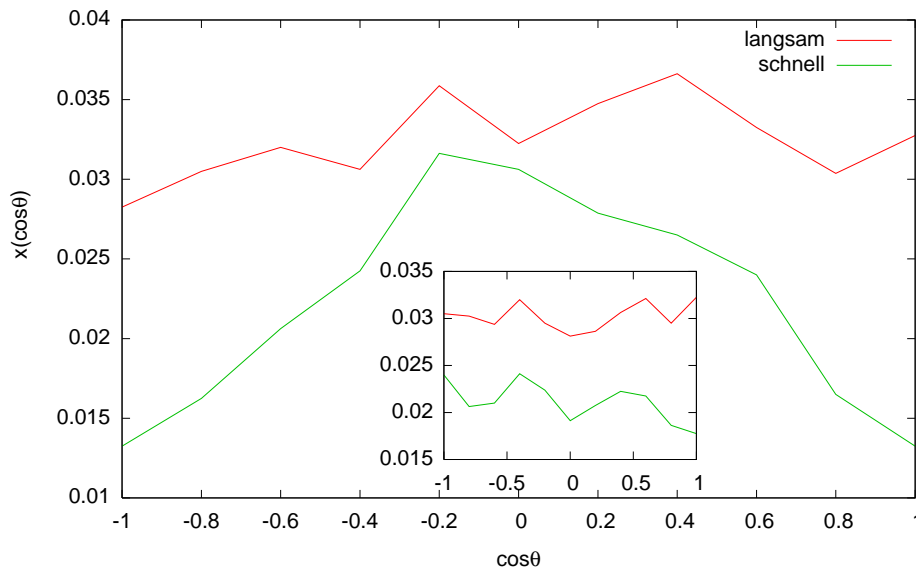


Abbildung 4.3. Winkelverteilung für das System aus Abb. 4.2 zur Zeit $t = 30$. Dargestellt ist der Anteil x der Teilchen als Funktion des Winkels θ . Aufgeteilt in *schnelle* (überdurchschnittliche Geschwindigkeiten) und *langsame* Teilchen (unterdurchschnittliche Geschwindigkeiten). Der Inset zeigt die selben Größen für $t = 1 \times 10^4$.

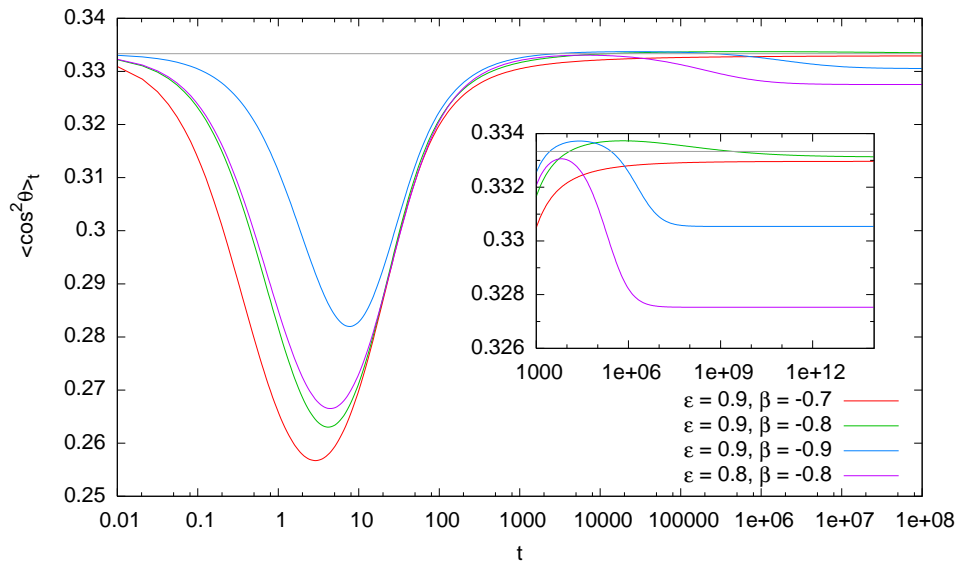


Abbildung 4.4. Zeitliche Entwicklung des mittleren Winkels für einige Paare von Restitutionskoeffizienten. Der Volumenbruch beträgt jeweils $\nu = 0.0146$. Die Anfangsbedingungen sind $T_{tr}(0) = 1$ & $T_{rot}(0) = 0$. Der Inset zeigt das Verhalten für große Zeiten.

4. Korrelation von Rotation und Translation in granularen Gasen

äquat wiedergegeben werden, ist nicht unmittelbar klar. Es wäre möglich, dass hier Terme höherer Ordnung dominieren.

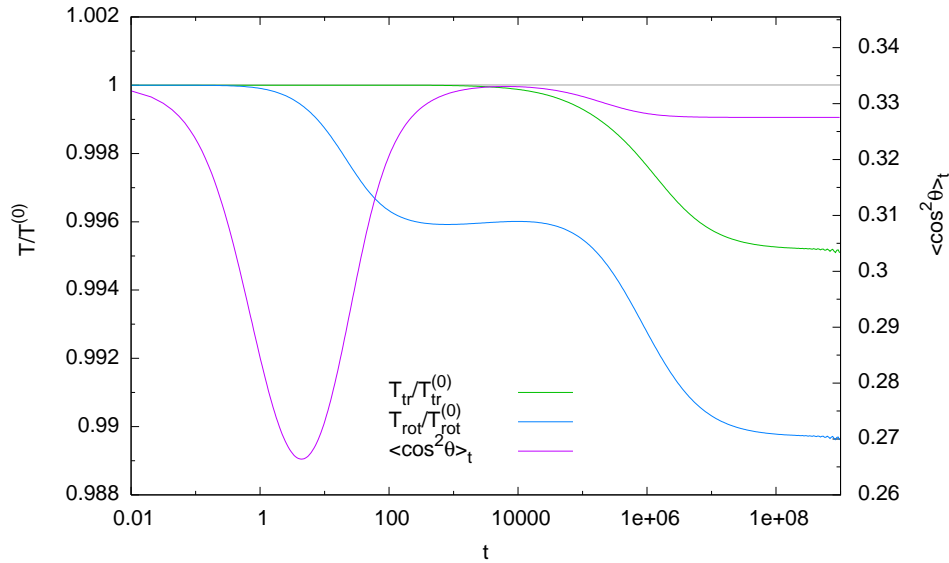


Abbildung 4.5. Änderung der Temperaturentwicklung durch Berücksichtigung der Korrelationen. Aufgetragen sind das Verhältnisse der Temperaturen *mit* Berücksichtigung der Korrelation (Gl. (4.8)) zu dem unter der Annahme von verschwindenden Korrelationen berechneten (Gl. (2.17)). Zum Vergleich ist auch noch einmal der Verlauf des mittleren Winkels aus Abb. 4.4 eingezeichnet. Die Parameterwerte betragen $\epsilon = 0.8$, $\beta = -0.8$ und $\nu = 0.0146$ mit den Startwerten $T_{tr}(0) = 1$ und $T_{rot}(0) = 2.5 \times 10^{-4}$.

Betrachtet man die Korrekturen der Temperaturentwicklung (Gl. (4.8)), wie sie in Abb. 4.5 dargestellt sind, so fallen mehrere Dinge auf. Zum einen fällt nun erwartungsgemäß die Dissipation von T_{rot} stärker aus. Zum anderen wachsen die Abweichungen aber auch nicht beliebig an, sondern gehen ihrerseits gegen einen konstanten Wert. Ebenfalls interessant erscheint mir, dass die Translationstemperatur T_{tr} von der ersten korrelierten Phase offenbar unbeeinflusst bleibt.

Abb. 4.6 zeigt nun den stationären Wert von $\langle \cos^2 \theta \rangle_\infty$ in Abhängigkeit von den Restitutionskoeffizienten. Auch hierfür lässt sich — wie in Abschnitt A.8.1 gezeigt — ein analytischer Ausdruck finden:

$$\langle \cos^2 \theta \rangle_\infty = \frac{1}{3} - \frac{6}{5} \frac{A^{(0)} + B^{(0)}R^* + C^{(0)}R^{*-1}}{A^{(1)} + B^{(1)}R^* + 40BR^{*-1} - 40C} \quad (4.10)$$

wobei R^* den stationären Wert des Temperaturverhältnisses nach Gl. (2.21) bezeichnet. Tatsächlich ist also $\langle \cos^2 \theta \rangle_\infty < 1/3$ für fast alle Parameterwerte. Interessant ist auch, dass $\langle \cos^2 \theta \rangle_\infty$ für $\beta \rightarrow -1$ einen Sprung macht. Für $\beta \equiv -1$ kann

natürlich keine Korrelation vorliegen und es gilt $\langle \cos^2 \theta \rangle_\infty = 1/3$. In der Tat gilt aber

$$\lim_{\beta \rightarrow -1^+} \lim_{t \rightarrow \infty} \langle \cos^2 \theta \rangle_t = \frac{1}{3} - \frac{3(1-\epsilon)}{8(7-\epsilon)}. \quad (4.11)$$

Es kommt hier also auf die Reihenfolge der Grenzwerte an. Der Vergleich mit den Simulationsdaten aus [BPTZ06] zeigt vor allem im Limes elastischer und glatter Kugeln eine hervorragende Übereinstimmung, und im ganzen Wertebereich von β gibt die Theorie das Verhalten zumindest qualitativ richtig wieder.

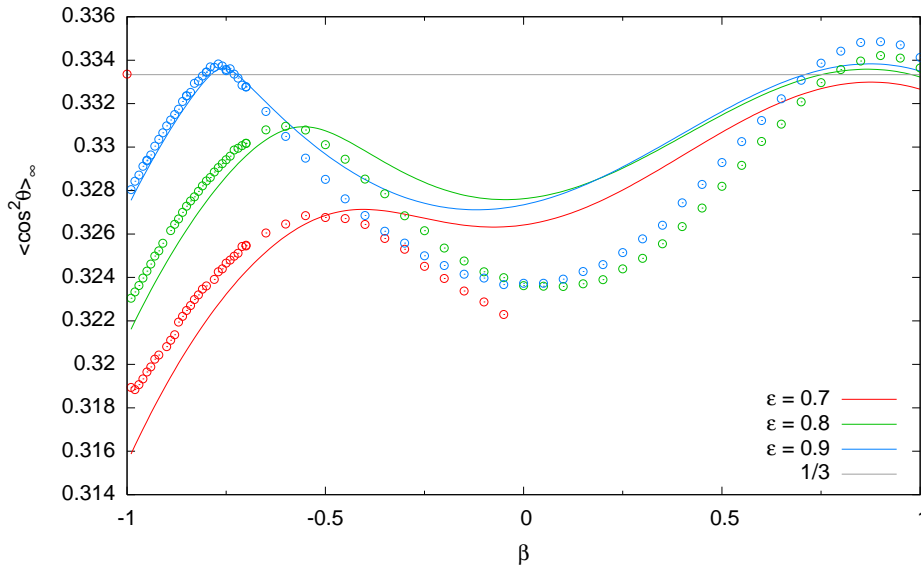


Abbildung 4.6. Der stationäre Wert des mittleren Winkels $\langle \cos^2 \theta \rangle_\infty$ für verschiedene normale Restitutionskoeffizienten ϵ als Funktion von β . Man beachte, dass für fast alle Parameterwerte der stationäre Wert kleiner als $1/3$ ist. Auffällig ist auch der Sprung bei $\beta = -1$ (siehe Text). Die Symbole sind DSMC-Daten von Pöschel [BPTZ06]

Abb. 4.7 gibt schließlich einen Überblick über die Parameterabhängigkeit des mittleren Winkels. Nur innerhalb der schwarzen Konturlinien nimmt $\langle \cos^2 \theta \rangle_\infty$ Werte größer als $1/3$ an. Für den Bereich $\beta \rightarrow -1$ bestätigen sich auch die eingangs angestellten Überlegungen, dass zwischen $\langle \cos^2 \theta \rangle_\infty \approx 1/3$ und $R^* \approx 1$ ein Zusammenhang besteht. Für $\beta \rightarrow +1$ ist die Situation weniger klar. Hier scheinen auch noch andere Effekte eine Rolle zu spielen.

4.5. Zusammenfassung

Im zweiten Teil dieser Arbeit wurde gezeigt, wie sich mittels eines relativ einfachen Ansatzes ein weiterer Korrelationseffekt in granularen Gasen berücksichtigen lässt. Im Rahmen der angesetzten Näherung wurden exakte analytische

4. Korrelation von Rotation und Translation in granularen Gasen

Ausdrücke abgeleitet. Die Gültigkeit der Theorie konnte durch Simulationen unterstützt werden.

In der zeitlichen Entwicklung der Korrelationen konnten drei Zeitskalen identifiziert werden:

1. zunächst ein Anwachsen der Korrelation auf Werte $\langle \cos^2 \theta \rangle_t < 1/3$ während sich die Rotationstemperatur aufbaut,
2. in einer Übergangsphase ein Zerfall der Korrelationen bis zu einem fast unkorrelierten Zustand,
3. für lange Zeiten i. A. wieder ein Anwachsen der Korrelationen auf einen stationären Wert $\langle \cos^2 \theta \rangle_\infty \neq 1/3$.

Zu jeder Zeit ist das System dabei nur schwach korreliert.

Die Parameterabhängigkeit des stationären Wertes $\langle \cos^2 \theta \rangle_\infty$ konnte ansatzweise durch eine Betrachtung des vorherrschenden Energieform für $t \rightarrow \infty$ erklärt werden. Es bleiben aber noch offene Fragen:

- i. Wie ist das Verhalten für $\beta \rightarrow +1$ zu verstehen?
- ii. Wie kann man den Sprung bei $\beta \rightarrow -1$ physikalisch verstehen?
- iii. Was zeichnet die Systeme mit verschwindender Korrelation aus?
- iv. Warum wird für manche Systeme eine parallele Stellung von v und ω bevorzugt?

4.6. Ausblick

Vordringlichste Aufgabe ist sicher, den Prozess, der zu den Korrelationen in den verschiedenen Phasen der Zeitentwicklung führt, besser zu verstehen. Hierzu könnten sicher auch systematische Simulationsstudien beitragen. Eventuell lohnt es auch, nach aussagekräftigeren oder komplementären Observablen zu suchen.

Jeder Erweiterung des Modells müsste eine Studie vorangehen, die auslotet, in welchem Ausmaß sich die Rechnungen mit Hilfe von Computer-Algebra-Systemen durchführen lassen. Die klassische Behandlung mit Papier & Bleistift dürfte hier an ihre Grenzen geraten sein. Ist die Automatisierung gelungen, könnte man sicherlich auch Coulombsche Reibung [HHZ00] bzw. viskoelastische Teilchen [BSHP96] berücksichtigen.

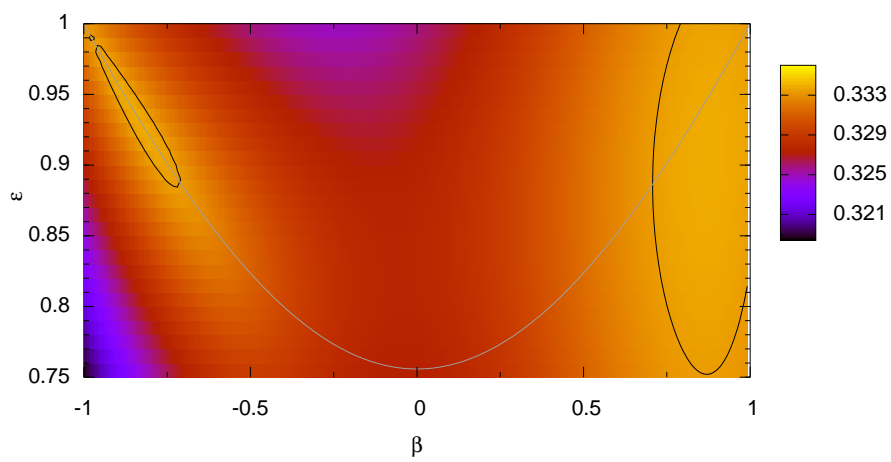


Abbildung 4.7. Der mittlere Winkel $\langle \cos^2 \theta \rangle_\infty$ als Funktion von ϵ & β . Die schwarzen Konturlinien liegen bei $\langle \cos^2 \theta \rangle_\infty = 1/3$, die helle markiert $R^* = 1$.

4. *Korrelation von Rotation und Translation in granularen Gasen*

Danksagung

Zunächst möchte ich Prof. Dr. Annette Zippelius für die interessanten Themen und die gute Betreuung danken, nicht zuletzt auch für die tagelange Suche nach obskuren Vorfaktoren. Vielen Dank auch an PD Dr. Peter Müller für die Übernahme des Korreferats.

Weiter gilt mein Dank insbesondere Dr. Timo Aspelmeier für die Bereitstellung und Erklärung seines Simulationsprogramms sowie die immer freundliche Beantwortung meiner Fragen. Für hilfreiche Anmerkungen zu meiner Arbeit sei ihm hier genau so gedankt, wie Alice, Andrea und Robert.

Dr. Nikolai Brilliantov und Dr. Thorsten Pöschel danke ich für die Simulationsdaten und die hilfreichen Diskussionen.

Meinen Zimmernachbarn Jens, Stefan, Wolfgang (Dir speziell auch für die Einblicke in das Institutsleben) und Andrea danke ich für die schöne Zeit. Der Rest des Instituts sei an dieser Stelle natürlich mit eingeschlossen, insbesondere das Sekretariat, das mir stets freundlich über alle bürokratischen Hürden geholfen hat.

Danke auch allen, die dazu beigetragen haben, dass ich überhaupt bis zu diesem Punkt durchgehalten habe.

4. *Korrelation von Rotation und Translation in granularen Gasen*

Abbildungsverzeichnis

2.1. Stoßprozess in $d = 2$	8
2.2. Stoßvolumen	11
2.3. Ablauf einer Kollision in der ED-Simulation (siehe Text).	16
2.4. Typischer Snapshot eines Systems mit 8000 Teilchen	17
3.1. Zeitentwicklung von T_1, T_2	24
3.2. Vergleich von Theorie & Simulation	25
3.3. Die Zeitentwicklung des Temperaturverhältnisses γ	26
3.4. Temperaturverhältnis γ für verschiedene Massenverhältnisse Δ	27
3.5. Temperaturverhältnis γ für verschiedene Größenverhältnisse σ	27
3.6. Temperaturverhältnis γ als Funktion des Massenverhältnisses Δ	28
3.7. Temperaturverhältnis γ als Funktion des Größenverhältnisses σ	29
3.8. Temperatur des Tracer-Teilchens	30
3.9. Granulares Treiben	31
4.1. Die Korrelationsfunktion $\Delta(t)$	37
4.2. Vergleich zwischen Simulation und Theorie	38
4.3. Winkelverteilung	39
4.4. Der mittlere Winkel für einige Restitutionskoeffizienten	39
4.5. Änderung der Temperaturentwicklung durch die Korrelationen	40
4.6. Der mittlere Winkel als Funktion von β	41
4.7. Der mittlere Winkel als Funktion von ϵ & β	43

Abbildungsverzeichnis

A. Anhang

A.1. Die Stoßgesetze

A.1.1. Für gleiche Massen

Die Definition der Restitutionskoeffizienten (2.1) bildet zusammen mit der Impulserhaltung $v'_1 + v'_2 = v_1 + v_2$ und der Drehimpulserhaltung (2.2) ein Gleichungssystem zur Bestimmung der gestrichenen Größen $v'_1, v'_2, \omega'_1, \omega'_2$. Mit $\delta := v'_2 - v_2$ gilt

$$v'_1 = v_1 - \delta, \quad v'_2 = v_2 + \delta \quad (\text{A.1})$$

und $2\delta = v_{12} - v'_{12}$.

Für die Normalkomponente erhält man so

$$2\hat{n} \cdot \delta = \hat{n} \cdot \mathbf{g} - \hat{n} \cdot \mathbf{g}' = (1 + \epsilon)(\hat{n} \cdot v_{12}) \quad (\text{A.2})$$

Aus der Drehimpulserhaltung folgt zunächst

$$\Omega'_{12} - \Omega_{12} = \frac{2}{qa} \hat{n} \times \delta \quad (\text{A.3})$$

und damit gilt für die Tangentialkomponente

$$\begin{aligned} 2\hat{n} \times \delta &= \hat{n} \times \mathbf{g} - \hat{n} \times \mathbf{g}' + a\hat{n} \times (\hat{n} \times \Omega'_{12}) - a\hat{n} \times (\hat{n} \times \Omega_{12}) \\ &= (1 + \beta)(\hat{n} \times \mathbf{g}) - \frac{2}{q} \hat{n} \times \delta \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

bzw. $\hat{n} \times \delta = \eta_t \hat{n} \times \mathbf{g}$. Aus $\hat{n} \times (\hat{n} \times \delta) = (\hat{n} \cdot \delta)\hat{n} - \delta$ erhält man dann schliesslich δ in der Form von Gl. (2.4).

A.1.2. Für verschiedene Massen

gilt es zunächst die Geschwindigkeiten im Schwerpunktsystem auszudrücken. Mit dem Gesamtimpuls des Systems $\mathbf{P} := m_1 v_1 + m_2 v_2$ lauten die Geschwindigkeiten im Schwerpunktsystem wie folgt

$$\begin{aligned} \tilde{v}_1 &:= v_1 - \frac{\mathbf{P}}{m_1 + m_2} = \frac{m_2}{m_1 + m_2} v_{12} \\ \tilde{v}_2 &:= v_2 - \frac{\mathbf{P}}{m_1 + m_2} = -\frac{m_1}{m_1 + m_2} v_{12} \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

A. Anhang

Für den Impulsübertrag gilt also

$$2\Delta\mathbf{p} := m_1\tilde{\mathbf{v}}'_1 - m_2\tilde{\mathbf{v}}'_2 - (m_1\tilde{\mathbf{v}}_1 - m_2\tilde{\mathbf{v}}_2) = 2\mu(\mathbf{v}'_{12} - \mathbf{v}_{12}) \quad (\text{A.6})$$

mit der reduzierten Masse $\mu := \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$. Da nur normale Restitution vorliegen soll, muss $\Delta\mathbf{p} = (\hat{\mathbf{n}} \cdot \Delta\mathbf{p})\hat{\mathbf{n}}$ gelten und damit

$$\Delta\mathbf{p} = -\mu(1 + \epsilon)(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v}_{12})\hat{\mathbf{n}} \quad (\text{A.7})$$

Für die Geschwindigkeitsänderungen erhält man also die Form von Gl. (3.6).

A.2. Der gemischte Term in $d = 2$

Ausgehend von der Definition kann man die Rechnung zunächst auf nur ein Paar von Teilchen einschränken. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit seien dies die ersten beiden. Weiter soll das erste Teilchen auch der ersten Spezies angehören und das zweite der zweiten. Von diesen Stößen gibt es dann, wie man sich leicht überzeugt, $2N_1 N_2$ Stück und es gilt

$$\begin{aligned} \langle i\mathcal{L}_{12}^+ E_1 \rangle_t &= \left\langle \frac{1}{2} \sum_{k \neq l} i\mathcal{T}_{kl}^{12+} E_1 \right\rangle_t \\ &= \frac{1}{2} \sum_{k \neq l} \int d\Gamma \rho(t) i\mathcal{T}_{kl}^{12+} \frac{1}{N_1} \sum_{k=1}^{N_1} \frac{m_1}{2} \mathbf{v}_k^2 \\ &= -\frac{1}{2N_1} 2 \frac{N_1 N_2}{\int d\Gamma} \int d\Gamma \mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\mathbf{r}}_{12} \Theta(-\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\mathbf{r}}_{12}) \delta(r_{12} - (a_1 + a_2)) \Delta E_{12} \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

wobei

$$\begin{aligned} \frac{2}{m_1} \Delta E_{12} &:= \mathbf{v}'_1{}^2 - \mathbf{v}_1^2 = \frac{2}{m_1} \mathbf{v}_1 \cdot \Delta\mathbf{p} + \frac{\Delta\mathbf{p}^2}{m_1^2} \\ &= -\frac{2\mu}{m_1} (1 + \epsilon_{12}) (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v}_{12}) (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v}_1) + \frac{\mu^2}{m_1^2} (1 + \epsilon_{12})^2 (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v}_{12})^2 \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Um die Paarkorrelationsfunktion in diesem Ausdruck wiederfinden zu können, schieben wir nun zwei Darstellungen der 1 ein ($\int d^2 R_1 d^2 R_2 \delta(\mathbf{R}_1 - \mathbf{r}_1) \delta(\mathbf{R}_2 - \mathbf{r}_2)$)

$$\begin{aligned} \langle i\mathcal{L}_{12}^+ E_1 \rangle_t &= -\frac{N_2}{\int d\Gamma} \int \prod_j d^2 r_j d^2 v_j d^2 R_1 d^2 R_2 \prod_{l \neq j} \Theta(r_{jl} - (a_1 + a_2)) \\ &\quad \delta(\mathbf{R}_1 - \mathbf{r}_1) \delta(\mathbf{R}_2 - \mathbf{r}_2) \mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\mathbf{r}}_{12} \Theta(-\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\mathbf{r}}_{12}) \delta(r_{12} - (a_1 + a_2)) \\ &\quad \exp \left[-\frac{m_1 \mathbf{v}_1^2}{2T_1} - \frac{m_2 \mathbf{v}_2^2}{2T_2} \right] \Delta E_{12} \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

A.2. Der gemischte Term in $d = 2$

Setzt man nun die Definition der Paarkorrelationsfunktion aus Gl. (2.14) ein, so besteht der Normierungsfaktor im Nenner nur noch aus Gaußintegralen. Die Integrationen über die Geschwindigkeiten der Teilchen $3, \dots, N$ lassen sich ebenfalls sofort ausführen und man erhält

$$\begin{aligned} \langle i\mathcal{L}_{12}^+ E_1 \rangle_t &= -\frac{N_2}{V^2} \left(\frac{m_1}{2\pi T_1} \right) \left(\frac{m_2}{2\pi T_2} \right) \int d^2 R_1 d^2 R_2 d^2 v_1 d^2 v_2 \delta(R_{12} - (a_1 + a_2)) \\ &\quad g(R_{12}) v_{12} \cdot \hat{\mathbf{R}}_{12} \Theta(-v_{12} \cdot \hat{\mathbf{R}}_{12}) \exp \left[-\frac{m_1 v_1^2}{2T_1} - \frac{m_2 v_2^2}{2T_2} \right] \Delta E_{12} \quad (\text{A.11}) \end{aligned}$$

Die Substitution $\mathbf{n} := \mathbf{R}_{12}$, erlaubt die Integration über $d^2 R_1$:

$$\begin{aligned} \langle i\mathcal{L}_{12}^+ E_1 \rangle_t &= n_2 \left(\frac{m_1}{2\pi T_1} \right) \left(\frac{m_2}{2\pi T_2} \right) \int d^2 n d^2 v_1 d^2 v_2 \Theta(-v_{12} \cdot \hat{\mathbf{n}}) \delta(n - (a_1 + a_2)) \\ &\quad g(n) v_{12} \cdot \hat{\mathbf{n}} \exp \left[-\frac{m_1 v_1^2}{2T_1} - \frac{m_2 v_2^2}{2T_2} \right] \Delta E_{12} \quad (\text{A.12}) \end{aligned}$$

Schreibt man nun \mathbf{n} in Polarkoordinaten $d^2 n = n dn d\phi$ (sodass $\hat{\mathbf{n}} \cdot v_{12} = v_{12} \cos \phi$), so reduziert sich die Integration über den Radialteil zu einer Anwendung der δ -Funktion, während die Θ -Funktion den Winkel ϕ auf das Intervall $[\pi/2, 3\pi/2]$ einschränkt. Es folgt

$$\begin{aligned} \langle i\mathcal{L}_{12}^+ E_1 \rangle_t &= n_2 (a_1 + a_2) g(a_1 + a_2) \left(\frac{m_1}{2\pi T_1} \right) \left(\frac{m_2}{2\pi T_2} \right) \\ &\quad \int_{\frac{\pi}{2}}^{\frac{3\pi}{2}} d\phi \int d^2 v_1 d^2 v_2 v_{12} \cos \phi \exp \left[-\frac{m_1 v_1^2}{2T_1} - \frac{m_2 v_2^2}{2T_2} \right] \Delta E_{12} \quad (\text{A.13}) \end{aligned}$$

Mit den Abkürzungen

$$\mathcal{N}^{(2)} := \frac{\mu}{2} n_2 (a_1 + a_2) g(a_1 + a_2) \left(\frac{m_1}{2\pi T_1} \right) \left(\frac{m_2}{2\pi T_2} \right) \quad (\text{A.14})$$

und

$$\langle \dots \rangle_2 := \int_{\frac{\pi}{2}}^{\frac{3\pi}{2}} d\phi \int d^2 v_1 d^2 v_2 v_{12} \cos \phi \exp \left[-\frac{m_1 v_1^2}{2T_1} - \frac{m_2 v_2^2}{2T_2} \right] \quad (\text{A.15})$$

bleibt also Folgendes zu bestimmen

$$\langle i\mathcal{L}_{12}^+ E_1 \rangle_t \equiv -2(1 + \epsilon_{12}) \mathcal{N}^{(2)} \langle (v_{12} \cdot \hat{\mathbf{n}})(v_1 \cdot \hat{\mathbf{n}}) \rangle_2 + \frac{\mu}{m_1} (1 + \epsilon_{12})^2 \mathcal{N}^{(2)} \langle (v_{12} \cdot \hat{\mathbf{n}})^2 \rangle_2 \quad (\text{A.16})$$

Für den ersten Term gilt

$$\langle (v_{12} \cdot \hat{\mathbf{n}})(v_1 \cdot \hat{\mathbf{n}}) \rangle_2 = \int_{\frac{\pi}{2}}^{\frac{3\pi}{2}} d\phi \int d^2 v_1 d^2 v_2 v_{12}^2 \cos^2 \phi (v_1 \cdot \hat{\mathbf{n}}) \exp \left[-\frac{m_1 v_1^2}{2T_1} - \frac{m_2 v_2^2}{2T_2} \right] \quad (\text{A.17})$$

A. Anhang

Substituiert man nun $v_2 \rightarrow v := v_{12}$ und schreibt v_1 in Polarkoordinaten $d^2v_1 = v_1 dv_1 d\gamma$ (sodass $v_1 \cdot v = v_1 v \cos \gamma$), so erhält man

$$\begin{aligned} \langle (v_{12} \cdot \hat{n})(v_1 \cdot \hat{n}) \rangle_2 &= \int d^2v \int_{\frac{\pi}{2}}^{\frac{3\pi}{2}} d\phi \int_0^\infty dv_1 \int_0^{2\pi} d\gamma v^2 v_1^2 \cos^2 \phi \cos(\gamma - \phi) \\ &\quad \exp \left[-\frac{1}{2} \frac{m_2 T_1 + m_1 T_2}{T_1 T_2} v_1^2 \right] \exp \left[-\frac{m_2 v^2}{2T_2} \right] \exp \left[\frac{m_2 v_1 v}{T_2} \cos \gamma \right] \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

Mit $\cos(\gamma - \phi) = \cos \gamma \cos \phi + \sin \gamma \sin \phi$ zeigt sich, dass nur der erste Term einen endlichen Beitrag zur $d\phi$ -Integration liefert

$$\begin{aligned} \langle (v_{12} \cdot \hat{n})(v_1 \cdot \hat{n}) \rangle_2 &= -\frac{4}{3} \int d^2v \int_0^\infty dv_1 \int_0^{2\pi} d\gamma v^2 v_1^2 \cos \gamma \\ &\quad \exp \left[-\frac{1}{2} \frac{m_2 T_1 + m_1 T_2}{T_1 T_2} v_1^2 \right] \exp \left[-\frac{m_2 v^2}{2T_2} \right] \exp \left[\frac{m_2 v_1 v}{T_2} \cos \gamma \right] \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

Die $d\gamma$ -Integration definiert nun die Bessel-Funktion $2\pi I_1$ (8.431.5 in [JZ00]).

$$\begin{aligned} \langle (v_{12} \cdot \hat{n})(v_1 \cdot \hat{n}) \rangle_2 &= -\frac{8\pi}{3} \int d^2v \int_0^\infty dv_1 v^2 v_1^2 I_1(m_2 v v_1 / T_2) \\ &\quad \exp \left[-\frac{1}{2} \frac{m_2 T_1 + m_1 T_2}{T_1 T_2} v_1^2 \right] \exp \left[-\frac{m_2 v^2}{2T_2} \right] \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

Damit ist die dv_1 -Integration von der Form 6.631.4 in [JZ00], liefert also

$$\begin{aligned} \langle (v_{12} \cdot \hat{n})(v_1 \cdot \hat{n}) \rangle_2 &= -\frac{8\pi}{3} \frac{m_2}{T_2} \frac{(T_1 T_2)^2}{(m_2 T_1 + m_1 T_2)^2} \int d^2v v^3 \exp \left[-\frac{m_2 v^2}{2T_2} \right] \\ &\quad \exp \left[\frac{m_2^2 T_1}{2 T_2} \frac{v^2}{m_2 T_1 + m_1 T_2} \right] \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

Schreibt man nun auch v in Polarkoordinaten und fasst die Exponentialfunktionen zusammen, so erhält man

$$\begin{aligned} \langle (v_{12} \cdot \hat{n})(v_1 \cdot \hat{n}) \rangle_2 &= -\frac{16\pi^2}{3} \frac{m_2}{T_2} \frac{(T_1 T_2)^2}{(m_2 T_1 + m_1 T_2)^2} \\ &\quad \int_0^\infty dv v^4 \exp \left[-\frac{m_1 m_2}{2} \frac{v^2}{m_2 T_1 + m_1 T_2} \right] \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

Es bleibt also lediglich eine Gaußintegration mit dem Ergebnis

$$\langle (v_{12} \cdot \hat{n})(v_1 \cdot \hat{n}) \rangle_2 = -\frac{2^{\frac{7}{2}} \pi^{\frac{5}{2}}}{m_1^{\frac{5}{2}} m_2^{\frac{5}{2}}} T_1 T_2 T_1 (m_2 T_1 + m_1 T_2)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{A.23})$$

A.2. Der gemischte Term in $d = 2$

Zur Berechnung des zweiten Terms kann man wie folgt vorgehen. Zunächst gilt

$$\langle (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\mathbf{n}})^2 \rangle_2 = \int_{\frac{\pi}{2}}^{\frac{3\pi}{2}} d\phi \int d^2v_1 d^2v_2 (v_{12} \cos \phi)^3 \exp \left[-\frac{m_1 v_1^2}{2T_1} - \frac{m_2 v_2^2}{2T_2} \right] \quad (\text{A.24})$$

Geht man nun zu den Relativkoordinaten $\mathbf{v} := \frac{\mathbf{v}_{12}}{\sqrt{2}}$ und $\mathbf{V} := \frac{\mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2}{\sqrt{2}}$ über, so erhält man

$$\begin{aligned} \langle (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\mathbf{n}})^2 \rangle_2 &= 2\sqrt{2} \int_{\frac{\pi}{2}}^{\frac{3\pi}{2}} d\phi \cos^3 \phi \int d^2v d^2V v^3 \\ &\quad \exp \left[-\frac{1}{4} \left(\frac{m_1}{T_1} + \frac{m_2}{T_2} \right) (v^2 + V^2) - \frac{1}{2} \left(\frac{m_1}{T_1} - \frac{m_2}{T_2} \right) \mathbf{v} \cdot \mathbf{V} \right] \end{aligned} \quad (\text{A.25})$$

Die $d\phi$ -Integration ist nun leicht auszuführen, und mit $d^2V = V dV d\gamma$ (sodass $\mathbf{v} \cdot \mathbf{V} = vV \cos \gamma$) gilt

$$\begin{aligned} \langle (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\mathbf{n}})^2 \rangle_2 &= -\frac{8\sqrt{2}}{3} \int d^2v \int_0^\infty dV \int_0^{2\pi} d\gamma V v^3 \\ &\quad \exp \left[-\frac{1}{2} \frac{m_1 T_2 - m_2 T_1}{T_1 T_2} vV \cos \gamma \right] \exp \left[-\frac{1}{4} \frac{m_2 T_1 + m_1 T_2}{T_1 T_2} (v^2 + V^2) \right] \end{aligned} \quad (\text{A.26})$$

Die $d\gamma$ -Integration definiert nun erneut eine Bessel-Funktion $2\pi I_0$ (8.431.3 in [JZ00]):

$$\begin{aligned} \langle (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\mathbf{n}})^2 \rangle_2 &= -\frac{16\sqrt{2}}{3} \pi \int d^2v v^3 \int_0^\infty dV V I_0 \left(\frac{1}{2} \frac{m_1 T_2 - m_2 T_1}{T_1 T_2} vV \right) \\ &\quad \exp \left[-\frac{1}{4} \frac{m_2 T_1 + m_1 T_2}{T_1 T_2} V^2 \right] \exp \left[-\frac{1}{4} \frac{m_2 T_1 + m_1 T_2}{T_1 T_2} v^2 \right] \end{aligned} \quad (\text{A.27})$$

Damit ist die dV -Integration wieder von der Form 6.631.4 in [JZ00] und man erhält

$$\begin{aligned} \langle (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\mathbf{n}})^2 \rangle_2 &= -\frac{32\sqrt{2}}{3} \pi \frac{T_1 T_2}{m_2 T_1 + m_1 T_2} \int d^2v v^3 \\ &\quad \exp \left[\frac{1}{4} \frac{(m_1 T_2 - m_2 T_1)^2}{m_2 T_1 + m_1 T_2} \frac{v^2}{T_1 T_2} \right] \exp \left[-\frac{1}{4} \frac{m_2 T_1 + m_1 T_2}{T_1 T_2} v^2 \right] \end{aligned} \quad (\text{A.28})$$

Schreibt man schließlich auch \mathbf{v} in Polarkoordinaten $d^2v = v dv d\psi$, so ist die Winkelintegration trivial

$$\langle (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\mathbf{n}})^2 \rangle_2 = -\frac{64\sqrt{2}}{3} \pi^2 \frac{T_1 T_2}{m_2 T_1 + m_1 T_2} \int dv v^4 \exp \left[-\frac{m_1 m_2 v^2}{m_2 T_1 + m_1 T_2} \right] \quad (\text{A.29})$$

und ein letztes Gaußintegral liefert

$$\langle (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\mathbf{n}})^2 \rangle_2 = -8\sqrt{2} \left(\frac{\pi}{m_1 m_2} \right)^{\frac{5}{2}} T_1 T_2 (m_2 T_1 + m_1 T_2)^{\frac{3}{2}} \quad (\text{A.30})$$

Zusammenfassen und Identifikation der Konstanten liefert dann den Ausdruck (3.11).

A.3. Der gemischte Term in $d = 3$

Die Rechnungen für den Fall $d = 3$ sind im Prinzip zu denen im Fall $d = 2$ analog. Insbesondere gilt

$$\langle i\mathcal{L}_{12}^+ E_1 \rangle_t = \left\langle \frac{1}{2} \sum_{k \neq l} i\mathcal{J}_{kl}^{12+} E_1 \right\rangle_t = \frac{1}{2} \sum_{k \neq l} \int d\Gamma \rho(t) i\mathcal{J}_{kl}^{12+} \frac{1}{N_1} \sum_{k=1}^{N_1} \frac{m_1}{2} v_k^2 \quad (\text{A.31})$$

sowie

$$\langle i\mathcal{L}_{12}^+ E_1 \rangle_t = n_2 \left(\frac{m_1}{2\pi T_1} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{m_2}{2\pi T_2} \right)^{\frac{3}{2}} \int d^3 n d^3 v_1 d^3 v_2 \Theta(-v_{12} \cdot \hat{n}) \delta(n - (a_1 + a_2)) g(n) v_{12} \cdot \hat{n} \exp \left[-\frac{m_1 v_1^2}{2T_1} - \frac{m_2 v_2^2}{2T_2} \right] \Delta E_{12} \quad (\text{A.32})$$

Schreibt man nun \mathbf{n} in Kugelkoordinaten $d^3 n = n^2 \sin \phi dn d\gamma d\phi$ (mit $v_{12} \cdot \hat{n} = v_{12} \cos \phi$), so entpuppt sich die dn -Integration als Anwendung der δ -Funktion. Die Θ -Funktion schränkt die $d\phi$ -Integration auf das Intervall $[\pi/2, \pi]$ ein:

$$\langle i\mathcal{L}_{12}^+ E_1 \rangle_t = 2\pi (a_1 + a_2)^2 g(a_1 + a_2) n_2 \left(\frac{m_1}{2\pi T_1} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{m_2}{2\pi T_2} \right)^{\frac{3}{2}} \int_{\frac{\pi}{2}}^{\pi} d\phi \int d^3 v_1 d^3 v_2 v_{12} \cos \phi \sin \phi \exp \left[-\frac{m_1 v_1^2}{2T_1} - \frac{m_2 v_2^2}{2T_2} \right] \Delta E_{12} \quad (\text{A.33})$$

Mit

$$\mathcal{N}^{(3)} := \frac{\mu}{2} (a_1 + a_2)^2 g(a_1 + a_2) n_2 \left(\frac{m_1}{2\pi T_1} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{m_2}{2\pi T_2} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (\text{A.34})$$

und

$$\langle \dots \rangle_3 := \int_{\frac{\pi}{2}}^{\pi} d\phi \int_0^{2\pi} d\gamma \int d^3 v_1 d^3 v_2 v_{12} \cos \phi \sin \phi \exp \left[-\frac{m_1 v_1^2}{2T_1} - \frac{m_2 v_2^2}{2T_2} \right] \quad (\text{A.35})$$

gilt nun also

$$\langle i\mathcal{L}_{12}^+ E_1 \rangle_t \equiv -2(1 + \epsilon_{12}) \mathcal{N}^{(3)} \langle (v_{12} \cdot \hat{n})(v_1 \cdot \hat{n}) \rangle_3 + \frac{\mu}{m_1} (1 + \epsilon_{12})^2 \mathcal{N}^{(3)} \langle (v_{12} \cdot \hat{n})^2 \rangle_3 \quad (\text{A.36})$$

Zum ersten Term:

$$\langle (v_{12} \cdot \hat{n})(v_1 \cdot \hat{n}) \rangle_3 = \int_{\frac{\pi}{2}}^{\pi} d\phi \int_0^{2\pi} d\gamma \int d^3 v_1 d^3 v_2 v_{12}^2 \cos^2 \phi \sin \phi (v_1 \cdot \hat{n}) \exp \left[-\frac{m_1 v_1^2}{2T_1} - \frac{m_2 v_2^2}{2T_2} \right] \quad (\text{A.37})$$

Mit der Substitution $d^3v_2 \rightarrow -d^3v \equiv -d^3v_{12}$ erhält man

$$\begin{aligned} \langle (v_{12} \cdot \hat{n})(v_1 \cdot \hat{n}) \rangle_3 &= - \int_{\frac{\pi}{2}}^{\pi} d\phi \int_0^{2\pi} d\gamma \int d^3v_1 d^3v v^2 \cos^2 \phi \sin \phi (v_1 \cdot \hat{n}) \\ &\exp \left[-\frac{1}{2} \frac{m_2 T_1 + m_1 T_2}{T_1 T_2} v_1^2 \right] \exp \left[-\frac{m_2 v^2}{2T_2} \right] \exp \left[\frac{m_2 v_1 \cdot v}{T_2} \right] \end{aligned} \quad (\text{A.38})$$

Schreibt man nun auch v_1 in Kugelkoordinaten $d^3v_1 = v_1^2 \sin \psi dv_1 d\alpha d\psi$. Von den drei Summanden des Skalarprodukts $v_1 \cdot \hat{n}$ liefert nur der dritte einen endlichen Beitrag. Die $d\alpha$ - und $d\gamma$ -Integrationen sind dann trivial

$$\begin{aligned} \langle (v_{12} \cdot \hat{n})(v_1 \cdot \hat{n}) \rangle_3 &= -4\pi^2 \int_{\frac{\pi}{2}}^{\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\psi \int_0^{\infty} dv_1 \int d^3v v^2 v_1^3 \\ &\cos^3 \phi \sin \phi \cos \psi \sin \psi \exp \left[-\frac{1}{2} \frac{m_2 T_1 + m_1 T_2}{T_1 T_2} v_1^2 \right] \\ &\exp \left[-\frac{m_2 v^2}{2T_2} \right] \exp \left[\frac{m_2 v_1 v}{T_2} \cos \psi \right] \end{aligned} \quad (\text{A.39})$$

Die $d\phi$ -Integration liefert nun einen Faktor $-1/4$. Schreibt man schließlich auch v in Kugelkoordinaten $d^3v = v^2 dv d\vartheta$, so kann man unmittelbar über den Raumwinkel $d\vartheta$ integrieren.

$$\begin{aligned} \langle (v_{12} \cdot \hat{n})(v_1 \cdot \hat{n}) \rangle_3 &= 4\pi^3 \int_0^{\pi} d\psi \int_0^{\infty} dv_1 \int_0^{\infty} dv v^4 v_1^3 \cos \psi \sin \psi \\ &\exp \left[-\frac{1}{2} \frac{m_2 T_1 + m_1 T_2}{T_1 T_2} v_1^2 \right] \exp \left[-\frac{m_2 v^2}{2T_2} \right] \\ &\exp \left[\frac{m_2 v_1 v}{T_2} \cos \psi \right] \end{aligned} \quad (\text{A.40})$$

Nach einer partiellen Integration definiert, die $d\psi$ -Integration wieder eine Bessel-Funktion $-\sqrt{\frac{2\pi}{x}} I_{\frac{3}{2}}(x)$ (8.431.3 in [JZ00])

$$\begin{aligned} \langle (v_{12} \cdot \hat{n})(v_1 \cdot \hat{n}) \rangle_3 &= -4\sqrt{2}\pi^{\frac{7}{2}} \sqrt{\frac{T_2}{m_2}} \int_0^{\infty} dv_1 \int_0^{\infty} dv v^{\frac{7}{2}} v_1^{\frac{5}{2}} \\ &I_{\frac{3}{2}}(m_2 v_1 v / T_2) \exp \left[-\frac{1}{2} \frac{m_2 T_1 + m_1 T_2}{T_1 T_2} v_1^2 \right] \exp \left[-\frac{m_2 v^2}{2T_2} \right] \end{aligned} \quad (\text{A.41})$$

Anwendung der nun hinlänglich bekannten Formel liefert

$$\begin{aligned} \langle (v_{12} \cdot \hat{n})(v_1 \cdot \hat{n}) \rangle_3 &= -4\sqrt{2}\pi^{\frac{7}{2}} m_2 \frac{(T_1)^{\frac{5}{2}} (T_2)^{\frac{3}{2}}}{(m_2 T_1 + m_1 T_2)^{\frac{5}{2}}} \\ &\int_0^{\infty} dv v^5 \exp \left[-\frac{1}{2} \frac{m_1 m_2 v^2}{m_2 T_1 + m_1 T_2} \right] \end{aligned} \quad (\text{A.42})$$

A. Anhang

und nach dem letzten Gaußintegral

$$\langle (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\mathbf{n}})(\mathbf{v}_1 \cdot \hat{\mathbf{n}}) \rangle_3 = -\frac{32\sqrt{2}\pi^{\frac{7}{2}}}{m_1^3 m_2^2} (T_1)^{\frac{5}{2}} (T_2)^{\frac{3}{2}} (m_2 T_1 + m_1 T_2)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{A.43})$$

Für den zweiten Term gilt

$$\langle (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\mathbf{n}})^2 \rangle_3 = \int_{\frac{\pi}{2}}^{\pi} \int_0^{2\pi} d\gamma d\phi \int d^3 v_1 d^3 v_2 \sin \phi (v_{12} \cos \phi)^3 \exp \left[-\frac{m_1 \mathbf{v}_1^2}{2T_1} - \frac{m_2 \mathbf{v}_2^2}{2T_2} \right] \quad (\text{A.44})$$

Die Winkelintegrationen sind nun leicht auszuführen, und nach der Substitution $(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) \rightarrow (\mathbf{v}, \mathbf{V})$ erhält man

$$\langle (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\mathbf{n}})^2 \rangle_3 = -\sqrt{2}\pi \int d^3 v \int d^3 V v^3 \exp \left[-\frac{m_1}{4T_1} (\mathbf{v} + \mathbf{V})^2 - \frac{m_2}{4T_2} (\mathbf{v} - \mathbf{V})^2 \right] \quad (\text{A.45})$$

Schreibt man nun \mathbf{V} in Kugelkoordinaten $d^3 V = V^2 \sin \psi dV d\alpha d\psi$ (sodass $\mathbf{v} \cdot \mathbf{V} = vV \cos \psi$) und ebenso $d^3 v = v^2 dv d\hat{v}$, so sind die $d\hat{v}$ - und die $d\alpha$ -Integration trivial

$$\begin{aligned} \langle (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\mathbf{n}})^2 \rangle_3 &= -8\sqrt{2}\pi^3 \int_0^\infty dv v^5 \int_0^\infty dV \int_0^\pi d\psi V^2 \sin \psi \\ &\exp \left[-\frac{1}{2} \frac{m_1 T_2 - m_2 T_1}{T_2 T_1} vV \cos \psi \right] \exp \left[-\frac{1}{4} \frac{m_2 T_1 + m_1 T_2}{T_2 T_1} V^2 \right] \\ &\exp \left[-\frac{1}{4} \frac{m_2 T_1 + m_1 T_2}{T_2 T_1} v^2 \right] \quad (\text{A.46}) \end{aligned}$$

Die $d\psi$ -Integration definiert nun die Bessel-Funktion $\sqrt{\frac{2\pi}{x}} I_{\frac{1}{2}}(x) = \frac{2 \sinh x}{x}$ (8.431.3 in [JZ00])

$$\begin{aligned} \langle (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\mathbf{n}})^2 \rangle_3 &= -32\sqrt{2}\pi^3 \frac{T_2 T_1}{m_1 T_2 - m_2 T_1} \int_0^\infty dv v^4 \int_0^\infty dV V \\ &\sinh \left(\frac{1}{2} \frac{m_1 T_2 - m_2 T_1}{T_2 T_1} vV \right) \exp \left[-\frac{1}{4} \frac{m_2 T_1 + m_1 T_2}{T_2 T_1} V^2 \right] \\ &\exp \left[-\frac{1}{4} \frac{m_2 T_1 + m_1 T_2}{T_2 T_1} v^2 \right] \quad (\text{A.47}) \end{aligned}$$

Die dV -Integration liefert nun nach 6.631.4 in [JZ00]

$$\langle (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\mathbf{n}})^2 \rangle_3 = -32\sqrt{2}\pi^{\frac{7}{2}} \frac{(T_2 T_1)^{\frac{3}{2}}}{(m_2 T_1 + m_1 T_2)^{\frac{3}{2}}} \int_0^\infty dv v^5 \exp \left[-\frac{m_1 m_2}{m_2 T_1 + m_1 T_2} v^2 \right] \quad (\text{A.48})$$

und ein letztes Gauß-Integral ergibt

$$\langle (\mathbf{v}_{12} \cdot \hat{\mathbf{n}})^2 \rangle_3 = -\frac{32\sqrt{2}}{m_1^3 m_2^2} \pi^{\frac{7}{2}} (T_2 T_1)^{\frac{3}{2}} (m_2 T_1 + m_1 T_2)^{\frac{3}{2}} \quad (\text{A.49})$$

A.4. Das Temperaturverhältnis γ

In diesem Abschnitt gelte $\dot{} = \frac{d}{dt}$. Ausgehend von

$$\dot{\gamma} = \frac{\dot{T}_1}{T_2} - \gamma \frac{\dot{T}_2}{T_2} \quad (\text{A.50})$$

erhält man mit

$$\frac{\dot{T}_1}{T_2} = -\frac{4}{d} x_1 \frac{G_{11}}{G_{12}} A_{11} \frac{\gamma^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\gamma + \Delta}} - \frac{2\sqrt{2}}{d} \frac{1}{1 + \Delta} x_2 A_{12} \gamma + \frac{2\sqrt{2}}{d} \frac{\Delta}{1 + \Delta} x_2 \tilde{A}_{12}^+ (1 - \gamma) \quad (\text{A.51})$$

und

$$\frac{\dot{T}_2}{T_2} = -\frac{4}{d} x_2 \frac{G_{11}}{G_{12}} A_{22} \frac{1}{\sqrt{\gamma + \Delta}} - \frac{2\sqrt{2}}{d} \frac{\Delta}{1 + \Delta} x_1 A_{12} + \frac{2\sqrt{2}}{d} \frac{\Delta}{1 + \Delta} x_1 \tilde{A}_{12}^+ (\gamma - 1) \quad (\text{A.52})$$

sowie

$$\frac{G_{11}}{G_{12}} = \frac{(2\sigma)^{d-1}}{(1 + \sigma)^{d-1}} \frac{\chi_{11}}{\chi_{12}} \quad (\text{A.53})$$

$$\frac{G_{22}}{G_{12}} = \frac{2^{d-1}}{(1 + \sigma)^{d-1}} \frac{\chi_{22}}{\chi_{12}} \sqrt{\Delta} \quad (\text{A.54})$$

das Temperaturverhältnis in der Form von Gl. (3.16).

A.5. Berechnung von Δ

Ausgehend von

$$\begin{aligned} \langle i\mathcal{L}_{+\Delta} \rangle_t &= -8\pi n a^2 g(2a) \left(\frac{m}{2\pi T_{tr}} \right)^3 \left(\frac{I}{2\pi T_{rot}} \right)^3 \int d^3 v_1 d^3 v_2 d^3 \omega_1 d^3 \omega_2 \\ &\quad (\hat{n} \cdot \mathbf{v}_{12}) \{ 1 + b(t) (v_1^2 \omega_1^2 P_2(\cos \theta_1) + v_2^2 \omega_2^2 P_2(\cos \theta_2)) \} \\ &\quad \exp \left[-\frac{m(v_1^2 + v_2^2)}{2T_{tr}} - \frac{I(\omega_1^2 + \omega_2^2)}{2T_{rot}} \right] \delta\Delta \quad (\text{A.55}) \end{aligned}$$

mit $\delta\Delta = (b_{12}^+ - 1)\Delta$ ist der erste Schritt das Umschreiben in Relativkoordinaten. Für die Legendre-Polynome bedeutet dies

$$\begin{aligned} \frac{4}{3} v_1^2 \omega_1^2 P_2(\cos \theta_1) + \frac{4}{3} v_2^2 \omega_2^2 P_2(\cos \theta_2) &= (\mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\Omega})^2 + (\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\omega})^2 + (\mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\omega})^2 + (\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\Omega})^2 \\ &\quad + 2(\mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\Omega})(\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\omega}) + 2(\mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\omega})(\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\Omega}) \\ &\quad - \frac{1}{3} (\mathbf{V}^2 + \mathbf{v}^2)(\boldsymbol{\Omega}^2 + \boldsymbol{\omega}^2) - \frac{4}{3} (\mathbf{V} \cdot \mathbf{v})(\boldsymbol{\Omega} \cdot \boldsymbol{\omega}) \quad (\text{A.56}) \end{aligned}$$

A. Anhang

Außerdem erweist es sich als praktisch, diese neuen Mittelwerte zu definieren:

$$\langle \dots \rangle_0 := \int d^3v d^3V d^3\omega d^3\Omega \Theta(-\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}}) (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v}) \exp \left[-\frac{m(\mathbf{v}^2 + \mathbf{V}^2)}{2T_{tr}} - \frac{I(\boldsymbol{\omega}^2 + \boldsymbol{\Omega}^2)}{2T_{rot}} \right] \quad (\text{A.57})$$

$$\begin{aligned} \langle \dots \rangle_1 &:= \int d^3v d^3V d^3\omega d^3\Omega \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v} \Theta(-\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v}) \exp \left[-\frac{m(\mathbf{v}^2 + \mathbf{V}^2)}{2T_{tr}} - \frac{I(\boldsymbol{\omega}^2 + \boldsymbol{\Omega}^2)}{2T_{rot}} \right] \\ &\left\{ (\mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\Omega})^2 + (\mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\omega})^2 + (\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\Omega})^2 + (\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\omega})^2 - \frac{1}{3}(\mathbf{V}^2 + \mathbf{v}^2)(\boldsymbol{\Omega}^2 + \boldsymbol{\omega}^2) \right\} \quad (\text{A.58}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle \dots \rangle_{1'} &:= \int d^3v d^3V d^3\omega d^3\Omega (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v}) \Theta(-\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v}) \\ &\left\{ (\mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\Omega})(\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\omega}) + (\mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\omega})(\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\Omega}) - \frac{2}{3}(\mathbf{V} \cdot \mathbf{v})(\boldsymbol{\Omega} \cdot \boldsymbol{\omega}) \right\} \\ &\exp \left[-\frac{m(\mathbf{v}_1^2 + \mathbf{v}_2^2)}{2T_{tr}} - \frac{I(\boldsymbol{\omega}_1^2 + \boldsymbol{\omega}_2^2)}{2T_{rot}} \right] \quad (\text{A.59}) \end{aligned}$$

Mit der Aufspaltung $\frac{d}{dt} \langle \Delta \rangle_t \equiv \frac{d}{dt} \langle \Delta \rangle_t^{(0)} + b(t) \frac{d}{dt} \langle \Delta \rangle_t^{(1)}$ gilt also

$$\frac{d}{dt} \langle \Delta \rangle_t^{(0)} = -8\sqrt{2}\pi n a^2 g(2a) \left(\frac{m}{2\pi T_{tr}} \right)^3 \left(\frac{I}{2\pi T_{rot}} \right)^3 \langle \delta \Delta \rangle_0 \quad (\text{A.60})$$

und

$$\frac{d}{dt} \langle \Delta \rangle_t^{(1)} = -6\sqrt{2}\pi n a^2 g(2a) \left(\frac{m}{2\pi T_{tr}} \right)^3 \left(\frac{I}{2\pi T_{rot}} \right)^3 (\langle \delta \Delta \rangle_1 + 2 \langle \delta \Delta \rangle_{1'}) \quad (\text{A.61})$$

A.5.1. Der Anteil Δ_1

Um $\delta \Delta_1 := (b_{12}^+ - 1)((\mathbf{v}_1 \cdot \boldsymbol{\omega}_1)^2 + (\mathbf{v}_2 \cdot \boldsymbol{\omega}_2)^2)$ ausschreiben zu können, benötigen wir folgende Identitäten:

$$\begin{aligned} (\mathbf{v}'_1 \cdot \boldsymbol{\omega}'_1)^2 &= (\mathbf{v}_1 \cdot \boldsymbol{\omega}_1)^2 + (\boldsymbol{\delta} \cdot \boldsymbol{\omega}_1)^2 + \frac{1}{q^2 a^2} (\mathbf{v}_1 \cdot (\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\delta}))^2 \\ &\quad - 2(\mathbf{v}_1 \cdot \boldsymbol{\omega}_1)(\boldsymbol{\delta} \cdot \boldsymbol{\omega}_1) + \frac{2}{qa} (\mathbf{v}_1 \cdot \boldsymbol{\omega}_1)(\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\delta}) \cdot \mathbf{v}_1 \\ &\quad - \frac{2}{qa} (\boldsymbol{\delta} \cdot \boldsymbol{\omega}_1)(\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\delta}) \cdot \mathbf{v}_1 \quad (\text{A.62a}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (\mathbf{v}'_2 \cdot \boldsymbol{\omega}'_2)^2 &= (\mathbf{v}_2 \cdot \boldsymbol{\omega}_2)^2 + (\boldsymbol{\delta} \cdot \boldsymbol{\omega}_2)^2 + \frac{1}{q^2 a^2} (\mathbf{v}_2 \cdot (\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\delta}))^2 \\ &\quad + 2(\mathbf{v}_2 \cdot \boldsymbol{\omega}_2)(\boldsymbol{\delta} \cdot \boldsymbol{\omega}_2) + \frac{2}{qa} (\mathbf{v}_2 \cdot \boldsymbol{\omega}_2)(\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\delta}) \cdot \mathbf{v}_2 \\ &\quad + \frac{2}{qa} (\boldsymbol{\delta} \cdot \boldsymbol{\omega}_2)(\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\delta}) \cdot \mathbf{v}_2 \quad (\text{A.62b}) \end{aligned}$$

Das Umschreiben in Relativkoordinaten ermöglichen nun diese Identitäten

$$(\boldsymbol{\delta} \cdot \boldsymbol{\omega}_1)^2 + (\boldsymbol{\delta} \cdot \boldsymbol{\omega}_2)^2 = (\boldsymbol{\delta} \cdot \boldsymbol{\omega})^2 + (\boldsymbol{\delta} \cdot \boldsymbol{\Omega})^2 \quad (\text{A.63a})$$

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{v}_2 \cdot \boldsymbol{\omega}_2)(\boldsymbol{\delta} \cdot \boldsymbol{\omega}_2) - (\boldsymbol{v}_1 \cdot \boldsymbol{\omega}_1)(\boldsymbol{\delta} \cdot \boldsymbol{\omega}_1) &= -\frac{\sqrt{2}}{2}(\boldsymbol{\delta} \cdot \boldsymbol{\Omega})(\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{\Omega} + \boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{\omega}) \\ &\quad - \frac{\sqrt{2}}{2}(\boldsymbol{\delta} \cdot \boldsymbol{\omega})(\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{\omega} + \boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{\Omega}) \end{aligned} \quad (\text{A.63b})$$

$$((\hat{\boldsymbol{n}} \times \boldsymbol{\delta}) \cdot \boldsymbol{v}_1)^2 + ((\hat{\boldsymbol{n}} \times \boldsymbol{\delta}) \cdot \boldsymbol{v}_2)^2 = ((\hat{\boldsymbol{n}} \times \boldsymbol{\delta}) \cdot \boldsymbol{v})^2 + ((\hat{\boldsymbol{n}} \times \boldsymbol{\delta}) \cdot \boldsymbol{V})^2 \quad (\text{A.63c})$$

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{v}_1 \cdot \boldsymbol{\omega}_1)(\hat{\boldsymbol{n}} \times \boldsymbol{\delta}) \cdot \boldsymbol{v}_1 + (\boldsymbol{v}_2 \cdot \boldsymbol{\omega}_2)(\hat{\boldsymbol{n}} \times \boldsymbol{\delta}) \cdot \boldsymbol{v}_2 \\ = \frac{\sqrt{2}}{2}(\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{\Omega} + \boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{\omega})(\hat{\boldsymbol{n}} \times \boldsymbol{\delta}) \cdot \boldsymbol{v} + \frac{\sqrt{2}}{2}(\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{\omega} + \boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{\Omega})(\hat{\boldsymbol{n}} \times \boldsymbol{\delta}) \cdot \boldsymbol{V} \end{aligned} \quad (\text{A.63d})$$

$$(\boldsymbol{\delta} \cdot \boldsymbol{\omega}_2)(\hat{\boldsymbol{n}} \times \boldsymbol{\delta}) \cdot \boldsymbol{v}_2 - (\boldsymbol{\delta} \cdot \boldsymbol{\omega}_1)(\hat{\boldsymbol{n}} \times \boldsymbol{\delta}) \cdot \boldsymbol{v}_1 = -(\boldsymbol{\delta} \cdot \boldsymbol{\Omega})(\hat{\boldsymbol{n}} \times \boldsymbol{\delta}) \cdot \boldsymbol{v} - (\boldsymbol{\delta} \cdot \boldsymbol{\omega})(\hat{\boldsymbol{n}} \times \boldsymbol{\delta}) \cdot \boldsymbol{V} \quad (\text{A.63e})$$

Nun ist noch der Ausdruck für $\boldsymbol{\delta}$ einzusetzen. Ermöglicht wird dies durch die Identitäten

$$\boldsymbol{\delta} \cdot \boldsymbol{\omega} = \sqrt{2}\eta_t(\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{\omega}) + \sqrt{2}(\eta_n - \eta_t)(\hat{\boldsymbol{n}} \cdot \boldsymbol{v})(\hat{\boldsymbol{n}} \cdot \boldsymbol{\omega}) + \sqrt{2}\eta_t a(\hat{\boldsymbol{n}} \times \boldsymbol{\Omega}) \cdot \boldsymbol{\omega} \quad (\text{A.64a})$$

$$\boldsymbol{\delta} \cdot \boldsymbol{\Omega} = \sqrt{2}\eta_t(\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{\Omega}) + \sqrt{2}(\eta_n - \eta_t)(\hat{\boldsymbol{n}} \cdot \boldsymbol{v})(\hat{\boldsymbol{n}} \cdot \boldsymbol{\Omega})$$

$$(\hat{\boldsymbol{n}} \times \boldsymbol{\delta}) \cdot \boldsymbol{v} = \sqrt{2}\eta_t a((\hat{\boldsymbol{n}} \cdot \boldsymbol{\Omega})(\hat{\boldsymbol{n}} \cdot \boldsymbol{v}) - \boldsymbol{\Omega} \cdot \boldsymbol{v}) \quad (\text{A.64b})$$

$$(\hat{\boldsymbol{n}} \times \boldsymbol{\delta}) \cdot \boldsymbol{V} = \sqrt{2}\eta_t((\hat{\boldsymbol{n}} \times \boldsymbol{v}) \cdot \boldsymbol{V} + a(\hat{\boldsymbol{n}} \cdot \boldsymbol{\Omega})(\hat{\boldsymbol{n}} \cdot \boldsymbol{V}) - a(\boldsymbol{\Omega} \cdot \boldsymbol{V}))$$

Mittelt man nun über den HCS, so erhält man die

Terme nullter Ordnung

Beachtet man, dass alle Terme mit ungeraden Potenzen von \boldsymbol{V} , $\boldsymbol{\omega}$ oder $\boldsymbol{\Omega}$ aus Symmetriegründen verschwinden, so ergeben sich folgende Beiträge

$$\begin{aligned} \langle (\boldsymbol{\delta} \cdot \boldsymbol{\omega})^2 + (\boldsymbol{\delta} \cdot \boldsymbol{\Omega})^2 \rangle_0 &= 4\eta_t^2 \langle (\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{\omega})^2 \rangle_0 + 4(\eta_n - \eta_t)^2 \langle (\hat{\boldsymbol{n}} \cdot \boldsymbol{v})^2 (\hat{\boldsymbol{n}} \cdot \boldsymbol{\omega})^2 \rangle_0 \\ &\quad + 2\eta_t^2 a^2 \langle ((\hat{\boldsymbol{n}} \times \boldsymbol{\Omega}) \cdot \boldsymbol{\omega})^2 \rangle_0 + 8\eta_t(\eta_n - \eta_t) \langle (\hat{\boldsymbol{n}} \cdot \boldsymbol{v})(\hat{\boldsymbol{n}} \cdot \boldsymbol{\omega})(\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{\omega}) \rangle_0 \end{aligned} \quad (\text{A.65a})$$

$$\begin{aligned} \frac{\sqrt{2}}{2} \langle (\boldsymbol{\delta} \cdot \boldsymbol{\Omega})(\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{\Omega} + \boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{\omega}) + (\boldsymbol{\delta} \cdot \boldsymbol{\omega})(\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{\omega} + \boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{\Omega}) \rangle_0 \\ = 2\eta_t \langle (\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{\omega})^2 \rangle_0 + 2(\eta_t - \eta_n) \langle (\hat{\boldsymbol{n}} \cdot \boldsymbol{v})(\hat{\boldsymbol{n}} \cdot \boldsymbol{\omega})(\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{\omega}) \rangle_0 \end{aligned} \quad (\text{A.65b})$$

A. Anhang

$$\begin{aligned}
\langle ((\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\delta}) \cdot \mathbf{v})^2 + ((\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\delta}) \cdot \mathbf{V})^2 \rangle_0 &= 2\eta_t^2 a^2 \langle (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v})^2 (\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\omega})^2 \rangle_0 \\
&+ 2\eta_t^2 a^2 \langle (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{V})^2 (\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\omega})^2 \rangle_0 + 2\eta_t^2 a^2 \langle (\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\omega})^2 \rangle_0 + 2\eta_t^2 a^2 \langle (\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{V})^2 \rangle_0 \\
&- 4\eta_t^2 a^2 \langle (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v})(\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\omega})(\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\omega}) \rangle_0 - 4\eta_t^2 a^2 \langle (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{V})(\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\omega})(\mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\omega}) \rangle_0 \\
&+ 2\eta_t^2 \langle ((\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{v}) \cdot \mathbf{V})^2 \rangle_0 \quad (\text{A.65c})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\sqrt{2}}{2} \langle (\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\Omega} + \mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\omega})(\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\delta}) \cdot \mathbf{v} + (\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\omega} + \mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\Omega})(\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\delta}) \cdot \mathbf{V} \rangle_0 \\
= \eta_t a \langle (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{V})(\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\omega})(\mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\omega}) \rangle_0 - \eta_t a \langle (\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{V})^2 \rangle_0 \\
+ \eta_t a \langle (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v})(\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\omega})(\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\omega}) \rangle_0 - \eta_t a \langle (\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\omega})^2 \rangle_0 \quad (\text{A.65d})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle (\boldsymbol{\delta} \cdot \boldsymbol{\Omega})(\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\delta}) \cdot \mathbf{v} + (\boldsymbol{\delta} \cdot \boldsymbol{\omega})(\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\delta}) \cdot \mathbf{V} \rangle_0 &= 2\eta_t^2 a \langle (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v})(\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\omega})(\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\omega}) \rangle_0 \\
&- 2\eta_t^2 a \langle (\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\omega})^2 \rangle_0 + 2\eta_t (\eta_n - \eta_t) a \langle (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v})^2 (\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\omega})^2 \rangle_0 \\
&- 2\eta_t (\eta_n - \eta_t) a \langle (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v})(\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\omega})(\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\omega}) \rangle_0 \quad (\text{A.65e})
\end{aligned}$$

Zusammengefasst also

$$\begin{aligned}
\langle \delta \Delta_1 \rangle_0 &= 2 \left(2\eta_t^2 - 2\eta_t + \frac{\eta_t^2}{q^2} - \frac{\eta_t}{q} + \frac{2\eta_t^2}{q} \right) \langle (\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\omega})^2 \rangle_0 + 2 \frac{\eta_t}{q} \left(\frac{\eta_t}{q} - 1 \right) \langle (\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{V})^2 \rangle_0 \\
&+ 2 \left(2(\eta_n - \eta_t)^2 + \frac{\eta_t^2}{q^2} - \frac{2\eta_t}{q} (\eta_n - \eta_t) \right) \langle (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v})^2 (\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\omega})^2 \rangle_0 \\
&+ 2 \frac{\eta_t^2}{q^2} \langle (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{V})^2 (\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\omega})^2 \rangle_0 + 2\eta_t^2 a^2 \langle ((\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\Omega}) \cdot \boldsymbol{\omega})^2 \rangle_0 + 2 \frac{\eta_t^2}{q^2 a^2} \langle ((\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{v}) \cdot \mathbf{V})^2 \rangle_0 \\
&+ 4 \left((2\eta_t - 1)(\eta_n - \eta_t) - \frac{\eta_t^2}{q^2} + \frac{1}{2} \frac{\eta_t}{q} - \frac{\eta_t^2}{q} + \frac{\eta_t}{q} (\eta_n - \eta_t) \right) \langle (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v})(\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\omega})(\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\omega}) \rangle_0 \\
&- \frac{2\eta_t}{q} \left(\frac{2\eta_t}{q} - 1 \right) \langle (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{V})(\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\omega})(\mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\omega}) \rangle_0 \quad (\text{A.66})
\end{aligned}$$

Einsetzen der Integrale aus Abschnitt A.5.3 und erneutes Zusammenfassen liefert

$$qm^2 a^2 \langle i\mathcal{L}_+ \Delta_1 \rangle_t^{(0)} = A_1^{(0)} G T_{tr}^{\frac{3}{2}} T_{rot} + B_1^{(0)} G T_{tr}^{\frac{1}{2}} T_{rot}^2 + C_1^{(0)} G T_{tr}^{\frac{5}{2}} \quad (\text{A.67})$$

mit

$$A_1^{(0)} := \frac{2\eta_t}{q} \left(\frac{\eta_t}{q} - 1 \right) - \frac{2\eta_t^2}{q} + 2\eta_t (\eta_t - 1) + 2\eta_n (\eta_n - 1) \quad (\text{A.68a})$$

$$B_1^{(0)} := \frac{\eta_t^2}{q} \quad (\text{A.68b})$$

$$C_1^{(0)} := \frac{\eta_t^2}{q} \quad (\text{A.68c})$$

Term erster Ordnung

Die Beiträge zu $\langle \delta \Delta \rangle_1$ sind exakt die gleichen wie in Gl. (A.66)¹ mit der einzigen Ausnahme, dass der Term $\langle ((\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{v}) \cdot \mathbf{V})^2 \rangle_0$ nun von vornherein als verschwindend erkannt werden kann.

Zu $\langle \delta \Delta \rangle_{1'}$ tragen folgende Terme bei

$$\begin{aligned} \langle (\boldsymbol{\delta} \cdot \boldsymbol{\Omega})(\mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\omega}) \rangle_{1'} &= \sqrt{2} \eta_t \langle (\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\Omega})(\mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\omega}) \rangle_{1'} \\ &+ \sqrt{2} (\eta_n - \eta_t) \langle (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v})(\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\Omega})(\mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\omega}) \rangle_{1'} \quad (\text{A.69a}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle (\boldsymbol{\delta} \cdot \boldsymbol{\omega})(\mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\Omega}) \rangle_{1'} &= \sqrt{2} \eta_t \langle (\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\omega})(\mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\Omega}) \rangle_{1'} \\ &+ \sqrt{2} (\eta_n - \eta_t) \langle (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v})(\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\omega})(\mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\Omega}) \rangle_{1'} \quad (\text{A.69b}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle (\mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\omega})(\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\delta}) \cdot \mathbf{v} \rangle_{1'} &= \sqrt{2} \eta_t a \langle (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v})(\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\Omega})(\mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\omega}) \rangle_{1'} \\ &- \sqrt{2} \eta_t a \langle (\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\Omega})(\mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\omega}) \rangle_{1'} \quad (\text{A.69c}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle (\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\omega})(\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\delta}) \cdot \mathbf{V} \rangle_{1'} &= \sqrt{2} \eta_t a \langle (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{V})(\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\Omega})(\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\omega}) \rangle_{1'} \\ &- \sqrt{2} \eta_t a \langle (\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\omega})(\mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\Omega}) \rangle_{1'} \quad (\text{A.69d}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle (\boldsymbol{\delta} \cdot \boldsymbol{\omega})(\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\delta}) \cdot \mathbf{V} \rangle_{1'} &= 2\eta_t^2 a \langle (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{V})(\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\Omega})(\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\omega}) \rangle_{1'} - 2\eta_t^2 a \langle (\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\omega})(\mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\Omega}) \rangle_{1'} \\ &+ 2\eta_t (\eta_n - \eta_t) a \langle (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v})(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{V})(\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\omega})(\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\Omega}) \rangle_{1'} \\ &- 2\eta_t (\eta_n - \eta_t) a \langle (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v})(\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\omega})(\mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\Omega}) \rangle_{1'} \\ &+ 2\eta_t^2 a \langle ((\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\Omega}) \cdot \boldsymbol{\omega})((\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{v}) \cdot \mathbf{V}) \rangle_{1'} \quad (\text{A.69e}) \end{aligned}$$

Zusammengefasst also

$$\begin{aligned} \langle \delta \Delta_1 \rangle_{1'} &= \left(\frac{4\eta_t^2}{q} - \frac{4\eta_t}{q} - 4\eta_t \right) \langle (\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\omega})(\mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\Omega}) \rangle_{1'} \\ &+ \left(4 \left(\frac{\eta_t}{q} - 1 \right) (\eta_n - \eta_t) + \frac{2\eta_t}{q} \right) \langle (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v})(\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\omega})(\mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\Omega}) \rangle_{1'} \\ &+ \frac{2\eta_t}{q} (1 - 2\eta_t) \langle (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{V})(\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\Omega})(\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\omega}) \rangle_{1'} \\ &- \frac{4\eta_t}{q} (\eta_n - \eta_t) \langle (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v})(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{V})(\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\omega})(\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\Omega}) \rangle_{1'} \\ &- \frac{4\eta_t^2}{q} \langle ((\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{v}) \cdot \mathbf{V})((\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\Omega}) \cdot \boldsymbol{\omega}) \rangle_{1'} \quad (\text{A.70}) \end{aligned}$$

¹natürlich sind die Mittelungen entsprechend zu ersetzen

A. Anhang

und damit

$$qm^2a^2 \langle i\mathcal{L} + \Delta_1 \rangle_t^{(1)} = \frac{A_1^{(1)}G}{qm^2a^2} T_{tr}^{\frac{5}{2}} T_{rot}^2 + \frac{B_1^{(1)}G}{qm^2a^2} T_{tr}^{\frac{3}{2}} T_{rot}^3 \quad (\text{A.71})$$

mit

$$A_1^{(1)} := \frac{3\eta_t^2}{q^2} + \frac{13\eta_t^2}{q} - \frac{22\eta_t}{q} + \frac{12\eta_n\eta_t}{q} + 12\eta_n\eta_t + 6(\eta_t^2 + \eta_n^2) - 22(\eta_t + \eta_n) \quad (\text{A.72a})$$

$$B_1^{(1)} := -\frac{\eta_t^2}{q} \quad (\text{A.72b})$$

A.5.2. Der Anteil Δ_0

Ausgehend von

$$v_1'^2 := \frac{1}{2}(\mathbf{V} + \mathbf{v})^2 - \sqrt{2}(\mathbf{V} + \mathbf{v}) \cdot \boldsymbol{\delta} + \boldsymbol{\delta}^2 \quad (\text{A.73a})$$

$$v_2'^2 := \frac{1}{2}(\mathbf{V} - \mathbf{v})^2 + \sqrt{2}(\mathbf{V} - \mathbf{v}) \cdot \boldsymbol{\delta} + \boldsymbol{\delta}^2$$

$$\omega_1'^2 := \frac{1}{2}(\boldsymbol{\Omega} + \boldsymbol{\omega})^2 + \frac{\sqrt{2}}{qa}(\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\delta}) \cdot (\boldsymbol{\Omega} + \boldsymbol{\omega}) + \frac{1}{q^2a^2}(\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\delta})^2 \quad (\text{A.73b})$$

$$\omega_2'^2 := \frac{1}{2}(\boldsymbol{\Omega} - \boldsymbol{\omega})^2 + \frac{\sqrt{2}}{qa}(\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\delta}) \cdot (\boldsymbol{\Omega} - \boldsymbol{\omega}) + \frac{1}{q^2a^2}(\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\delta})^2$$

erhalt man

$$\begin{aligned} \delta\Delta_0 = & \frac{\sqrt{2}}{qa}v^2(\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\delta}) \cdot \boldsymbol{\Omega} + \frac{\sqrt{2}}{qa}V^2(\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\delta}) \cdot \boldsymbol{\Omega} + \frac{1}{q^2a^2}v^2(\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\delta})^2 + \frac{1}{q^2a^2}V^2(\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\delta})^2 \\ & - \sqrt{2}(\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\delta})(\boldsymbol{\omega}^2 + \boldsymbol{\Omega}^2) - \frac{4}{qa}(\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\delta})(\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\delta}) \cdot \boldsymbol{\Omega} - \frac{2\sqrt{2}}{q^2a^2}(\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\delta})(\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\delta})^2 \\ & + \boldsymbol{\delta}^2(\boldsymbol{\omega}^2 + \boldsymbol{\Omega}^2) + \frac{2\sqrt{2}}{qa}\boldsymbol{\delta}^2(\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\delta}) \cdot \boldsymbol{\Omega} + \frac{2}{q^2a^2}\boldsymbol{\delta}^2(\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\delta})^2 \\ & + 2(\mathbf{v} \cdot \mathbf{V})(\boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{\Omega}) + \frac{2\sqrt{2}}{qa}(\mathbf{v} \cdot \mathbf{V})(\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\delta}) \cdot \boldsymbol{\omega} \\ & - 2\sqrt{2}(\mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\delta})(\boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{\Omega}) - \frac{4}{qa}(\mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\delta})(\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\delta}) \cdot \boldsymbol{\omega} \quad (\text{A.74}) \end{aligned}$$

und mit den Ersetzungen

$$(\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\delta}) \cdot \boldsymbol{\Omega} = \sqrt{2}\eta_t((\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{v}) \cdot \boldsymbol{\Omega} - a(\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\Omega})^2) \quad (\text{A.75a})$$

$$(\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\delta})^2 = 2\eta_t^2((\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{v})^2 + a^2(\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\Omega})^2 - 2a(\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{v}) \cdot \boldsymbol{\Omega}) \quad (\text{A.75b})$$

$$\boldsymbol{\delta}^2 = 2\eta_t^2v^2 + 2(\eta_n^2 - \eta_t^2)(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v})^2 + 2\eta_t^2a^2(\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\Omega})^2 - 4\eta_t^2a(\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{v}) \cdot \boldsymbol{\Omega} \quad (\text{A.75c})$$

$$\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\delta} = \sqrt{2}\eta_tv^2 + \sqrt{2}(\eta_n - \eta_t)(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v})^2 - \sqrt{2}\eta_t a(\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{v}) \cdot \boldsymbol{\Omega} \quad (\text{A.75d})$$

zunächst wieder die

Terme nullter Ordnung

Folgende Terme liefern einen Beitrag:

$$\langle v^2(\hat{n} \times \delta) \cdot \Omega \rangle_0 = -\sqrt{2}\eta_t a \langle v^2(\hat{n} \times \Omega)^2 \rangle_0 \quad (\text{A.76a})$$

$$\langle v^2(\hat{n} \times \delta)^2 \rangle_0 = 2\eta_t^2 \langle v^2(\hat{n} \times v)^2 \rangle_0 + 2\eta_t^2 a^2 \langle v^2(\hat{n} \times \Omega)^2 \rangle_0 \quad (\text{A.76b})$$

$$\langle (v \cdot \delta)\omega^2 \rangle_0 = \sqrt{2}\eta_t \langle v^2\omega^2 \rangle_0 + \sqrt{2}(\eta_n - \eta_t) \langle (\hat{n} \cdot v)^2\omega^2 \rangle_0 \quad (\text{A.76c})$$

$$\begin{aligned} \langle (v \cdot \delta)(\hat{n} \times \delta) \cdot \Omega \rangle_0 &= -2\eta_t^2 a \langle v^2(\hat{n} \times \Omega)^2 \rangle_0 - 2\eta_t a(\eta_n - \eta_t) \langle (\hat{n} \cdot v)^2(\hat{n} \times \Omega)^2 \rangle_0 \\ &\quad - 2\eta_t^2 a \langle ((\hat{n} \times v) \cdot \Omega)^2 \rangle_0 \end{aligned} \quad (\text{A.76d})$$

$$\begin{aligned} \langle (v \cdot \delta)(\hat{n} \times \delta)^2 \rangle_0 &= 2\sqrt{2}\eta_t^3 \langle v^2(\hat{n} \times v)^2 \rangle_0 + 2\sqrt{2}\eta_t^3 a^2 \langle v^2(\hat{n} \times \Omega)^2 \rangle_0 \\ &+ 2\sqrt{2}\eta_t^2(\eta_n - \eta_t) \langle (\hat{n} \cdot v)^2(\hat{n} \times v)^2 \rangle_0 + 2\sqrt{2}\eta_t^2 a^2(\eta_n - \eta_t) \langle (\hat{n} \cdot v)^2(\hat{n} \times \Omega)^2 \rangle_0 \\ &\quad + 4\sqrt{2}\eta_t^3 a^2 \langle ((\hat{n} \times v) \cdot \Omega)^2 \rangle_0 \end{aligned} \quad (\text{A.76e})$$

$$\langle \delta^2\omega^2 \rangle_0 = 2\eta_t^2 \langle v^2\omega^2 \rangle_0 + 2(\eta_n^2 - \eta_t^2) \langle (\hat{n} \cdot v)^2\omega^2 \rangle_0 + 2\eta_t^2 a^2 \langle (\hat{n} \times \Omega)^2\omega^2 \rangle_0 \quad (\text{A.76f})$$

$$\langle \delta^2\Omega^2 \rangle_0 = 2\eta_t^2 \langle v^2\omega^2 \rangle_0 + 2(\eta_n^2 - \eta_t^2) \langle (\hat{n} \cdot v)^2\omega^2 \rangle_0 + 2\eta_t^2 a^2 \langle (\hat{n} \times \Omega)^2\Omega^2 \rangle_0 \quad (\text{A.76g})$$

$$\begin{aligned} \langle \delta^2(\hat{n} \times \delta) \cdot \Omega \rangle_0 &= -2\sqrt{2}\eta_t^3 a \langle v^2(\hat{n} \times \Omega)^2 \rangle_0 - 2\sqrt{2}\eta_t a(\eta_n^2 - \eta_t^2) \langle (\hat{n} \cdot v)^2(\hat{n} \times \Omega)^2 \rangle_0 \\ &\quad - 2\sqrt{2}\eta_t^3 a^3 \langle (\hat{n} \times \Omega)^4 \rangle_0 - 4\sqrt{2}\eta_t^3 a \langle ((\hat{n} \times v) \cdot \Omega)^2 \rangle_0 \end{aligned} \quad (\text{A.76h})$$

$$\begin{aligned} \langle \delta^2(\hat{n} \times \delta)^2 \rangle_0 &= 4\eta_t^4 \langle v^2(\hat{n} \times v)^2 \rangle_0 + 4\eta_t^2(\eta_n^2 - \eta_t^2) \langle (\hat{n} \cdot v)^2(\hat{n} \times v)^2 \rangle_0 \\ &\quad + 4\eta_t^4 a^2 \langle (\hat{n} \times \Omega)^2(\hat{n} \times v)^2 \rangle_0 + 4\eta_t^4 a^2 \langle v^2(\hat{n} \times \Omega)^2 \rangle_0 \\ &\quad + 4\eta_t^2(\eta_n^2 - \eta_t^2) a^2 \langle (\hat{n} \cdot v)^2(\hat{n} \times \Omega)^2 \rangle_0 + 4\eta_t^4 a^4 \langle (\hat{n} \times \Omega)^4 \rangle_0 \\ &\quad + 16\eta_t^4 a^2 \langle ((\hat{n} \times v) \cdot \Omega)^2 \rangle_0 \end{aligned} \quad (\text{A.76i})$$

A. Anhang

Zusammengefasst also

$$\begin{aligned}
\langle \delta\Delta_0 \rangle_0 &= \frac{2\eta_t}{q} \left(\frac{\eta_t}{q} - 1 \right) (2\eta_t - 1)^2 \langle v^2 (\mathbf{n} \times \boldsymbol{\Omega})^2 \rangle_0 + \frac{2\eta_t}{q} \left(\frac{\eta_t}{q} - 1 \right) \langle V^2 (\mathbf{n} \times \boldsymbol{\Omega})^2 \rangle_0 \\
&\quad + \frac{2\eta_t^2}{q^2 a^2} (2\eta_t - 1)^2 \langle v^2 (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{v})^2 \rangle_0 + \frac{2\eta_t^2}{q^2 a^2} \langle V^2 (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{v})^2 \rangle_0 \\
&\quad + 4\eta_t (\eta_t - 1) \langle v^2 \boldsymbol{\omega}^2 \rangle_0 + 4(\eta_n^2 - \eta_n - \eta_t^2 + \eta_t) \langle (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v})^2 \boldsymbol{\omega}^2 \rangle_0 \\
&\quad + \frac{8\eta_t}{q} \left(\frac{\eta_t}{q} - 1 \right) (\eta_n^2 - \eta_n - \eta_t^2 + \eta_t) \langle (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v})^2 (\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\Omega})^2 \rangle_0 \\
&\quad + \frac{8\eta_t^2}{q} \left(\frac{2\eta_t}{q} - 1 \right) (2\eta_t - 1) \langle ((\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{v}) \cdot \boldsymbol{\Omega})^2 \rangle_0 \\
&\quad + \frac{8\eta_t^2}{q^2 a^2} (\eta_n^2 - \eta_n - \eta_t^2 + \eta_t) \langle (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v})^2 (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{v})^2 \rangle_0 + 2\eta_t^2 a^2 \langle (\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\Omega})^2 \boldsymbol{\omega}^2 \rangle_0 \\
&\quad + 2\eta_t^2 a^2 \langle (\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\Omega})^2 \boldsymbol{\Omega}^2 \rangle_0 + \frac{8\eta_t^3}{q} a^2 \left(\frac{\eta_t}{q} - 1 \right) \langle (\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\Omega})^4 \rangle_0 + \frac{8\eta_t^4}{q^2} \langle (\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\Omega})^2 (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{v})^2 \rangle_0
\end{aligned} \tag{A.77}$$

Nach einsetzen der Integrale somit

$$q\eta^2 a^2 \langle i\mathcal{L} + \Delta_0 \rangle_t = A_0^{(0)} G T_{tr}^{\frac{3}{2}} T_{rot} + B_0^{(0)} G T_{tr}^{\frac{1}{2}} T_{rot}^2 + C_0^{(0)} G T_{tr}^{\frac{5}{2}} \tag{A.78}$$

mit

$$\begin{aligned}
A_0^{(0)} &:= \frac{16\eta_t^3}{q} \left(\frac{2\eta_t}{q} - 1 \right) - \frac{4\eta_t^2}{q} \left(\frac{4\eta_t}{q} - 3 \right) + \frac{7\eta_t}{q} \left(\frac{\eta_t}{q} - 1 \right) \\
&\quad + \frac{8\eta_t}{q} \left(\frac{\eta_t}{q} - 1 \right) \eta_n (\eta_n - 1) + 6\eta_t (\eta_t - 1) + 6\eta_n (\eta_n - 1)
\end{aligned} \tag{A.79a}$$

$$B_0^{(0)} := \frac{8\eta_t^2}{q} \left(\frac{2\eta_t}{q} \left(\frac{\eta_t}{q} - 1 \right) + 1 \right) \tag{A.79b}$$

$$C_0^{(0)} := \frac{\eta_t^2}{q} (16\eta_t (\eta_t - 1) + 8\eta_n (\eta_n - 1) + 9) \tag{A.79c}$$

Term erster Ordnung

Im Prinzip handelt es sich bei $\langle \delta\Delta_0 \rangle_1$ wieder um denselben Ausdruck wie für $\langle \delta\Delta_0 \rangle_0$. Hilfreich ist allerdings zu bemerken, dass eine ganze Reihe von Termen aus Symmetriegründen Null ergeben muss.

Zu $\langle \delta\Delta_0 \rangle_{1'}$ tragen lediglich die Terme

$$\langle (\mathbf{v} \cdot \mathbf{V})(\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\delta}) \cdot \boldsymbol{\omega} \rangle_{1'} = \sqrt{2}\eta_t a \langle (\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\omega})(\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\Omega})(\mathbf{v} \cdot \mathbf{V}) \rangle_{1'} \tag{A.80a}$$

$$\begin{aligned}
\langle (\mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\delta})(\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\delta}) \cdot \boldsymbol{\omega} \rangle_{1'} &= -2\eta_t^2 a \langle ((\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{v}) \cdot \boldsymbol{\omega})((\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\Omega}) \cdot \mathbf{V}) \rangle_{1'} \\
&\quad + 2\eta_t^2 a \langle (\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\omega})(\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\Omega})(\mathbf{v} \cdot \mathbf{V}) \rangle_{1'} \\
&\quad + 2\eta_t(\eta_n - \eta_t) a \langle (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v})(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{V})(\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\omega})(\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\Omega}) \rangle_{1'} \quad (\text{A.80b})
\end{aligned}$$

bei, sodass gilt

$$\begin{aligned}
\langle \delta \Delta_0 \rangle_{1'} &= -\frac{4\eta_t}{q} (2\eta_t - 1) \langle (\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\omega})(\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\Omega})(\mathbf{v} \cdot \mathbf{V}) \rangle_{1'} \\
&\quad + \frac{8\eta_t^2}{q} \langle ((\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{v}) \cdot \boldsymbol{\omega})((\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\Omega}) \cdot \mathbf{V}) \rangle_{1'} \\
&\quad - \frac{8\eta_t}{q} (\eta_n - \eta_t) \langle (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v})(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{V})(\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\omega})(\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\Omega}) \rangle_{1'} \quad (\text{A.81})
\end{aligned}$$

Einsetzen der Integrale und Zusammenfassen ergibt schließlich

$$qm^2 a^2 \langle i\mathcal{L}_+ \Delta_0 \rangle_t^{(1)} = \frac{A_0^{(1)} G}{qm^2 a^2} T_{tr}^{\frac{5}{2}} T_{rot}^2 + \frac{B_0^{(1)} G}{qm^2 a^2} T_{tr}^{\frac{3}{2}} T_{rot}^3 \quad (\text{A.82})$$

wobei

$$A_0^{(1)} := -\frac{48\eta_t^4}{q^2} + \frac{24\eta_t^3}{q^2} - \frac{9\eta_t^2}{2q^2} + \frac{24\eta_t^3}{q} + \frac{2\eta_t^2}{q} + \frac{13\eta_t}{2q} - \frac{12\eta_t}{q} \left(\frac{\eta_t}{q} - 1 \right) \eta_n^2 + \frac{12\eta_t^2 \eta_n}{q^2} - \frac{20\eta_n \eta_t}{q} \quad (\text{A.83a})$$

$$B_0^{(1)} := \frac{\eta_t^2}{q} \left(\frac{16\eta_t}{q} \left(\frac{\eta_t}{q} - 1 \right) + 5 \right) \quad (\text{A.83b})$$

Fasst man nun noch die Konstanten zusammen zu

$$\begin{aligned}
A^{(0)} &:= \frac{16\eta_t^3}{3q} \left(\frac{2\eta_t}{q} - 1 \right) - \frac{2\eta_t^2}{3q} \left(\frac{8\eta_t}{q} - 3 \right) + \frac{1\eta_t}{3q} \left(\frac{\eta_t}{q} - 1 \right) \\
&\quad + \frac{8\eta_t}{3q} \left(\frac{\eta_t}{q} - 1 \right) \eta_n (\eta_n - 1) \quad (\text{A.84a})
\end{aligned}$$

$$B^{(0)} := \frac{1\eta_t^2}{3q} \left(\frac{16\eta_t}{q} \left(\frac{\eta_t}{q} - 1 \right) + 5 \right) \quad (\text{A.84b})$$

$$C^{(0)} := \frac{2\eta_t^2}{3q} (8\eta_t(\eta_t - 1) + 4\eta_n(\eta_n - 1) + 3) \quad (\text{A.84c})$$

$$\begin{aligned}
A^{(1)} &:= -\frac{8\eta_t^3}{q} \left(\frac{2\eta_t}{q} - 1 \right) + \frac{1\eta_t^2}{3q} \left(\frac{24\eta_t}{q} - 37 \right) - \frac{5\eta_t}{6q} \left(\frac{9\eta_t}{q} - 29 \right) \\
&\quad - \frac{4\eta_t \eta_n^2}{q} \left(\frac{\eta_t}{q} - 1 \right) + \frac{4\eta_t \eta_n}{3q} \left(\frac{3\eta_t}{q} - 14 \right) - 12\eta_t \eta_n \\
&\quad + 22(\eta_t + \eta_n) - 6(\eta_t^2 + \eta_n^2) \quad (\text{A.84d})
\end{aligned}$$

$$B^{(1)} := -\frac{2\eta_t^2}{3q} \left(\frac{8\eta_t}{q} \left(\frac{\eta_t}{q} - 1 \right) + 1 \right) \quad (\text{A.84e})$$

so erhält man die Form von Gl. (4.7).

A.5.3. Einige Mittelwerte

Die folgenden Mittelwerte wurden zunächst zum Teil per Hand bestimmt. Nachdem ich allerdings ab einem bestimmten Punkt auf die Verwendung von MAPLE[®] umgestiegen bin, möchte ich dem Leser die wenig interessanten, aber um so langwierigeren Rechnungen ersparen.

Um die Rechnungen mit MAPLE 10 durchzuführen kann, man wie folgt vorgehen

```

> with(LinearAlgebra):
>
> vv := Vector(3, symbol=v);
> vV := Vector(3, symbol=V);
> vw := Vector(3, symbol=w);
> vW := Vector(3, symbol=W);
>
> assume(vv[1], real, vv[2], real, vv[3], real);
> assume(vV[1], real, vV[2], real, vV[3], real);
> assume(vw[1], real, vw[2], real, vw[3], real);
> assume(vW[1], real, vW[2], real, vW[3], real);
> assume(Nv > 0, Nw > 0);
>
> v2 := DotProduct(vv, vv);
> V2 := DotProduct(vV, vV);
> w2 := DotProduct(vw, vw);
> W2 := DotProduct(vW, vW);
>
> vn := <0,0,1>;
> vvn := DotProduct(vn, vv);
> nxv := CrossProduct(vn, vv);
> nxW := CrossProduct(vn, vW);
> avr3 := K -> int(int(int(int(int(int(int(int(int(int(int(
    vvn*Heaviside(-vvn)*K*exp(-(v2 + V2)/Nv^2 - (w2 + W2)/Nw^2),
    vv[1] = -infinity..infinity), vv[2] = -infinity..infinity),
    vv[3] = -infinity..infinity), vV[1] = -infinity..infinity),
    vV[2] = -infinity..infinity), vV[3] = -infinity..infinity),
    vw[1] = -infinity..infinity), vw[2] = -infinity..infinity),
    vw[3] = -infinity..infinity), vW[1] = -infinity..infinity),
    vW[2] = -infinity..infinity), vW[3] = -infinity..infinity);
>
> K1 := DotProduct(vV, vW)^2 + DotProduct(vV, vw)^2
    + DotProduct(vv, vW)^2 + DotProduct(vv, vw)^2
    - 1/3*(V2 + v2)*(W2 + w2);
> K2 := DotProduct(vV, vW)*DotProduct(vv, vw)
    + DotProduct(vV, vw)*DotProduct(vv, vW)

```

A.5. Berechnung von Δ

$$- 2/3 * \text{DotProduct}(\mathbf{vV}, \mathbf{vV}) * \text{DotProduct}(\mathbf{vW}, \mathbf{vW});$$

Damit würden beispielsweise diese Mittelwerte wie folgt berechnet:

$$\langle (\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\omega})^2 \rangle_0 :$$

$$> \text{avr3}(\text{DotProduct}(\mathbf{vV}, \mathbf{vV})^2);$$

$$\langle (\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\omega})^2 \rangle_1 :$$

$$> \text{avr3}(K1 * \text{DotProduct}(\mathbf{vV}, \mathbf{vV})^2);$$

Folgende Mittelwerte wurden benötigt:

$$\langle (\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\omega})^2 \rangle_0 = -\frac{1}{2} \pi^{\frac{11}{2}} \mathcal{N}_v^9 \mathcal{N}_\omega^8 \quad (\text{A.85a})$$

$$\langle (\mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\omega})^2 \rangle_0 = -\frac{3}{8} \pi^{\frac{11}{2}} \mathcal{N}_v^9 \mathcal{N}_\omega^8 \quad (\text{A.85b})$$

$$\langle (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v})^2 (\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\omega})^2 \rangle_0 = -\frac{1}{4} \pi^{\frac{11}{2}} \mathcal{N}_v^9 \mathcal{N}_\omega^8 \quad (\text{A.85c})$$

$$\langle (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{V})^2 (\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\omega})^2 \rangle_0 = -\frac{1}{8} \pi^{\frac{11}{2}} \mathcal{N}_v^9 \mathcal{N}_\omega^8 \quad (\text{A.85d})$$

$$\langle ((\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\Omega}) \cdot \boldsymbol{\omega})^2 \rangle_0 = -\frac{1}{4} \pi^{\frac{11}{2}} \mathcal{N}_v^7 \mathcal{N}_\omega^{10} \quad (\text{A.85e})$$

$$\langle ((\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{v}) \cdot \mathbf{V})^2 \rangle_0 = -\frac{1}{4} \pi^{\frac{11}{2}} \mathcal{N}_v^{11} \mathcal{N}_\omega^6 \quad (\text{A.85f})$$

$$\langle (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v})(\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\omega})(\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\omega}) \rangle_0 = -\frac{1}{4} \pi^{\frac{11}{2}} \mathcal{N}_v^9 \mathcal{N}_\omega^8 \quad (\text{A.85g})$$

$$\langle (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{V})(\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\omega})(\mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\omega}) \rangle_0 = -\frac{1}{8} \pi^{\frac{11}{2}} \mathcal{N}_v^9 \mathcal{N}_\omega^8 \quad (\text{A.85h})$$

$$\langle (\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\omega})^2 \rangle_1 = -\pi^{\frac{11}{2}} \mathcal{N}_v^{11} \mathcal{N}_\omega^{10} \quad (\text{A.85i})$$

$$\langle (\mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\omega})^2 \rangle_1 = -\frac{5}{8} \pi^{\frac{11}{2}} \mathcal{N}_v^{11} \mathcal{N}_\omega^{10} \quad (\text{A.85j})$$

$$\langle (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v})^2 (\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\omega})^2 \rangle_1 = -\frac{1}{4} \pi^{\frac{11}{2}} \mathcal{N}_v^{11} \mathcal{N}_\omega^{10} \quad (\text{A.85k})$$

$$\langle (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{V})^2 (\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\omega})^2 \rangle_1 = -\frac{1}{8} \pi^{\frac{11}{2}} \mathcal{N}_v^{11} \mathcal{N}_\omega^{10} \quad (\text{A.85l})$$

$$\langle ((\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\Omega}) \cdot \boldsymbol{\omega})^2 \rangle_1 = \frac{1}{12} \pi^{\frac{11}{2}} \mathcal{N}_v^9 \mathcal{N}_\omega^{12} \quad (\text{A.85m})$$

$$\langle (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v})(\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\omega})(\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\omega}) \rangle_1 = -\frac{1}{2} \pi^{\frac{11}{2}} \mathcal{N}_v^{11} \mathcal{N}_\omega^{10} \quad (\text{A.85n})$$

$$\langle (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{V})(\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\omega})(\mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\omega}) \rangle_1 = -\frac{1}{4} \pi^{\frac{11}{2}} \mathcal{N}_v^{11} \mathcal{N}_\omega^{10} \quad (\text{A.85o})$$

$$\langle (\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\omega})(\mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\Omega}) \rangle_{1'} = -\frac{5}{12} \pi^{\frac{11}{2}} \mathcal{N}_v^{11} \mathcal{N}_\omega^{10} \quad (\text{A.85p})$$

$$\langle (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v})(\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\omega})(\mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\Omega}) \rangle_{1'} = -\frac{5}{24} \pi^{\frac{11}{2}} \mathcal{N}_v^{11} \mathcal{N}_\omega^{10} \quad (\text{A.85q})$$

$$\langle (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{V})(\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\Omega})(\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\omega}) \rangle_{1'} = -\frac{7}{48} \pi^{\frac{11}{2}} \mathcal{N}_v^{11} \mathcal{N}_\omega^{10} \quad (\text{A.85r})$$

$$\langle (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v})(\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{V})(\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\omega})(\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\Omega}) \rangle_{1'} = -\frac{1}{12} \pi^{\frac{11}{2}} \mathcal{N}_v^{11} \mathcal{N}_\omega^{10} \quad (\text{A.85s})$$

$$\langle ((\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{v}) \cdot \mathbf{V})((\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\Omega}) \cdot \boldsymbol{\omega}) \rangle_{1'} = 0 \quad (\text{A.85t})$$

$$\langle \mathbf{v}^2 (\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\Omega})^2 \rangle_0 = -\pi^{\frac{11}{2}} \mathcal{N}_v^9 \mathcal{N}_\omega^8 \quad (\text{A.86a})$$

$$\langle \mathbf{V}^2 (\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\Omega})^2 \rangle_0 = -\frac{3}{4} \pi^{\frac{11}{2}} \mathcal{N}_v^9 \mathcal{N}_\omega^8 \quad (\text{A.86b})$$

$$\langle \mathbf{v}^2 (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{v})^2 \rangle_0 = -\frac{3}{2} \pi^{\frac{11}{2}} \mathcal{N}_v^{11} \mathcal{N}_\omega^6 \quad (\text{A.86c})$$

$$\langle \mathbf{V}^2 (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{v})^2 \rangle_0 = -\frac{3}{4} \pi^{\frac{11}{2}} \mathcal{N}_v^{11} \mathcal{N}_\omega^6 \quad (\text{A.86d})$$

$$\langle \mathbf{v}^2 \boldsymbol{\omega}^2 \rangle_0 = -\frac{3}{2} \pi^{\frac{11}{2}} \mathcal{N}_v^9 \mathcal{N}_\omega^8 \quad (\text{A.86e})$$

$$\langle (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v})^2 \boldsymbol{\omega}^2 \rangle_0 = -\frac{3}{4} \pi^{\frac{11}{2}} \mathcal{N}_v^9 \mathcal{N}_\omega^8 \quad (\text{A.86f})$$

$$\langle (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v})^2 (\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\Omega})^2 \rangle_0 = -\frac{1}{2} \pi^{\frac{11}{2}} \mathcal{N}_v^9 \mathcal{N}_\omega^8 \quad (\text{A.86g})$$

$$\langle ((\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{v}) \cdot \boldsymbol{\Omega})^2 \rangle_0 = -\frac{1}{4} \pi^{\frac{11}{2}} \mathcal{N}_v^9 \mathcal{N}_\omega^8 \quad (\text{A.86h})$$

$$\langle (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v})^2 (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{v})^2 \rangle_0 = -\frac{1}{2} \pi^{\frac{11}{2}} \mathcal{N}_v^{11} \mathcal{N}_\omega^6 \quad (\text{A.86i})$$

$$\langle (\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\Omega})^2 \boldsymbol{\omega}^2 \rangle_0 = -\frac{3}{4} \pi^{\frac{11}{2}} \mathcal{N}_v^7 \mathcal{N}_\omega^{10} \quad (\text{A.86j})$$

$$\langle (\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\Omega})^2 \boldsymbol{\Omega}^2 \rangle_0 = -\frac{5}{4} \pi^{\frac{11}{2}} \mathcal{N}_v^7 \mathcal{N}_\omega^{10} \quad (\text{A.86k})$$

$$\langle (\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\Omega})^4 \rangle_0 = -\pi^{\frac{11}{2}} \mathcal{N}_v^7 \mathcal{N}_\omega^{10} \quad (\text{A.86l})$$

$$\langle (\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\Omega})^2 (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{v})^2 \rangle_0 = -\frac{1}{2} \pi^{\frac{11}{2}} \mathcal{N}_v^9 \mathcal{N}_\omega^8 \quad (\text{A.86m})$$

$$\langle \mathbf{v}^2 (\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\Omega})^2 \rangle_1 = \frac{1}{4} \pi^{\frac{11}{2}} \mathcal{N}_v^{11} \mathcal{N}_\omega^{10} \quad (\text{A.86n})$$

$$\langle \mathbf{V}^2 (\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\Omega})^2 \rangle_1 = \frac{1}{8} \pi^{\frac{11}{2}} \mathcal{N}_v^{11} \mathcal{N}_\omega^{10} \quad (\text{A.86o})$$

A.6. Der Zusammenhang zwischen Δ und $b(t)$

$$\langle (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v})^2 (\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\Omega})^2 \rangle_1 = \frac{1}{4} \pi^{\frac{11}{2}} \mathcal{N}_v^{11} \mathcal{N}_\omega^{10} \quad (\text{A.86p})$$

$$\langle ((\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{v}) \cdot \boldsymbol{\Omega})^2 \rangle_1 = \frac{1}{4} \pi^{\frac{11}{2}} \mathcal{N}_v^{11} \mathcal{N}_\omega^{10} \quad (\text{A.86q})$$

$$\langle \omega^2 (\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\Omega})^2 \rangle_1 = \frac{1}{8} \pi^{\frac{11}{2}} \mathcal{N}_v^9 \mathcal{N}_\omega^{12} \quad (\text{A.86r})$$

$$\langle \boldsymbol{\Omega}^2 (\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\Omega})^2 \rangle_1 = \frac{7}{24} \pi^{\frac{11}{2}} \mathcal{N}_v^9 \mathcal{N}_\omega^{12} \quad (\text{A.86s})$$

$$\langle (\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\Omega})^4 \rangle_1 = \frac{1}{3} \pi^{\frac{11}{2}} \mathcal{N}_v^9 \mathcal{N}_\omega^{12} \quad (\text{A.86t})$$

$$\langle (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{v})^2 (\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\Omega})^2 \rangle_1 = 0 \quad (\text{A.86u})$$

$$\langle (\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\omega}) (\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\Omega}) (\mathbf{v} \cdot \mathbf{V}) \rangle_{1'} = -\frac{1}{24} \pi^{\frac{11}{2}} \mathcal{N}_v^{11} \mathcal{N}_\omega^{10} \quad (\text{A.86v})$$

$$\langle ((\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{v}) \cdot \boldsymbol{\omega}) ((\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\Omega}) \cdot \mathbf{V}) \rangle_{1'} = -\frac{5}{48} \pi^{\frac{11}{2}} \mathcal{N}_v^{11} \mathcal{N}_\omega^{10} \quad (\text{A.86w})$$

A.6. Der Zusammenhang zwischen Δ und $b(t)$

Zunächst gilt

$$\begin{aligned} \langle \Delta \rangle_t &= \frac{2}{3} \int \prod_j d^3 v_j d^3 \omega_j (1 + b(t) v_j^2 \omega_j^2 P_2(\cos \theta_j)) \\ &\quad \exp \left[-\frac{m v_j^2}{2T_{tr}} - \frac{I \omega_j^2}{2T_{rot}} \right] \frac{1}{N} \sum_l v_l^2 \omega_l^2 P_2(\cos \theta_l) / \\ &\quad \int \prod_j d^3 v_j d^3 \omega_j (1 + b(t) v_j^2 \omega_j^2 P_2(\cos \theta_j)) \exp \left[-\frac{m v_j^2}{2T_{tr}} - \frac{I \omega_j^2}{2T_{rot}} \right] \quad (\text{A.87}) \end{aligned}$$

Der $b(t)$ -Term liefert im Nenner keinen Beitrag, und somit lässt sich dieser Ausdruck unmittelbar auf nur ein Teilchen reduzieren.

$$\langle \Delta \rangle_t = \frac{2}{3} b(t) \left(\frac{m}{2\pi T_{tr}} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{I}{2\pi T_{rot}} \right)^{\frac{3}{2}} \int d^3 v d^3 \omega v^4 \omega^4 P_2^2(\cos \theta) \exp \left[-\frac{m v^2}{2T_{tr}} - \frac{I \omega^2}{2T_{rot}} \right] \quad (\text{A.88})$$

In Kugelkoordinaten $d^3 v = v^2 \sin \theta dv d\phi d\theta$ (sodass $\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\omega} = v\omega \cos \theta$) erhält man

$$\begin{aligned} \langle \Delta \rangle_t &= 3\pi b(t) \left(\frac{m}{2\pi T_{tr}} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{I}{2\pi T_{rot}} \right)^{\frac{3}{2}} \int_0^\infty dv \int_0^\pi d\theta \int d^3 \omega v^6 \omega^4 \\ &\quad \sin \theta \left(\cos^4 \theta - \frac{2}{3} \cos^2 \theta + \frac{1}{9} \right) \exp \left[-\frac{m v^2}{2T_{tr}} - \frac{I \omega^2}{2T_{rot}} \right] \quad (\text{A.89}) \end{aligned}$$

A. Anhang

Die Winkelintegrationen liefern einen Faktor $\frac{8}{45}$ und mit $d^3\omega = \omega^2 d\omega d\hat{\omega}$ gilt

$$\langle \Delta \rangle_t = \frac{32}{15} \pi^{-1} b(t) \left(\frac{m}{2T_{tr}} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{I}{2T_{rot}} \right)^{\frac{3}{2}} \int_0^\infty dv \int_0^\infty d\omega v^6 \omega^6 \exp \left[-\frac{mv^2}{2T_{tr}} - \frac{I\omega^2}{2T_{rot}} \right] \quad (\text{A.90})$$

Nach zwei abschließenden Gaußintegrationen erhält man die Beziehung (4.4).

A.7. Korrekturen erster Ordnung der Temperaturen

Ausgehend von

$$\begin{aligned} \frac{3}{2} \frac{dT_{tr}}{dt} = & -8\sqrt{2}\pi n a^2 g(2a) \int d^3v d^3V d^3\omega d^3\Omega \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v} \Theta(-\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v}) \\ & \{1 + b(t)(v_1^2 \omega_1^2 P_2(\cos \theta_1) + v_2^2 \omega_2^2 P_2(\cos \theta_2))\} \\ & \exp \left[-\frac{m(v^2 + V^2)}{2T_{tr}} - \frac{I(\omega^2 + \Omega^2)}{2T_{rot}} \right] (b_{12}^+ - 1) \frac{m}{2} (v_1^2 + v_2^2) \Big/ \\ & \int d^3v d^3V d^3\omega d^3\Omega \{1 + b(t)(v_1^2 \omega_1^2 P_2(\cos \theta_1) + v_2^2 \omega_2^2 P_2(\cos \theta))\} \\ & \exp \left[-\frac{m(v^2 + V^2)}{2T_{tr}} - \frac{I(\omega^2 + \Omega^2)}{2T_{rot}} \right] \quad (\text{A.91}) \end{aligned}$$

und der Aufspaltung $\frac{d}{dt} T_{tr} = \frac{d}{dt} T_{tr}^{(0)} + b(t) \frac{d}{dt} T_{tr}^{(1)}$ ist also der Term

$$\begin{aligned} \frac{dT_{tr}^{(1)}}{dt} = & -8\sqrt{2}\pi m n a^2 g(2a) \left(\frac{m}{2\pi T_{tr}} \right)^3 \left(\frac{I}{2\pi T_{rot}} \right)^3 \int d^3v d^3V d^3\omega d^3\Omega \\ & \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v} \Theta(-\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v}) \exp \left[-\frac{m(v^2 + V^2)}{2T_{tr}} - \frac{I(\omega^2 + \Omega^2)}{2T_{rot}} \right] \\ & \left\{ (\mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\Omega})^2 + (\mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\omega})^2 + (\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\Omega})^2 + (\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\omega})^2 - \frac{1}{3} (\mathbf{V}^2 + \mathbf{v}^2) (\boldsymbol{\Omega}^2 + \boldsymbol{\omega}^2) \right\} \\ & \{ \eta_t (\eta_t - 1) (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{v})^2 + \eta_n (\eta_n - 1) (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v})^2 + \eta_t^2 a^2 (\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\Omega})^2 \} \quad (\text{A.92}) \end{aligned}$$

zu berechnen ($\frac{d}{dt} T_{tr}^{(0)}$ entnehme man z. B. [AHZ01]). Der einzige nicht-verschwindende Beitrag ist

$$\langle (\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\Omega})^2 \rangle_1 = \frac{1}{12} \pi^{\frac{11}{2}} \mathcal{N}_v^9 \mathcal{N}_\omega^{10} \quad (\text{A.93})$$

D. h.

$$\frac{3}{2} \frac{dT_{tr}^{(1)}}{dt} = -16 \sqrt{\frac{\pi}{m}} n g(2a) \frac{\eta_t^2}{q^2 m^2} T_{tr}^{\frac{3}{2}} T_{rot}^2 \quad (\text{A.94})$$

Identifikation der Konstanten bringt dies auf die Form von Gl. (4.8). Die Berechnung von $\frac{d}{dt} T_{rot}^{(1)}$ verläuft völlig analog.

A.8. Der mittlere Winkel θ

Zunächst gilt

$$\langle \cos^2 \theta \rangle_t = \frac{\int d^3v d^3\omega \frac{(\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\omega})^2}{v^2 \omega^2} (1 + b(t)v^2 \omega^2 P_2(\cos \theta)) \exp \left[-\frac{mv^2}{2T_{tr}} - \frac{I\omega^2}{2T_{rot}} \right]}{\int d^3v d^3\omega (1 + b(t)v^2 \omega^2 P_2(\cos \theta)) \exp \left[-\frac{mv^2}{2T_{tr}} - \frac{I\omega^2}{2T_{rot}} \right]} \quad (\text{A.95})$$

bzw.

$$\pi^3 \mathcal{N}_v^3 \mathcal{N}_\omega^3 \langle \cos^2 \theta \rangle_t = \left\langle \frac{(\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\omega})^2}{v^2 \omega^2} \right\rangle_t + \frac{3b(t)}{2} \left\langle \frac{(\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\omega})^4}{v^2 \omega^2} \right\rangle_t - \frac{b(t)}{2} \langle (\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\omega})^2 \rangle_t \quad (\text{A.96})$$

Schreibt man nun sowohl Winkel- als auch Translationsgeschwindigkeit in Kugelkoordinaten und führt die trivialen Integrationen sofort aus, erhält man.

$$\left\langle \frac{(\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\omega})^2}{v^2 \omega^2} \right\rangle_t = 8\pi^2 \int_0^\infty dv \int_0^\infty d\omega \int_0^\pi d\theta v^2 \omega^2 \cos^2 \theta \sin \theta \exp \left[-\frac{mv^2}{2T_{tr}} - \frac{I\omega^2}{2T_{rot}} \right] \quad (\text{A.97})$$

Nach Ausführen des vierten Winkelintegrals bleiben noch zwei Gaußintegrale. Das Ergebnis ist

$$\left\langle \frac{(\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\omega})^2}{v^2 \omega^2} \right\rangle_t = \frac{1}{3} \pi^3 \mathcal{N}_v^3 \mathcal{N}_\omega^3 \quad (\text{A.98})$$

Man erhält in analoger Weise zunächst

$$\left\langle \frac{(\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\omega})^4}{v^2 \omega^2} \right\rangle_t = 8\pi^2 \int_0^\infty dv \int_0^\infty d\omega \int_0^\pi d\theta v^4 \omega^4 \cos^4 \theta \sin \theta \exp \left[-\frac{mv^2}{2T_{tr}} - \frac{I\omega^2}{2T_{rot}} \right] \quad (\text{A.99})$$

und schließlich

$$\left\langle \frac{(\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\omega})^4}{v^2 \omega^2} \right\rangle_t = \frac{9}{20} \pi^3 \mathcal{N}_v^5 \mathcal{N}_\omega^5 \quad (\text{A.100})$$

Auch das letzte Integral lässt sich in derselben Weise behandeln

$$\langle (\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\omega})^2 \rangle_t = 8\pi^2 \int_0^\infty dv \int_0^\infty d\omega \int_0^\pi d\theta v^4 \omega^4 \cos^2 \theta \sin \theta \exp \left[-\frac{mv^2}{2T_{tr}} - \frac{I\omega^2}{2T_{rot}} \right] \quad (\text{A.101})$$

sodass

$$\langle (\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\omega})^2 \rangle_t = \frac{3}{4} \pi^3 \mathcal{N}_v^5 \mathcal{N}_\omega^5 \quad (\text{A.102})$$

Zusammenfassen der Terme liefert nun den Ausdruck in Gl. (4.6).

A. Anhang

A.8.1. Der mittlere Winkel für $t \rightarrow \infty$

In diesem Abschnitt bezeichne $\dot{\cdot} \equiv \frac{d}{d\tau}$. Betrachtet man $x(t) := \langle \cos^2 \theta \rangle_t - 1/3$ und ersetzt in Gl. (4.9) $b(t)$ durch $x(t)$ mittels der Beziehungen

$$b(t) = \frac{5qm^2a^2}{6T_{tr}T_{rot}}x(t) \quad (\text{A.103a})$$

$$\frac{6}{5} \frac{T_{tr}T_{rot}}{qm^2a^2} \frac{d}{dt} b(t) = \frac{d}{dt} x(t) - x(t) \left(\frac{1}{T_{tr}} \frac{d}{dt} T_{tr} + \frac{1}{T_{rot}} \frac{d}{dt} T_{rot} \right) \quad (\text{A.103b})$$

so erhält man

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} x(t) = -\frac{x(t)}{30} & \left(A^{(1)}GT_{tr}^{\frac{1}{2}} + B^{(1)}GT_{tr}^{\frac{1}{2}}R + 30\frac{1}{T_{tr}}\frac{d}{dt}T_{tr} + 30\frac{1}{T_{rot}}\frac{d}{dt}T_{rot} \right) \\ & - \frac{1}{25}A^{(0)}GT_{tr}^{\frac{1}{2}} - \frac{1}{25}B^{(0)}GT_{tr}^{\frac{1}{2}}R - \frac{1}{25}C^{(0)}GT_{tr}^{\frac{1}{2}}R^{-1} \end{aligned} \quad (\text{A.104})$$

mit dem Temperaturverhältnis R aus Gl. (2.20), oder in Kollisionszeit

$$\begin{aligned} \dot{x}(\tau) = -\frac{x(\tau)}{15} & \left(A^{(1)} + B^{(1)}R - 20(A + C) + 20B(R + R^{-1}) \right) \\ & - \frac{2}{25}A^{(0)} - \frac{2}{25}B^{(0)}R - \frac{2}{25}C^{(0)}R^{-1} \end{aligned} \quad (\text{A.105})$$

Bis zu diesem Punkt ist das Ergebnis noch allgemein. Für den stationären Wert kann man nun R durch R^* (Gl. (2.21)) ersetzen. Die Identitäten

$$(20B + B^{(1)})R^* + 20BR^{*-1} = \frac{40B + B^{(1)}}{R^*} + \frac{A - C}{B}(20B + B^{(1)}) \quad (\text{A.106a})$$

$$B^{(0)}R^* + C^{(0)}R^{*-1} = \frac{B^{(0)} + C^{(0)}}{R^*} + \frac{A - C}{B}B^{(0)} \quad (\text{A.106b})$$

liefern dann

$$\begin{aligned} 75\dot{x}(\tau \rightarrow \infty) = -5x(\tau \rightarrow \infty) & \left(A^{(1)} - 40C + (A - C)\frac{B^{(1)}}{B} + (40B + B^{(1)})R^{*-1} \right) \\ & - 6A^{(0)} - 6(A - C)\frac{B^{(0)}}{B} - 6(B^{(0)} + C^{(0)})R^{*-1} \end{aligned} \quad (\text{A.107})$$

Unter der Annahme, dass $x(\tau)$ gegen einen stationären Wert x_∞ konvergiert ($\lim_{\tau \rightarrow \infty} \dot{x}(\tau) = 0$), kann man diesen nun also leicht bestimmen

$$\langle \cos^2 \theta \rangle_\infty = \frac{1}{3} - \frac{6}{5} \frac{A^{(0)} + (A - C)\frac{B^{(0)}}{B} + (B^{(0)} + C^{(0)})R^{*-1}}{A^{(1)} - 40C + (A - C)\frac{B^{(1)}}{B} + (40B + B^{(1)})R^{*-1}} \quad (\text{A.108})$$

und unter Zuhilfenahme der Identität

$$\frac{A - C}{2B} = \frac{R^{*2} - 1}{2R^*} \quad (\text{A.109})$$

folgt der Ausdruck in Gl. (4.10).

Literaturverzeichnis

- [AGZ98] ASPELMEIER, TIMO, FRANZ GERL, ANNETTE ZIPPELIUS. *A microscopic modell of energy dissipation in granular collisions*. In Hans J. Herrmann, J.-P. Hovi, Stefan Luding (Editors), *Physics of Dry Granular Media, NATO ASI Series*, volume 350, 407. Kluwer Academic, 1998.
- [AHZ01] ASPELMEIER, TIMO, MARTIN HUTHMANN, ANNETTE ZIPPELIUS. *Free Cooling of Particles with Rotational Degrees of Freedom*. In Thorsten Pöschel, Stefan Luding (Editors), *Granular Gases, Lecture Notes in Physics*, volume 564, 31–58. Springer, 2001.
- [AJ04] ARNARSON, BIRGIR Ö., JAMES T. JENKINS. *Binary mixtures of inelastic spheres: Simplified constitutive theory*. *Phys. Fluids*, 16(12): 4543–4550, 2004.
- [AL02] ALAM, MEHEBOOB, STEFAN LUDING. *How good is the equipartition assumption for the transport properties of a granular mixture?* *Granular Matter*, 4: 139–142, 2002.
- [AL03] ALAM, MEHEBOOB, STEFAN LUDING. *Rheology of bidisperse granular mixtures via event-driven simulations*. *J. Fluid Mech.*, 476: 69–103, 2003.
- [AL05] ALAM, MEHEBOOB, STEFAN LUDING. *Energy nonequipartition, rheology, and microstructure in sheared bidisperse granular mixtures*. *Phys. Fluids*, 17: 063303, 2005.
- [AT96] ALLEN, M. P., D. J. TILDESLEY. *Computer Simulaton of Liquids*. Clarendon Press, Oxford, 1996.
- [AW98] ARNARSON, BIGIR Ö., JEFFREY T. WILLITS. *Thermal diffusion in binary mixtures of smooth, nearly elastic spheres with and without gravity*. *Phys. Fluids*, 10(6): 1324–1328, 1998.
- [BDSM06] BREY, J. JAVIER, A. DOMÍNGUEZ, M. I. GRACÍA DE SORIA, P. MAYNAR. *Mesoscopic Theory of Critical Fluctuations in Isolated Granular Gases*. *Phys. Rev. Letters*, 96: 158002, 2006.
- [BE79] VAN BEIJEREN, H., M. H. ERNST. *Kinetic theory of hard spheres*. *J. Stat. Phys.*, 21(2): 125–167, 1979.
- [Bir76] BIRD, G. A. *Molecular Gas Dynamics*. Oxford University Press, London, 1976.

Literaturverzeichnis

- [BMP02] BIBEN, THIERRY, PH. A. MARTIN, J. PIASECKI. *Stationary state of thermostated inelastic hard spheres*. *Physica A*, 310: 308–324, 2002.
- [BNK00] BEN-NAIM, E., P. L. KRAPIVSKY. *Multiscaling in inelastic collisions*. *Phys. Rev. E*, 61(1): R5–R8, 2000.
- [BP00] BRILLIANTOV, NIKOLAI V., THORSTEN PÖSCHEL. *Deviation from Maxwell distribution in granular gases with constant restitution coefficient*. *Phys. Rev. E*, 61(3): 2809–2812, 2000.
- [BP04] BRILLIANTOV, NIKOLAI V., THORSTEN PÖSCHEL. *Kinetic Theory of Granular Gases*. Oxford University Press, Oxford, 2004.
- [BP06] BRILLIANTOV, NIKOLAI V., THORSTEN PÖSCHEL. *Breakdown of the Sonine expansion for the velocity distribution of granular gases*. *Europhys. Lett.*, 74(3): 424–430, 2006.
- [BPTZ06] BRILLIANTOV, NIKOLAI V., THORSTEN PÖSCHEL, T. K., ANNETTE ZIPPELIUS. *Rotation is coupled to Translation in Granular Gases*. unveröffentlicht, 2006.
- [BRC96] BREY, J. JAVIER, M. J. RUIZ-MONTERO, D. CUBERO. *Homogeneous cooling state of a low-density granular flow*. *Phys. Rev. E*, 54(4): 3664–3671, 1996.
- [BRC99] BREY, J. JAVIER, M. J. RUIZ-MONTERO, D. CUBERO. *Origin of density clustering in a freely evolving granular gas*. *Phys. Rev. E*, 60(3): 3150–3157, 1999.
- [BRG99] BREY, J. JAVIER, M. J. RUIZ-MONTERO, R. GARCÍA-ROJO. *Brownian motion in a granular gas*. *Phys. Rev. E*, 60(6): 7174–7181, 1999.
- [BRM05] BREY, J. JAVIER, M. J. RUIZ-MONTERO, F. MORENO. *Energy Partition and Segregation for an Intruder in a Vibrated Granular System under Gravity*. *Phys. Rev. Letters*, 95(9): 098001, 2005.
- [BSHP96] BRILLIANTOV, NIKOLAI V., FRANK SPAHN, JAN-MARTIN HERTZSCH, THORSTEN PÖSCHEL. *Model for collisions in granular gases*. *Phys. Rev. E*, 53(5): 5382–5392, 1996.
- [BT02a] BARRAT, ALAIN, EMMANUEL TRIZAC. *Lack of energy equipartition in homogeneous heated binary granular mixtures*. *Granular Matter*, 4: 57–63, 2002.
- [BT02b] BARRAT, ALAIN, EMMANUEL TRIZAC. *Molecular dynamics simulations of vibrated granular gases*. *Phys. Rev. E*, 66: 051303, 2002.

- [CBM⁺06] CATTUTO, C., R. BRITO, UMBERTO MARINI BETTOLO MARCONI, F. NORI, R. SOTO. *Fluctuation-Induced Casimir Forces in Granular Fluids*. Phys. Rev. Letters, 96: 178001, 2006.
- [CC60] CHAPMAN, SYDNEY, T. G. COWLING. *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*. Cambridge University Press, London, 1960.
- [CH02] CLELLAND, R., CHRISTINE M. HRENYA. *Simulations of a binary-sized mixture of inelastic grains in rapid shear flow*. Phys. Rev. E, 65: 031301, 2002.
- [CM04] CATTUTO, C., UMBERTO MARINI BETTOLO MARCONI. *Ordering Phenomena in Cooling Granular Mixtures*. Phys. Rev. Letters, 92(17): 174502, 2004.
- [CS69] CARNAHAN, NORMAN F., KENNETH E. STARLING. *Equation of State for Nonattracting Rigid Spheres*. J. Chem. Phys., 51(2): 635–636, 1969.
- [CS99] CONWAY, JOHN HORTON, NEIL JAMES ALEXANDER SLOANE. *Sphere packings, lattices and groups*. Springer, New York, 1999.
- [DH04] DAHL, STEVEN R., CHRISTINE M. HRENYA. *Size segregation in rapid, granular flows with continuous size distributions*. Phys. Fluids, 16(1): 1–13, 2004.
- [DHGD02] DAHL, STEVEN R., CHRISTINE M. HRENYA, VICENTE GARZÓ, JAMES W. DUFTY. *Kinetic temperatures for a granular mixture*. Phys. Rev. E, 66: 041301, 2002.
- [DP03] DAS, SUBIR K., SANJAY PURI. *Kinetics of inhomogeneous cooling in granular fluids*. Phys. Rev. E, 68: 011302, 2003.
- [EDHL69] ERNST, M. H., J. R. DORFMAN, W. R. HOEGY, J. M. J. VAN LEEUWEN. *Hard-sphere dynamics and binary-collision operators*. Physica, 45: 127–146, 1969.
- [EGL⁺05] EVESQUE, P., Y. GARRABOS, C. LECOUTRE, F. PALENCIA, D. BEYSENS. *Dilute dissipative granular gas in Knudsen regime and in microgravity: evidence for a “velostat” as a boundary condition*. In R. García-Rojo, Hans J. Herrmann, Sean McNamara (Editors), *Powders and Grains 2005*, volume 1 & 2. A. A. Balkema Publishers, 2005.
- [ESR05] EHRHARDT, GEORGE C. M. A., ANDREW STEPHENSON, PEDRO M. REIS. *Segregation mechanisms in a numerical model of a binary granular mixture*. Phys. Rev. E, 71: 041301, 2005.
- [FM02] FEITOSA, KLEBERT, NARAYANAN MENON. *Breakdown of energy equipartition in 2D binary vibrated granular gas*. Phys. Rev. Letters, 88(19): 198301, 2002.

Literaturverzeichnis

- [GD99] GARZÓ, VICENTE, JAMES W. DUFTY. *Homogeneous cooling state for a granular mixture*. Phys. Rev. E, 60(5): 5706–5713, 1999.
- [GD02] GARZÓ, VICENTE, JAMES W. DUFTY. *Hydrodynamics for a granular binary mixture at low density*. Phys. Fluids, 14(4): 1476–1490, 2002.
- [GDH05] GALVIN, J. E., S. R. DAHL, CHRISTINE M. HRENYA. *On the role of non-equipartition in the dynamics of rapidly flowing granular mixtures*. J. Fluid Mech., 528: 207–232, 2005.
- [GHM05] GARCÍA-ROJO, R., HANS J. HERRMANN, SEAN MCNAMARA (Editors). *Powders and Grains 2005*, volume 1 & 2. A. A. Balkema Publishers, 2005.
- [GNB05] GOLDBIRSCHE, ISAAC, S. H. NOSKOWICZ, O. BAR-LEV. *Theory of granular gases: some recent results and some open problems*. J. Phys.: Condens. Matter, 17: S2591–S2608, 2005.
- [Gol01] GOLDSTEIN, HERBERT. *Classical Mechanics*. Addison Wesley, San Francisco, 3. edition, 2001.
- [Gol03] GOLDBIRSCHE, ISAAC. *Rapid Granular Flows*. Annu. Rev. Fluid Mech., 35: 267–293, 2003.
- [Gro97] GROSSMAN, E. L. *Effects of container geometry on granular convection*. Phys. Rev. E, 56(3): 3290–3300, 1997.
- [GS95] GOLDSHTEIN, ALEXANDER, MICHAEL SHAPIRO. *Mechanics of collisional motion of granular materials Part 1. General hydrodynamic equations*. J. Fluid Mech., 282: 75–114, 1995.
- [GTV05] GOMART, H., J. TALBOT, P. VIOT. *Boltzmann equation for a granular capped rectangle in a thermalized bath of hard disks*. Phys. Rev. E, 71: 051306, 2005.
- [GZ93] GOLDBIRSCHE, ISAAC, G. ZANETTI. *Clustering Instability in Dissipative Gases*. Phys. Rev. Letters, 70(11): 1619–1622, 1993.
- [GZ99] GERL, FRANZ, ANNETTE ZIPPELIUS. *Coefficient of restitution for elastic disks*. Phys. Rev. E, 59(2): 2361–2372, 1999.
- [Haf83] HAFF, P. K. *Grain flow as a fluid-mechanical phenomenon*. J. Fluid Mech., 134: 401–430, 1983.
- [HAZ99] HUTHMANN, MARTIN, TIMO ASPELMEIER, ANNETTE ZIPPELIUS. *Granular cooling of hard needles*. Phys. Rev. E, 60(1): 654–659, 1999.
- [Her82] HERTZ, H. *Über die Berührung fester Körper*. J. Reine Angew. Math., 92: 156–171, 1882.

- [Her05a] HERMINGHAUS, S. *Dynamics of wet granular matter*. Adv. Phys., 54(3): 221–261, 2005.
- [Her05b] HERRMANN, HANS J. *Spuren im Sand*. Physik Journal, 4(8/9): 57–60, 2005.
- [HHZ00] HERBST, OLAF, MARTIN HUTHMANN, ANNETTE ZIPPELIUS. *Dynamics of inelastically colliding spheres with Coulomb friction: Relaxation of translational and rotational energy*. Granular Matter, 2: 211–219, 2000.
- [HOB00] HUTHMANN, MARTIN, JOSÉ A. G. ORZA, RICARDO BRITO. *Dynamics of deviations from the Gaussian state in a freely cooling homogeneous system of smooth inelastic particles*. Granular Matter, 2: 189–199, 2000.
- [Hut99] HUTHMANN, MARTIN. *Free cooling of granular particles with rotational degrees of freedom*. Ph.D. thesis, Georg-August-Universität zu Göttingen, 1999.
- [HYC⁺04] HUAN, CHAO, XIAOYU YANG, D. CANDELA, R. W. MAIR, R. L. WALSWORTH. *NMR experiments on a three-dimensional vibrofluidized granular medium*. Phys. Rev. E, 69: 041302, 2004.
- [JNB96] JAEGER, HEINRICH M., SIDNEY R. NAGEL, ROBERT P. BEHRINGER. *Granular solids, liquids, and gases*. Rev. Mod. Phys, 68(4), 1996.
- [JR85] JENKINS, JAMES T., M. W. RICHMAN. *Kinetic theory of plane flows of a dense gas of identical, rough, inelastic, circular disks*. Phys. Fluids, 28(12): 3485–3494, 1985.
- [JZ00] JEFFREY, ALAN, DAN ZWILLINGER. *Table of Integrals, Series, and Products*. Academic Press, San Diego, CA, sixth edition edition, 2000.
- [JZ02] JENKINS, JAMES T., CHAO ZHANG. *Kinetic theory for identical, frictional, nearly elastic spheres*. Phys. Fluids, 14(3): 1228, 2002.
- [KH99] KUN, FERENC, HANS J. HERRMANN. *Transition from damage to fragmentation in collision of solids*. Phys. Rev. E, 59(3): 2623–2632, 1999.
- [Kud04] KUDROLLI, ARSHAD. *Size separation in vibrated granular matter*. Rep. Prog. Phys., 67: 209–247, 2004.
- [KWG97] KUDROLLI, ARSHAD, M. WOLPERT, J. P. GOLLUB. *Cluster Formation due to Collisions in Granular Material*. Phys. Rev. Letters, 78(7): 1383–1386, 1997.
- [LB05] LAMBIOTTE, RENAUD, LÉON BRENIG. *Energy nonequipartition in multicomponent granular mixtures*. Phys. Rev. E, 72: 042301, 2005.

Literaturverzeichnis

- [LH99] LUDING, STEFAN, HANS J. HERRMANN. *Cluster-growth in freely cooling granular media*. *Chaos*, 9(3): 673–681, 1999.
- [LHMZ98] LUDING, STEFAN, MARTIN HUTHMANN, SEAN MCNAMARA, ANNETTE ZIPPELIUS. *Homogeneous cooling of rough, dissipative particles: Theory and simulations*. *Phys. Rev. E*, 58(3): 3416–3425, 1998.
- [LM98] LUDING, STEFAN, SEAN MCNAMARA. *How to handle the inelastic collapse of a dissipative hard-sphere gas with the TC modell*. *Granular Matter*, 1: 113–128, 1998.
- [LRD97] LABOUS, LAURENT, ANTHONY D. ROSATO, RAJESH N. DAVE. *Measurements of collisional properties of spheres using high-speed video analysis*. *Phys. Rev. E*, 56(5): 5717–5725, 1997.
- [LS04] LUDING, STEFAN, ANDRÉS SANTOS. *Molecular dynamics and theory for the contact values of the radial distribution functions of hard-disk fluid mixtures*. *J. Chem. Phys.*, 121(17): 8458–8465, 2004.
- [LSJC84] LUN, C. K. K., S. B. SAVAGE, D. J. JEFFREY, N. CHEPURNIY. *Kinetic theories for granular flow: inelastic particles in Couette flow and slightly inelastic particles in a general flowfield*. *J. Fluid Mech.*, 140: 223–256, 1984.
- [Lub91] LUBACHEVSKY, BORIS D. *How to Simulate Billiards and Similar Systems*. *J. Comput. Phys.*, 94(2): 255–283, 1991.
- [MCSL71] MANSOORI, G. A., N. F. CARNAHAN, K. E. STARLING, T. W. LELAND, JR. *Equilibrium Thermodynamic Properties of the Mixture of Hard Spheres*. *J. Chem. Phys.*, 54(4): 1523–1525, 1971.
- [MP99] MARTIN, P. A., J. PIASECKI. *Thermalization of a particle by dissipative collisions*. *Europhys. Lett.*, 46(5): 613–616, 1999.
- [MR06] VAN DER MEER, D., P REIMANN. *Temperature anisotropy in a driven granular gas*. *Europhys. Lett.*, 74(3): 384–390, 2006.
- [MSS01] MOON, SUNG JOON, M. D. SHATTUCK, J. B. SWIFT. *Velocity distributions and correlations in homogeneously heated granular media*. *Phys. Rev. E*, 64: 031303, 2001.
- [MY96] MCNAMARA, SEAN, W. R. YOUNG. *Dynamics of a freely evolving, two-dimensional granular medium*. *Phys. Rev. E*, 53(5): 5089–5100, 1996.
- [NE98] VAN NOIJE, T. P. C., M. H. ERNST. *Velocity distributions in homogeneous granular fluids: the free and the heated case*. *Granular Matter*, 1: 57–64, 1998.

- [NE00] VAN NOIJE, T. P. C., M. H. ERNST. *Cahn-Hilliard theory for unstable granular fluids*. Phys. Rev. E, 61(2): 1765–1782, 2000.
- [NEB98] VAN NOIJE, T. P. C., M. H. ERNST, R. BRITO. *Ring kinetic theory for an idealized granular gas*. Physica A, 251: 266–283, 1998.
- [NETP99] VAN NOIJE, T. P. C., M. H. ERNST, E. TRIZAC, I. PAGONABARRAGA. *Randomly driven granular fluids: Large-scale structure*. Phys. Rev. E, 59(4): 4326–4341, 1999.
- [PB95] PÖSCHEL, THORSTEN, VOLKHARD BUCHHOLTZ. *Molecular Dynamics of Arbitrarily Shaped Granular Particles*. J. Phys. I, 5: 1431–1455, 1995.
- [PMP02] PAGNANI, RICCARDO, UMBERTO MARINI BETTOLO MARCONI, ANDREA PUGLISI. *Driven low density granular mixtures*. Phys. Rev. E, 66: 051304, 2002.
- [Raj00] RAJCHENBACH, JEAN. *Granular flows*. Adv. Phys., 49(2): 229–256, 2000.
- [RESM04] REIS, P. M., G. EHRHARDT, A. STEPHENSON, T. MULLIN. *Gases, liquids and crystals in granular segregation*. Europhys. Lett., 66(3): 357–363, 2004.
- [RGLB06] RYCROFT, CHRIS H., GRAY S. GREY, JAMES W. LANDRY, MARTIN Z. BAZANT. *Analysis of Granular Flow in a Pebble-Bed Nuclear Reactor*. cond-mat/0602395, 2006.
- [San03] SANTOS, ANDRÉS. *Granular fluid thermostated by a bath of elastic hard spheres*. Phys. Rev. E, 67: 051101, 2003.
- [SGNT06] SERERO, D., ISAAC GOLDBIRSCHE, S. H. NOSKOWICZ, M.-L. TAN. *Hydrodynamics of granular gases and granular gas mixtures*. J. Fluid Mech., 554: 237–258, 2006.
- [SK89] SHIDA, KOICHIRO, TOSHIO KAWAI. *Cluster Formation by Inelastically Colliding Particles in One-dimensional Space*. Physica A, 162: 145–160, 1989.
- [SYH05] SANTOS, ANDRÉS, SANTOS B. YUSTE, MARIANO LÓPEZ DE HARO. *Contact values of the particle-particle and wall-particle correlation functions in a hard-sphere polydisperse fluid*. J. Chem. Phys., 123: 234512, 2005.
- [VNM99] VELASCO, E., G. NAVASCÚES, L. MEDEROS. *Phase behavior of binary hard-sphere mixtures from perturbation theory*. Phys. Rev. E, 60(3): 3158–3164, 1999.
- [VT04] VIOT, P., J. TALBOT. *Thermalization of an anisotropic granular particle*. Phys. Rev. E, 69: 051106, 2004.

Literaturverzeichnis

- [WA99] WILLITS, JEFFREY T., B. Ö. ARNARSON. *Kinetic theory of a binary mixture of nearly elastic disks*. Phys. Fluids, 11(10): 3116–3122, 1999.
- [WB86] WALTON, OTIS R., ROBERT L. BRAUN. *Viscosity, Granular-Temperature, and Stress Calculations for Shearing Assemblies of Inelastic, Frictional Disks*. J. Rheol., 30(5): 949–980, 1986.
- [WJM03] WANG, HONG-QIANG, GUO-JUN JIN, YU-QIANG MA. *Simulation study on kinetic temperatures of vibrated binary granular mixtures*. Phys. Rev. E, 68: 031301, 2003.
- [WP02] WILDMAN, R. D., D. J. PARKER. *Coexistence of Two Granular Temperatures in Binary Vibrofluidized Beds*. Phys. Rev. Letters, 88(6): 064301, 2002.
- [Zam95] ZAMANKHAN, PIROZ. *Kinetic theory of multicomponent dense mixtures of slightly inelastic spherical particles*. Phys. Rev. E, 52(5): 4877–4891, 1995.