

Gerichtete Bewegung aus dem Chaos bei asymmetrischer Wechselwirkung unter Berücksichtigung der Translations-Rotations-Kopplung

Dissertation
zur Erlangung des akademischen Grades
Doktor eines Wissenschaftszweiges (Dr. rer. nat.)

vorgelegt an der Fakultät für Mathematik und Naturwissenschaften
der Technischen Universität Ilmenau

von Dipl.-Phys. Dirk Lehmkuhl
geboren am 15.10.1967 in Oldenburg

Berichterstatter:

Prof. Dr. Klaus Handrich, TU Ilmenau
Prof. Dr. Christoph Schnittler, TU Ilmenau
HD Dr. Michael Schulz, Universität Ulm

eröffnet am: 19.06.2001

wissenschaftliche Aussprache am: 06.02.2002

Verfahrensnummer: N 238

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	4
2	Das Modell	6
2.1	Testteilchen und Medienteilchen	6
2.2	Wechselwirkungsmechanismen	8
2.2.1	Spiegelnd-elastische Reflexion	9
2.2.2	Diffus-elastische Reflexion	9
2.2.3	Inelastische Wechselwirkung (totale Akkomodation)	9
3	Translation und Rotation total diffus-elastisch reflektierender Testteilchen	11
3.1	Translations-Rotations-Kopplung	11
3.2	Reflexionswinkelverteilung	18
3.3	Grundlagen der Computersimulation	21
4	Rotation von Testteilchen bei Wechselwirkung mit totaler Akkomodation	24
4.1	Rotations-Rotations-Kopplung	24
4.2	Rotation im Fall endlicher Adsorptionszeit	30
5	Systematische Beschleunigung und Reibungskoeffizienten – analytische Ergebnisse	33
5.1	Einleitung	33
5.2	Reibungskoeffizient symmetrischer Testteilchen	36
5.3	Systematische Winkelbeschleunigung	39
5.4	Reibungskoeffizienten asymmetrischer Testteilchen	44
5.4.1	Testteilchen mit tensorieller Masse	44
5.4.2	Rotierende Testteilchen	49
5.5	Kopplung der Freiheitsgrade wechselwirkender Teilchen	52

6	Ergebnisse der Computersimulation	53
6.1	Reibungskoeffizient der Rotation	53
6.2	Testteilchen mit stochastischem Trägheitsmoment	60
6.3	Gerichtete Bewegung asymmetrischer Testteilchen	65
6.3.1	Testteilchen mit tensorieller Masse	65
6.3.2	Rotierende Testteilchen	71
6.4	Nichtlineare Effekte symmetrischer Testteilchen	76
7	Gerichtete Bewegung von Testteilchen durch asymmetrische stochastische Kräfte	79
7.1	Modell	79
7.1.1	Diskusförmige Testteilchen	81
7.1.2	Kugelförmige Testteilchen	84
7.2	Systematische Beschleunigung und Reibungskoeffizienten	85
7.3	Ergebnisse der Computersimulation	88
8	Störungsrechnung	94
8.1	Lösung der nichtlinearen LANGEVIN-Gleichung	94
8.1.1	Einleitung	94
8.1.2	Näherungslösung	97
8.1.3	Lösung der FOKKER-PLANCK-Gleichung	99
8.1.4	Mittelwert und Varianz	100
8.1.5	Lösung der speziellen Riccatischen Differentialgleichung	103
8.1.6	Vergleich mit Ergebnissen der Computersimulation	106
8.2	Lösung der gekoppelten, nichtlinearen LANGEVIN-Gleichungen	108
9	Zusammenfassung	115
A	Ableitung einer speziellen Riccatischen Differentialgleichung	119
	Verzeichnis der Abkürzungen	126
	Danksagung	129
	Erklärung	130

Kapitel 1

Einleitung

Im Jahre 1827 beobachtete der schottische Botaniker Robert BROWN unter seinem Mikroskop die unregelmäßige Bewegung in Wasser suspendierter Pollenteilchen [1]. Er wiederholte das Experiment mit sehr feinen Mineralpartikeln und stellte eine ähnliche ungeordnete Bewegung dieser Teilchen fest. Diese, seitdem als BROWNSche Bewegung genannte Erscheinung, wird dadurch erklärt, daß Teilchen beliebiger Art z.B. in einer Flüssigkeit ständig ungeordnete Stöße mit den umgebenden Molekülen erfahren. Die theoretische Beschreibung der BROWNSchen Bewegung wurde von EINSTEIN [2] und SMOLUCHOWSKI [3] entwickelt und später von LANGEVIN [4], UHLENBECK, ORNSTEIN [5] und anderen ([6] - [10]) verfeinert.

Eine Übersicht zur BROWNSchen *Bewegung* und BROWNSchen *Rotation* ist in [11] gegeben. Darin findet man einen Überblick über den Stand der allgemeinen Theorie zur BROWNSchen Rotation im Hinblick auf die Interpretation von Prozessen in realen Systemen. Mit der Entwicklung der Rechen-technik haben insbesondere numerische Methoden [12] an Bedeutung gewonnen ([13] - [16]). In den Arbeiten ([17] - [23]) wurden speziell wechselwirkende Teilchen behandelt, die gleichzeitig sowohl eine Translations- als auch Rotationsbewegung ausführen. Die *Translations-Rotations-Kopplung* ist z.B. für das Forschungsgebiet "biocolloidal field" von Bedeutung [18].

In den vergangenen Jahren ist das Problem der BROWNSchen Bewegung im Zusammenhang mit einer Fragestellung aus der Zellbiologie verstärkt in den Blickpunkt der Forschung gerückt. Für Biologen stellte sich die Frage, warum in biologischen Systemen ein gerichteter Transport von großen Molekülen (durch *Motor-Proteine*) auftritt [24], ohne das eine äußere Kraft, ein Konzentrations- oder Temperaturgradient vorliegt ([25] - [27]). Inspiriert von dieser Frage, erschienen eine Reihe von Arbeiten ([28] - [48]) zu dem Analogon, den sogenannten BROWNSchen Motoren (*Ratschen*). In einem räumlich asymmetrischen Potential kann unter bestimmten Voraussetzungen, nämlich beim Vorhandensein einer zeitlichen Korrelation (neben der unkorrelierten weißen Rauschkraft des Gleichgewichtszustandes) eine *gerichtete* BROWNSche *Bewegung* der Teilchen entstehen. Eine Möglichkeit, eine solche Korrelation einzubauen, besteht in dem zeitlich korrelierten Ein- und Ausschalten des asymmetrischen Potentials. Dieser Transportmechanismus wurde mehrfach experimentell verwirklicht ([31], [38], [39]). Eine technische Realisierung von rauschinduziertem Transport mit periodischem Antrieb wird in ([49], [50]) gegeben. Darüber hinaus werden Anwendungen bei regulierten Prozessen in biologischen Systemen [51] und der Einsatz von Motor-Proteinen in der *Nanotechnologie* [52] diskutiert.

In ([53] - [57]) wurde das Verhalten flacher, *nichtrotierender Testteilchen* bei nichttrivialer Wechselwirkung mit einem stark verdünnten, klassischen Gas von Medienteilchen untersucht. In den Arbeiten von HEIBER [55] und LUDWIG [57] wurde der von HANDRICH [58] gefundene Effekt einer *gerichteten Bewegung asymmetrischer Testteilchen* (eine Seite spiegelnd-elastisch reflektierend, die andere Seite total diffus-elastisch reflektierend oder total inelastisch (total akkomodierend) wechselwirkend) mit Hilfe der Computersimulation bestätigt. Dieser Effekt liefert eine weitere Möglichkeit einen gerichteten Transport von Teilchen aus dem weißen Rauschen heraus zu erzeugen und liefert eine zusätzliche Erklärungsmöglichkeit für die Existenz der oben beschriebenen gerichteten Bewegung.

Anknüpfend an die Arbeiten ([55] - [57]) wird im Kapitel 2 ein Testteilchen-Modell vorgestellt, bei dem neben den Translationsfreiheitsgraden erstmalig *ein zusätzlicher Rotationsfreiheitsgrad* um eine fest orientierte Drehachse des Testteilchens berücksichtigt wird. Für dieses Modell (Grundmodell) wird im Kapitel 3 die *Translations-Rotations-Kopplung* für den Wechselwirkungsmechanismus der total diffus-elastischen Reflexion detailliert untersucht und es werden die Grundlagen der Computersimulation dargestellt.

Kapitel 4 beschäftigt sich mit der Rotation von Testteilchen bei inelastischer Wechselwirkung (totale Akkomodation). In dem Grundmodell werden zusätzliche Rotationsfreiheitsgrade kugelförmiger Medienteilchen berücksichtigt (erweitertes Modell) und die *Rotations-Rotations-Kopplung* für den Fall einer verschwindenden Adsorptionszeit betrachtet.

Im zweiten Teil dieses Kapitels werden Testteilchen im Rahmen des Grundmodells für den Fall einer endlichen Adsorptionszeit behandelt, deren *Masse* [59] und *Trägheitsmoment* infolge der adsorbierten Medienteilchen *zeitlich stochastisch variiert*.

Im Kapitel 5 werden die analytischen, linearen Reibungskoeffizienten der Translation und Rotation schwerer Testteilchen (BROWNSche Teilchen) abgeleitet und im Kapitel 6 mittels Computersimulation quantitativ bestätigt. Insbesondere wird der Einfluß der *Rotations-Rotations-Kopplung* auf den linearen Reibungskoeffizienten der Rotation untersucht.

Die *gerichtete Bewegung rotierender, asymmetrischer Testteilchen*, die von der *Translations-Rotations-Kopplung* beeinflusst wird, ergibt sich als Effekt zweiter Ordnung in den analytischen Reibungskoeffizienten. Auch bei der Relaxation leichter, symmetrischer Testteilchen spielt die *Translations-Rotations-Kopplung* eine wesentliche Rolle. Die Computersimulation bestätigt qualitativ die analytischen Resultate.

Kapitel 7 beschäftigt sich mit einem weiteren Modell (Zylindermodell) für symmetrische, spiegelnd-elastisch reflektierende Testteilchen. Im Falle einer *Asymmetrie der stochastischen Kraft* (bei gleichem Druck) ([60], [61]) erfahren kugelförmige und diskusförmige Testteilchen ebenfalls eine kurzzeitige, gerichtete Bewegung. Aus der systematischen und stochastischen Beschleunigung (additives Rauschen) der Testteilchen folgt eine eindimensionale, *nichtlineare* LANGEVIN-Gleichung, die im Kapitel 8 näher untersucht und mit einer Störungsreihenentwicklung gelöst wird.

Mit Hilfe der Störungsrechnung wird schließlich eine analytische Näherungslösung für die mittlere Geschwindigkeit und Winkelgeschwindigkeit rotierender, asymmetrischer Testteilchen abgeleitet.

Der Ausdruck *Testteilchen* [62] bezeichnet dasjenige Teilchen, das man während des Experiments (also während der Computersimulation) verfolgt und dessen Verhalten man untersucht. Der in der Literatur häufig verwendete Begriff der BROWNSchen Teilchen trifft dagegen nur auf Teilchen zu, die um einige Größenordnungen schwerer als die MT sind.

Wir nehmen an, daß bei dem diskusförmigen TT die Dicke d im Vergleich zu dem Radius R (Abb. 2.1) vernachlässigbar klein $d \ll R$ ist, so daß nur Treffer von MT auf den beiden Frontseiten des TT der Fläche A einen Beitrag zu dessen Bewegung liefern. Die Bewegung des fest orientierten TT ist auf die dreidimensionale Translationsbewegung und die Rotation um die fest orientierte Drehachse (z -Achse), die durch den Schwerpunkt S gehen soll, beschränkt. Zur Beschreibung der Bewegung des TT der Masse M und dem Trägheitsmoment $\theta \equiv \theta_{zz}$ führen wir die Geschwindigkeit $\vec{u} = (u_x, u_y, u_z)$ und die Winkelgeschwindigkeit $\vec{\omega} = \omega \vec{e}_z$ ein.

Die Massendichte des TT kann von Ort zu Ort variieren. Darüber hinaus sind auch hypothetische TT denkbar, bei denen die Masse richtungsabhängig ist.

Eine Änderung des Bewegungszustandes der TT soll nur durch die ungeordneten Stöße mit den umgebenden klassischen MT verursacht werden. Die Translation und Rotation der TT werden klassisch beschrieben. Die Bedingung für die klassische Rotation ist durch die Ungleichung $\frac{\hbar^2}{2\theta} \ll k_B T$ (k_B ist die BOLTZMANN-Konstante) gegeben. Diese Bedingung kann für mesoskopische Teilchen stets als erfüllt angesehen werden [63].

Es wird angenommen, daß sich die MT zu jedem Zeitpunkt im thermodynamischen Gleichgewicht befinden. Darüber hinaus seien die MT hinreichend stark verdünnt, so daß Schneepflugeffekte und Rekollisionen mit den TT keine Rolle spielen, d.h. wir schließen eine Verdichtung des Gases von MT an der Frontseite des TT aus. Die punktförmigen MT mit der Masse m und der Translationsgeschwindigkeit $\vec{v} = (v_x, v_y, v_z)$ genügen daher stets einer MAXWELLSchen Geschwindigkeitsverteilung

$$f_M(\vec{v}) d^3v = \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{m \vec{v}^2}{2 k_B T} \right) d^3v \quad (2.1)$$

bei gegebener Temperatur T .

Die verschiedenen Modellannahmen, insbesondere die feste Orientierung der diskusförmigen TT und die starke Verdünnung der MT, stellen zunächst Einschränkungen in bezug auf den konkreten Vergleich mit realen Systemen dar. In der Literatur ([64] - [70], [13], [16], [18]) wurden zumeist kugelförmige TT in flüssigen, also sehr dichten Medien betrachtet. Im Rahmen des erweiterten Modells werden die Einschränkungen des ursprünglichen Modells (Grundmodell) teilweise aufgehoben. Eine weitergehende Modifizierung dieser TT-Modelle bezüglich der starken Verdünnung der MT ist leicht realisierbar [57], wird in dieser Arbeit jedoch nicht betrachtet.

Trägheitsmoment der Testteilchen

Das Trägheitsmoment θ eines diskusförmigen TT um die z -Achse (s. Abb. 2.1) durch den Schwerpunkt ist

$$\theta = \int_A \varrho^2 \rho(\varrho) dA = \frac{MR^2}{\xi}, \quad (2.2)$$

wobei ϱ der Abstand von der Drehachse ist. Für ein homogenes, diskusförmiges TT $\rho = \text{const.}$ ist der Parameter $\xi = 2$, bei einer ortsabhängigen Massendichte $\rho(\varrho)$ auf dem TT ergeben sich Werte für ξ im Bereich $1 \leq \xi \leq \infty$. Ist beispielsweise die gesamte Masse auf einem Kreisring (Rand) von infinitesimaler Breite konzentriert, so ist $\xi = 1$. Ist dagegen die gesamte Masse des TT im Schwerpunkt konzentriert, so folgt $\xi = \infty$.

Anisotropie der Testteilchen-Masse

Der Begriff einer richtungsabhängigen (tensoriellen), effektiven Masse ist aus der Festkörperphysik bekannt und wird dort verwendet, um den Einfluß des Gitterpotentials auf die Dynamik der Elektronen zu berücksichtigen. Ein oft verwendetes klassisches mechanisches Beispiel ist ein Wagen der Masse M , der entlang einer festen Schiene ohne Schlupf beschleunigt wird. Formal kann man dies durch eine tensorielle Masse beschreiben - die Masse des Wagens wäre parallel zur Schiene M und senkrecht zur Schiene unendlich.

Mit dem Konzept einer tensoriellen Masse kann man ausgehend von dem TT-Modell (Abb. 2.1) insbesondere die Bewegung von TT beschreiben, die durch bestimmte geometrische Bedingungen eingeschränkt ist. Beispielsweise geht für $M_i \rightarrow \infty$ (der Index $i = x, y, z$ kennzeichnet die Richtung) das TT-Modell in einem räumlich fest fixierten Rotator (in Analogie zu Ref. [57]) über, bei dem $\omega \equiv \omega_z$, der einzige Freiheitsgrad des TT, durch die tangentialen Geschwindigkeiten auftreffender MT angeregt wird. Diese Form der Rotation eines Teilchens (Molekül) wird als *ebene BROWNSche Rotation* bezeichnet und beschreibt die Rotation bezüglich einer Achse, die sowohl im Raum als auch innerhalb des Moleküls fest fixiert ist [11].

2.2 Wechselwirkungsmechanismen

Wir unterscheiden drei verschiedene Formen der Wechselwirkung (Reflexion), abgekürzt mit \mathcal{R} , von MT auf der Oberfläche des TT: Die spiegelnd-elastische Reflexion \mathcal{R}_e ([53], [55], [56]), die total diffus-elastische Reflexion \mathcal{R}_d ([56], [57]) und die inelastische Wechselwirkung (totale Akkomodation) \mathcal{R}_a ([71], [53] - [55], [57], [63]).

In diesem Abschnitt geben wir eine kurze Darstellung der grundlegenden Modellannahmen für die verschiedenen Formen der Wechselwirkung, die in der oben genannten Literatur bereits ausführlich diskutiert wurden. Dabei beziehen wir im Fall der totalen Akkomodation Rotationsfreiheitsgrade kugelförmiger MT mit ein.

2.2.1 Spiegelnd-elastische Reflexion

Eine notwendige Voraussetzung für die spiegelnd-elastische Reflexion ist eine ideal glatte Oberfläche des TT. Die spiegelnd-elastische Reflexion wird durch das deterministische Reflexionsgesetz [72] beschrieben. Dabei ist der Einfallswinkel gleich dem Reflexionswinkel. Einfallende und reflektierte MT bilden mit der Normalen im Auftreffpunkt auf der TT-Oberfläche gleiche Winkel und liegen in einer gemeinsamen Ebene.

2.2.2 Diffus-elastische Reflexion

Die diffus-elastische Reflexion wird hingegen durch eine Oberflächenrauigkeit des TT hervorgerufen. Bei einer Modellierung (Molekulardynamik) einer zweidimensionalen diffus-elastisch reflektierenden Oberfläche durch eine regellose Folge von Kerben, wurde in [57] der Grad der Rauigkeit durch den zufälligen Anstieg zweier Flanken einzelner Kerben simuliert. Die numerischen Ergebnisse zeigen bei einem Anstiegswinkel der Flanken von 60° erwartungsgemäß ein Maximum an *Rauigkeit*. Zusammenfassend erfüllt ein *total* diffus-elastischer Stoß die folgenden Bedingungen:

1. Man spricht von einer total diffus-elastischen Reflexion, wenn MT unter einem beliebigen Einfallswinkel auf das TT treffen und isotrop in alle Raumrichtungen gestreut (Remission) werden. Dabei existieren zwischen den Einfalls- und Reflexionswinkeln keine Korrelationen.
2. Der Stoß ist total elastisch, d.h. die Gesamtenergie der stoßenden Teilchen bleibt erhalten.

Da bei der total diffus-elastischen Reflexion neben der Energie der Schwerpunktsbewegung auch die Energie der Relativbewegung von TT und MT erhalten bleibt, kann die Wechselwirkung im Rahmen eines *mikrokanonischen Ensembles* beschrieben werden. Die MAXWELLSche Gleichgewichtsverteilung ist invariant bezüglich der total diffus-elastischen Reflexion [72].

2.2.3 Inelastische Wechselwirkung (totale Akkomodation)

Bei der inelastischen Wechselwirkung wird das MT auf der Oberfläche des TT zunächst adsorbiert. Während der Adsorption schwingt das MT mit einer bestimmten *Frequenz* im *Adsorptionsvolumen* des TT und "vergibt" nach einer gewissen Zeit seine jeweilige aktuelle Geschwindigkeit und Winkelgeschwindigkeit, infolge des stochastisch erfolgenden Energie-, Impuls- und Drehimpulsaustausches mit der Oberfläche des TT. Die mittlere Adsorptionszeit τ_a ergibt sich näherungsweise aus der Frequenz ν_0 der genannten Oszillationen und der Größe des Adsorptionspotentials V_a über die bekannte FRENKEL-Beziehung [73]

$$\tau_a = \frac{1}{\nu_0} \exp\left(\frac{V_a}{k_B T}\right). \quad (2.3)$$

Untersucht werden die Fälle $\tau_a \rightarrow 0$ und $\tau_a > 0$. Im Fall $\tau_a > 0$ nehmen wir an, daß die Zahl der pro Zeiteinheit desorbierten MT proportional zur Zahl der adsorbierten MT auf der Oberfläche des TT ist (*Desorption 1. Ordnung* [74]).

Verschwindende Adsorptionszeit ($\tau_a \rightarrow 0$) Die Desorption erfolgt unmittelbar (”momentan”) nach der Adsorption. Für das Zweikörperproblem TT und MT bleibt die Schwerpunkts-
geschwindigkeit erhalten und die Relativgeschwindigkeit g'_z (in Normalenrichtung) genügt nach
erfolgter totaler Akkomodation der MAXWELLverteilung

$$f_{M,FT}(g'_z) dg'_z = \sqrt{\frac{\mu}{2\pi k_B T}} \exp\left(-\frac{\mu g'_z{}^2}{2k_B T}\right) dg'_z, \quad (2.4)$$

wobei μ die reduzierte Masse bedeutet. Hierbei wird vorausgesetzt, daß sich die inneren Freiheits-
grade des TT bei der Temperatur T im Gleichgewicht befinden und die Relativbewegung mit dem
”Wärmereservoir” dieser inneren Freiheitsgrade im Gleichgewicht ist, bevor die Desorption erfolgt
(totale Akkomodation). Zwischen dem mittleren Adsorptionsstrom und Desorptionsstrom stellt
sich innerhalb von τ_a ein dynamisches Gleichgewicht ein, so daß beide Ströme gleich groß und ent-
gegengesetzt gerichtet sind. Der Fall $\tau_a \rightarrow 0$ bei der inelastischen Wechselwirkung kann demnach
im Rahmen eines *kanonischen Ensembles* beschrieben werden, wobei die inneren Freiheitsgrade des
TT die Rolle des Wärmereservoirs übernehmen.

Endliche Adsorptionszeit Der Fall $\tau_a > 0$ bei der inelastischen Wechselwirkung kann hingegen
im Rahmen eines *großkanonischen Ensembles* beschrieben werden.

Zusammenfassung Im Fall der inelastischen Wechselwirkung sind folgende Bedingungen erfüllt:

1. Der Normalen-Freiheitsgrad entkoppelt infolge der festen Orientierung des TT von den tan-
gentialen Freiheitsgraden und dem Rotationsfreiheitsgrad des TT vollständig für beliebige
Massenverhältnisse m/M .
2. Die Bewegung des TT in Normalenrichtung kann demnach als eine eindimensionale Bewegung
behandelt werden.
3. Bei einer endlichen Adsorptionszeit entsteht sowohl eine *zeitlich stochastisch veränderliche
Masse* als auch ein *zeitlich stochastisches Trägheitsmoment*, die beide mit der zeitlichen Ent-
wicklung der Translation und Rotation des TT gekoppelt sind.

Kapitel 3

Translation und Rotation total diffus-elastisch reflektierender Testteilchen

In den Arbeiten ([55] - [57]) wurde ausschließlich die Translationsbewegung von Testteilchen betrachtet, d.h. Rotationsfreiheitsgrade wurden nicht berücksichtigt. Mit der Erweiterung um zusätzliche Rotationsfreiheitsgrade des Testteilchens ist es möglich die *Translations-Rotations-Kopplung* explizit zu betrachten. Wegen der festen Orientierung der Testteilchen (Abb. 2.1), muß nur die eindimensionale Rotation des Testteilchens um die Drehachse (z -Achse) berücksichtigt werden. Daher wird nur die Kopplung zwischen diesem Rotationsfreiheitsgrad und den drei Translationsfreiheitsgraden des Testteilchens untersucht. Dazu führen wir in dem folgenden Abschnitt die Energie der Relativbewegung des Test- (TT) und Medienteilchens (MT) für die total diffus-elastische Reflexion ein. Desweiteren wird ein Ausdruck für die Änderung der Translationsgeschwindigkeit und Winkelgeschwindigkeit des TT bei einem einzelnen Stoß angegeben.

3.1 Translations-Rotations-Kopplung

Wir zeigen zunächst, daß grundsätzlich die Translations- und Rotationsfreiheitsgrade der TT, unabhängig von der Art der Wechselwirkung mit den MT (Abschn. 2.2), miteinander gekoppelt sind. Dabei kann die Annahme fest orientierter TT (Kap. 2) fallen gelassen werden.

Impuls- und Drehimpulserhaltungssatz haben die Form:

$$\vec{P}_0 = M \vec{u} + m \vec{v} = M \vec{u}' + m \vec{v}' = \vec{P}'_0 \quad (3.1)$$

und

$$\vec{L}_0 = \boldsymbol{\theta} \vec{\omega} + m \vec{\varrho} \times \vec{v} = \boldsymbol{\theta} \vec{\omega}' + m \vec{\varrho} \times \vec{v}' = \vec{L}'_0, \quad (3.2)$$

wobei $\vec{\varrho}$ der Vektor vom Schwerpunkt zum Auftreffpunkt eines MT auf der Oberfläche des TT ist. Die gestrichelten Ausdrücke kennzeichnen jeweils die Größen nach dem Stoß. Der Impulserhaltungssatz (3.1) liefert nach der Transformation auf Relativ- (\vec{g})

und Schwerpunktschwindigkeit (\vec{s})

$$\begin{aligned} \vec{g} &= \vec{v} - \vec{u} & \vec{v} &= \vec{s} + \frac{\mu}{m} \vec{g} \\ \vec{s} &= \frac{M\vec{u} + m\vec{v}}{M+m} = \vec{s}' & \vec{u} &= \vec{s} - \frac{\mu}{M} \vec{g} \end{aligned} \quad \Rightarrow \quad \mu = \frac{mM}{m+M}. \quad (3.3)$$

Für die Geschwindigkeitsänderung des TT bei einem einzelnen Stoß folgt:

$$\Delta\vec{u} = \vec{u}' - \vec{u} = \frac{\mu}{M} (\vec{g} - \vec{g}') = -\frac{\mu}{M} \Delta\vec{g} \quad (3.4)$$

Analog folgt aus (3.2) - (3.4) für die Änderung der Winkelgeschwindigkeit des TT:

$$\Delta\vec{\omega} = \vec{\omega}' - \vec{\omega} = -\boldsymbol{\theta}^{-1} m \vec{\varrho} \times (\Delta\vec{g} + \Delta\vec{u}) = -\boldsymbol{\theta}^{-1} \mu \vec{\varrho} \times \Delta\vec{g} \quad (3.5)$$

Generell sind demzufolge die Impuls- und Drehimpulsänderung des TT

$$\Delta\vec{L} = \boldsymbol{\theta} \Delta\vec{\omega} = -\mu \vec{\varrho} \times \Delta\vec{g} = \vec{\varrho} \times \Delta\vec{P}, \text{ mit } \Delta\vec{P} = M \Delta\vec{u}, \quad (3.6)$$

miteinander gekoppelt (*Translations-Rotations-Kopplung*). Im Detail hängt die Kopplung der einzelnen Freiheitsgrade untereinander noch von der Geometrie des TT und der konkreten Wechselwirkung mit den MT ab. Für eine allgemeinere Diskussion zu diesem Sachverhalt, speziell über die Kopplung der Rotationsfreiheitsgrade untereinander, sei auf [11] verwiesen. Wir merken lediglich an, daß bei einem spiegelnd-elastischen Stoß die tangentialen Geschwindigkeitskomponenten der MT bei der Wechselwirkung mit dem TT erhalten bleiben und daher offensichtlich keinen Beitrag zur Rotationsbewegung des TT liefern.

Eine grundlegende Annahme des TT-Modells (Grundmodell, Kap. 2) besteht darin, daß die diskusförmigen TT bei der jeweiligen Wechselwirkung (Abschn. 2.2) mit den klassischen MT parallel zur z -Achse des Laborsystems fest orientiert bleiben (Abb. 2.1). Daher ist es nur erforderlich, die Rotation ($\vec{\omega} = \omega_z \vec{e}_z$) des TT um die orientierte Drehachse (z -Achse, $\omega \equiv \omega_z$) im Drehimpulserhaltungssatz (3.2)

$$L_z = \theta \omega + m (\varrho_x v_y - \varrho_y v_x) = \theta \omega' + m (\varrho_x v'_y - \varrho_y v'_x) \quad (3.7)$$

bei der Beschreibung des Zweierstoßes zu berücksichtigen.

Im Weiteren betrachten wir den total diffus-elastischen Stoß (Abschn. 2.2.2) genauer. Die gesamte kinetische Energie ist bei einem solchen Stoß neben (3.1) und (3.2) eine weitere Erhaltungsgröße:

$$E_0 = \frac{m}{2} \vec{v}^2 + \frac{M}{2} \vec{u}^2 + \frac{\theta}{2} \omega^2 = \frac{m}{2} \vec{v}'^2 + \frac{M}{2} \vec{u}'^2 + \frac{\theta}{2} \omega'^2 \quad (3.8)$$

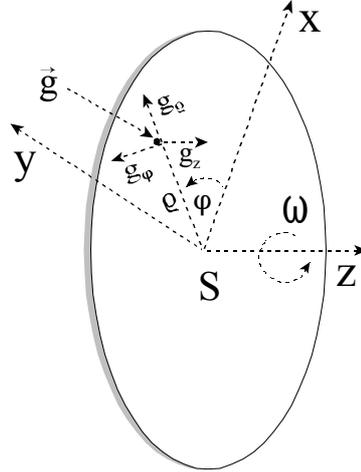


Abbildung 3.1: Rotierendes Testteilchen. ϱ ist der Abstand vom Schwerpunkt S zum Auftreffort des Medienteilchens, φ ist der zugehörige Auftreffwinkel.

Mit Bestimmung der sieben unbekannt, gestrichelten Größen in Gl. (3.8), ist der Bewegungszustand des TT nach einem total diffus-elastischen Stoß eindeutig festgelegt. Mit Hilfe der Gl. (3.3) transformieren wir die Erhaltungssätze (3.7) - (3.8) in das Schwerpunktsystem:

$$L_0 = \theta \omega + \mu (\varrho_x g_y - \varrho_y g_x) = \theta \omega' + \mu (\varrho_x g'_y - \varrho_y g'_x) \quad (3.9)$$

und

$$E_0 - \frac{m M}{2 \mu} \vec{s}^2 = \frac{\mu}{2} \vec{g}^2 + \frac{\theta}{2} \omega^2 = \frac{\mu}{2} \vec{g}'^2 + \frac{\theta}{2} \omega'^2 \quad (3.10)$$

Die Ermittlung der unbekannt Größen in Gl. (3.8) wird durch die Ausnutzung von $\vec{s} = \vec{s}'$ auf die Unbekannten (\vec{g}', ω') reduziert. Wir führen neben dem Laborsystem (\mathcal{L}) ein mit dem TT verbundenes (körperfestes), rotierendes Koordinatensystem (\mathcal{K}) ein, indem MT unter gleichverteilten Winkeln φ in Abständen ϱ von der Drehachse des TT auftreffen (Abb. 3.1). Wir betonen, daß \mathcal{K} nur bzgl. der Translationsbewegung des TT körperfest ist.

Desweiteren stellen wir die Komponenten von \vec{g} in Zylinderkoordinaten

$$g_z = g_z, g_y = g_\varrho \sin \varphi + g_\varphi \cos \varphi \text{ und } g_x = g_\varrho \cos \varphi - g_\varphi \sin \varphi \quad (3.11)$$

dar. Daraus folgt die Rücktransformation

$$g_z = g_z, g_\varrho = g_x \cos \varphi + g_y \sin \varphi \text{ und } g_\varphi = g_y \cos \varphi - g_x \sin \varphi. \quad (3.12)$$

Die Gln. (3.9) und (3.10) haben im Bezugssystem \mathcal{K} (Abb. 3.1) die Form:

$$L_0 = \theta \omega + \mu \varrho g_\varphi = \theta \omega' + \mu \varrho g'_\varphi = L'_0 \quad (3.13)$$

und

$$E_0 - \frac{m M}{2 \mu} \vec{s}^2 = \frac{\mu (g_z^2 + g_\varrho^2 + g_\varphi^2)}{2} + \frac{\theta \omega^2}{2} = \frac{\mu (g'_z{}^2 + g'_\varrho{}^2 + g'_\varphi{}^2)}{2} + \frac{\theta \omega'^2}{2} \quad (3.14)$$

Aus (3.13) folgt, analog zu (3.5), für die Winkelgeschwindigkeitsänderung des TT aufgrund eines total diffus-elastischen Stoßes:

$$\Delta \omega = \omega' - \omega = \frac{\mu \varrho}{\theta} (g_\varphi - g'_\varphi) = -\frac{\mu \varrho}{\theta} \Delta g_\varphi \quad (3.15)$$

Die beiden Komponenten der Geschwindigkeitsänderung (3.4) in tangentialer Richtung setzen sich aus Δg_φ und Δg_ϱ (Abb. 3.1) zusammen und werden mit (3.11) in \mathcal{L}

$$\Delta u_y = -\frac{\mu}{M} (\Delta g_\varrho \sin \varphi + \Delta g_\varphi \cos \varphi), \Delta u_x = -\frac{\mu}{M} (\Delta g_\varrho \cos \varphi - \Delta g_\varphi \sin \varphi) \quad (3.16)$$

zurücktransformiert. Sie sind über Δg_φ mit $\Delta \omega$ (3.15) gekoppelt (*Translations-Rotations-Kopplung*).

In Analogie zu (3.3) führen wir die Relativ- und Schwerpunktwinkelgeschwindigkeit

$$\begin{aligned} \dot{\varphi}_r = \omega - \frac{g_\varphi}{\varrho} & \quad \Rightarrow \quad g_\varphi = \varrho \dot{\Phi} - \frac{\eta}{\mu \varrho} \dot{\varphi}_r \\ \dot{\Phi} = \frac{\theta \omega + \mu \varrho g_\varphi}{\theta + \mu \varrho^2} & \quad \omega = \dot{\Phi} + \frac{\eta}{\theta} \dot{\varphi}_r \end{aligned} \quad (3.17)$$

ein, wobei

$$\eta = \frac{\theta \mu \varrho^2}{\theta + \mu \varrho^2} \quad (3.18)$$

das reduzierte Trägheitsmoment ist.

Unter Benutzung von (3.17), wobei $\dot{\Phi} = \dot{\Phi}'$ (3.13) ist, können wir für (3.15) auch schreiben:

$$\begin{aligned} \Delta\omega &= \frac{\mu \varrho}{\theta} (g_\varphi - g'_\varphi) = \frac{\mu \varrho}{\theta} \left(\left[\varrho \dot{\Phi} - \frac{\eta}{\mu \varrho} \dot{\varphi}_r \right] - \left[\varrho \dot{\Phi} - \frac{\eta}{\mu \varrho} \dot{\varphi}'_r \right] \right) \\ &= \frac{\eta}{\theta} (\dot{\varphi}'_r - \dot{\varphi}_r) = \frac{\eta}{\theta} \Delta\dot{\varphi}_r \end{aligned} \quad (3.19)$$

Verwendet man die Ausdrücke für ω und g_φ nach Gl. (3.17), so kann unter Benutzung von (3.1) und (3.13), die Gl. (3.14) schließlich auf die Form

$$\tilde{E} = E_0 - \left(\frac{\mu}{2mM} \vec{P}_0^2 + \frac{\eta}{2\theta\mu\varrho^2} L_0^2 \right) \quad (3.20)$$

$$= \frac{\mu}{2} (g_z^2 + g_\varrho^2) + \frac{\eta}{2} \dot{\varphi}_r^2 = \frac{\mu}{2} (g'_z{}^2 + g'_\varrho{}^2) + \frac{\eta}{2} \dot{\varphi}'_r{}^2 = \tilde{E}'$$

gebracht werden. Die kinetische Energie \tilde{E} der Relativbewegung bleibt offensichtlich bei einem total diffus-elastischen Stoß ebenfalls erhalten.

g_z , g_ϱ und $\dot{\varphi}_r$ mit den zugehörigen Koeffizienten (μ , η) sind einfach durch die Bedingung eindeutig festgelegt, daß Gl. (3.20) nach den Transformationen (3.3) und (3.17), wieder eine homogen quadratische Form in den Relativgeschwindigkeiten und der Relativwinkelgeschwindigkeit hat. Division der Gl. (3.20) durch \tilde{E} führt schließlich auf die Gleichung eines *zusammengedrückten Rotationsellipsoids* (Abb. 3.2)

$$\frac{g_z^2 + g_\varrho^2}{h^2} + \frac{\dot{\varphi}_r^2}{h_1^2} = \frac{g'_z{}^2 + g'_\varrho{}^2}{h^2} + \frac{\dot{\varphi}'_r{}^2}{h_1^2} = 1, \quad (3.21)$$

mit den Halbachsen,

$$h = \sqrt{\frac{2\tilde{E}}{\mu}} \quad \text{und} \quad h_1 = \frac{h}{\varrho} \sqrt{1 + \kappa \frac{\varrho^2}{R^2}}, \quad (3.22)$$

wobei

$$\kappa = \frac{\mu R^2}{\theta} = \frac{\xi \varepsilon^2}{1 + \varepsilon^2} \quad \text{und} \quad \varepsilon = \sqrt{\frac{m}{M}} \quad \text{ist.} \quad (3.23)$$

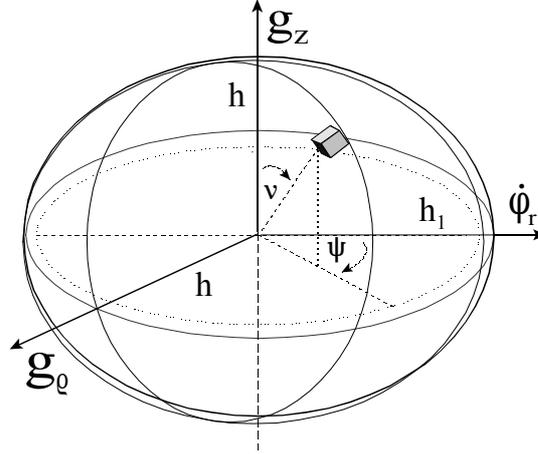


Abbildung 3.2: Schematische Darstellung des Rotationsellipsoids nach Gl. (3.21).

Die Komponenten der Relativgeschwindigkeit und die Relativwinkelgeschwindigkeit (vor und) nach einem total diffus-elastischen Stoß können in Form verallgemeinerter Kugelkoordinaten

$$g'_z = h \cos \nu', \quad (3.24)$$

$$g'_\varrho = h \sin \nu' \cos \psi' \quad (3.25)$$

und

$$\dot{\phi}'_r = h_1 \sin \nu' \sin \psi' \quad (3.26)$$

dargestellt werden.

Diese Darstellung, mit Hilfe der konstanten Halbachsen und des Reflexions- ($0 \leq \nu' \leq \pi$) und Azimutwinkels ($0 \leq \psi' \leq 2\pi$), ist für unser Problem eine besonders geeignete Parameterdarstellung der Rotationsellipsoidoberfläche. Einsetzen in Gl. (3.21) für das Rotationsellipsoid zeigt direkt, daß diese Gleichung für beliebige Winkel ν' , ψ' bzw. ν , ψ stets erfüllt ist. Demnach darf nach jedem Stoß, ohne Verletzung der Erhaltungssätze (3.1), (3.7) und (3.8), jeder Reflexionswinkel $\nu' \neq \nu$ und Azimutwinkel $\psi' \neq \psi$ gewählt werden. Die Verteilungsfunktionen des Reflexions- (ν') und Azimutwinkels (ψ') sind Gegenstand des folgenden Abschnitts.

Mit der Einführung der Relativgeschwindigkeit $\tilde{g}_\varphi = \varrho \dot{\varphi}_r$ erhält man einheitliche, physikalische Dimensionen der verwendeten Relativgrößen mit den entsprechenden Halbachsen h und $\tilde{h}_1 = \varrho h_1$.

Für den Fall sehr schwerer ($\varepsilon \ll 1$) TT (BROWNSche Teilchen) gilt:

$$\tilde{h}_1 = h \sqrt{1 + \kappa \frac{\varrho^2}{R^2}} \simeq h \left(1 + \varepsilon^2 \frac{\xi}{2} \frac{\varrho^2}{R^2} + \mathcal{O}(\varepsilon)^4 \right) \text{ für } \varepsilon \ll 1 \quad (3.27)$$

Im Grenzfall $\kappa \rightarrow 0$ gehen die Ausdrücke für \tilde{h}_1 (3.27) und $\dot{\Phi}$ (3.17) in

$$\lim_{\kappa \rightarrow 0} \tilde{h}_1 = \lim_{\kappa \rightarrow 0} h \sqrt{1 + \kappa \frac{\varrho^2}{R^2}} = h \text{ und } \lim_{\kappa \rightarrow 0} \dot{\Phi} = \lim_{\kappa \rightarrow 0} \frac{\omega + \varrho \frac{\kappa}{R^2} g_\varphi}{1 + \kappa \frac{\varrho^2}{R^2}} = \omega \quad (3.28)$$

über. In diesem Fall sind also alle Halbachsen gleich, d.h. der Betrag der Relativgeschwindigkeit (3.3) $g = h = \tilde{h}_1 = g'$ bleibt bei dem Stoß erhalten. Darüber hinaus bleibt wegen der Erhaltung der Schwerpunktswinkelgeschwindigkeit $\dot{\Phi} = \dot{\Phi}'$ auch die Winkelgeschwindigkeit des TT bei dem Stoß erhalten. Der Grenzfall $\kappa \rightarrow 0$ entspricht also dem Fall "nichtrotierender" Testteilchen [56], den wir mit $\mathcal{R}_{d(3)}$ bezeichnen. Der allgemeinere Fall ist jedoch bei rotierenden TT gegeben, den wir mit $\mathcal{R}_{d(\kappa)}$ abkürzen.

Im Allgemeinen sind alle Freiheitsgrade des TT bei der total diffus-elastischen Reflexion durch den Energieerhaltungssatz miteinander gekoppelt. Bei $\mathcal{R}_{d(\kappa)}$ sind die Beiträge von Translations- und Rotationsenergie zur Energie der Relativbewegung (3.20) unterschiedlich. Dieser Sachverhalt kommt durch unterschiedliche Halbachsen (3.22) zum Ausdruck und bedeutet, daß im Gegensatz zu $\mathcal{R}_{d(3)}$ der Betrag der Relativgeschwindigkeit (3.3) bei dem Stoß nicht erhalten bleibt.

3.2 Reflexionswinkelverteilung

In diesem Abschnitt behandeln wir die Reflexionswinkelverteilung für die *total diffus-elastische Reflexion*. Für die analytischen Rechnungen wurde "Mathematica" [75] verwendet.

Als Ausgangspunkt betrachten wir das differentielle Volumenelement des vierzehndimensionalen Phasenraums:

$$dP_{z_1} dP_{y_1} dP_{x_1} dL_{\varphi_1} dz_1 dy_1 dx_1 d\varphi_1 dP_{z_2} dP_{y_2} dP_{x_2} dz_2 dy_2 dx_2 \quad (3.29)$$

Die Koordinaten und Impulse (\vec{P}) bzw. der Drehimpuls (L_{φ_1}) des TT sind durch den Index 1, die der MT durch den Index 2 gekennzeichnet. Mit der Winkelkoordinate φ_1 bezeichnen wir den Drehwinkel um die z -Achse (Abb. 2.1), wobei $\omega = \frac{d\varphi_1}{dt}$ ist.

Drückt man die verallgemeinerten Impulse und den Drehimpuls des TT (Index 1) durch die Geschwindigkeiten (u_z, u_y, u_x) und Winkelgeschwindigkeit (ω) und analog die Impulse (Index 2) des MT durch die Geschwindigkeiten (v_z, v_y, v_x) aus, so läßt sich (3.29) in der Form

$$\theta M^3 m^3 du_z du_y du_x d\omega d\varphi_1 dv_z dv_y dv_x dz_1 dy_1 dx_1 dz_2 dy_2 dx_2 \quad (3.30)$$

schreiben.

Wir transformieren (3.30) mit (3.3) auf Schwerpunkts- ($\dot{s}_z, \dot{s}_y, \dot{s}_x$) und Relativgeschwindigkeiten (g_z, g_y, g_x), sowie entsprechend auf Schwerpunkts- (s_z, s_y, s_x) und Relativkoordinaten (z_3, y_3, x_3). Unter Berücksichtigung der JACOBI-Determinante kann das transformierte Phasenraumvolumenelement in der Form

$$\theta M^3 m^3 d\dot{s}_z d\dot{s}_y d\dot{s}_x ds_z ds_y ds_x d\omega d\varphi_1 \underbrace{dg_z dg_y dg_x dz_3 dy_3 dx_3}_{(1)} \quad (3.31)$$

dargestellt werden. Die JACOBI-Determinante der Transformation ist Eins [76].

Wir gehen zu \mathcal{K} über (Abb. 3.1) und stellen das Volumenelement (1) in (3.31) in Zylinderkoordinaten (3.11) dar:

$$\theta M^3 m^3 \varrho d\dot{s}_z d\dot{s}_y d\dot{s}_x ds_z ds_y ds_x dg_z dg_\varrho d\varrho dz_3 \underbrace{d\omega d\varphi_1 dg_\varphi d\varphi}_{(2)} \quad (3.32)$$

Mit der Transformation von (2) in (3.32) auf die Relativ- $\dot{\varphi}_r$ und Schwerpunktswinkelgeschwindigkeit $\dot{\Phi}$ (3.17), sowie entsprechend auf den Relativ- φ_r und Schwerpunktswinkel Φ , wird das Phasenraumvolumenelement schließlich auf die Form

$$\theta M^3 m^3 \varrho^2 d\dot{s}_z d\dot{s}_y d\dot{s}_x ds_z ds_y ds_x d\dot{\Phi} d\Phi dg_z dg_\varrho d\varrho dz_3 d\dot{\varphi}_r d\varphi_r \quad (3.33)$$

gebracht. Der zusätzliche Vorfaktor ϱ in (3.33) ergibt sich bei der Transformation auf $d\dot{\Phi} d\dot{\varphi}_r$.

Da bei der total diffus-elastischen Reflexion (Abschn. 2.2.2) die Energie erhalten bleibt, kann die Wechselwirkung im Rahmen eines *mikrokanonischen Ensembles* beschrieben werden. Voraussetzung dafür ist, daß keine Korrelationen zwischen den Einfallswinkel- und Reflexionswinkeln vorhanden sind. Nach dem LIOUVILLESchen Satz ändert zwar das Volumen einer beliebigen Phasenbildpunktmenge im Laufe der zeitlichen Entwicklung seine Gestalt, behält seine Größe jedoch bei. Deshalb folgt unmittelbar für das Phasenraumvolumenelement vor und nach einem total diffus-elastischen Stoß:

$$\begin{aligned} & \theta M^3 m^3 \varrho^2 dg_z dg_\varrho d\dot{\varphi}_r dz_3 \underbrace{d\dot{s}_z d\dot{s}_y d\dot{s}_x ds_z ds_y ds_x d\dot{\Phi} d\Phi}_{(3)} \underbrace{d\varrho d\varphi_r}_{(4)} \quad (3.34) \\ & = \theta M^3 m^3 \varrho^2 dg'_z dg'_\varrho d\dot{\varphi}'_r dz'_3 \underbrace{d\dot{s}'_z d\dot{s}'_y d\dot{s}'_x ds'_z ds'_y ds'_x d\dot{\Phi}' d\Phi'}_{(3')} \underbrace{d\varrho' d\varphi'_r}_{(4')} \end{aligned}$$

Die Volumenelemente (3) und (3') in Gl. (3.34) sind nach den Erhaltungssätzen (3.1), (3.13) gleich groß und auch das differentielle Element (4) bzw. (4') ist offensichtlich bei einem Stoß invariant, so daß

$$dz_3 dg_z dg_\varrho d\dot{\varphi}_r = dz'_3 dg'_z dg'_\varrho d\dot{\varphi}'_r \quad (3.35)$$

gilt. Geht man in Gl. (3.35) erneut zu verallgemeinerten Impulsen und Drehimpulsen über, so kürzen sich die Vorfaktoren heraus.

Die Phasenbildpunkte, die den Bewegungszustand des Relativproblems von TT und MT vor und nach einem einzelnen Stoß eindeutig charakterisieren, liegen jeweils auf der Energiehyperfläche (in der jeweiligen Phasenraumzelle) des Phasenraums. Der von der Energiehyperfläche umschlossene Teil des Phasenraums hat die Form eines zusammengedrückten Rotationsellipsoids (Abb. 3.2). Mit der Substitution

$$dz'_3 = g'_z dt \quad (3.36)$$

und der Transformation auf verallgemeinerte Kugelkoordinaten (3.24) - (3.26) wird das Phasenraumvolumenelement schließlich auf die Form

$$g'_z dt \underbrace{dg'_z dg'_\varrho d\dot{\varphi}'_r}_{(5')} = g'_z dt \frac{\partial(g'_z, g'_\varrho, \dot{\varphi}'_r)}{\partial(h, \nu', \psi')} d\nu' d\psi' dh = h^2 h_1 \cos \nu' \sin \nu' d\nu' d\psi' dh dt \quad (3.37)$$

gebracht. Dabei ist die Umformung des Volumenelements (5') in (3.37) zu beachten.

Bei der total diffus-elastischen Reflexion (Abschn. 2.2.2) sind alle gleich großen Phasenraumvolumenelemente (3.37) auf der Energieschale der Dicke dh des Rotationsellipsoids, unabhängig von den Polar- (ν) und Azimutwinkel (ψ) der einfallenden Teilchen, gleichwahrscheinlich. Dieser Sachverhalt ist in völliger Übereinstimmung mit einer *mikrokanonischen Verteilung*. Nach Gl. (3.35) und (3.37) gilt:

$$h^2 h_1 \cos \nu \sin \nu d\nu d\psi \underbrace{dh dt}_{(6)} = h^2 h_1 \cos \nu' \sin \nu' d\nu' d\psi' \underbrace{dh dt}_{(6')} \quad (3.38)$$

Da h und h_1 (3.22), sowie das differentielle Element (6) bzw. (6') bei einem Stoß ebenfalls invariant sind, folgt

$$\cos \nu \sin \nu d\nu d\psi = \cos \nu' \sin \nu' d\nu' d\psi', \quad (3.39)$$

d.h. die Winkelverteilungsfunktionen für den einfallenden und reflektierten Teilchenstrom stimmen überein. Dieses Ergebnis wurde in [57] für den Fall der total diffus-elastischen Reflexion nichtrotierender TT mittels Computersimulation (vgl. Abschn. 2.2.2) explizit bestätigt.

Die normierte *Verteilungsfunktion* für den Reflexionswinkel ν' und Azimutwinkel ψ' lautet für den Fall der total diffus-elastischen Reflexion:

$$f(\nu', \psi') \sin \nu' d\nu' d\psi' = \frac{2}{2\pi} \cos \nu' \sin \nu' d\nu' d\psi' \quad (3.40)$$

Die total diffus-elastische Reflexion wird durch eine $\cos \nu'$ -Verteilung [77] beschrieben.

Die Reflexionswinkelverteilung (3.40) ist für rotierende und nichtrotierende TT identisch und stimmt mit der Einfallswinkelverteilung der auftreffenden MT überein.

3.3 Grundlagen der Computersimulation

Die grundlegenden Aspekte des hier zugrunde liegenden numerischen Verfahrens wurden bereits ausführlich in der Literatur ([55] - [57]) diskutiert. Hierbei ist insbesondere die Arbeit von HEIBER [55] zu nennen. In diesem Abschnitt stellen wir die Grundlagen zur Computersimulation der TT-Modelle, die in dieser Arbeit betrachtet werden, kurz vor. Das Hauptaugenmerk liegt dabei auf die Simulation des total diffus-elastisch reflektierenden TT im Rahmen des Grundmodells (Kap. 2).

Das TT bewege sich in \mathcal{L} mit der Geschwindigkeit \vec{u} und der Winkelgeschwindigkeit ω . Der Strom von MT auf die linke Seite des TT ist

$$\frac{dN}{dt} = n \int dA \int_{v_z \geq u_z} (v_z - u_z) f_M(\vec{v}) d^3v, \quad (3.41)$$

wobei n die Teilchenzahldichte der MT, $dA = \varrho d\varrho d\varphi$ das Flächenelement auf der TT-Oberfläche und $f_M(\vec{v})$ die Verteilungsfunktion der MT-Geschwindigkeiten (2.1) ist. Wir führen die Integration über die Geschwindigkeiten $u_z \leq v_z \leq \infty$, $-\infty \leq v_{x/y} \leq \infty$ der MT und über alle Flächenelemente auf der TT-Oberfläche in (3.41) durch und erhalten

$$\begin{aligned} \frac{dN}{dt} &= J_l(u_z) = \frac{1}{\tau_l(u_z)} \\ &= n A \left(\frac{\langle v \rangle}{4} \exp\left(-\frac{m u_z^2}{2 k_B T}\right) + \frac{u_z}{2} \left[\operatorname{erf}\left(\sqrt{\frac{m}{2 k_B T}} u_z\right) - 1 \right] \right). \end{aligned} \quad (3.42)$$

Dabei ist $\tau_l(u_z)$ die mittlere Zeit zwischen zwei aufeinanderfolgenden Stößen auf der linken Seite des bewegten TT, $A = \pi R^2$ die Fläche des TT und $\langle v \rangle$ der mittlere Geschwindigkeitsbetrag der MT-Geschwindigkeiten. Um den mittleren Strom $J_r(u_z) = \frac{1}{\tau_r(u_z)}$ zur rechten Seitenfläche des TT zu erhalten, ersetzt man in Gl. (3.42) u_z durch $-u_z$.

Die normierte Verteilungsfunktion der Auftrefforte lautet:

$$f_A(\varrho, \varphi) d\varrho d\varphi = \frac{\varrho}{\pi R^2} d\varrho d\varphi \quad (3.43)$$

Der Abstand ϱ zur Drehachse des TT und der gleichverteilte Auftreffwinkel φ wird unabhängig von dem Bewegungszustand der TT ausgelost.

Berücksichtigt man beide Seiten des TT, so lautet die resultierende Zeitskala eines ruhenden TT:

$$\tau_0 = \frac{2}{n A \langle v \rangle}, \text{ für } u_z = 0 \quad (3.44)$$

τ_0 wird als Einheit für die Zeitskala bei der Computersimulation verwendet.

Der mittlere Strom auftreffender MT ist zeitlich konstant, solange das TT die Geschwindigkeit u_z beibehält. Alle Ereignisse sollen unabhängig von der Vorgeschichte sein (MARKOV-Prozeß ([78] - [80])).

Auch die Auftreffzeit, der Auftreffort und die konkrete Geschwindigkeit des auftreffenden MT werden als unabhängig voneinander betrachtet. Diese Annahmen bedeuten für den Fall eines stark verdünnten Mediengases keine zusätzlichen Einschränkungen. Für diesen Fall wurde in Ref. [55] die Verteilungsfunktion der Zeitintervalle zwischen aufeinanderfolgenden Stößen der Form

$$f(t) dt = \frac{1}{\tau(u_z)} \exp\left(-\frac{t}{\tau(u_z)}\right) dt, \text{ mit } \tau^{-1} = \tau_l^{-1} + \tau_r^{-1} \quad (3.45)$$

abgeleitet.

Die Tangentialkomponenten der MT-Geschwindigkeiten v_x und v_y sind maxwellverteilt:

$$f(v_i) = \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T}} \exp\left(-\frac{m v_i^2}{2k_B T}\right), \text{ für } i = x, y \quad (3.46)$$

Die Verteilungsfunktion der Normalkomponente der MT-Geschwindigkeit ergibt sich aus dem Strom zur Oberfläche des TT:

$$f(v_z) = \pm \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T}} (v_z - u_z) \exp\left(-\frac{m v_z^2}{2k_B T}\right) \quad (3.47)$$

Das Pluszeichen gilt dabei für das Auftreffen der MT auf der linken Seite, das Minuszeichen entsprechend auf der rechten Seite des TT.

Die Computersimulation läuft wie folgt ab:

1. Die zu der aktuellen Normalengeschwindigkeit u_z gehörige mittlere Zeit zwischen zwei Stößen auf der linken ($\tau_l(u_z)$) (3.42) und rechten Seite ($\tau_r(u_z)$) des TT wird ermittelt und der Zeitpunkt des nächsten Stoßes nach (3.45) ausgelost. Die Entscheidung über die getroffene (linke oder rechte) Seite des TT fällt nach dem Verhältnis der beiden Einzelströme.
2. Der Auftreffort des MT wird nach der Verteilung (3.43) ausgelost.
3. Die jeweilige Komponente der Geschwindigkeit des auftreffenden MT wird nach der entsprechenden Verteilung (3.46) bzw. (3.47) ausgelost.
4. Die Translationsgeschwindigkeit und Winkelgeschwindigkeit des rotierenden TT nach dem Stoß wird durch den konkreten Wechselwirkungsmechanismus (spiegelnd-elastische Reflexion, total diffus-elastische Reflexion oder total inelastische Wechselwirkung; siehe Abschn. 2.2) festgelegt. Anschließend beginnt der Zyklus mit der neuen Geschwindigkeit \vec{u} und der Winkelgeschwindigkeit ω des TT von vorn.

Nach (3.4) und (3.24) lautet die Geschwindigkeitsänderung in Normalenrichtung infolge eines Stoßes für ein total diffus-elastisch reflektierenden TT:

$$\Delta u_z = \frac{\mu}{M} (g_z - g'_z) = \frac{\mu}{M} h (\cos \nu + \cos \nu') \quad (3.48)$$

Der Vorzeichenwechsel innerhalb der Klammer in (3.48) kommt dadurch zustande, daß g_z und g'_z bei jedem Stoß jeweils verschiedene Vorzeichen haben, die $\cos \nu$ jedoch per Definition jeweils dasselbe Vorzeichen. Für die Winkelgeschwindigkeitsänderung des TT gilt nach (3.19) und (3.26):

$$\Delta \omega = \frac{\eta}{\theta} h_1 (\sin \nu' \sin \psi' - \sin \nu \sin \psi) \quad (3.49)$$

Damit ergibt sich für die Komponenten der Geschwindigkeitsänderung des TT in tangentialer Richtung nach (3.15), (3.16) und (3.25)

$$\Delta u_i = -\frac{\mu}{M} \left(h (\sin \nu' \cos \psi' - \sin \nu \cos \psi) \cos \varphi \pm \frac{\theta}{\mu \varrho} \Delta \omega \sin \varphi \right) \text{ für } i = x, y, \quad (3.50)$$

wobei das Pluszeichen für die x -Richtung, das Minuszeichen für die y -Richtung steht.

Für die konkrete Auslosung von t (3.45) und weiterer benötigter Zufallsgrößen verwenden wir das übliche Verfahren [80] zur Erzeugung von Zufallszahlen einer bestimmten Verteilung gemäß

$$\int^{x_i} f(\zeta) d\zeta - z_i = 0. \quad (3.51)$$

Wenn die z_i gleichverteilte Zufallszahlen im Intervall (0,1) sind, dann genügen die nach Auflösung von (3.51) erhaltenen x_i der Verteilung $f(x_i)$.

Die Auslosung der Normalengeschwindigkeit der auftreffenden MT erfolgt nach der v. NEUMANNschen Verwerfungsmethode ([78], [57]). Der Vorteil dieser Methode besteht in der sehr effizienten Bestimmung der Normalengeschwindigkeit, mit einem Zeitgewinn um einen Faktor fünf gegenüber dem NEWTONschen Iterationsverfahren.

Kapitel 4

Rotation von Testteilchen bei Wechselwirkung mit totaler Akkomodation

In diesem Kapitel untersuchen wir die Rotation von Testteilchen (TT) bei total inelastischer Wechselwirkung (totaler Akkomodation), sowohl für den Fall einer verschwindenden als auch endlichen Adsorptionszeit τ_a (Abschn. 2.2.3).

Für den erstgenannten Fall werden zusätzliche Rotationsfreiheitsgrade kugelförmiger Medienteilchen (MT) in das Grundmodell (Kap. 2) einbezogen (erweitertes Modell) und die Änderung der Winkelgeschwindigkeit untersucht. Man erkennt, daß die Rotationsfreiheitsgrade von TT und MT miteinander gekoppelt sind (*Rotations-Rotations-Kopplung*).

Im zweiten Teil wird die inelastische Wechselwirkung für den Fall einer endlichen Adsorptionszeit im Rahmen des Grundmodells näher untersucht.

4.1 Rotations-Rotations-Kopplung

In der Literatur ([53] - [55], [57], [63]) ist der Normalen-Freiheitsgrad (in z -Richtung) total inelastisch wechselwirkender TT analytisch und numerisch bereits ausführlich untersucht worden. Bei fester Orientierung des TT, entkoppelt offensichtlich der Normalen-Freiheitsgrad von den tangentialen Freiheitsgraden und dem Rotationsfreiheitsgrad des TT bei Wechselwirkung mit totaler Akkomodation.

Bisher haben wir ausschließlich den Zweierstoß zwischen punktförmigen MT und diskusförmigen TT behandelt (Kap. 2). Wir betrachten nun kugelförmige MT (Hartkugelgas) mit der Winkelgeschwindigkeit $\vec{\Omega} = (\Omega_x, \Omega_y, \Omega_z)$, dem Radius r und dem Trägheitsmoment $\Theta = \frac{2mr^2}{5}$.

Wir gehen davon aus, daß sich neben den Translationsfreiheitsgraden der MT auch ihre Rotationsfreiheitsgrade stets im thermodynamischen Gleichgewicht mit der gleichen Temperatur T befinden, d.h. die Winkelgeschwindigkeits-Verteilungsfunktion der MT ist ebenfalls eine MAXWELLverteilung:

$$f_M(\Omega_z, \Omega_y, \Omega_x) d\Omega_z d\Omega_y d\Omega_x = \quad (4.1)$$

$$\frac{(\Theta_{zz} \Theta_{yy} \Theta_{xx})^{\frac{1}{2}}}{(2\pi k_B T)^{-\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{(\Theta_{zz} \Omega_z^2 + \Theta_{yy} \Omega_y^2 + \Theta_{xx} \Omega_x^2)}{2 k_B T}\right) d\Omega_z d\Omega_y d\Omega_x$$

Für kugelförmige MT sind alle drei Hauptträgheitsmomente gleich ($\Theta \equiv \Theta_{zz} = \Theta_{yy} = \Theta_{xx}$). Die Komponenten der MT-Winkelgeschwindigkeiten sind alle voneinander unabhängig.

Wir nehmen an, daß die feste Orientierung der TT auch bei der Wechselwirkung mit kugelförmigen MT erhalten bleibt. Daher braucht man wiederum nur die Rotation des TT ($\omega \equiv \omega_z$, $\theta \equiv \theta_{zz}$) um die fest orientierte Drehachse in den Drehimpulserhaltungssätzen zu berücksichtigen:

$$L_z = \theta \omega + \Theta \Omega_z + m (\varrho_x v_y - \varrho_y v_x) = \theta \omega' + \Theta \Omega'_z + m (\varrho_x v'_y - \varrho_y v'_x), \quad (4.2)$$

$$L_y = \Theta \Omega_y + m (\varrho_z v_x - \varrho_x v_z) = \Theta \Omega'_y + m (\varrho_z v'_x - \varrho_x v'_z) \quad (4.3)$$

und

$$L_x = \Theta \Omega_x + m (\varrho_y v_z - \varrho_z v_y) = \Theta \Omega'_x + m (\varrho_y v'_z - \varrho_z v'_y) \quad (4.4)$$

Der Impulserhaltungssatz in \mathcal{L} wird durch Gl. (3.1) beschrieben. Die zu ϱ_z proportionalen Terme von L_x , L_y verschwinden für unendlich flache TT (Abb. 2.1). Die Drehimpulserhaltungssätze in den einzelnen Raumrichtungen haben im Schwerpunktsystem (3.3) die Form (3.9):

$$\tilde{L}_z = \theta \omega + \Theta_{zz} \Omega_z + \mu (\varrho_x g_y - \varrho_y g_x) = \theta \omega' + \Theta_{zz} \Omega'_z + \mu (\varrho_x g'_y - \varrho_y g'_x), \quad (4.5)$$

$$\tilde{L}_y = \Theta_{yy} \Omega_y - \mu \varrho_x g_z = \Theta_{yy} \Omega'_y - \mu \varrho_x g'_z \quad (4.6)$$

und

$$\tilde{L}_x = \Theta_{xx} \Omega_x + \mu \varrho_y g_z = \Theta_{xx} \Omega'_x + \mu \varrho_y g'_z \quad (4.7)$$

Die Rotation des TT um die fest orientierte Drehachse wird offensichtlich zusätzlich nur durch die z -Komponente der Winkelgeschwindigkeit des MT $\Omega \equiv \Omega_z$ beeinflusst. Für die Ableitung der Winkelgeschwindigkeitsänderung des TT muß ausschließlich nur der Drehimpulserhaltungssatz in z -Richtung betrachtet werden. Die tangentialen Komponenten der MT-Winkelgeschwindigkeit (Ω_x, Ω_y) brauchen weiterhin nicht mehr berücksichtigt werden, da wir uns nur für die Rotationsbewegung und nicht für die Bewegung des TT in Normalenrichtung interessieren.

Der gesamte Stoß bei inelastischer Wechselwirkung wird nun folgendermaßen berechnet: Wir befinden uns wiederum im Bezugssystem \mathcal{K} (Abb. 3.1), in dem das MT mit dem Winkel φ im Abstand ϱ von der Drehachse des TT auftritt. Den Gesamtprozeß teilen wir in zwei Teilprozesse auf, die Adsorption und die Desorption. Für den Prozeß der Adsorption des MT an der Oberfläche des TT lautet der Drehimpulserhaltungssatz:

$$\tilde{L}_z = \theta \omega + \Theta \Omega + \mu \varrho g_\varphi = (\theta + \Theta + \mu \varrho^2) \tilde{\Phi} \quad (4.8)$$

Dabei entsteht ein temporärer TT-MT-Cluster der Masse $M + m$ und dem Trägheitsmoment $\theta + \Theta + \mu \varrho^2$, der mit der Schwerpunktwinkelgeschwindigkeit

$$\tilde{\Phi} = \frac{\theta \omega + \Theta \Omega + \mu \varrho g_\varphi}{\theta + \Theta + \mu \varrho^2} = \tilde{\Phi}' \quad (4.9)$$

rotiert. Die neue Schwerpunktwinkelgeschwindigkeit, die sich von (3.17) unterscheidet, bleibt ebenfalls bei dem total inelastischen Stoß zwischen TT und MT erhalten. Für die Desorption gilt analog zu (4.8):

$$(\theta + \Theta + \mu \varrho^2) \tilde{\Phi}' = \theta \omega' + \Theta \Omega' + \mu \varrho g'_\varphi = \tilde{L}'_z = \tilde{L}_z \quad (4.10)$$

Die gesamte Änderung der Winkelgeschwindigkeit nach der Desorption des MT ist mit (4.8) - (4.10):

$$\Delta\omega = \omega' - \omega = \frac{\mu \varrho}{\theta} (g_\varphi - g'_\varphi) + \frac{\Theta}{\theta} (\Omega - \Omega') = - \left(\frac{\mu \varrho}{\theta} \Delta g_\varphi + \frac{\Theta}{\theta} \Delta \Omega \right) \quad (4.11)$$

Sind Rotationsfreiheitsgrade der MT bei dem total inelastischen Stoß beteiligt, so unterscheidet sich $\Delta\omega$ gegenüber (3.15) durch die Winkelgeschwindigkeitsänderung der MT, gewichtet mit dem Verhältnis der Trägheitsmomente von MT zu TT. Demzufolge sind die Änderungen der Winkelgeschwindigkeiten von TT und MT im Rahmen des erweiterten Modells erwartungsgemäß miteinander gekoppelt (*Rotations-Rotations-Kopplung*).

Wir gehen nun der Frage nach, wie die unbekannte Größe Ω' in Gl. (4.11) nach dem total inelastischen Stoß zu bestimmen ist. Dazu betrachten wir die kinetische Energie

$$E = \frac{Mm}{2\mu} \vec{s}^2 + \frac{\mu}{2} (g_z^2 + g_\varrho^2) + \underbrace{\frac{1}{2} (\mu g_\varphi^2 + \theta \omega^2 + \Theta \Omega^2)}_{E_1}, \quad (4.12)$$

die sich nur durch den zusätzlichen Beitrag der Rotationsenergie $\sim \frac{1}{2} \Theta \Omega^2$ des adsorbierten MT von (3.14) unterscheidet.

Die Zahl der unbekanntenen Größen in Gl. (4.10) wird durch die Ausnutzung von $\tilde{\Phi} = \tilde{\Phi}'$, in Analogie zu Gl. (3.17), um eine Unbekannte reduziert. Neben g_z , g_ϱ ist es zweckmäßig zwei Relativwinkelgeschwindigkeiten zur Beschreibung der Relativbewegung von TT und MT einzuführen.

Neben $\dot{\varphi}_r$ (3.17) und $\tilde{\Phi}$ (4.9) führen wir zusätzlich die neue Relativwinkelgeschwindigkeit

$$\dot{\Phi}_r = \Omega - \tilde{\Phi} \quad \Rightarrow \quad \Omega = \dot{\Phi}_r + \tilde{\Phi} \quad (4.13)$$

ein und erhalten mit Hilfe der Gl. (4.8) - (4.10)

$$\omega = \left(\frac{\theta + \Theta + \mu \varrho^2}{\theta + \mu \varrho^2} \right) \tilde{\Phi} + \frac{\mu \varrho^2 \dot{\varphi}_r - \Theta \Omega}{\theta + \mu \varrho^2} = \tilde{\Phi} + \frac{\mu \varrho^2 \dot{\varphi}_r - \Theta \dot{\Phi}_r}{\theta + \mu \varrho^2} \quad (4.14)$$

und

$$\dot{\varphi} = \left(\frac{\theta + \Theta + \mu \varrho^2}{\theta + \mu \varrho^2} \right) \tilde{\Phi} - \frac{\Theta \Omega + \theta \dot{\varphi}_r}{\theta + \mu \varrho^2} = \tilde{\Phi} - \frac{\Theta \dot{\Phi}_r + \theta \dot{\varphi}_r}{\theta + \mu \varrho^2}. \quad (4.15)$$

Benutzt man die Ausdrücke für Ω , ω und $\dot{\varphi}$, so folgt für den Anteil E_1 der Energie in (4.12):

$$\begin{aligned} 2E_1 &= \mu \varrho^2 \left(\tilde{\Phi} - \frac{\Theta \dot{\Phi}_r + \theta \dot{\varphi}_r}{\theta + \mu \varrho^2} \right)^2 \\ &+ \theta \left(\tilde{\Phi} + \frac{\mu \varrho^2 \dot{\varphi}_r - \Theta \dot{\Phi}_r}{\theta + \mu \varrho^2} \right)^2 + \Theta \left(\dot{\Phi}_r + \tilde{\Phi} \right)^2 \end{aligned} \quad (4.16)$$

Die beiden zu $\tilde{\Phi} \dot{\varphi}_r$ proportionalen Terme heben sich gegenseitig auf, die übrigen Terme fassen wir in der Form

$$\begin{aligned} 2E_1 &= (\theta + \mu \varrho^2) \tilde{\Phi}^2 + \Theta \left(\dot{\Phi}_r + \tilde{\Phi} \right)^2 - 2\Theta \dot{\Phi}_r \tilde{\Phi} \\ &+ \left(\frac{\Theta \dot{\Phi}_r + \theta \dot{\varphi}_r}{\theta + \mu \varrho^2} \right)^2 \mu \varrho^2 + \left(\frac{\mu \varrho^2 \dot{\varphi}_r - \Theta \dot{\Phi}_r}{\theta + \mu \varrho^2} \right)^2 \theta \end{aligned} \quad (4.17)$$

zusammen.

Ebenso verschwinden die zu $\dot{\Phi}_r$ $\dot{\varphi}_r$ proportionalen Terme. Mit (3.18) folgt

$$2E_1 = (\theta + \Theta + \mu \varrho^2) \tilde{\Phi}^2 + \eta \dot{\varphi}_r^2 + \frac{\Theta^2 \dot{\Phi}_r^2}{\theta + \mu \varrho^2} + \Theta \dot{\Phi}_r^2. \quad (4.18)$$

Verwendet man diesen Ausdruck für E_1 , so kann die Gl. (4.12) schließlich auf die Form

$$E = \frac{M + m}{2} \vec{s}^2 + \frac{\theta + \Theta + \mu \varrho^2}{2} \tilde{\Phi}^2 + \frac{\mu}{2} (g_z^2 + g_\varrho^2) + \frac{\eta}{2} \dot{\varphi}_r^2 + \frac{F\Theta}{2} \dot{\Phi}_r^2, \quad (4.19)$$

mit

$$F = \frac{\theta + \Theta + \mu \varrho^2}{\theta + \mu \varrho^2} \quad (4.20)$$

gebracht werden.

Neben η (3.18) ist $F\Theta$ ein weiteres reduziertes Trägheitsmoment. Die Energie hat nach diesen Transformationen wie (3.20) wieder eine homogen quadratische Form in den Relativgeschwindigkeiten (g_z , g_ϱ) und Relativwinkelgeschwindigkeiten ($\dot{\varphi}_r$, $\dot{\Phi}_r$), sowie der entsprechenden konstanten Schwerpunktschwindigkeit (\vec{s}) und Schwerpunktschwindigkeitswinkelgeschwindigkeit ($\dot{\Phi}$).

Die Relativgrößen g_z , g_ϱ , $\dot{\varphi}_r$ und $\dot{\Phi}_r$, die in (4.19) mit den jeweiligen Koeffizienten μ , η und $F\Theta$ gewichtet sind, eignen sich zur Beschreibung der Relativbewegung von TT und MT besonders gut: Erwartungsgemäß geht im Grenzfall $\Theta \rightarrow 0$ der Drehimpulserhaltungssatz (4.8) - (4.10) und die Energie (4.19) unmittelbar in (3.13) und (3.20) über.

In Analogie zu (3.19), können wir unter Verwendung von (4.9), (4.13), (4.15) und $\tilde{\Phi} = \tilde{\Phi}'$ für (4.11) auch schreiben:

$$\begin{aligned} \Delta\omega &= \frac{\mu \varrho}{\theta} (g_\varphi - g'_\varphi) + \frac{\Theta}{\theta} (\Omega - \Omega') \quad (4.21) \\ &= \frac{\mu \varrho}{\theta} \left(\left[\varrho \tilde{\Phi} - \frac{\eta}{\mu \varrho} \left(\frac{\Theta}{\theta} \dot{\Phi}_r + \dot{\varphi}_r \right) \right] - \left[\varrho \tilde{\Phi}' - \frac{\eta}{\mu \varrho} \left(\frac{\Theta}{\theta} \dot{\Phi}'_r + \dot{\varphi}'_r \right) \right] \right) \\ &\quad + \frac{\Theta}{\theta} \left(\left[\dot{\Phi}_r + \tilde{\Phi} \right] - \left[\dot{\Phi}'_r + \tilde{\Phi}' \right] \right) \\ &= \frac{\eta}{\theta} (\dot{\varphi}'_r - \dot{\varphi}_r) + \frac{\Theta}{\theta} \left(\frac{\eta}{\theta} - 1 \right) (\dot{\Phi}'_r - \dot{\Phi}_r) = \frac{\eta}{\theta} \Delta\dot{\varphi}_r + (1 - F) \Delta\dot{\Phi}_r \end{aligned}$$

Wir weisen ausdrücklich darauf hin, daß die Änderung der neuen Relativwinkelgeschwindigkeit $\Delta\dot{\Phi}_r$ zwar wegen $\tilde{\Phi} = \tilde{\Phi}'$ mit der Winkelgeschwindigkeitsänderung der MT identisch $\Delta\dot{\Phi}_r = \Delta\Omega$ ist, die Größe $\dot{\Phi}'_r$ neben g'_z , g'_ϱ und φ'_r jedoch die ausschlaggebende Unbekannte nach der Desorption ist. Die Gl. (4.11) kann wegen $\Delta\dot{\Phi}_r = \Delta\Omega$ mit (3.23) auch in der Form

$$\Delta\omega = - \left(\kappa \frac{\varrho}{R^2} \Delta g_\varphi + \lambda^2 \Delta\dot{\Phi}_r \right), \text{ wobei } \lambda = \sqrt{\frac{\Theta}{\theta}} \text{ ist,} \quad (4.22)$$

geschrieben werden. Im Rahmen des erweiterten Modells ist nach Gl. (4.22) die Änderung der Winkelgeschwindigkeit des TT $\Delta\omega$ bei dem total inelastischen Stoß von λ und κ abhängig. Diesen Fall bezeichnen wir mit dem Symbol $\mathcal{R}_{a(\kappa,\lambda)}$. Für den Fall $\lambda \rightarrow 0$ bzw. $F \rightarrow 1$ (4.20) folgt die Winkelgeschwindigkeitsänderung des TT für das Grundmodell (3.15).

Die unbekanntenen Relativgeschwindigkeiten g'_z , g'_ϱ und die Relativwinkelgeschwindigkeiten $\dot{\varphi}'_r$, $\dot{\Phi}'_r$ zwischen TT und MT genügen aufgrund der vorausgesetzten totalen Akkomodation bei der Desorption einer MAXWELLverteilung

$$f_{M,FT} \left(g'_z, g'_\varrho, \dot{\varphi}'_r, \dot{\Phi}'_r \right) dg'_z dg'_\varrho d\dot{\varphi}'_r d\dot{\Phi}'_r = \frac{\mu}{2\pi k_B T} \sqrt{\frac{\eta}{2\pi k_B T}} \sqrt{\frac{F\Theta}{2\pi k_B T}} \quad (4.23)$$

$$\exp \left(-\frac{\mu (g_z'^2 + g_\varrho'^2)}{2 k_B T} \right) \exp \left(-\frac{\eta \dot{\varphi}_r'^2}{2 k_B T} \right) \exp \left(-\frac{F\Theta \dot{\Phi}_r'^2}{2 k_B T} \right) dg'_z dg'_\varrho d\dot{\varphi}'_r d\dot{\Phi}'_r.$$

Für den Fall der inelastischen Wechselwirkung verstehen wir unter der "Dimension des TT-Modells" die Anzahl der unabhängigen Relativgeschwindigkeiten und Relativwinkelgeschwindigkeiten nach der Desorption, die nach einer MAXWELLverteilung mit der Temperatur des Gases der MT ausgewürfelt werden. In diesem Sinne ist das erweiterte Modell ein "vierdimensionales TT-Modell".

4.2 Rotation im Fall endlicher Adsorptionszeit

Es wird nunmehr angenommen, daß ein punktförmiges MT auf der Oberfläche eines rotierenden TT adsorbiert (Abb. 4.1) und nach einer endlichen mittleren Adsorptionszeit τ_a (Abschn. 2.2.3) nach erfolgter totaler Akkomodation wieder desorbiert. Eine endliche Adsorptionszeit führt zur Bildung eines *TT-MT-Clusters* mit *zeitlich veränderlicher stochastischer Masse* und *zeitlich veränderlichen stochastischen Trägheitsmoment*. Wir geben in diesem Abschnitt die Ausdrücke für $\Delta\omega$, Δu_x und Δu_y für diesen Fall an.

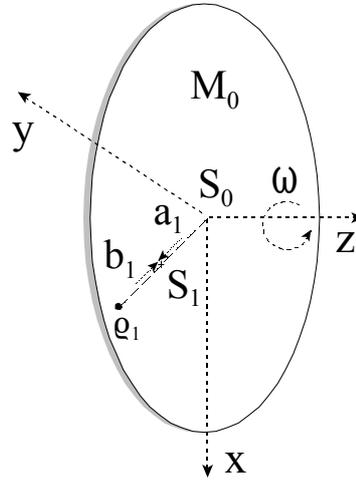


Abbildung 4.1: Trägheitsmoment des Testteilchens mit adsorbierten Medienteilchen. Neben den im Text erklärten Größen bedeuten: $a_1 = \frac{\mu}{M} \varrho_1$, $b_1 = \frac{\mu}{m} \varrho_1$.

Der Gesamtstrom von MT (auf der linken Seite des TT) setzt sich aus den Adsorptionsstrom ($J_{a,l}$) und Desorptionsstrom ($J_{d,l}$) zusammen und bewirkt dabei eine zeitliche Änderung der (im Adsorptionsvolumen) auf der linken Seite des TT befindlichen MT N_l :

$$\frac{dN_l}{dt} = J_{a,l} - J_{d,l} = \frac{1}{\tau_l} - \frac{N_l}{\tau_a} \quad (4.24)$$

Für den Strom J_r zur rechten Seitenfläche des TT gilt ein analoger Ausdruck. Der Adsorptionsstrom J_a zur jeweiligen Seitenfläche des TT ist nach Gleichung (3.41) gegeben. Der Desorptionsstrom wird gemäß einer *Desorption 1. Ordnung* beschrieben.

Wir nehmen an, daß sich zu einem bestimmten Zeitpunkt $N = N_l + N_r$ MT der Masse m im Adsorptionsvolumen auf der linken (Index l) und rechten (Index r) Seite des TT befinden. Diese N MT bilden mit dem TT der Masse M_0 einen *TT-MT-Cluster* der Masse

$$M(t) \equiv M_N = M_0 + N(t) m. \quad (4.25)$$

Sei S_{N-1} (Abb. 4.1) der gemeinsame Schwerpunkt des TT-MT-Clusters und sein Trägheitsmoment $\theta_{S_{N-1}} := \theta_{N-1}$ für die Drehachse (z -Achse) durch S_{N-1} bekannt. Adsorbiert ein weiteres MT (das N -te MT) auf der Oberfläche des TT-MT-Clusters im Abstand ϱ_N vom Schwerpunkt S_{N-1} , dann folgt für das neue Trägheitsmoment θ_N um den Schwerpunkt S_N nach dem STEINERSchen Satz:

$$\theta_N = \theta_{N-1} + \mu_{N-1} \varrho_N^2 \quad (4.26)$$

Durch sukzessive Anwendung der Gleichung läßt sich schließlich das stochastische Trägheitsmoment nach

$$\theta(t) \equiv \theta_N = \sum_{p=0}^N \theta^{(p)}, \text{ wobei } \theta^{(p)} = \mu_{p-1} \varrho_p^2 \text{ mit } \theta_0 \equiv \theta^{(0)} \quad (4.27)$$

berechnen, wobei θ_0 das Trägheitsmoment des unbelegten, nackten TT ist.

Desweiteren führen wir die zu (4.25) entsprechende reduzierte Masse

$$\mu(t) \equiv \mu_N = \frac{M(t) m}{M(t) + m} \quad (4.28)$$

ein. Das zu (4.27) entsprechende reduzierte Trägheitsmoment

$$\eta(t) = \frac{\theta(t) \mu(t) \varrho(t)^2}{\theta(t) + \mu(t) \varrho(t)^2} \quad (4.29)$$

ist von dem *stochastisch fluktuierenden Auftreffort* $\varrho(t) \equiv \varrho_{N+1}$ abhängig.

Für den Prozeß der Adsorption mit sofortiger Desorption des N -ten MT an der Oberfläche des TT folgt für den Impuls- (3.1) und Drehimpulserhaltungssatz (3.13)

$$\overrightarrow{P}_0^N = M_N \vec{u} + m \vec{v} = M_N \vec{u}' + m \vec{v}' = \overrightarrow{P}_0'^N \quad (4.30)$$

und

$$L_0^N = \theta_N \omega + \mu_N \varrho_{N+1} g_\varphi = \theta_N \omega' + \mu_N \varrho_{N+1} g'_\varphi = L_0'^N. \quad (4.31)$$

Die Änderung der Translations- und Winkelgeschwindigkeit des TT bei einem einzelnen total inelastischen Stoß ist (vgl. (3.4), (3.16), (3.19))

$$\Delta u_z = -\frac{\mu(t)}{M(t)} \Delta g_z, \quad \Delta u_y = -\frac{\mu(t)}{M(t)} (\Delta g_\varrho \sin \varphi + \Delta g_\varphi \cos \varphi), \quad (4.32)$$

$$\Delta u_x = -\frac{\mu(t)}{M(t)} (\Delta g_\varrho \cos \varphi - \Delta g_\varphi \sin \varphi) \quad \text{und} \quad \Delta \omega = \frac{\eta(t)}{\theta(t)} \Delta \dot{\varphi}_r. \quad (4.33)$$

Die Computersimulation für ein total inelastisch wechselwirkendes TT für $\tau_a > 0$ verläuft nun folgendermaßen:

1. Mit (4.24) wird die zu der aktuellen Normalengeschwindigkeit u_z gehörige mittlere Stoßfrequenz $\tau(u_z)^{-1}$ ermittelt und der Zeitpunkt des nächsten Stoßes nach (3.45) ausgelost. Die Entscheidung über die getroffene (linke oder rechte) Seite des TT und den stattfindenden Prozeß (Adsorption oder Desorption) fällt nach dem Verhältnis der jeweiligen vier Einzelströme (4.24), d.h. der Adsorptions- und Desorptionsstrom auf die linke und rechte Seite des TT. Der Auftreffort des MT wird nach der Verteilung (3.43) ausgelost.
2. Wir nehmen an, daß alle im Adsorptionsvolumen auf der linken bzw. rechten Seite des TT befindlichen MT unabhängig voneinander mit der gleichen Wahrscheinlichkeit desorbieren. Welches der N_l bzw. N_r MT desorbiert wird jeweils gleichverteilt ausgelost.
3. Die Verteilungsfunktion der Normalkomponente der MT-Geschwindigkeit ergibt sich aus dem Adsorptionsstrom zur Oberfläche des TT (3.47). Die Tangentialkomponenten der MT-Geschwindigkeit sind einfach maxwellverteilt (3.46).
4. Die Relativgeschwindigkeiten g'_z, g'_ϱ und die Relativwinkelgeschwindigkeit $\dot{\varphi}'_r$ werden nach der entsprechenden MAXWELLverteilung (4.23) mit der *reduzierten stochastischen Masse* (4.28) und *Trägheitsmoment* (4.29) ausgelost.
5. Mit (4.32) und (4.33) wird die neue Geschwindigkeit und Winkelgeschwindigkeit des TT nach dem Stoß berechnet, anschließend beginnt der hier beschriebene Zyklus von vorn.

Kapitel 5

Systematische Beschleunigung und Reibungskoeffizienten – analytische Ergebnisse

5.1 Einleitung

Zur Beschreibung der BROWNSchen Bewegung liefert die LANGEVIN-Gleichung ([4] - [7])

$$\frac{du}{dt} = -\gamma u + \mathcal{A}(t) \quad (5.1)$$

eine geeignete Basis. Darin wird die von den umgebenden Medienteilchen ausgeübte Gesamtkraft in einen systematischen Anteil, gegeben durch die lineare Reibungskraft γu und in einen zeitabhängigen, fluktuierenden Anteil, die stochastische Kraft $\mathcal{A}(t)$, deren Mittelwert verschwindet, zerlegt. Um die LANGEVIN-Gleichung für eine konkrete Wechselwirkung (spiegelnd-elastische Reflexion, total diffus-elastische Reflexion und inelastische Wechselwirkung) und bestimmten Freiheitsgrad (Translation oder Rotation) des BROWNSchen Teilchens zu erhalten, ist ein entsprechender, expliziter Ausdruck für die Gesamtkraft (*systematische* und *stochastische Kraft*), mit der die Medienteilchen (MT) auf das BROWNSche Teilchen (BT) einwirken, anzugeben.

Für den Fall schwerer rotierender TT (BT) kann für unser einfaches Modell eine Methode nach HANDRICH [53] verwendet werden, um vier LANGEVIN-Gleichungen, für die Translationsfreiheitsgrade (mit $\gamma_x, \gamma_y, \gamma_z$ - linearer (STOKESScher) Reibungskoeffizient für die einzelnen Raumrichtungen) und den Rotationsfreiheitsgrad (mit γ_ω - linearer Reibungskoeffizient der Rotation), abzuleiten. Die Bedeutung dieser Methode besteht darin, daß für ein stark verdünntes Gas von MT (Mediengas) eine Ableitung der LANGEVIN-Gleichung für jeden der genannten Freiheitsgrade des BT gelingt, ohne ad hoc Annahmen bzgl. der Reibungskoeffizienten und der stochastischen Kraft machen zu müssen. Dies wurde in Ref. ([53] - [55]) für den Normalen-Freiheitsgrad (z -Richtung) eines spiegelnd-elastisch reflektierenden und total inelastisch wechselwirkenden BT gezeigt.

Weiterhin kann mittels eines expliziten Ausdrucks für die stochastische Kraft die Autokorrelation der stochastischen Beschleunigung für die Translationsfreiheitsgrade

$$\langle \mathcal{A}_i(t) \mathcal{A}_i(t + \tau) \rangle d\tau = 2 \frac{k_B T}{M} \gamma_i \delta(\tau) d\tau \text{ für } i = x, y, z \quad (5.2)$$

und den Rotationsfreiheitsgrad des TT

$$\langle \mathcal{A}_\omega(t) \mathcal{A}_\omega(t + \tau) \rangle d\tau = 2 \frac{k_B T}{\theta} \gamma_\omega \delta(\tau) d\tau \quad (5.3)$$

berechnet werden. Daraus folgt für BT *direkt* das Fluktuations-Dissipations-Theorem zweiter Art (FDT II).

Im Weiteren untersuchen wir die mittlere systematische Reibungskraft in Normalenrichtung, die wir auch für leichte TT angeben können. Genauer gesagt, wir betrachten die auf das TT wirkende systematische Beschleunigung, die sich aus den ständigen Stößen der MT ergibt. Integrieren wir die einzelnen Geschwindigkeitsänderungen (3.4) multipliziert mit der entsprechenden Wahrscheinlichkeit (3.42) für einen solchen Stoß pro Zeit über alle möglichen MT-Geschwindigkeiten \vec{v} , so lautet die *systematische* oder *mittlere Beschleunigung* eines TT in Normalenrichtung

$$\begin{aligned} \frac{du_z}{dt} |_{\mathcal{R}} &= \frac{du_z}{dt} |_{\mathcal{R}^l} + \frac{du_z}{dt} |_{\mathcal{R}^r} \quad (5.4) \\ &= n \int dA \int \int_{v_z > u_z} \Delta u_z (v_z - u_z) f_M(\vec{v}) d^3v \\ &\quad + n \int dA \int \int_{v_z < u_z} \Delta u_z (u_z - v_z) f_M(\vec{v}) d^3v. \end{aligned}$$

Die gesamte systematische Beschleunigung ist die Summe der jeweiligen Anteile auf der linken (Index l) und rechten (Index r) Seite des TT. Darüber hinaus kann man den jeweiligen Anteil zur systematischen Beschleunigung, z.B. der linken Seite des TT

$$\frac{du_z}{dt} |_{\mathcal{R}^l} = \frac{du_z}{dt} |_{\mathcal{R}^l}^a + \frac{du_z}{dt} |_{\mathcal{R}^l}^w, \quad (5.5)$$

in einen Beitrag der ankommenden/adsorbierten (Index a) und reflektierten (weggehenden)/desorbierten MT (Index w) zerlegen.

Ist weiterhin eine ausdrückliche Indizierung durch l/r bzw. a/w nicht gegeben, so ist jeweils der gesamte Beitrag zur systematischen Beschleunigung (5.5) des TT gemeint. Der Ausdruck (5.4) ist für die Beschreibung der systematischen Beschleunigung eines total inelastisch und total diffus-elastisch reflektierenden TT gültig [55]. Der Beitrag zur systematischen Beschleunigung des TT aufgrund der ankommenden MT (Index a) ist grundsätzlich unabhängig von der Art der Wechselwirkung.

Wir führen die dimensionslosen Geschwindigkeiten \vec{u}, \vec{v} , die dimensionslose Winkelgeschwindigkeit $\dot{\omega}$ und die reduzierte Zeitskala \dot{t} ein:

$$\vec{u} = \sqrt{\frac{M}{k_B T}} \vec{u}, \vec{v} = \sqrt{\frac{M}{k_B T}} \vec{v}, \dot{\omega} = \sqrt{\frac{\theta}{k_B T}} \omega \text{ und } \dot{t} = n A \sqrt{\frac{k_B T}{2\pi M}} t \quad (5.6)$$

Weiterhin werden in den Ausdrücken die Akzente weggelassen.

Die systematische Beschleunigung eines auf der linken Seite spiegelnd-elastisch reflektierenden TT lautet [55]:

$$\begin{aligned} \frac{du_z}{dt} |_{\mathcal{R}_e^l} &= \frac{du_z}{dt} |_{\mathcal{R}^l}^a + \frac{du_z}{dt} |_{\mathcal{R}_e^l}^w = 2 \frac{du_z}{dt} |_{\mathcal{R}^l}^a \quad (5.7) \\ &= \int \int_{g_z > 0} \int \Delta u_z g_z f(\vec{g}, \vec{u}) d^3 g \\ &= \frac{1}{2\pi} \frac{2\varepsilon^5}{1+\varepsilon^2} \int_0^\infty dg_z \int_{-\infty}^\infty dg_y \int_{-\infty}^\infty dg_x g_z^2 \exp\left(-\frac{\varepsilon^2(\vec{g} + \vec{u})}{2}\right) d^3 g \\ &= -\frac{2}{1+\varepsilon^2} \left\{ \varepsilon^2 u_z J_l(u_z) + \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left[\operatorname{erf}\left(\frac{\varepsilon u_z}{\sqrt{2}}\right) - 1 \right] \right\}, \end{aligned}$$

wobei $J_l(u_z)$ (3.42) der mittlere Strom von MT (in reduzierten Größen) auf die linke Seite des TT ist. Der Beitrag zur systematischen Beschleunigung in Normalenrichtung (z -Richtung) ist bei der spiegelnd-elastischen Reflexion (\mathcal{R}_e) für die ankommenden und reflektierten MT gleich groß ($g_z = g'_z$).

5.2 Reibungskoeffizient symmetrischer Testteilchen

In diesem Abschnitt leiten wir die lineare systematische Beschleunigung (Reibungskraft) in Normalenrichtung (z -Richtung) ab, aus der der lineare Reibungskoeffizient γ_z eines rotierenden, beidseitig total diffus-elastisch reflektierenden BT direkt folgt.

Da wir den Beitrag der ankommenden MT zur systematischen Beschleunigung (5.7) (auf beiden TT-Seiten) bereits kennen, benötigen wir nur noch den Beitrag der reflektierten MT auf der linken (rechten) Seite des TT. Mit (5.4), (5.5) und (3.43) folgt:

$$\frac{du_z}{dt} \Big|_{\mathcal{R}_{d(\kappa)}^l}^w = -\frac{1}{\pi R^2} \frac{\varepsilon^2}{1 + \varepsilon^2} \int_0^{2\pi} \int_0^R \varrho d\varrho d\varphi \int \int_{g_z > 0} g'_z g_z f(\vec{g}, \vec{u}) d^3g \quad (5.8)$$

Die zur Ableitung der systematischen Beschleunigung des TT notwendigen Integrationen sind nicht in geschlossener Form darstellbar.

Wir beschränken uns in diesem Abschnitt auf den linearen Reibungskoeffizienten. Aus diesem Grund entwickeln wir die Verteilungsfunktion $f(\vec{g}, \vec{u}) d^3g$ bis zur ersten Ordnung in \vec{u} (abgekürzt durch $\mathcal{O}(\vec{u}^1)$), stellen \vec{g} in Zylinderkoordinaten (3.11) dar und drücken g_φ mittels der Beziehung (3.17) durch ω und $\dot{\varphi}_r$ aus. Dabei sind die neuen Einheiten (5.6) zu beachten. Unter Verwendung von (3.22) - (3.26) kann die Verteilungsfunktion schließlich auf die Form

$$\begin{aligned} f(\vec{g}, \vec{u}) |^{\mathcal{O}(\vec{u}^1)} d^3g &\simeq \frac{\varepsilon^3}{2\pi} [1 - \varepsilon^2 u_z g_z - \varepsilon^2 u_y g_y - \varepsilon^2 u_x g_x] \exp\left(-\frac{\varepsilon^2 g^2}{2}\right) d^3g \quad (5.9) \\ &\simeq \frac{\varepsilon^3}{2\pi} [1 - \varepsilon^2 u_z g_z - \varepsilon^2 u_y (g_\varrho \sin \varphi + g_\varphi \cos \varphi) - \varepsilon^2 u_x (g_\varrho \cos \varphi - g_\varphi \sin \varphi)] \exp\left(-\frac{\varepsilon^2 g^2}{2}\right) d^3g \\ &\simeq \frac{\varepsilon^3}{2\pi} \{1 - \varepsilon^2 u_z h \cos \nu - \varepsilon^2 u_y [h \sin \nu \cos \psi \sin \varphi + \varrho \left(\sqrt{\xi} \frac{\omega}{R} - h_1 \sin \nu \sin \psi\right) \cos \varphi] \\ &\quad - \varepsilon^2 u_x [h \sin \nu \cos \psi \cos \varphi - \varrho \left(\sqrt{\xi} \frac{\omega}{R} - h_1 \sin \nu \sin \psi\right) \sin \varphi]\} \\ &\quad \times \exp\left(-\frac{\varepsilon^2 \mathcal{I}}{2}\right) \varrho h_1 h \sin \nu d\nu d\psi dh, \end{aligned}$$

mit der Abkürzung

$$\mathcal{I} = \xi \frac{\varrho^2}{R^2} \omega^2 - 2\sqrt{\xi} \frac{\varrho^2 h_1}{R} \omega \sin \nu \sin \psi + h^2 \left[1 + \left(\frac{\varrho^2 h_1^2}{h^2} - 1\right) \sin^2 \nu \sin^2 \psi\right] \quad (5.10)$$

gebracht werden. Der Parameter ξ kommt durch die inhomogene Massenverteilung bei dem TT (2.2) ins Spiel und die Halbachse $h_1(\varepsilon)$ ist proportional zu ϱ^{-1} .

Es lohnt sich diesen komplizierten, länglichen Ausdruck vollständig hinzuschreiben, enthält er doch im Argument der Exponentialfunktion (\mathcal{I}) quadratische Terme in ω , denen bei weiteren Diskussionen (Abschn. 5.4.2) eine wesentliche Rolle zukommt.

Zur Berechnung der linearen, systematischen Beschleunigung in Normalenrichtung ist die Verteilungsfunktion (5.9) zusätzlich bis zu Gliedern erster Ordnung in ω zu entwickeln. Wir verwenden in Gl. (5.9) den Ausdruck für g'_z nach Gl. (3.48). Da der Reflexionswinkel ν' bei jedem Stoß unabhängig ausgewürfelt wird, können wir den Mittelwert

$$\langle \cos \nu' \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} 2 \cos^2 \nu' \sin \nu' d\nu' d\psi' = \frac{2}{3} \quad (5.11)$$

entsprechend der Verteilung (3.40) benutzen. Verwendet man darüber hinaus den Ausdruck für h_1 (3.22), so folgt:

$$\frac{du_z}{dt} \Big|_{\mathcal{R}_{d(\kappa)}^{\text{w}, \mathcal{O}(\vec{u}, \omega)^1}} = \frac{2}{3\pi R^2} \frac{\varepsilon^2}{1+\varepsilon^2} \int_0^{2\pi} \int_0^R \varrho d\varrho d\varphi \quad (5.12)$$

$$\times \int_0^{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_0^\infty h^2 \cos \nu f(\vec{u}, \omega) \Big|_{\mathcal{O}(\vec{u}, \omega)^1} \sqrt{1 + \frac{\xi \varepsilon^2}{1+\varepsilon^2} \frac{\varrho^2}{R^2}} h^2 \sin \nu dh d\nu d\psi,$$

mit

$$f(\vec{u}, \omega) \Big|_{\mathcal{O}(\vec{u}, \omega)^1} \sqrt{1 + \frac{\xi \varepsilon^2}{1+\varepsilon^2} \frac{\varrho^2}{R^2}} h^2 \sin \nu dh d\nu d\psi = \frac{\varepsilon^3}{2\pi} [1 - \varepsilon^2 h u_z \cos \nu \quad (5.13)$$

$$- \varepsilon^2 h u_y \left(\sin \nu \cos \psi \sin \varphi - \sqrt{1 + \frac{\xi \varepsilon^2}{1+\varepsilon^2} \frac{\varrho^2}{R^2}} \sin \nu \sin \psi \cos \varphi \right)$$

$$- \varepsilon^2 h u_x \left(\sin \nu \cos \psi \cos \varphi + \sqrt{1 + \frac{\xi \varepsilon^2}{1+\varepsilon^2} \frac{\varrho^2}{R^2}} \sin \nu \sin \psi \sin \varphi \right) +$$

$$+ \sqrt{\xi} h \omega \frac{\varrho}{R} \sqrt{1 + \frac{\xi \varepsilon^2}{1+\varepsilon^2} \frac{\varrho^2}{R^2}} h \sin \nu \sin \psi] \times$$

$$\times \exp\left(-\frac{\varepsilon^2 h^2}{2} \left[1 + \frac{\xi \varepsilon^2}{1 + \varepsilon^2} \frac{\varrho^2}{R^2} \sin^2 \nu \sin^2 \psi\right]\right) \sqrt{1 + \frac{\xi \varepsilon^2}{1 + \varepsilon^2} \frac{\varrho^2}{R^2}} h^2 \sin \nu dh d\nu d\psi$$

Wir entwickeln (5.12) bis zu Gliedern erster Ordnung in ε . Wir merken an, daß die oben bereits vernachlässigten Terme (z.B. $\sim u_x \omega$) von zweiter Ordnung in ε sind. Bei der Integration über die Winkel φ und ψ verschwinden die in u_x , u_y und ω linearen Terme, d.h. die weggehenden/desorbierten MT liefern für diese Freiheitsgrade keinen Beitrag zur systematischen Beschleunigung. Wir führen die Integration über h (3.22), d.h. über die Energie der Relativbewegung, die durch die Relativgeschwindigkeiten der ankommenden Teilchen gegeben ist, aus. Wir erhalten für den Beitrag der weggehenden MT auf der linken Seite des TT

$$\frac{du_z}{dt} \Big|_{\mathcal{R}_{d(\kappa)}^l} \Big|_{\mathcal{O}(\vec{u}, \omega, \varepsilon)^1} = \frac{2}{3} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \left(3 \sqrt{\frac{\pi}{2}} - 8 \varepsilon u_z \cos \nu\right) \cos \nu \sin \nu d\nu. \quad (5.14)$$

Analog folgt der entsprechende Ausdruck für die rechte Seite

$$\frac{du_z}{dt} \Big|_{\mathcal{R}_{d(\kappa)}^r} \Big|_{\mathcal{O}(\vec{u}, \omega, \varepsilon)^1} = \frac{2}{3} \int_{\frac{\pi}{2}}^{\pi} \left(3 \sqrt{\frac{\pi}{2}} - 8 \varepsilon u_z \cos \nu\right) \cos \nu \sin \nu d\nu, \quad (5.15)$$

woraus für die gesamte systematische Beschleunigung

$$\begin{aligned} \frac{du_z}{dt} \Big|_{\mathcal{R}_{d(\kappa)}} \Big|_{\mathcal{O}(\vec{u}, \omega, \varepsilon)^1} &= \frac{du_z}{dt} \Big|_{\mathcal{R}_{d(\kappa)}^l} \Big|_{\mathcal{O}(\vec{u}, \omega, \varepsilon)^1} + \frac{du_z}{dt} \Big|_{\mathcal{R}_{d(\kappa)}^r} \Big|_{\mathcal{O}(\vec{u}, \omega, \varepsilon)^1} + \frac{du_z}{dt} \Big|_{\mathcal{R}} \Big|_{\mathcal{O}(u_z, \varepsilon)^1} \\ &= -\frac{32}{9} \varepsilon u_z - 4 \varepsilon u_z = -\frac{68}{9} \varepsilon u_z \end{aligned} \quad (5.16)$$

folgt. Aus (5.7) und (5.16) folgen die Ausdrücke für die linearen Reibungskoeffizienten (in nicht reduzierten Einheiten) eines spiegelnd-elastisch und total diffus-elastisch reflektierenden BT in Normalenrichtung (vgl. [53], [70])

$$\gamma_z^{\text{sp.-el.}} = 8 n A \sqrt{\frac{m}{M}} \sqrt{\frac{k_B T}{2\pi M}} = 2 n A \frac{m}{M} \langle v \rangle \quad (5.17)$$

und

$$\gamma_z^{\text{diff.-el.}} = \frac{68}{9} n A \sqrt{\frac{m}{M}} \sqrt{\frac{k_B T}{2\pi M}} = \frac{17}{9} n A \frac{m}{M} \langle v \rangle = \frac{17}{18} \gamma_z^{\text{sp.-el.}}. \quad (5.18)$$

Der Ausdruck für $\gamma_z^{\text{diff.-el.}}$ ist mit dem entsprechenden Ausdruck eines nichtrotierenden BT [56] identisch.

5.3 Systematische Winkelbeschleunigung

In diesem Abschnitt berechnen wir für die beiden TT-Modelle (Grundmodell und erweitertes Modell) die *systematische Winkelbeschleunigung* eines symmetrischen TT, aus der wir den *linearen Reibungskoeffizienten der Rotation* erhalten. Zunächst wird die total inelastische Wechselwirkung (totale Akkomodation) (Abschn. 2.2.3) betrachtet.

Im Abschnitt 4.1 wurde das erweiterte Modell für die inelastische Wechselwirkung im Fall $\tau_a \rightarrow 0$ behandelt, bei dem zusätzliche Rotationsfreiheitsgrade der MT gegenüber dem Grundmodell berücksichtigt werden. Bei dem erweiterten Modell ist die Änderung der Winkelgeschwindigkeit (4.21) von den jeweiligen Relativwinkelgeschwindigkeiten $\dot{\varphi}_r$ (3.17) und $\dot{\Phi}_r$ (4.13) abhängig. Diese Relativwinkelgeschwindigkeiten genügen nach der Desorption, infolge der totalen Akkomodation, der MAXWELLverteilung (4.23). Ihr Mittelwert

$$\langle \dot{\varphi}'_r \rangle = 0 \text{ und } \langle \dot{\Phi}'_r \rangle = 0 \quad (5.19)$$

verschwindet daher.

Auch im Fall der total diffus-elastischen Reflexion (Abschn. 2.2.2) liefern die reflektierten MT wegen der isotropen Reflexionswinkelverteilung (3.40) keinen Beitrag zur systematischen Beschleunigung des Rotationsfreiheitsgrades. Ausschließlich der Strom der adsorbierten (reflektierten) MT trägt zur systematischen Winkelbeschleunigung des TT bei. Daher ist es nur erforderlich den Beitrag (4.21)

$$\begin{aligned} \Delta^{(a)}\omega &= -\frac{\eta}{\theta} \dot{\varphi}_r - (1 - F) \dot{\Phi}_r \\ &= -\frac{\eta}{\theta} \left(\omega - \frac{g_\varphi}{\varrho} \right) - (1 - F) \left(\Omega - \tilde{\Phi} \right) \end{aligned} \quad (5.20)$$

in der systematischen Winkelbeschleunigung zu berücksichtigen.

Wir führen neben den dimensionslosen Größen (5.6) die dimensionslose Winkelgeschwindigkeit $\dot{\Omega}$ der MT ein

$$\dot{\Omega} = \sqrt{\frac{\Theta}{k_B T}} \Omega \quad (5.21)$$

und lassen wiederum den Akzent weg.

In Analogie zu (5.4) berechnen wir den Beitrag zur systematischen Winkelbeschleunigung auf der linken Seite des TT

$$\begin{aligned}
 \frac{d\omega}{dt} \Big|_{\mathcal{R}'_{a(\kappa,\lambda)}} &= \frac{1}{A} \int dA \int \int_{v_z > u_z} \int \Delta^{(a)\omega} (v_z - u_z) f_M(\vec{v}, \Omega) d^3v d\Omega \quad (5.22) \\
 &= -\frac{2\varepsilon^3}{(2\pi)^{\frac{5}{2}} R^2} \int_0^{2\pi} \int_0^R \varrho d\varrho d\varphi \int_{u_z}^{\infty} (v_z - u_z) \exp\left(-\frac{\varepsilon^2 v_z^2}{2}\right) dv_z \\
 &\quad \times \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{\eta}{\theta} \left(\omega - \frac{g_\varphi}{\varrho} \right) + (1 - F) \left(\Omega - \tilde{\Phi} \right) \right] \\
 &\quad \times \exp\left(-\frac{\varepsilon^2 (v_x^2 + v_y^2) + \Omega^2}{2}\right) dv_x dv_y d\Omega.
 \end{aligned}$$

Wir setzen g_φ (3.12) und $\tilde{\Phi}$ (4.9) in Gl. (5.22) ein und integrieren über alle Auftreffwinkel φ

$$\begin{aligned}
 \frac{d\omega}{dt} \Big|_{\mathcal{R}'_{a(\kappa,\lambda)}} &= -\frac{2\varepsilon^3}{(2\pi)^{\frac{3}{2}} R^2} \int_{u_z}^{\infty} (v_z - u_z) \exp\left(-\frac{\varepsilon^2 v_z^2}{2}\right) dv_z \quad (5.23) \\
 &\quad \times \int_0^R \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\varrho}{1 + \frac{\kappa \varrho^2}{R^2}} \left\{ \frac{\kappa \varrho^2}{R^2} \omega + \frac{\lambda^2}{1 + \lambda^2 + \frac{\kappa \varrho^2}{R^2}} \left[\omega - \Omega \left(1 + \frac{\kappa \varrho^2}{R^2} \right) \right] \right\} \\
 &\quad \times \exp\left(-\frac{\varepsilon^2 (v_x^2 + v_y^2) + \Omega^2}{2}\right) dv_x dv_y d\Omega d\varrho.
 \end{aligned}$$

Der zu Ω proportionale Term verschwindet bei der Integration. Nach Integration über v_x , v_y und Ω folgt

$$\frac{d\omega}{dt} \Big|_{\mathcal{R}'_{a(\kappa,\lambda)}} = -\frac{2\omega}{R^2} \int_{u_z}^{\infty} \varepsilon (v_z - u_z) \exp\left(-\frac{\varepsilon^2 v_z^2}{2}\right) dv_z \int_0^R \varrho \frac{\lambda^2 + \kappa \frac{\varrho^2}{R^2}}{1 + \lambda^2 + \kappa \frac{\varrho^2}{R^2}} d\varrho. \quad (5.24)$$

Das Integral über v_z ergibt den mittleren Strom $J_l(u_z)$ (3.42) (in reduzierten Größen). Für die systematische Winkelbeschleunigung auf der rechten Seite des TT gilt ein analoger Ausdruck, nur daß $J_l(u_z)$ durch $J_r(u_z)$ ersetzt wird.

Berücksichtigt man beide TT-Seiten, so ergibt sich für die gesamte systematische Winkelbeschleunigung

$$\frac{d\omega}{dt}\bigg|_{\mathcal{R}_{a(\kappa,\lambda)}} = - \left[1 + \frac{\log\left(\frac{1+\lambda^2}{1+\kappa+\lambda^2}\right)}{\kappa} \right] J(u_z) \omega, \quad (5.25)$$

mit $J(u_z) = J_r(u_z) + J_l(u_z)$ als mittlerer Gesamtstrom.

Falls das Trägheitsmoment der MT gegenüber dem der TT (4.22) vernachlässigbar ist ($\lambda \rightarrow 0$) geht die systematische Winkelbeschleunigung für das erweiterte Modell (5.25) in den entsprechenden Ausdruck für das Grundmodell über:

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{d\omega}{dt}\bigg|_{\mathcal{R}_{a(\kappa,\lambda)}} = \frac{d\omega}{dt}\bigg|_{\mathcal{R}_{a(\kappa)}} = - \left[1 + \frac{\log\left(\frac{1}{1+\kappa}\right)}{\kappa} \right] J(u_z) \omega \quad (5.26)$$

Ist das Trägheitsmoment des TT unendlich groß ($\kappa \rightarrow 0$), so folgt aus Gl. (5.25) und (5.26):

$$\lim_{\kappa \rightarrow 0} \frac{d\omega}{dt}\bigg|_{\mathcal{R}_{a(\kappa,\lambda)}} = -\frac{\lambda^2}{1+\lambda^2} J(u_z) \omega \quad \text{und} \quad \lim_{\kappa \rightarrow 0} \frac{d\omega}{dt}\bigg|_{\mathcal{R}_{a(\kappa)}} = 0 \quad (5.27)$$

Die systematische Winkelbeschleunigung des TT für das Grundmodell verschwindet erwartungsgemäß. Dies entspricht dem Fall eines "nichtrotierenden" TT ([53], [55], [56], vgl. (3.28)). Anders verhält es sich, wenn man zusätzliche Rotationsfreiheitsgrade der MT (erweitertes Modell) berücksichtigt. Für diesen Fall wird eine Anfangswinkelgeschwindigkeit der TT, je nach dem Verhältnis der Trägheitsmomente von MT zu TT (4.22), von der maxwellverteilten MT-Winkelgeschwindigkeit zusätzlich abgebaut.

Für das Verhältnis V_{RR} der Reibungskoeffizienten der Rotation für das erweiterte Modell und Grundmodell (Abb. 5.1a), das offensichtlich unabhängig von den mittleren Strom $J(u_z)$ der auftretenden MT ist, folgt mit (5.25), (5.26) für die Parameter $\xi = 2$, $R = r = 1$:

$$V_{RR} = \frac{1 + \frac{\log\left(\frac{1+\lambda^2}{1+\kappa+\lambda^2}\right)}{\kappa}}{1 + \frac{\log\left(\frac{1}{1+\kappa}\right)}{\kappa}} = \frac{2 + (1 + \varepsilon^{-2}) \ln\left(1 - \frac{10\varepsilon^{-2}}{4 + \varepsilon^{-2}(19 + 5\varepsilon^{-2})}\right)}{2 + (1 + \varepsilon^{-2}) \ln\left(\frac{1 + \varepsilon^{-2}}{3 + \varepsilon^{-2}}\right)} \quad (5.28)$$

Wir entwickeln Gl. (5.25) und (5.26) zusätzlich bis zu Termen erster Ordnung in \vec{u} , ω und ε . Die linearen Reibungskoeffizienten der Rotation eines BT ([81] - [84], [11]) für die genannten TT-Modelle und den oben angegebenen Parametern lauten in nicht reduzierten Einheiten:

$$\gamma_\omega|^{4\text{-dim.}} = \frac{9}{10} n A \frac{m}{M} \langle v \rangle \quad \text{und} \quad \gamma_\omega|^{3\text{-dim.}} = \frac{1}{2} n A \frac{m}{M} \langle v \rangle \quad (5.29)$$

Für das Verhältnis der beiden linearen Reibungskoeffizienten der Rotation (mit und ohne Berücksichtigung von Rotationsfreiheitsgraden der MT) ergibt sich der analytische Wert $\frac{9}{5}$ (vgl. (5.28)). Bei einer inhomogenen Massenverteilung bei dem BT ist $\gamma_\omega \equiv \gamma_\omega|^{3\text{-dim.}}$ proportional zu ξ .

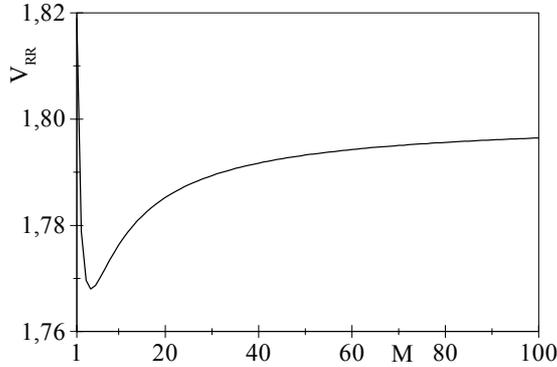


Abbildung 5.1a: Verhältnis V_{RR} nach Gl. (5.28) (siehe Text) für verschiedene M ($m = 1$).

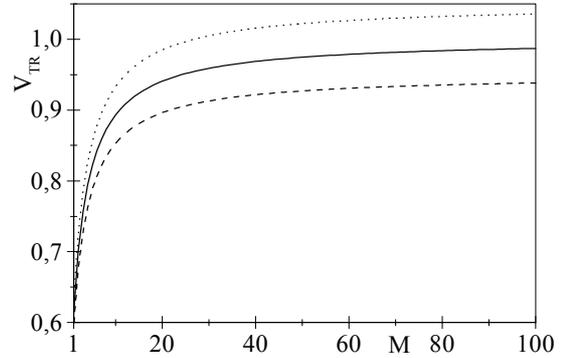


Abbildung 5.1b: Verhältnis V_{TR} nach Gl. (5.33) (siehe Text) für verschiedene M ($m = 1$) und ξ : gestrichelte Kurve: $\xi = 1.9$; durchgezogene Kurve: $\xi = 2$; gepunktete Kurve: $\xi = 2.1$.

Im Rahmen des Grundmodells (Kap. 2) betrachten wir nun kurz ein rotierendes, beidseitig total diffus-elastisch reflektierendes TT. Aus den bereits genannten Gründen ergibt sich ein vollkommen äquivalenter, analytischer Ausdruck für die systematische Winkelbeschleunigung, wie für den eines total inelastisch wechselwirkenden TT (5.26). Wir weisen lediglich darauf hin, daß für das erweiterte Modell ebenfalls eine Behandlung total diffus-elastisch reflektierender TT durch die Einführung einer adäquaten Haftreibungsbedingung möglich ist.

Zum Vergleich mit Gl. (5.26) schreiben wir die systematische Beschleunigung

$$\frac{du_i}{dt} \Big|_{\mathcal{R}_{a(\kappa)}} = -\frac{\varepsilon^2}{1 + \varepsilon^2} J(u_z) u_i \text{ für } i = x, y \quad (5.30)$$

in tangentialer Richtung auf. Der entsprechende lineare Reibungskoeffizient eines BT (in nichtreduzierte Einheiten) lautet [56]:

$$\gamma_i = \frac{1}{2} n A \frac{m}{M} \langle v \rangle \text{ für } i = x, y \quad (5.31)$$

Die linearen Reibungskoeffizienten in tangentialer Richtung und der Rotation (5.29) für ein homogenes BT ($\xi = 2$) stimmen überein

$$\gamma_x = \gamma_y = \gamma_\omega. \quad (5.32)$$

Für das Verhältnis zwischen den Reibungskoeffizienten der Rotation und den in tangentialer Richtung (der zu ω bzw. $u_{x/y}$ proportionale Term) ergibt sich allgemein (bei beliebigem Massenverhältnis):

$$V_{TR} = \frac{1 + \frac{\log\left(\frac{1}{1+\kappa}\right)}{\kappa}}{\frac{\varepsilon^2}{1+\varepsilon^2}} = (1 + \varepsilon^{-2}) \left[1 + \frac{(1 + \varepsilon^{-2})}{\xi} \ln \left(\frac{1 + \varepsilon^{-2}}{1 + \varepsilon^{-2} + \xi} \right) \right] \quad (5.33)$$

Dieser Quotient ist für verschiedene M ($m = 1$) und ξ in Abb. 5.1b aufgetragen. Der Wert für V_{TR} nimmt mit zunehmender Masse des TT zu und konvergiert gegen den Wert $\frac{\xi}{2}$. Für den Fall sehr leichter ($\varepsilon \gg 1$) inhomogener TT gilt nach (5.31) und (5.28):

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow \infty} V_{TR} = \lim_{\varepsilon \rightarrow \infty} V_{RR}^{-1} = 1 + \frac{\log\left(\frac{1}{1+\xi}\right)}{\xi} \quad (5.34)$$

5.4 Reibungskoeffizienten asymmetrischer Testteilchen

In diesem Abschnitt betrachten wir speziell *asymmetrische Testteilchen*, bei denen die linke Seite spiegelnd-elastisch und die rechte Seite total diffus-elastisch reflektiert. Wir untersuchen die *nichtlineare systematische Beschleunigung* bis zu Termen zweiter Ordnung in \vec{v} , ω und ε .

Bei asymmetrischen, *nichtrotierenden Testteilchen mit tensorieller Masse*, speziell bei einer unendlich großen tangentialen Masse (s. Abschn. 2.1), muß lediglich die eindimensionale Bewegung in Normalenrichtung (z -Richtung) betrachtet werden. Die analytische Behandlung vereinfacht sich dadurch erheblich und liefert neue Einsichten, die insbesondere für das Verständnis der Bewegung *rotierender, asymmetrischer Testteilchen* von Vorteil sind.

Eine detaillierte Diskussion der Ergebnisse dieses Abschnittes und der Vergleich mit entsprechenden Resultaten der Computersimulation wird im Abschnitt 6.3 gegeben. Wir merken im voraus an, daß im Abschnitt 8.2 eine analytische Näherungslösung für die mittlere Geschwindigkeit verschieden beschaffener, asymmetrischer Testteilchen angegeben wird.

5.4.1 Testteilchen mit tensorieller Masse

Im Folgenden betrachten wir ein total diffus-elastisch reflektierendes Testteilchen mit tensorieller Masse. Die Masse des Testteilchens in Normalenrichtung, bezeichnen wir mit M_n und in tangentialer Richtung mit M_t . Der Rotationsfreiheitsgrad des Testteilchens wird bei diesem formalen Modell nicht berücksichtigt.

Die Energieerhaltung für die Relativbewegung des Test- (TT) und Medienteilchens (MT) [57] führt wiederum auf die Gleichung eines Rotationsellipsoids (Abb. 3.2) für die Relativgeschwindigkeiten

$$\frac{g_z^2}{b^2} + \frac{g_y^2 + g_x^2}{b_1^2} = \frac{g'_z{}^2}{b^2} + \frac{g'_y{}^2 + g'_x{}^2}{b_1^2} = 1, \quad (5.35)$$

mit den Halbachsen

$$b = \sqrt{2\tilde{E} (1 + \varepsilon_n^2)} \quad \text{und} \quad b_1 = \sqrt{2\tilde{E} (1 + \varepsilon_t^2)} = b \sqrt{1 - \sigma}, \quad (5.36)$$

sowie den Parametern

$$\sigma = \frac{\varepsilon_n^2 - \varepsilon_t^2}{1 + \varepsilon_n^2}, \quad \varepsilon_n = \sqrt{\frac{m}{M_n}} \quad \text{und} \quad \varepsilon_t = \sqrt{\frac{m}{M_t}}. \quad (5.37)$$

\tilde{E} ist wiederum die Energie der Relativbewegung (vgl. (3.20)).

Die Komponenten der Relativgeschwindigkeit stellen wir ebenfalls (vgl. (3.24) - (3.26)) mittels verallgemeinerter Kugelkoordinaten

$$g'_z = b \cos \nu', \quad (5.38)$$

$$g'_y = b_1 \sin \nu' \cos \psi' \quad (5.39)$$

und

$$g'_x = b_1 \sin \nu' \sin \psi' \quad (5.40)$$

dar.

Die Form des Rotationsellipsoids ist durch die Halbachsen b und b_1 (5.36) und damit durch den Parameter σ (5.37) eindeutig bestimmt. σ ist ein Maß für die Abweichung der tensoriellen von der skalaren Masse. Wir verwenden weiterhin die Abkürzung $\mathcal{R}_{d(\sigma)}$ für die total diffus-elastische Reflexion tensorieller TT. Wir betonen, daß die Gleichung des Rotationsellipsoids (5.35) zu Gl. (3.21), die ein rotierendes TT beschreibt, ähnlich ist.

Die Variation des Parameters σ , je nach Wahl von ε_n und ε_t , liefert die folgenden Fälle für die Halbachsen b und b_1 :

$$\text{Für } \varepsilon_t > \varepsilon_n \text{ ist } \sigma < 0, \text{ so daß } b_1 > b \text{ folgt.} \quad (5.41)$$

Die Flächen konstanter Energie (der Relativbewegung) haben wie bei $\mathcal{R}_{d(x)}$ ebenfalls die Form eines zusammengedrückten Rotationsellipsoids (vgl. Abb. 3.2), während die Parameterwahl

$$\varepsilon_t = \varepsilon_n \text{ oder } \sigma = 0 \text{ den Fall } b = b_1 \text{ liefert.} \quad (5.42)$$

Dagegen ergibt sich für

$$0 \leq \varepsilon_t < \varepsilon_n \text{ oder } 0 < \sigma < 1, \text{ d.h. } b_1 < b, \quad (5.43)$$

ein langgestrecktes Rotationsellipsoid. Diese Unterteilung dient dazu, die Bedeutung des Verhältnisses der Halbachsen zueinander hervorzuheben, die insbesondere bei der Bewegung asymmetrischer TT eine wichtige Rolle spielen.

Die genannten Fälle können folgendermaßen zusammengefaßt werden: Sind alle Halbachsen gleich ($\sigma = 0$), so liefert dies den Fall $\mathcal{R}_{d(3)}$ (vgl. S. 17), bei dem der Betrag der Relativgeschwindigkeit bei dem total diffus-elastischen Stoß erhalten $g = b = b_1 = g'$ bleibt [56]. Für $\sigma \neq 0$, d.h. $b \neq b_1$ ist im Allgemeinen $g \neq g'$. Unmittelbare Folge ist die Existenz eines geschwindigkeitsunabhängigen Anteils in der systematischen Beschleunigung eines asymmetrischen TT, dessen Vorzeichen durch $\sigma \neq 0$ eindeutig bestimmt ist.

Wir berücksichtigen nun in der Entwicklung der Verteilungsfunktion (5.9) Terme bis zur zweiten Ordnung in \vec{u} :

$$f(\vec{g}, \vec{u})|_{\mathcal{O}(\vec{u})^2} d^3g = \frac{\varepsilon^3}{2\pi} [1 - \varepsilon^2 u_z g_z - \varepsilon^2 u_y g_y - \varepsilon^2 u_x g_x] \quad (5.44)$$

$$+ \frac{1}{2} \{ (\varepsilon^2 g_z^2 - 1) \varepsilon^2 u_z^2 + (\varepsilon^2 g_y^2 - 1) \varepsilon^2 u_y^2 + (\varepsilon^2 g_x^2 - 1) \varepsilon^2 u_x^2 \}$$

$$+ \varepsilon^4 (g_z u_z (g_x u_x + g_y u_y) + g_y g_x u_y u_x) \exp\left(-\frac{\varepsilon^2 g^2}{2}\right) d^3g$$

Für TT mit tensorieller Masse verwenden wir die neuen dimensionslosen Geschwindigkeiten

$$u_z^* = \sqrt{\frac{M_n}{k_B T}} u_z, \quad u_y^* = \sqrt{\frac{M_t}{k_B T}} u_y \quad \text{und} \quad u_x^* = \sqrt{\frac{M_t}{k_B T}} u_x \quad (5.45)$$

und lassen weiterhin die Sterne weg. In allen Rechnungen ist jeweils die reduzierte Zeitskala (5.6) mit $\varepsilon_n = \varepsilon$ gemeint.

Der Beitrag der reflektierten MT zur systematischen Beschleunigung (5.5) auf der rechten (total diffus-elastisch reflektierenden) Seite des TT lautet:

$$\frac{du_z}{dt} \Big|_{\mathcal{R}_{d(\sigma)}^r} \Big|_{\mathcal{O}(\vec{u})^2} = -\frac{\varepsilon_n^2}{1 + \varepsilon_n^2} \int_{g_z < 0} \int \int g'_z g_z f(\vec{g}, \vec{u})|_{\mathcal{O}(\vec{u})^2} d^3g \quad (5.46)$$

Die Verwendung von (5.38) – (5.40) und Integration über ψ führt auf

$$\frac{du_z}{dt} \Big|_{\mathcal{R}_{d(\sigma)}^r} \Big|_{\mathcal{O}(\vec{u})^2} = \frac{2}{3} \frac{\varepsilon_n^5}{1 + \varepsilon_n^2} (1 - \sigma) \int_0^\infty db \int_{\frac{\pi}{2}}^\pi d\nu \sin \nu \cos \nu \quad (5.47)$$

$$\times b^4 \exp\left(-\frac{\varepsilon_n^2 b^2 (1 - \sigma \sin^2 \nu)}{2}\right) \times \left\{ 1 - \varepsilon_n^2 u_z b \cos \nu + \frac{1}{2} [\varepsilon_n^2 u_z^2 (\varepsilon_n^2 b^2 \cos^2 \nu - 1) \right.$$

$$\left. + (\varepsilon_n^2 - (1 + \varepsilon_n^2) \sigma) (u_x^2 + u_y^2) \left(\frac{1}{2} \varepsilon_n^2 b^2 (1 - \sigma) \sin^2 \nu - 1\right) \right\},$$

wobei ε_t (5.37) durch σ und ε_n ausgedrückt wurde. Die in u_x und u_y linearen Terme verschwinden bei der Integration über ψ . Der Beitrag zur systematischen Beschleunigung der linken, spiegelnd-elastisch reflektierenden Seite des TT ist durch Gl. (5.7) gegeben. Auch der Beitrag der ankommenden MT auf der total diffus-elastisch reflektierenden Seite des TT folgt aus (5.7).

Reibungsk.	$\mathcal{R}_e^l/\mathcal{R}_{d(\sigma)}^r$
γ_z	$\frac{2}{3} \frac{\varepsilon_n}{1+\varepsilon_n^2} \left(11 + \frac{\arctan\left(\sqrt{\frac{\sigma}{1-\sigma}}\right)}{\sigma^{\frac{3}{2}} \sqrt{1-\sigma}} - \frac{1}{\sigma} \right)$
α	$\frac{\sqrt{2\pi} \left(\frac{1}{\sigma} \left[1 - \frac{1}{\sqrt{1-\sigma}} \right] + \frac{1}{2} \right)}{3(1+\varepsilon_n^2)}$
β_n	$\frac{\sqrt{2\pi} \varepsilon_n^2 \left(\frac{1}{\sigma^2} \left(1 - \frac{2-\sigma}{2\sqrt{1-\sigma}} \right) + \frac{1}{2} \right)}{3(1+\varepsilon_n^2)}$
β_t	$\frac{\sqrt{2\pi} \left(\frac{2-3\sigma}{\sqrt{1-\sigma}} + 2(\sigma-1) \right) (\varepsilon_n^2(\sigma-1) + \sigma)}{6\sigma^2(1+\varepsilon_n^2)}$

Tabelle 5.1: Analytische Reibungskoeffizienten γ_z , α , β_n und β_t der systematischen Beschleunigung (5.48) für ein asymmetrisches (linke Seite spiegelnd-elastisch reflektierend, rechte Seite total diffus-elastisch reflektierend) TT mit tensorieller Masse, abgekürzt durch $\mathcal{R}_e^l/\mathcal{R}_{d(\sigma)}^r$.

Der Beitrag (5.47), nach Integration über b und ν und die zuvor genannten Beiträge (bis zu Termen der Ordnung $\mathcal{O}(u_z)^2$) liefern schließlich für die gesamte systematische Beschleunigung in Normalenrichtung

$$\begin{aligned} \frac{du_z}{dt} \Big|_{\mathcal{R}_e^l/\mathcal{R}_{d(\sigma)}^r}^{\mathcal{O}(\vec{u})^2} &= \frac{du_z}{dt} \Big|_{\mathcal{R}_{d(\sigma)}^r}^{\text{w.}\mathcal{O}(\vec{u})^2} + \frac{du_z}{dt} \Big|_{\mathcal{R}_e^l}^{\mathcal{O}(u_z)^2} + \frac{du_z}{dt} \Big|_{\mathcal{R}^r}^{\text{a.}\mathcal{O}(u_z)^2} \\ &= \alpha(\varepsilon_n, \sigma) - \gamma_z(\varepsilon_n, \sigma) u_z + \beta_n(\varepsilon_n, \sigma) u_z^2 - \beta_t(\varepsilon_n, \sigma) \left(\frac{u_x^2 + u_y^2}{2} \right), \end{aligned} \quad (5.48)$$

die sowohl von einem geschwindigkeitsunabhängigen (*konstanten*) Anteil als auch von Termen zweiter Ordnung in \vec{u} abhängt. Die Reibungskoeffizienten des asymmetrischen TT γ_z , α , β_n und β_t sind in Tabelle 5.1 wiedergegeben.

Wir untersuchen den konstanten Anteil α der systematischen Beschleunigung für drei Spezialfälle genauer: Ist die Masse des TT in tangentialer Richtung sehr klein, so ergibt sich:

$$\alpha(\varepsilon_n, \sigma) = \frac{\sqrt{2\pi} \left(\frac{1}{\sigma} \left[1 - \frac{1}{\sqrt{1-\sigma}} \right] + \frac{1}{2} \right)}{3(1+\varepsilon_n^2)} = \frac{\sqrt{2\pi}}{6(1+\varepsilon_n^2)} \text{ für } -\sigma \gg 1 \quad (5.49)$$

Für den Fall einer skalaren Masse ($\sigma = 0$) verschwindet α :

$$\lim_{\sigma \rightarrow 0} \alpha(\varepsilon_n, \sigma) = \lim_{\sigma \rightarrow 0} \left(-\frac{\sqrt{2\pi} \sigma}{8(1+\varepsilon_n^2)} + \mathcal{O}(\sigma)^2 \right) = 0 \quad (5.50)$$

Für den Fall $0 < \sigma < 1$, speziell für TT mit einer unendlich großen tangentialen Masse $\varepsilon_t \rightarrow 0$, folgt:

$$\lim_{\sigma \rightarrow \varepsilon_n^2} \alpha(\varepsilon_n, \sigma) \simeq -\frac{\sqrt{2\pi}}{8} \varepsilon_n^2 + \mathcal{O}(\varepsilon_n)^4 \quad (5.51)$$

Demnach besteht je nach Wahl von ε_n und ε_t der Zusammenhang

$$\begin{aligned} \alpha(\varepsilon_n, \sigma) &> 0 \text{ für } \sigma < 0 \text{ oder } b_1 > b \\ &= 0 \text{ für } \sigma = 0 \text{ oder } b_1 = b \\ &< 0 \text{ für } 0 < \sigma < 1 \text{ oder } b_1 < b \end{aligned} \quad (5.52)$$

zwischen dem Verhältnis der Halbachsen $b_1(\sigma)$ und b , der Form des Rotationsellipsoids (5.41) - (5.43), sowie dem Vorzeichen von α .

Wir entwickeln Gl. (5.48) zusätzlich bis zu Termen ersten Ordnung in σ und erhalten

$$\begin{aligned} \frac{du_z}{dt} \Big|_{\mathcal{R}_e^l/\mathcal{R}_{d(\sigma)}^r}^{\mathcal{O}(\vec{u})^2, \mathcal{O}(\sigma)^1} &= -\frac{\varepsilon_n}{1 + \varepsilon_n^2} \left(\frac{70}{9} + \frac{16\sigma}{45} \right) u_z \\ &+ \frac{\sqrt{2\pi}}{8} \frac{\varepsilon_n^2}{1 + \varepsilon_n^2} \left(u_z^2 \left[1 - \frac{\sigma}{3} \right] - \frac{u_x^2 + u_y^2}{2} \left[1 - \frac{\sigma}{\varepsilon_n^2} - \frac{\sigma}{3} \right] - \frac{\sigma}{\varepsilon_n^2} \right). \end{aligned} \quad (5.53)$$

Für den speziellen Fall $\vec{u} = 0$ erfährt das asymmetrische TT für $\sigma < 0$ (5.41) eine systematische Beschleunigung nach rechts (in positiver z -Richtung). Mit anderen Worten: die spiegelnd-elastisch reflektierende Seite liefert im Mittel einen größeren Beitrag zur Beschleunigung des TT (die spiegelnd-elastisch reflektierende Seite "schiebt"). Die umgekehrte Situation ergibt sich dagegen für den Fall $0 < \sigma < 1$ (5.43). In diesem Fall verursachen die Wechselwirkungen auf der total diffus-elastisch reflektierenden Seite eine betragsmäßig größere Geschwindigkeitsänderung des TT.

Der Fall $\sigma = 0$ (5.42) und $\varepsilon = \varepsilon_n < 1$ liefert die systematische Beschleunigung eines nichtrotierenden, asymmetrischen TT ($\mathcal{R}_e^l/\mathcal{R}_{d(3)}^r$) bis zu Termen zweiter Ordnung [56]

$$\frac{du_z}{dt} \Big|_{\mathcal{R}_e^l/\mathcal{R}_{d(3)}^r}^{\mathcal{O}(\vec{u}, \varepsilon)^2} = -\gamma_z^{\text{asym.}} u_z + \beta_n \left(u_z^2 - \frac{u_x^2 + u_y^2}{2} \right), \quad (5.54)$$

wobei

$$\gamma_z^{\text{asym.}} = \frac{70}{9} \varepsilon \text{ und } \beta_n = \frac{\sqrt{2\pi} \varepsilon^2}{8} \quad (5.55)$$

ist. $\gamma_z^{\text{asym.}}$ ist der lineare Reibungskoeffizient des asymmetrischen BT.

5.4.2 Rotierende Testteilchen

In diesem Abschnitt wird die *nichtlineare systematische Beschleunigung* eines *rotierenden, asymmetrischen TT* in Normalenrichtung bis zu Termen zweiter Ordnung in \vec{u} , ω und ε abgeleitet.

Für die folgenden Berechnungen verwenden wir das Programmpaket "SysB" [85] in der Programmiersprache "Mathematica" [75]. Mit diesem Programm kann die systematische Beschleunigung (5.4) verschieden beschaffener TT bis zu Termen beliebiger Ordnung in \vec{u} , ε und ω symbolisch berechnet werden.

Wir betrachten erneut den Beitrag der reflektierten MT zur systematischen Beschleunigung auf der rechten Seite eines rotierenden, asymmetrischen TT. Mit (5.4), (5.5) und (3.43) folgt

$$\frac{du_z}{dt} \Big|_{\mathcal{R}_{d(\kappa)}^r}^{\mathcal{O}(\vec{u})^2} = -\frac{\varepsilon^2}{1+\varepsilon^2} \frac{1}{\pi R^2} \int_0^{2\pi} \int_0^R \varrho d\varrho d\varphi \int_{g_z < 0} \int g'_z g_z f(\vec{g}, \vec{u}) \Big|_{\mathcal{O}(\vec{u})^2} d^3g, \quad (5.56)$$

mit der Verteilungsfunktion (5.44).

Zur Berechnung dieses Ausdrucks gehen wir wie im Abschnitt 5.2 vor. Zunächst stellen wir die Relativgeschwindigkeit \vec{g} in (5.44) in Zylinderkoordinaten (3.11) dar und transformieren dann mit (3.17) auf $\dot{\varphi}_r$ und ω . Wir stellen g_z , g_ϱ und $\dot{\varphi}_r$ in verallgemeinerte Kugelkoordinaten (3.24) - (3.26) dar und entwickeln die Verteilungsfunktion zusätzlich bis zu Gliedern zweiter Ordnung in ω .

Aus (5.56), (3.48) folgt für den o.g. Beitrag (vgl. (5.12))

$$\begin{aligned} \frac{du_z}{dt} \Big|_{\mathcal{R}_{d(\kappa)}^r}^{\mathcal{O}(\vec{u}, \omega)^2} &= \frac{2}{3\pi R^2} \frac{\varepsilon^2}{1+\varepsilon^2} \int_0^{2\pi} \int_0^R \varrho d\varrho d\varphi \\ &\times \int_0^{2\pi} \int_{\frac{\pi}{2}}^{\pi} \int_0^\infty h^2 \cos \nu f(\vec{u}, \omega) \Big|_{\mathcal{O}(\vec{u}, \omega)^2} \varrho h_1 h \sin \nu dh d\nu d\psi. \end{aligned} \quad (5.57)$$

Dieser Ausdruck ist außerdem bis zu Gliedern zweiter Ordnung in ε zu entwickeln. Aus Gründen der Übersichtlichkeit verzichten wir hier jedoch auf die Darstellung des länglichen Ausdrucks für die Verteilungsfunktion.

Die Integration über alle Flächenelemente auf der rechten TT-Oberfläche liefert:

$$\frac{du_z}{dt} \Big|_{\mathcal{R}_{d(\kappa)}^r}^{\mathcal{O}(\vec{u}, \omega, \varepsilon)^2} = \frac{2}{3} \frac{\varepsilon^5}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\psi \int_{\frac{\pi}{2}}^{\pi} d\nu \int_0^\infty dh h^4 \sin \nu \cos \nu \exp\left(-\frac{\varepsilon^2 h^2}{2}\right) \quad (5.58)$$

$$\begin{aligned} & \times \left\{ 1 - \varepsilon^2 h \cos \nu u_z + \frac{1}{2} \left[(\varepsilon^2 h^2 \cos^2 \nu - 1) \varepsilon^2 u_z^2 + \left(\frac{1}{2} \varepsilon^2 h^2 \sin^2 \nu - 1 \right) \varepsilon^2 (u_y^2 + u_x^2) \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{\varepsilon^2 \xi}{2} (\varepsilon^2 h^2 \sin^2 \nu \sin^2 \psi - 1) (\omega^2 - 1) - \varepsilon^2 - \frac{4 \varepsilon^4 h^2}{3} \sqrt{\xi} \sin \nu \cos \nu \sin \psi u_z \omega \right] \right\} \end{aligned}$$

Bei der anschließenden Integration über den Azimutwinkel ψ verschwindet der letzte Term des Klammerausdrucks von Gl. (5.58). Die Integration über h liefert:

$$\begin{aligned} \frac{du_z}{dt} \Big|_{\mathcal{R}_{d(\kappa)}^r} \Big|_{\mathcal{O}(\vec{u}, \omega, \varepsilon)^2} &= \frac{2}{3} \int_{\frac{\pi}{2}}^{\pi} d\nu \sin \nu \cos \nu \tag{5.59} \\ & \times \left[3 \sqrt{\frac{\pi}{2}} (1 - \varepsilon^2) - 8 \varepsilon u_z \cos \nu + \frac{3}{2} \sqrt{\frac{\pi}{2}} (5 \cos^2 \nu - 1) \varepsilon^2 u_z^2 \right. \\ & \left. + \frac{3}{2} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left(\frac{5 \sin^2 \nu}{2} - 1 \right) \varepsilon^2 (u_y^2 + u_x^2) + \frac{3 \xi \varepsilon^2}{4} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left(\frac{5 \sin^2 \nu}{2} - 1 \right) (\omega^2 - 1) \right] \end{aligned}$$

Schließlich führen wir die Integration über ν durch.

Analog zu (5.48) fassen wir den resultierenden Beitrag und die Beiträge (5.7) (entwickelt bis zu Termen der Ordnung $\mathcal{O}(\varepsilon, u_z)^2$) zur systematischen Beschleunigung in der Form

$$\frac{du_z}{dt} \Big|_{\mathcal{R}_e^l / \mathcal{R}_{d(\kappa)}^r} \Big|_{\mathcal{O}(\vec{u}, \omega, \varepsilon)^2} = -\gamma_z^{\text{asym.}} u_z + \beta_n \left(u_z^2 - \frac{2(u_x^2 + u_y^2) + \xi(\omega^2 - 1)}{4} \right), \tag{5.60}$$

mit

$$\gamma_z^{\text{asym.}} = \frac{70}{9} \varepsilon \quad \text{und} \quad \beta_n = \frac{\sqrt{2\pi} \varepsilon^2}{8} \tag{5.61}$$

zusammen.

Der lineare Reibungskoeffizient eines rotierenden, asymmetrischen BT $\gamma_z^{\text{asym.}}$ ist mit dem entsprechenden Ausdruck eines nichtrotierenden BT (5.55) identisch [56]. Die Terme $\frac{\varepsilon^2 \xi}{2} \omega^2$ und $\frac{\varepsilon^2 \xi}{2}$ in der systematischen Beschleunigung, fehlen in dem entsprechenden Ausdruck für nichtrotierende TT (5.54). Gl. (5.60) zeigt explizit, daß die Translations- und Rotationsbewegung von total diffus-elastisch reflektierenden TT nicht unabhängig voneinander behandelt werden kann (*Translations-Rotations-Kopplung*, [18]).

Die Betrachtung asymmetrischer TT mit tensorieller Masse (Abschn. 5.4.1), speziell für den Fall $\sigma < 0$ (5.41) soll insbesondere den konstanten, geschwindigkeitsunabhängigen Anteil

$$\alpha(\xi) = \frac{\xi}{4} \beta_n = \frac{\sqrt{2\pi}}{32} \xi \varepsilon^2 \quad (5.62)$$

in der systematischen Beschleunigung (5.60) eines rotierenden, asymmetrischen TT plausibel machen.

Für den speziellen Fall $\vec{u} = 0$ und $\omega = 0$ liefern nach (5.60) ebenfalls die Wechselwirkungen auf der spiegelnd-elastisch reflektierenden Seite einen größeren Beitrag zur Beschleunigung des TT. Die spiegelnd-elastisch reflektierende Seite des rotierenden, asymmetrischen TT "schiebt". Eine ausführlichere Diskussion des analytischen Ergebnisses (5.60) wird im Abschnitt 6.3.2 gegeben.

5.5 Kopplung der Freiheitsgrade wechselwirkender Teilchen

In den Veröffentlichungen ([17] - [23]) wurde die *Translations-Rotations-Kopplung* behandelt und darauf basierende nichtlineare Effekte wechselwirkender Teilchen untersucht. Insbesondere die Ergebnisse in dem Artikel von DICKINSON [18] sind für uns von besonderem Interesse. In dieser Veröffentlichung wird die Bewegung von BT in flüssigen, also in sehr dichten Medien behandelt.

DICKINSON nimmt die Translations- und Rotationsbewegung kugelförmiger BT zunächst als unabhängig voneinander an und schreibt die entsprechenden LANGEVIN-Gleichungen auf. Im Anschluß nimmt er *ad hoc* einen zusätzlichen Translations-Rotations-Kopplungsterm an und ergänzt diesen *nachträglich* in den jeweiligen LANGEVIN-Gleichungen. Ziel dieses Vorgehens ist, ein Gleichungssystem für wechselwirkende Teilchen zu erhalten, die gleichzeitig eine rotierende und translatorische BROWNSche Bewegung ausführen. Schließlich schlägt er einen numerischen Algorithmus vor, um insbesondere Effekte der Translations-Rotations-Kopplung wechselwirkender Teilchen detailliert zu untersuchen. DICKINSON kommt zu dem Schluß, daß die Translations- und die Rotationsbewegung BT im allgemeinen Fall voneinander abhängig ist.

In [18] werden insgesamt drei grundlegende Kopplungseigenschaften wechselwirkender Teilchen unterschieden:

1. Die Translations-Translations-Kopplung
2. Die Translations-Rotations-Kopplung
3. Die Rotations-Rotations-Kopplung

Diese Fälle können sowohl analytisch als auch numerisch mit Hilfe der *einfachen* TT-Modelle (Grundmodell, erweitertes Modell) untersucht werden, ohne irgendwelche *ad hoc* Annahmen bzgl. der systematischen und der stochastischen Kraft machen zu müssen. Hierbei ist jedoch die Größe des Massenverhältnisses zwischen TT und MT zu beachten. ε (3.23) muß groß genug gewählt werden (wenn man alle Kopplungen (1-3) einbeziehen will), so daß der Begriff des BT strenggenommen nicht mehr zutreffend ist. Die analytische Behandlung unserer TT-Modelle ist vergleichsweise relativ einfach zu handhaben. Darüber hinaus lassen sich mittels Computersimulation erstmalig Effekte der *Translations-Rotations-* und *Rotations-Rotations-Kopplung* für TT diskutieren, deren Masse vergleichbar mit der Masse der MT ist.

Kapitel 6

Ergebnisse der Computersimulation

Im Kapitel 2 wurde das Modell (Grundmodell) eines diskusförmigen Testteilchens (TT) vorgestellt, bei dem neben den Translationsfreiheitsgraden ein zusätzlicher Rotationsfreiheitsgrad berücksichtigt wird. Kapitel 4 beschäftigte sich darüber hinaus mit der Rotation von TT speziell bei inelastischer Wechselwirkung (totale Akkomodation). In dem erweiterten Modell (Abschn. 4.1) wurden anstelle von punktförmigen MT, kugelförmige MT mit zusätzlichen Rotationsfreiheitsgraden betrachtet.

Außerdem wurde im Rahmen des Grundmodells (Abschn. 4.2) der Fall einer endlichen Adsorptionszeit τ_a behandelt, der sich durch eine *stochastisch fluktuierende Masse* und ein *stochastisch fluktuierendes Trägheitsmoment* des TT auszeichnet.

Im Kapitel 5 wurde die *systematische Beschleunigung* und *Winkelbeschleunigung* für verschieden beschaffene Testteilchen analytisch berechnet und Aussagen über das Verhalten der betrachteten TT abgeleitet. In diesem Kapitel vergleichen bzw. überprüfen wir diese Aussagen mit entsprechenden Resultaten der Computersimulation.

6.1 Reibungskoeffizient der Rotation

Im Abschnitt 5.3 wurde für das Grundmodell und das erweiterte Modell die jeweilige systematische Winkelbeschleunigung eines symmetrischen TT abgeleitet. Für leichte TT folgen zwei unterschiedliche, *nichtlineare Reibungskoeffizienten der Rotation*. Das Verhältnis dieser beiden Ausdrücke wurde bestimmt. Außerdem wurde das Verhältnis zwischen den nichtlinearen Reibungskoeffizienten in tangentialer Richtung und der Rotation für beliebige Massenverhältnisse zwischen TT und MT für das Grundmodell berechnet. In beiden Fällen wurde der Grenzfall sehr schwerer TT (BROWNSche Teilchen (BT)) betrachtet. In diesem Abschnitt vergleichen wir die o.g. analytischen Ergebnisse mit den Resultaten der Computersimulation.

Um zunächst die Korrektheit der Computersimulation zu überprüfen, werden jeweils die ersten zwei Momente der Translationsgeschwindigkeit und der Winkelgeschwindigkeit der TT untersucht. Es werden die Wechselwirkungen: total inelastische Wechselwirkung für den Fall einer verschwindenden Adsorptionszeit (vgl. Abschn. 2.2.3) im Rahmen des Grundmodells und erweiterten Modells und die total diffus-elastische Reflexion (Tabelle 6.1) für das Grundmodell betrachtet.

Bei der Computersimulation wird eine hinreichend große Zahl von Stößen benötigt, um einen hinreichend kleinen relativen statistischen Fehler zu erreichen. Die Computersimulation umfaßte $4 \cdot 10^8$ Stöße.

M/m	i	$\langle u_i \rangle$	$\langle \omega \rangle$	$\langle u_i^2 \rangle$	$\langle \omega^2 \rangle$
1	z	$-5 \cdot 10^{-7}$	$5.16 \cdot 10^{-5}$	1.0000096	.9997191
	y	$-8.29 \cdot 10^{-5}$.9998433	
	x	$2.86 \cdot 10^{-5}$.999924	
10	z	$-1.015 \cdot 10^{-4}$	$-1.702 \cdot 10^{-4}$	1.0000109	.9999
	y	$-1.573 \cdot 10^{-4}$		1.0001488	
	x	$-7.06 \cdot 10^{-5}$.9997814	
100	z	$-3.781 \cdot 10^{-4}$	$-1.881 \cdot 10^{-4}$	1.000298	1.000835
	y	$4.664 \cdot 10^{-4}$		1.001067	
	x	$4.32 \cdot 10^{-5}$		1.0007715	

Tabelle 6.1: Momente der Translationsgeschwindigkeit und der Winkelgeschwindigkeit (Computersimulation) für total diffus-elastisch reflektierende TT.

Die jeweiligen Momente wurden als Zeitmittel aus der Langzeitbeobachtung eines einzelnen TT gewonnen (Äquivalenz von Ensemble- und Zeitmittel). Nach dem zweiten Hauptsatz der Thermodynamik muß $\langle \vec{u} \rangle = 0$ (die Diffusionsbewegung weist keine Vorzugsrichtung auf) und $\langle \omega \rangle = 0$ (die Klammer " $\langle \rangle$ " kennzeichnet eine Ensemble- bzw. Zeitmittelung) gelten. Für die mittlere quadratische Geschwindigkeit (in der jeweiligen Raumrichtung) und Winkelgeschwindigkeit muß nach dem Gleichverteilungssatz $\langle u_i^2 \rangle = 1$ und $\langle \omega^2 \rangle = 1$ im thermodynamischen Gleichgewicht gelten. An dieser Stelle betonen wir nochmals, daß die Zeit bei allen numerischen Ergebnissen dieses Kapitels auf τ_0 nach (3.44) bezogen ist. Dagegen sind \vec{u} und ω in den reduzierten Einheiten nach (5.6) gegeben.

In allen untersuchten Fällen liegen die Abweichungen der Ergebnisse der Computersimulation von den theoretischen Erwartungen innerhalb eines einstelligen Promillebereichs und damit innerhalb des statistischen Fehlers.

Wir vergleichen nun den analytischen Reibungskoeffizienten der Rotation für das Grundmodell mit den Ergebnissen der Computersimulation. Wie bereits im Abschnitt 5.3 diskutiert, liefern die weggehenden MT sowohl bei der inelastischen Wechselwirkung als auch bei der total diffus-elastischen Reflexion keinen systematischen Beitrag zur Winkelbeschleunigung des TT. Nach (5.26) unterscheidet sich die Winkelbeschleunigung nur durch den unterschiedlich u_z -abhängigen Strom (3.42).

M/m	Freiheitsgrad	Computersimulation	analytisches Ergebnis	Abweichung in %
1	Rotation	0.82284	0.8679	5.1935
1	Tangential	1.39287	$\sqrt{2}$	1.5089
1	V_{TR}	0.590746	0.6137	3.7410
100	Rotation	0.01959	0.01964	0.25861
100	Tangential	0.02011	0.0199	1.05698
100	V_{TR}	0.97414	0.98699	1.30183

Tabelle 6.2: Vergleich der Reibungskoeffizienten in tangentialer Richtung (x -Richtung) und der Rotation aus der Computersimulation für ein total diffus-elastisch reflektierendes TT der Masse M mit den analytischen Ergebnissen (5.30), (5.26) und (5.31). Die Computersimulation umfaßte 10^8 TT.

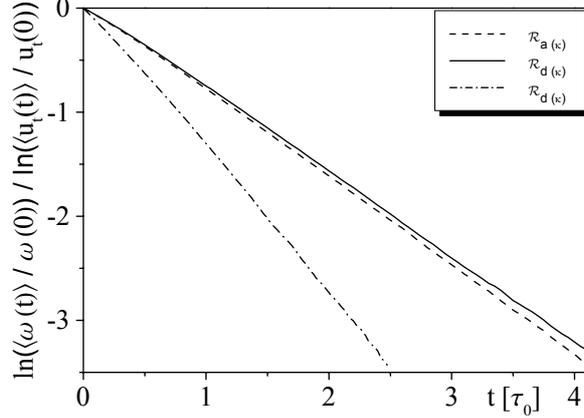


Abbildung 6.1: Logarithmische Darstellung der mittleren tangentialen (x-Richtung) Geschwindigkeit und Winkelgeschwindigkeit eines Ensembles von 10^8 total inelastisch wechselwirkenden ($\mathcal{R}_{a(\kappa)}$) und total diffus-elastisch reflektierenden Testteilchen ($\mathcal{R}_{d(\kappa)}$) der Masse $M = m$: gestrichelte Kurve: Rotationsfreiheitsgrad, $\mathcal{R}_{a(\kappa)}$; durchgezogene Kurve: Rotationsfreiheitsgrad, $\mathcal{R}_{d(\kappa)}$ jeweils mit den Anfangsbedingungen $\omega(0) = \sqrt{\langle \omega^2 \rangle}$, $\vec{u}(0) = 0$; Punkt-Strich-Kurve: Tangentialfreiheitsgrad, $\mathcal{R}_{d(\kappa)}$, $u_t(0) = \sqrt{\langle u_t^2 \rangle}$, $u_z(0) = \omega(0) = 0$.

Die Relaxationszeit des Normalen-Freiheitsgrades total diffus-elastisch reflektierender und inelastisch wechselwirkender TT ist verschieden. In der Abb. 6.1 ist daher eine unterschiedliche Relaxation der mittleren Winkelgeschwindigkeit total inelastisch wechselwirkender und total diffus-elastisch reflektierender TT der Masse $M = m$ deutlich zu erkennen (steilerer Abfall der Kurve bei $\mathcal{R}_{a(\kappa)}$ (gestrichelte Kurve)). Beide Kurven fallen erst mit der vollständigen Relaxation des Normalen-Freiheitsgrades zusammen. Der mittlere Strom auf ein ruhendes TT für $M = m$ ist $J(u_z = 0) = 2$ (3.42). Ist die Normalengeschwindigkeit des TT dagegen maxwellverteilt und im Gleichgewicht (\mathcal{M}) mit dem Mediengas, so ergibt sich für $J(u_z = \mathcal{M}) = 2\sqrt{2}$ [56].

Für den Fall schwerer TT (BT) ist J dagegen unabhängig von u_z . Die linearen Reibungskoeffizienten der Rotation eines total inelastisch und total diffus-elastisch reflektierenden BT (5.29) stimmen überein.

Je nach Auftreffort und Größe der tangentialen (x , y) Geschwindigkeitskomponenten der ein-

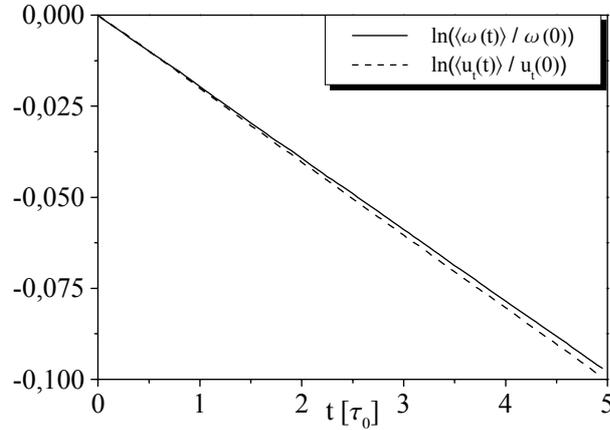


Abbildung 6.2: Logarithmische Darstellung der mittleren tangentialen (x -Richtung) Geschwindigkeit und Winkelgeschwindigkeit eines Ensembles von 10^8 total inelastisch wechselwirkenden Testteilchen der Masse $M = 100 m$ für das Grundmodell: durchgezogen: Rotationsfreiheitsgrad für die Anfangsbedingungen $\omega(0) = \sqrt{\langle \omega^2 \rangle}$, \vec{u} maxwellverteilt; gestrichelt: tangentialer Freiheitsgrad, $u_t(0) = \sqrt{\langle u_t^2 \rangle}$; u_z, ω maxwellverteilt.

fallenden MT erfährt ein ruhendes, diskusförmiges TT bei der Impulsübertragung sowohl eine Änderung seiner tangentialen Geschwindigkeit (3.16) als auch seiner Winkelgeschwindigkeit (3.15). Im Hinblick darauf, untersuchen wir nun den numerischen Reibungskoeffizienten in tangentialer (x -) Richtung (gestrichelte Kurve) und der Rotation (durchgezogene Kurve) eines total diffus-elastisch reflektierenden TT der Masse $M = m$ (Abb. 6.1).

Wie wir im Abschnitt 5.3 gesehen haben, relaxiert der Rotationsfreiheitsgrad der TT langsamer als die tangentialen Freiheitsgrade zum Gleichgewicht (Abb. 5.1b). Tabelle 6.2 zeigt den Vergleich der analytischen Werte mit den Ergebnissen der Computersimulation. Dabei sind die Anfangsbedingungen der Computersimulation zu beachten (Abb. 6.1). Für TT der Masse $M = m$ ist der Strom, der in dem Ausdruck für den Reibungskoeffizienten in tangentialer Richtung (5.30) und der Rotation (5.26) steht, zunächst kleiner als ihre Gleichgewichtswerte. Die Werte in Tabelle 6.2 für die jeweiligen numerischen Reibungskoeffizienten wurden durch einen linearen Fit über den gesamten Bereich ($0 \leq t \leq 2.5$) gewonnen. Daher kann die Ursache der Abweichungen in Tabelle 6.2 auch in der willkürlichen Festlegung des Fit-Bereichs liegen. Das Verhältnis zwischen diesen

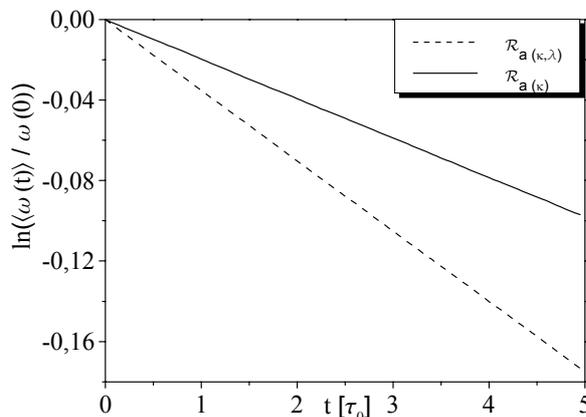


Abbildung 6.3: Logarithmische Darstellung der mittleren Winkelgeschwindigkeit eines Ensembles von 10^8 total inelastisch wechselwirkenden Testteilchen der Masse $M = 100 m$, die alle mit den Anfangsbedingungen $\omega(0) = \sqrt{\langle \omega^2 \rangle}$, \vec{u} maxwellverteilt gestartet sind: durchgezogene Kurve: Grundmodell ($\mathcal{R}_{a(\kappa)}$); gestrichelte Kurve: erweitertes Modell ($\mathcal{R}_{a(\kappa,\lambda)}$).

Reibungskoeffizienten (V_{TR}) ist jedoch von $J(u_z)$ unabhängig. Der analytische Wert für V_{TR} (5.31) stimmt gut mit den entsprechenden numerischen Wert überein.

Abb. 6.2 zeigt die logarithmische Darstellung der mittleren Geschwindigkeit in tangentialer Richtung (x -Richtung) und Winkelgeschwindigkeit eines Ensembles von 10^8 TT der Masse $M = 100 m$. Der entsprechende numerische Reibungskoeffizient der Rotation und der in tangentialer Richtung ist ebenfalls in Tabelle 6.2 wiedergegeben. Für TT dieser Masse ist der mittlere Strom nahezu von u_z unabhängig. Nach (5.32) stimmt der lineare Reibungskoeffizient in tangentialer Richtung und der Rotation eines homogenen BT überein. Aus der Abb. 6.2 geht eindeutig hervor, daß die genannten Reibungskoeffizienten schon nahezu identisch sind. Der Rotationsfreiheitsgrad der TT relaxiert nur geringfügig langsamer in den Gleichgewichtszustand.

Weiterhin vergleichen wir die Reibungskoeffizienten der Rotation für das Grundmodell und das erweiterte Modell mit den jeweiligen Resultaten der Computersimulation für total inelastisch wechselwirkende TT der Masse $M = 100 m$ (Abb. 6.3).

TT-Modell	Computersimulation	analytisches Ergebnis	Abweichung in %
erweitertes Modell	0.03495	0.03528	0.94596
Grundmodell	0.01959	0.01964	0.25861
V_{RR}	1.78406	1.79644	0.68913

Tabelle 6.3: Vergleich der Reibungskoeffizienten der Rotation aus der Computersimulation eines total inelastisch wechselwirkenden TT der Masse $M = 100 m$ für das Grundmodell und das erweiterte Modell mit den analytischen Ergebnissen (5.25), (5.26) und (5.28). Die Computersimulation umfaßte 10^8 TT.

Die Ergebnisse in Tabelle 6.3 weichen nur geringfügig von den analytischen Werten für BT (5.29) ab.

Der numerische Reibungskoeffizient der Rotation (Tabelle 6.3) für das erweiterte Modell ist erwartungsgemäß größer als der für das Grundmodell (Abb. 5.1a). Für eine anschauliche Erklärung dieses Ergebnisses betrachten wir die mittlere Änderung der Winkelgeschwindigkeit $\Delta\omega$ für das Grundmodell (3.19) und das erweiterte Modell (4.21) genauer.

$\Delta\omega$ ist bei dem erweiterten Modell größer, da bei dem intermediären stochastischen Prozeß das MT neben Energie und Impuls zusätzlich seinen Drehimpuls mit dem TT austauscht. Die TT nehmen dann wegen des zusätzlichen Austauschs schneller die maxwellverteilte Winkelgeschwindigkeit der MT an. Im Rahmen des Grundmodells wird dagegen der Rotationsfreiheitsgrad der TT nur teilweise (je nach Auftreffort auf der TT-Oberfläche) von den maxwellverteilten tangentialen Geschwindigkeitskomponenten der MT beeinflusst.

6.2 Testteilchen mit stochastischem Trägheitsmoment

Im Abschnitt 4.2 behandelten wir rotierende, total inelastisch wechselwirkende TT für den Fall einer endlichen Adsorptionszeit ($\tau_a > 0$). In diesem Abschnitt untersuchen wir mittels Computersimulation die Verteilungsfunktion der Winkelgeschwindigkeit für verschiedene Trägheitsmomente. Außerdem werden Aussagen über die stationäre Wahrscheinlichkeitsverteilung der Trägheitsmomente in Abhängigkeit von τ_a abgeleitet.

Im Abschnitt 4.2 wurde der Ablauf der Computersimulation für ein rotierendes, total inelastisch wechselwirkendes TT für den Fall $\tau_a > 0$ erläutert. Es wird wiederum eine hinreichend große Zahl von Stößen benötigt, um auch bei zunehmender Seltenheit bestimmter Massenbelegungen eine repräsentative Anzahl von Realisierungen zu erhalten. Ist eine bestimmte Massenbelegung mit einer geringen Wahrscheinlichkeit vertreten, so ist auch eine deutliche Zunahme des statistischen Fehlers zu erwarten. Für alle numerischen Untersuchungen dieses Abschnittes wählen wir $M_0 = m$ für das "nackte" TT und $R = 1$ für den Radius des TT. Für die Adsorptionszeit wählen wir $\tau_a = \frac{8}{9} \tau_{b,e}$ und $\tau_a = 80 \tau_{b,e}$, wobei $\tau_{b,e} = \left(\gamma_z^{\text{sp.-el.}}\right)^{-1}$ (5.17) die Relaxationszeit bei der spiegelnd-elastischen Reflexion ist.

In Ref. [55] wurde gezeigt, daß für jede Massenbelegung auf einem *nichtrotierenden* TT im thermodynamischen Gleichgewicht die MAXWELLSche Geschwindigkeitsverteilung gilt. In Abb. 6.4 ist die Verteilungsfunktion der Winkelgeschwindigkeit (Computersimulation) der TT bei entsprechendem Trägheitsmoment aus zwei verschiedenen Perspektiven dargestellt.

Die Winkelgeschwindigkeits-Verteilungsfunktion genügt für jedes Trägheitsmoment im stationären Zustand einer MAXWELLverteilung. Im Rahmen der statistischen Genauigkeit nehmen die Momente der Winkelgeschwindigkeits-Verteilungsfunktion für jedes Trägheitsmoment die theoretischen Werte an. Dies stützt sowohl die Eignung des Modells als auch die auf Seite 32 beschriebene Simulationemethode.

Die Resultate bestätigen erwartungsgemäß explizit, daß der Gleichverteilungssatz der statistischen Mechanik für jede Massenbelegung und jedes Trägheitsmoment der TT erfüllt ist $\langle M u_z^2 \rangle = \langle M u_y^2 \rangle = \langle M u_x^2 \rangle = \langle \theta \omega^2 \rangle = k_B T$ (in nichtreduzierte Einheiten).

Im Folgenden untersuchen wir mittels Computersimulation die stetige, stationäre Verteilungsfunktion (Wahrscheinlichkeitsdichte) der Trägheitsmomente der TT für die o.g. Adsorptionszeiten.

Dazu führen wir die Wahrscheinlichkeitsdichten für die Trägheitsmomente $p(\theta)$ und $p^{(k)}(\theta)$ ein. $p(\theta)$ gibt an, wie sich die Trägheitsmomente der TT in stationären Zustand verteilen. Mit $p^{(k)}(\theta)$ bezeichnen wir die Wahrscheinlichkeitsdichte der Trägheitsmomente bei einer bestimmten Massenbelegung der TT mit k MT.

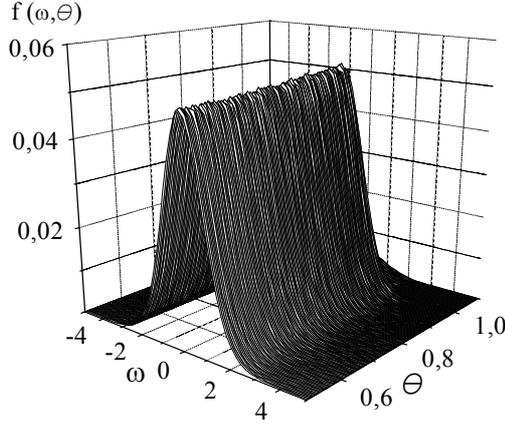


Abbildung 6.4a: Stationäre Verteilungsfunktion der Winkelgeschwindigkeit eines Ensembles von 10^8 rotierenden, total inelastisch wechselwirkenden Testteilchen bei entsprechendem Trägheitsmoment ($\theta_0 = 0.5$). Die Adsorptionszeit ist $\tau_a = \frac{8}{9} \tau_{b,e}$ (siehe Text).

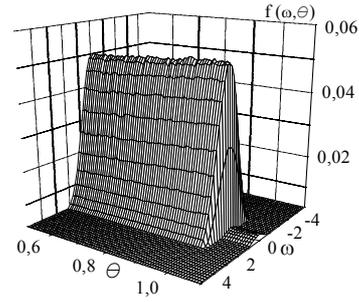


Abbildung 6.4b: Wie Abb. 6.4a, nur aus einer anderen Perspektive. Für die Darstellung wurden nur die Werte ($0.5 < \theta \leq 1.1$) verwendet (siehe dazu Abb. 6.5a).

Dieses Trägheitsmoment lautet (vgl. (4.27), (4.28))

$$\theta_k = \theta_0 + \sum_{p=1}^k \mu_{p-1} \varrho_p^2 = \theta_0 + m \sum_{p=1}^k \frac{M_{p-1} \varrho_p^2}{M_{p-1} + m}, \quad (6.1)$$

wobei $M_k = M_0 + k m$ (4.25) die entsprechende Masse des TT ist.

θ_k liegt stets in einem abgeschlossenen Intervall $[\min \theta_k, \max \theta_k]$. Das Maximum bzw. Minimum von θ_k ergibt sich einfach für den Fall, daß sich die k MT auf dem Rand bzw. im Schwerpunkt des TT befinden:

$$\max \theta_k = \theta_0 + k + \psi(M_0 + 1) - \psi(M_0 + 1 + k) \quad \text{und} \quad \min \theta_k = \theta_0 \quad (6.2)$$

wobei

$$\psi(x) = \frac{d}{dx} \ln \Gamma(x), \quad \Gamma(x) = \int_0^\infty t^{x-1} \exp(-t) dt \quad (6.3)$$

Hierbei ist $\psi(x)$ die Psi-Funktion und $\Gamma(x)$ die Gammafunktion [86].

Für den Fall $\tau_a = \frac{8}{9} \tau_{b,e}$ sind die Wahrscheinlichkeitsdichten $p(\theta)$ und $p^{(k)}(\theta)$, $k = 1, \dots, 3$ in Abb. 6.5a und b dargestellt. Bei der Darstellung ist zu beachten, daß $p(\theta)$ normiert ist, d.h.

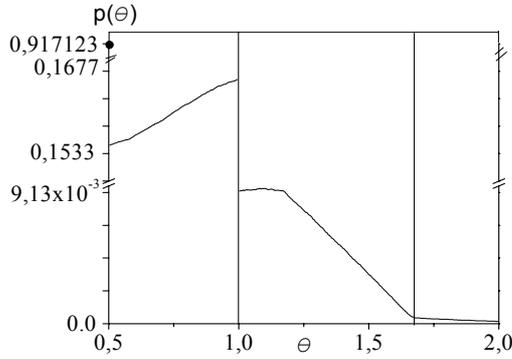


Abbildung 6.5a: Stationäre Verteilungsfunktion der Trägheitsmomente eines Ensembles von 10^8 rotierenden, total inelastisch wechselwirkenden Testteilchen für den Fall $\tau_a = \frac{8}{9} \tau_{b,e}$ und $\theta_0 = 0.5$. Zur besseren Verdeutlichung sind die Kurven geglättet (Gleitender Durchschnitt).

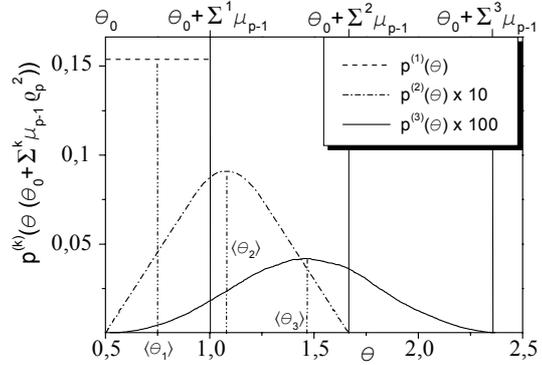


Abbildung 6.5b: Wie Abb. 6.5a, jedoch bei einer bestimmten Massenbelegung des jeweiligen Testteilchens (aktuelle Masse $M_0 + k m$, wobei $k \geq 1$). Die Punkt-Strich-Kurve ist um den Faktor 10, die durchgezogene Kurve ist um den Faktor 100 vergrößert.

die Wahrscheinlichkeit für ein Trägheitsmoment bei einer *beliebigen* Massenbelegung im Intervall $[\theta_0, \infty]$ ist Eins. Die aus der Computersimulation erhaltenen Werte (Abb. 6.5b) für die Intervalllängen ($\max \theta_k - \theta_0$) (durchgezogene senkrechte Kurven) stimmen für $k = 1, \dots, 3$ exakt mit den theoretischen Werten (6.2) überein.

Die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Massenbelegung eines TT lautet [55]:

$$W_k = \frac{W_0}{k!} \left(\frac{\tau_a}{4\tau_{b,e}} \frac{M_0}{m} \right)^k \sqrt{\frac{M_0 + k m}{M_0}}, \quad (6.4)$$

wobei W_0 aus der Normierung von W_k folgt.

Nach (6.2) kommen nur Trägheitsmomente $\theta > \theta_k$ (für bestimmte Werte k) bei TT mit der Masse $M > M_k$ vor.

Für den Fall $\tau_a = \frac{8}{9} \tau_{b,e}$ und $M_0 = m$ nimmt die Wahrscheinlichkeit W_k (6.4) mit zunehmenden k stark ab, z.B. beträgt $W_0 = 0.73481$ und $W_1 = 0.23093$. Die Wahrscheinlichkeit für ein Trägheitsmoment θ im Intervall $[\theta_0, \max \theta_k]$

$$P^{(k)}(\{\theta \leq \max \theta_k\}) = \int_{\theta_0}^{\max \theta_k} p^{(k)}(\theta) d\theta, \text{ wobei } \sum_{k=0}^{\infty} P^{(k)} = 1, \quad (6.5)$$

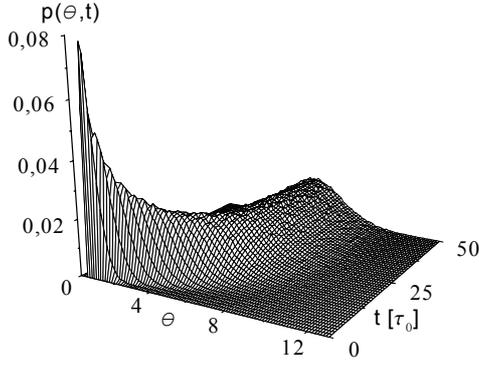


Abbildung 6.6a: Zeitliche Entwicklung der Verteilungsfunktion der Trägheitsmomente eines Ensembles von 10^8 rotierenden, total inelastisch wechselwirkenden Testteilchen für $\theta_0 = 0.5$ und $\tau_a = 80 \tau_{b,e}$, die mit den Anfangsbedingungen $\vec{u}(0) = \omega(0) = 0$ gestartet sind. Für die Darstellung wurden die Werte $p(\theta, t) > 0.08$ herausgenommen.

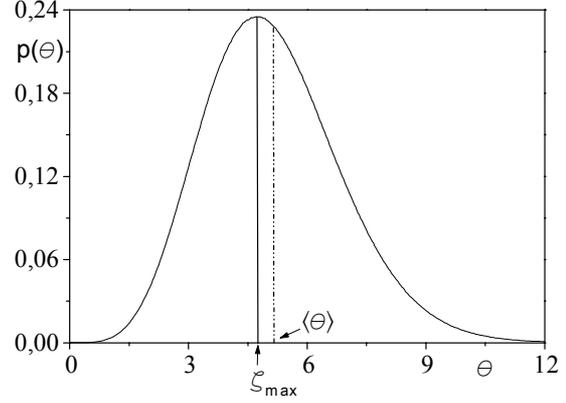


Abbildung 6.6b: Stationäre Verteilungsfunktion der Trägheitsmomente für die in Abb. 6.6a verwendeten Parameter.

nimmt offenbar ebenfalls mit zunehmender Massenbelegung der TT ab ($P^{(k)} > P^{(k+1)}$). Das mittlere Trägheitsmoment bei einer bestimmten Massenbelegung des TT ist (6.1)

$$\langle \theta_k \rangle = \int_{\theta_0}^{\max \theta_k} \theta^{(k)} p^{(k)}(\theta) d\theta, \text{ für } k \geq 1. \quad (6.6)$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte $p^{(1)}(\theta)$ der Trägheitsmomente für TT mit genau einer Massenbelegung ist in $[\theta_0, \theta_0 + \mu_0]$ (6.2) konstant und sonst 0 (gestichelte Kurve in Abb. 6.5b), d.h. in diesem Fall ist θ in $[\frac{1}{2}, 1]$ für $M_0 = 1$, $\theta_0 = \frac{1}{2}$ gleichverteilt.

Unter Berücksichtigung der Normierung ergibt sich nach (6.2), (6.6) für das mittlere Trägheitsmoment

$$\langle \theta_1 \rangle = \frac{1}{\max \theta_1 - \theta_0} \int_{\theta_0}^{\max \theta_1} \theta d\theta = 2 \int_{\frac{1}{2}}^1 \theta d\theta = \frac{3}{4}. \quad (6.7)$$

Die einzelnen Wahrscheinlichkeitsdichten $p^{(k)}(\theta)$ für $k > 1$ (Punkt-Strich-Kurve und durchgezogene Kurve) können offenbar jeweils durch eine Normalverteilung genähert werden. Der Mittelwert und die Varianz von θ_k nimmt mit zunehmender Massenbelegung zu.

Die Wahrscheinlichkeitsdichte $p(\theta)$ der Trägheitsmomente ist in Abb. 6.5a dargestellt. Um die Verteilungsfunktion aufzunehmen, wurde das gesamte θ -Intervall in gleich große $\Delta\theta$ -Intervalle von der Größe $\Delta\theta = 0.03$ unterteilt. Zu berücksichtigen ist, daß $\theta \equiv \theta_0$ für $\theta_0 \leq \theta \leq \theta_0 + \frac{\Delta\theta}{2}$ gesetzt wurde.

Im Intervall $[\theta_0, \theta_0 + \mu_0]$ ist $p(\theta)$ monoton steigend (vgl. auch Abb. 6.4), da es Trägheitsmomente der TT (4.27) mit einem und mehreren MT gibt, die in das konkrete Intervall fallen ($[\theta_0, \max \theta_1] \subseteq [\theta_0, \max \theta_k]$). Für Trägheitsmomente $\theta > \theta_1$ müssen sich jedoch mindestens zwei MT auf den TT befinden. Die Wahrscheinlichkeit für diese Massenbelegung ist $W_2 = 0.031$ (6.4), so daß $W_2 \ll W_1$ gilt. Dieser Sachverhalt führt zu dem sprunghaften Abfall von $p(\theta)$ an der Stelle $\theta_0 + \mu_0 = 1$ in Abb. 6.5a.

Abbildung 6.6a zeigt die zeitliche Entwicklung der Verteilungsfunktion der Trägheitsmomente für den Fall $\tau_a = 80 \tau_{b,e}$. Für die Darstellung wurden alle Werte $p(\theta, t) d\theta dt > 0.08$ herausgenommen. Zum Startzeitpunkt ist das aktuelle Trägheitsmoment der TT noch θ_0 . Die δ -förmige Startverteilung verbreitert sich nur allmählich und konvergiert gegen ihre stationäre Verteilung $p(\theta)$ (Abb. 6.6b). Dabei ist die unterschiedliche Normierung zu beachten.

Sei ζ_{\max} der Wert von θ , für den die Wahrscheinlichkeitsdichte $p(\theta)$ ihren größten Wert besitzt. Das mittlere Trägheitsmoment ist

$$\langle \theta \rangle = \int_{\theta_0}^{\infty} \theta p(\theta) d\theta. \quad (6.8)$$

Multipliziert man diesen Mittelwert mit der mittleren quadratischen Winkelgeschwindigkeit, dann ist $\langle \theta \rangle \langle \omega^2 \rangle \geq \langle \theta \omega^2 \rangle = k_B T$.

Für den Fall $\tau_a \gg \tau_{b,e}$ bildet sich $p(\theta)$ (im Gegensatz zu $p^{(k)}(\theta)$ für $k \geq 1$ (Abb. 6.5b)) nicht symmetrisch um ζ_{\max} aus. Um ζ_{\max} und $\langle \theta \rangle$ zu bestimmen, approximieren wir $p(\theta)$ in Abb. 6.6b durch einen Fit. Für $\tau_a = 80 \tau_{b,e}$ ergeben sich folgende Werte: $\zeta_{\max} = 4.731$ und $\langle \theta \rangle = 5.141$, so daß $\zeta_{\max} < \langle \theta \rangle$ (Abb. 6.6b) gilt. Ein Maß für die Asymmetrie der Verteilung, die Schiefe s [78], beträgt in diesem Fall $s = 0.464$. Wir geben abschließend eine anschauliche Erklärung für die Asymmetrie der Verteilung.

Für den Fall $\tau_a \gg \tau_{b,e}$ kann die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Massenbelegung (6.4) durch eine Binomialverteilung genähert werden. In diesem Fall ist die Verteilung W_k symmetrisch um ihr Maximum (W_j für $j = 20$). Analog zum Fall $\tau_a \leq \tau_{b,e}$ ist die Wahrscheinlichkeit dafür, ein bestimmtes Trägheitsmoment im Intervall $[\theta_0, \max \theta_j]$ zu finden, größer, da es wiederum Trägheitsmomente der TT (4.27) mit der Massenbelegung $l > j$ gibt, die zusätzlich in dieses Intervall fallen. Umgekehrt kommen jedoch *keine* Trägheitsmomente $\theta > \theta_j$ bei TT mit der Masse $M > M_j$ vor.

6.3 Gerichtete Bewegung asymmetrischer Testteilchen

Im Abschnitt 5.4.1 wurde die systematische Beschleunigung nichtrotierender, asymmetrischer TT mit tensorieller Masse in Normalenrichtung (5.53) bis zu Termen zweiter Ordnung in \vec{u} und erster Ordnung in σ (5.37) abgeleitet. Diese Terme lieferten eine gerichtete Bewegung der TT, solange nicht alle Freiheitsgrade der TT zum thermodynamischen Gleichgewicht relaxiert waren. Wir überprüfen nun diese Aussage mit entsprechenden Resultaten der Computersimulation und stellen weitere Überlegungen an.

6.3.1 Testteilchen mit tensorieller Masse

Wir untersuchen erneut die Gleichgewichtseigenschaften (Computersimulation) der asymmetrischen TT. Tabelle 6.4 zeigt, daß die Momente der Translationsgeschwindigkeiten im Rahmen der statistischen Genauigkeit die theoretischen Werte annehmen (vgl. Abschn. 6.1).

ε_n	ε_t	σ	i	$\langle u_i \rangle$	$\langle u_i^2 \rangle$
1	$\sqrt{2}$	$-\frac{1}{2}$	z	$-4.3 \cdot 10^{-5}$.999921
			y	$-1.11 \cdot 10^{-4}$.999944
			x	$1.3 \cdot 10^{-4}$.999928
1	$\rightarrow 0$	$\frac{1}{2}$	z	$3.2 \cdot 10^{-5}$	1.000113

Tabelle 6.4: Momente der Translationsgeschwindigkeit (Computersimulation von $2 \cdot 10^8$ Stöße) für asymmetrische (spiegelnd-elastisch/total diffus-elastisch reflektierende) TT mit tensorieller Masse für verschiedene σ (5.37).

Ein Ensemble asymmetrischer TT erfährt im thermodynamischen Gleichgewicht erwartungsgemäß keine gerichtete Beschleunigung. Dies kann man durch Mittelung der systematischen Beschleunigung (5.53)

$$\frac{du_z}{dt} \Big|_{\mathcal{R}_e^l / \mathcal{R}_d^r(\sigma)}^{\mathcal{O}(\vec{u})^2, \mathcal{O}(\sigma)^1} = -\frac{\varepsilon_n}{1 + \varepsilon_n^2} \left(\frac{70}{9} + \frac{16\sigma}{45} \right) u_z \quad (6.9)$$

$$+ \frac{\sqrt{2\pi}}{8} \frac{\varepsilon_n^2}{1 + \varepsilon_n^2} \left(u_z^2 \left[1 - \frac{\sigma}{3} \right] - \frac{u_x^2 + u_y^2}{2} \left[1 - \frac{\sigma}{\varepsilon_n^2} - \frac{\sigma}{3} \right] - \frac{\sigma}{\varepsilon_n^2} \right)$$

über ein maxwellverteiltes \vec{u} bestätigen. Im thermodynamischen Gleichgewicht gilt natürlich der Gleichverteilungssatz $\langle u_x^2 \rangle = \langle u_y^2 \rangle = \langle u_z^2 \rangle = 1$ (in reduzierten Einheiten nach (5.45)).

Solange sich die Freiheitsgrade der asymmetrischen TT jedoch im Nichtgleichgewicht befinden, zeigt das Ergebnis der Computersimulation (Abb. 6.7) eine gerichtete Bewegung dieser TT. Die Gleichgewichtswerte stellen sich im Langzeitverhalten, wenn alle Freiheitsgrade der TT zum Gleichgewicht relaxiert sind, ein.

Die systematische Beschleunigung (6.9), entwickelt bis zu quadratischen Termen in ε_n , läßt in zwei Anteile zerlegen:

$$\frac{du_z}{dt} = -\gamma_z u_z + \underbrace{\beta_n \left(u_z^2 - \frac{u_x^2 + u_y^2}{2} \right)}_{(1)} + \underbrace{\alpha \left(1 - \frac{u_x^2 + u_y^2}{2} \right)}_{(2)}, \quad (6.10)$$

wobei nach (5.37)

$$\gamma_z = \frac{70}{9} \varepsilon_n, \beta_n = \frac{\sqrt{2\pi} \varepsilon_n^2}{8} \text{ und } \alpha = -\frac{\sqrt{2\pi} \sigma}{8} \text{ ist.} \quad (6.11)$$

Die gerichtete Beschleunigung der asymmetrischen TT ist eine unmittelbare Folge von zwei unterschiedlichen, nichtlinearen Effekten. Diese Effekte werden bei $\mathcal{R}_e^l/\mathcal{R}_{d(\sigma)}^r$ durch die Ausdrücke (1) und (2) verdeutlicht.

Der erste Effekt, der ausführlich in Ref. [57] diskutiert wurde, ist die unterschiedlich schnelle Relaxation des Normalen-Freiheitsgrades und der tangentialen Freiheitsgrade der TT. Letztere relaxieren stets wesentlich langsamer zum Gleichgewicht. Danach findet eine gerichtete Beschleunigung der asymmetrischen TT immer dann statt, wenn die einzelnen Freiheitsgrade der TT unterschiedlich weit zum Gleichgewicht relaxiert sind.

Der zweite Anteil in (6.10), insbesondere für den speziellen Fall $\vec{u} = 0$, führt ebenfalls zu einer gerichteten Beschleunigung der TT. Je nachdem, ob $\sigma < 0$ (5.41) oder $0 < \sigma < 1$ (5.43) ist, wirkt die Beschleunigung in positiver oder negativer z -Richtung (5.52).

Für den Fall $\sigma = 0$ (skalare Masse) beruht die gerichtete Beschleunigung der TT (Anteil (1) in (6.10)) nur auf den erstgenannten Effekt (vgl. auch Gl. (6.9), (5.54)). Wir merken im voraus an, daß die erste Näherung der Störungsentwicklung (Abschn. 8.2) diesen Effekt besonders gut veranschaulicht.

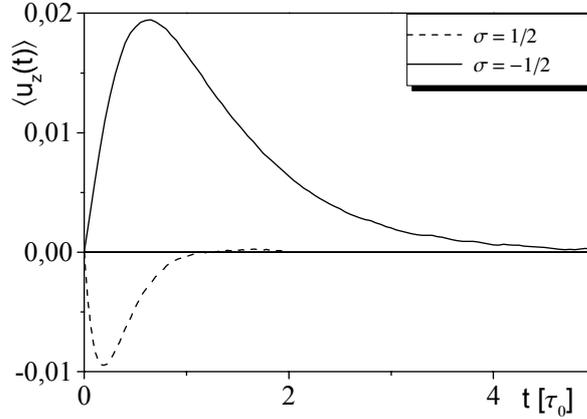


Abbildung 6.7: Mittlere Geschwindigkeit (Computersimulation) eines Ensembles von 10^8 asymmetrischen (spiegelnd-elastisch/total diffus-elastisch reflektierenden) Testteilchen mit tensorieller Masse für die Anfangsbedingungen $\vec{u}(0) = 0$: durchgezogene Kurve: $\varepsilon_t = \sqrt{2}$, $\sigma = -\frac{1}{2}$ (5.37); gestrichelte Kurve: $\varepsilon_t = 0$, $\sigma = \frac{1}{2}$.

Eine ausschließliche Erklärung der gerichteten Beschleunigung, basierend auf dem zweiten Effekt, konnte bisher nur für asymmetrische TT gezeigt werden, bei denen jeweils eine Seite spiegelnd-elastisch reflektiert und die andere Seite total inelastisch wechselwirkt [55]. Eine wesentliche Erweiterung gegenüber dem Fall nichtrotierender TT für $\sigma = 0$ ist also der zusätzliche Anteil (2) in (6.10).

Der Einfachheit halber betrachten wir weiterhin den speziellen Fall asymmetrischer (spiegelnd-elastisch reflektierender/total diffus-elastisch reflektierender) TT, bei denen jeweils unendlich große träge Massen in tangentialer Richtung $\varepsilon_t \rightarrow 0$ (5.37) angenommen werden. Nach (6.9) ist u_z wegen

$$\lim_{\varepsilon_t \rightarrow 0} \frac{du_t}{dt} = \lim_{\varepsilon_t \rightarrow 0} \left(-\frac{\varepsilon_t^2}{1 + \varepsilon_t^2} J(u_z) u_t \right) = 0 \quad (6.12)$$

(vgl. (5.30)) hierbei der einzige Freiheitsgrad des TT. In diesem Fall wird das TT nur in Normalenrichtung beschleunigt (eindimensionaler Fall), die gerichtete Beschleunigung der TT beruht damit allein auf den Anteil (2) in (6.10).

Aus (6.9) und (6.12) folgt:

$$\frac{du_z}{dt} \Big|_{\mathcal{R}_e^l / \mathcal{R}_{d(\sigma)}^r}^{\mathcal{O}(u_z, \varepsilon)^2} = -\gamma_z^{\text{asym.}} u_z + \alpha (1 - u_z^2), \quad (6.13)$$

wobei

$$\gamma_z^{\text{asym.}} = \frac{70}{9} \varepsilon, \quad \alpha = -\beta_n = -\frac{\sqrt{2\pi}}{8} \varepsilon^2 \quad \text{und} \quad \varepsilon = \varepsilon_n = \sqrt{\sigma} \quad \text{ist.} \quad (6.14)$$

Auch in diesem speziellen Fall erfährt ein Ensemble asymmetrischer TT im thermodynamischen Gleichgewicht ($t \rightarrow \infty$) keine systematische Beschleunigung. Anders verhalten sich zur Startzeit ruhende TT ($u_z(0) = 0$). In Abb. 6.7 (gestrichelte Kurve) ist die auf α (6.14) basierende gerichtete Beschleunigung der TT nach links, d.h. in negativer z -Richtung, deutlich zu erkennen.

In den beiden genannten eindimensionalen Fällen beruht die jeweilige gerichtete Beschleunigung der TT auf α und dem u_z^2 -Term. Die folgenden Überlegungen liefern eine anschauliche Erklärung für die Existenz dieser Terme in (6.13). Zu diesem Zweck betrachten wir ein TT mit tensorieller Masse für $\varepsilon_t \rightarrow 0$ ($0 < \sigma < 1$) (5.43) mit der speziellen Anfangsbedingung $u_z = 0$ genauer. Die Geschwindigkeitsänderung des TT aufgrund des Einfalls (Index a) (ohne Beachtung der Reflexion, also des Ausfalls (Index w)) eines MT ist

$$\Delta^{(a)} u_z = \frac{\varepsilon^2}{1 + \varepsilon^2} g_z = \frac{\varepsilon^2}{1 + \varepsilon^2} v_z = \frac{\varepsilon^2}{1 + \varepsilon^2} v \cos \nu \quad \text{für} \quad u_z = 0, \quad (6.15)$$

wobei für eine isotrope Geschwindigkeitsverteilung der MT $\langle \cos \nu \rangle = \frac{2}{3}$ (5.11) gilt. Der Strom auftreffender MT und der Betrag von $\Delta^{(a)} u_z$ sind auf beiden Seiten des ruhenden TT gleich groß, so daß die einfallenden MT keine mittlere, effektive Beschleunigung des TT in z -Richtung bewirken. Darüber hinaus liefern die reflektierten MT auf der spiegelnd-elastisch reflektierenden Seite des TT offensichtlich denselben Betrag (6.15) zur Geschwindigkeitsänderung Δu_z (siehe S. 35).

Der Beitrag der reflektierten MT zur Geschwindigkeitsänderung auf der total diffus-elastisch reflektierenden Seite des TT lautet:

$$\Delta^{(w)} u_z = \frac{\varepsilon^2}{1 + \varepsilon^2} b \cos \nu' \quad (6.16)$$

$\cos \nu'$ ist wiederum isotrop verteilt, genau wie $\cos \nu$ in Gl. (6.15). Auf der rechten (total diffus-elastisch reflektierenden) Seite des TT bleibt nur die Energie der Relativbewegung ($b = b'$, (5.36)) bei dem Stoß erhalten.

Anders verhält es sich auf der linken, spiegelnd-elastisch reflektierenden Seite des TT. Hier bleibt neben der Energie außerdem der Betrag der Relativgeschwindigkeit $b = v = v'$ bei dem Stoß erhalten. Unter Verwendung von (5.38) - (5.40) drücken wir nun v bzw. g durch b aus (5.37):

$$v^2 = g^2 = g_z^2 + \left(\frac{g_y^2 + g_x^2}{1 - \sigma} \right) (1 - \sigma) \quad (6.17)$$

$$= b^2 [\cos^2 \nu + \sin^2 \nu (1 - \sigma)] = b^2 (1 - \sigma \sin^2 \nu)$$

Für das Verhältnis von dem Betrag von v und b folgt:

$$|v| \geq |b| \text{ für } \sigma < 0 \text{ oder } \sqrt{1 - \sigma \sin^2 \nu} \geq 1$$

$$|v| = |b| \text{ für } \sigma = 0 \text{ oder } \sigma \sin^2 \nu = 0 \quad (6.18)$$

$$0 < |v| \leq |b| \text{ für } 0 < \sigma < 1 \text{ oder } 0 < \sqrt{1 - \sigma \sin^2 \nu} \leq 1$$

Hier genügt es zu zeigen, daß in dem speziell untersuchten Fall $u_z = 0$ und $\varepsilon_t \rightarrow 0$ ($0 < \sigma < 1$) die Geschwindigkeitsänderung des TT aufgrund des Ausfalls eines MT auf der total diffus-elastisch reflektierenden Seite größer ist als auf der spiegelnd-elastisch reflektierenden Seite. Aus (6.15) - (6.18) folgt:

$$\Delta^{(w)} u_z = \frac{\varepsilon^2}{1 + \varepsilon^2} \frac{v \cos \nu'}{\sqrt{1 - \sigma \sin^2 \nu'}} = \frac{\Delta^{(a)} u_z}{\sqrt{1 - \sigma \sin^2 \nu}} \geq \Delta^{(a)} u_z \text{ für } 0 < \sigma < 1 \quad (6.19)$$

Diesen erhöhten Beitrag der rechten (total diffus-elastisch reflektierenden) Seite des TT sehen wir in Abb. 6.7 (gestrichelte Kurve) als Beschleunigung nach links, in negativer z -Richtung.

Nach (5.43) ist für $0 < \varepsilon_t < \varepsilon_n$ ebenfalls $0 < \sigma < 1$. Im Unterschied zu (6.12) wird in diesem Fall auch die tangentielle Geschwindigkeit des TT bei dem Stoß beeinflusst. In Ref. [56] wurde eine intuitive Erklärung für die gerichtete Beschleunigung nichtrotierender, asymmetrischer TT (5.54) für $\sigma = 0$ gegeben. Für den speziellen Fall $u_z = 0$ und $u_y \neq 0$ wurde gezeigt, daß der effektive Betrag der Relativgeschwindigkeit $g_{eff}^2 \geq v^2$ sich aufgrund der tangentialen Bewegung des TT erhöht und damit die total diffus-elastisch reflektierende Seite einen größeren Beitrag zur Beschleunigung des TT liefert. Speziell in diesem Fall folgt aus (6.17)

$$v^2 \leq g_{eff}^2 = b^2 (1 - \sigma \sin^2 \nu) \leq b^2 \text{ für } 0 < \sigma < 1, \quad (6.20)$$

d.h. die total diffus-elastisch reflektierende Seite liefert einen noch größeren Beitrag zur Beschleunigung des TT.

Abschließend betrachten wir noch ein Ensemble asymmetrischer TT für $\sigma < 0$ mit den speziellen Anfangsbedingungen $\vec{u} = 0$ etwas genauer. In diesem Fall liefert der Ausdruck (6.10) zum Startzeitpunkt die positive systematische Beschleunigung α (6.11), und entsprechend steigt die durchgezogene Kurve in Abb. 6.7 am Anfang steil an. Mit abnehmender Masse des TT in tangentialer Richtung (5.49) ($\sigma \ll 0$) nimmt die gerichtete Beschleunigung der TT zwar zu, der Effekt läßt sich jedoch nicht beliebig steigern. Der Normalen-Freiheitsgrad relaxiert wesentlich schneller als die tangentialen Freiheitsgrade der TT zum Gleichgewicht. Es entsteht zeitweilig die Situation, daß die tangentialen Freiheitsgrade der TT noch nahe bei ihrem Anfangswert verharren, während der Normalen-Freiheitsgrad der TT bereits zum Gleichgewicht relaxiert ist.

Für diese Situation liefert der Ausdruck (6.10) neben α eine *zusätzliche* systematische Beschleunigung β_n . Die Computersimulation (durchgezogene Kurve in Abb. 6.7) zeigt entsprechend eine Beschleunigung der TT hin zu positiven Geschwindigkeiten. Die resultierende Beschleunigung ist im Vergleich zu dem Fall "nichtrotierender" TT für $\sigma = 0$ (5.54) wegen $\alpha > 0$ (5.52) größer. Die Beschleunigung verschwindet erst mit der vollständigen Relaxation der Freiheitsgrade der TT. Da diese Relaxation wesentlich länger andauert als im eindimensionalen Fall (6.13), zeigt die durchgezogene Kurve eine wesentlich länger anhaltende gerichtete Bewegung (Vorzugsgeschwindigkeit) der asymmetrischen TT.

Wir stellen fest: Für den Fall $\sigma \neq 0$ basiert die *gerichtete Bewegung asymmetrischer TT* auf dem Zusammenspiel der beiden genannten nichtlinearen Effekte.

6.3.2 Rotierende Testteilchen

Im Abschnitt 5.4.2 berechneten wir die *systematische Beschleunigung* (5.60) bis zu Termen zweiter Ordnung in \vec{u} , ω und ε *rotierender, asymmetrischer Testteilchen* (TT) in Normalenrichtung:

$$\left. \frac{du_z}{dt} \right|_{\mathcal{R}_e^l / \mathcal{R}_{d(\kappa)}^r}^{\mathcal{O}(\vec{u}, \omega, \varepsilon)^2} = -\frac{70}{9} \varepsilon u_z + \frac{\sqrt{2\pi}}{8} \varepsilon^2 \left(u_z^2 - \frac{2(u_x^2 + u_y^2) + \xi[\omega^2 - 1]}{4} \right) \quad (6.21)$$

Aus diesen Termen folgt ebenfalls eine *gerichtete Bewegung der rotierenden TT*, solange nicht alle Freiheitsgrade (Normalen-Freiheitsgrad, tangentiale Freiheitsgrade und Rotationsfreiheitsgrad) zum thermodynamischen Gleichgewicht relaxiert sind.

In diesem Abschnitt werden Aussagen zur gerichteten Bewegung rotierender, asymmetrischer TT abgeleitet und durch die Computersimulation überprüft. In diesem Zusammenhang wird insbesondere der Einfluß der *Translations-Rotations-Kopplung* (vgl. Abschn. 3.1) auf die gerichtete Bewegung der TT näher untersucht.

Auf der Grundlage der nichtlinearen systematischen Beschleunigung (6.21) können wir das Verhalten eines Ensembles rotierender, asymmetrischer TT für mehrere Spezialfälle diskutieren:

1. Im thermodynamischen Gleichgewicht gilt der Gleichverteilungssatz $\langle u_x^2 \rangle = \langle u_y^2 \rangle = \langle u_z^2 \rangle = \langle \omega^2 \rangle = 1$ (in reduzierte Einheiten nach (5.6)) und die systematische Beschleunigung (6.21) verschwindet. Da auch $\langle u_z \rangle = 0$ ist, erfährt ein Ensemble rotierender, asymmetrischer TT erwartungsgemäß keine gerichtete Beschleunigung.
2. Falls sich *irgendein* Freiheitsgrad oder *mehrere* Freiheitsgrade der TT im Nichtgleichgewicht befinden, so folgt aus (6.21) eine resultierende Beschleunigung der asymmetrischen TT in Normalenrichtung. Die Größe und das Vorzeichen der Beschleunigung ist durch den Ausdruck $2 \langle u_z^2 \rangle - \left(\langle u_x^2 \rangle + \langle u_y^2 \rangle + \frac{\xi}{2} [\langle \omega^2 \rangle - 1] \right)$ gegeben.
3. Sogar wenn die Translationsfreiheitsgrade der TT zum Startzeitpunkt maxwellverteilt sind, wirkt eine positive oder negative Beschleunigung, je nach Anfangswinkelgeschwindigkeit. In diesem Fall ist der Mittelwert $\langle u_z \rangle \neq 0$. Der anfängliche Gleichgewichtszustand des Normalen-Freiheitsgrades der TT wird *solange aufgehoben*, bis der volle Gleichgewichtszustand erreicht wird.
4. Sind die tangentialen Freiheitsgrade und der Rotationsfreiheitsgrad der asymmetrischen TT zum Startzeitpunkt maxwellverteilt, so zeigen die asymmetrischen TT eine gerichtete Beschleunigung ähnlich wie nichtrotierende TT mit tensorieller Masse (eindimensionaler Fall (6.13)).

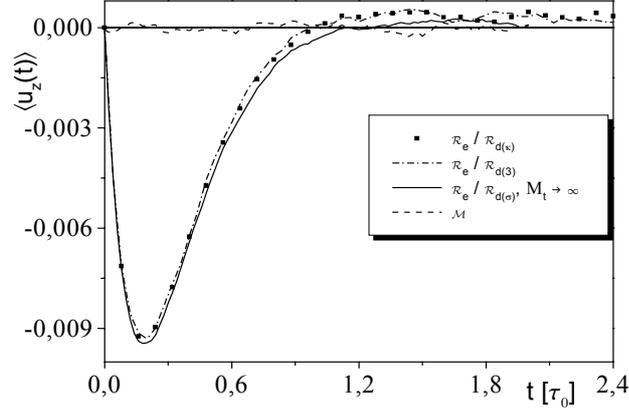


Abbildung 6.8: Mittlere Geschwindigkeit eines Ensembles von 10^8 asymmetrischen (spiegelnd-elastisch/total diffus-elastisch reflektierend) Testteilchen (TT) der Masse $M = M_n = m$: gestrichelt: rotierende TT ($\mathcal{R}_e^l/\mathcal{R}_{d(\kappa)}^r$) Gleichgewichtsverteilung, Quadrate: $u_z(0) = 0$, u_x , u_y und ω maxwellverteilt (\mathcal{M}); Punkt-Strich: nichtrotierende TT ($\mathcal{R}_e^l/\mathcal{R}_{d(3)}^r$), $u_z(0) = 0$, u_x und u_y \mathcal{M} ; durchgezogen: TT mit tensorieller Masse ($\mathcal{R}_e^l/\mathcal{R}_{d(\sigma)}^r$, $M_t \rightarrow \infty$), $u_z(0) = 0$.

Wir überprüfen nun diese Aussagen mit Hilfe der Computersimulation. Der Einfachheit halber betrachten wir in diesem Abschnitt ausschließlich *homogene* ($\xi = 2$) asymmetrische TT.

Abb. 6.8 zeigt den zeitlichen Verlauf der mittleren Geschwindigkeit verschiedener TT-Ensembles. Rotierende TT, bei denen zum Startzeitpunkt alle Freiheitsgrade maxwellverteilt sind (gestrichelte Kurve), zeigen erwartungsgemäß keine gerichtete Beschleunigung. Sind nur die tangentialen Freiheitsgrade und der Rotationsfreiheitsgrad der TT maxwellverteilt, so liefert der Ausdruck (6.21) einen negativen Wert für die systematische Beschleunigung. Der entsprechende Wert für nichtrotierende TT (5.54) ist derselbe. Das Ergebnis der Computersimulation zeigt jeweils entsprechend eine gerichtete Beschleunigung der TT (volle Quadrate und Punkt-Strich-Kurve) hin zu negativen Geschwindigkeiten.

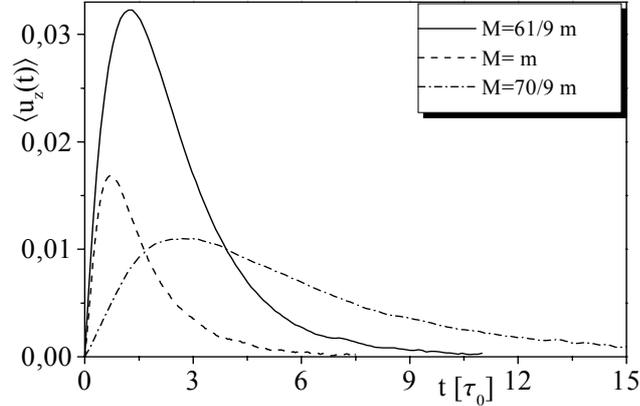


Abbildung 6.9: Mittlere Geschwindigkeit eines Ensembles von 10^8 rotierenden, asymmetrischen Testteilchen (linke Seite spiegelnd-elastisch reflektierend, rechte Seite total diffus-elastisch reflektierend) für die Anfangsbedingungen $\vec{u}(0) = \omega(0) = 0$ und verschiedene Massen M : durchgezogene Kurve: $M = 61/9 m$; gestrichelte Kurve: $M = m$; Punkt-Strich-Kurve: $M = 70/9 m$.

Betrachten wir ein Ensemble nichtrotierender, asymmetrischer TT mit den Anfangsbedingungen $\vec{u} = 0$. In der entsprechenden systematischen Beschleunigung (5.54) fehlt der zu ξ proportionale Term (6.21). Deshalb sind zum Startzeitpunkt die Beiträge zur Geschwindigkeitsänderung in Normalenrichtung auf beiden Seiten des TT gleich groß [56].

Anders verhält es sich bei rotierenden TT mit den Anfangsbedingungen $\vec{u} = 0$, $\omega(0) = 0$. Hier liefern zum Startzeitpunkt die Wechselwirkungen auf der spiegelnd-elastisch reflektierenden Seite einen größeren Beitrag zur Beschleunigung des TT. Die nach wenigen Stößen resultierende gerichtete Beschleunigung der TT (Abb. 6.9) nach rechts (in positiver z -Richtung) basiert auf $\alpha = \frac{\sqrt{2\pi}}{32} \xi \varepsilon^2$ in (6.21) und der steigenden, mittleren Normalengeschwindigkeit. Die zunehmende mittlere quadratische tangentielle Geschwindigkeit und Winkelgeschwindigkeit der TT (6.21) wirkt gemeinsam dieser positiven Beschleunigung entgegen, bis das TT-Ensemble ins thermodynamische Gleichgewicht relaxiert.

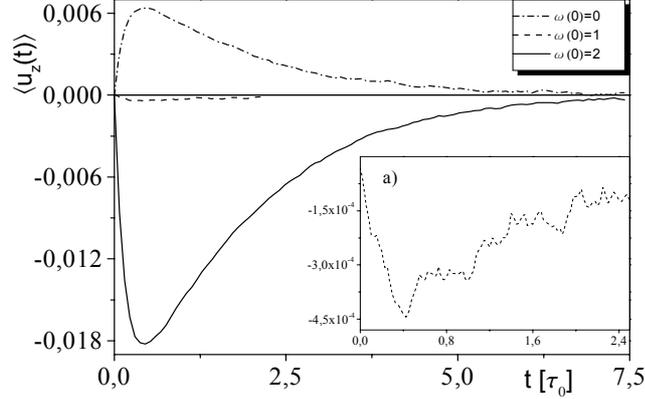


Abbildung 6.10: Mittlere Geschwindigkeit eines Ensembles von 10^8 asymmetrischen Testteilchen der Masse $M = m$ bei verschiedenen Anfangswinkelgeschwindigkeiten, \vec{u} maxwellverteilt: Punkt-Strich-Kurve: $\omega(0) = 0$; gestrichelte Kurve: $\omega(0) = 1$; durchgezogene Kurve: $\omega(0) = 2$. a) Ausschnitt von der gestrichelten Kurve ($\omega(0) = 1$).

Eine detaillierte Beschreibung des Nichtgleichgewichtsprozesses auf der Grundlage der Gl. (6.21) erweist sich als schwierig, da das Zusammenspiel positiver (Normalen-Freiheitsgrad, α) und negativer Beschleunigungseffekte (tangentielle Freiheitsgrade, Rotationsfreiheitsgrad) nach wenigen Stößen unübersichtlich wird. Wir merken im voraus an, daß jedoch die Störungsentwicklung der Gl.(6.21) in erster Näherung (Abschn. 8.2), den Einfluß der einzelnen Terme in (6.21) auf die gerichtete Bewegung der TT besonders gut verdeutlicht.

Offensichtlich liefern die auf der linken, spiegelnd-elastisch reflektierenden Seite des TT auftreffenden MT keinen Beitrag zur Winkelbeschleunigung (5.26) und zur systematischen Beschleunigung in tangentialer Richtung (5.30) eines rotierenden, asymmetrischen TT. $J(u_z)$ ist einfach in Gl. (5.30) und (5.26) jeweils durch $J_r(u_z)$ zu ersetzen. Die Entwicklung der systematische Beschleunigung in tangentialer Richtung (5.30) eines homogenen TT bis zu Termen dritter Ordnung in ε und \vec{u} ($\mathcal{O}(\vec{u}, \varepsilon)^3$) liefert:

$$\left. \frac{du_i}{dt} \right|_{\mathcal{R}_e^l / \mathcal{R}_{d(\kappa)}^r}^{\mathcal{O}(\vec{u}, \varepsilon)^3} = -\gamma_t^{\text{asym.}} u_i - \delta_t^{\text{asym.}} u_i u_z + \frac{1}{2} \varepsilon^3 u_i (2 - u_z^2) \quad \text{für } i = x, y \quad (6.22)$$

Für die systematische Winkelbeschleunigung (5.26) findet man:

$$\frac{d\omega}{dt} \Big|_{\mathcal{R}_e^l/\mathcal{R}_d^r(\kappa)} \mathcal{O}(u_z, \omega, \varepsilon)^3 = -\gamma_\omega^{\text{asym.}} \omega - \delta_\omega^{\text{asym.}} \omega u_z + \frac{1}{6} \varepsilon^3 \omega (14 - 3u_z^2), \quad (6.23)$$

wobei

$$\gamma_t^{\text{asym.}} = \gamma_\omega^{\text{asym.}} = \varepsilon \text{ und } \delta_t^{\text{asym.}} = \delta_\omega^{\text{asym.}} = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \varepsilon^2 \text{ ist.} \quad (6.24)$$

Die Gleichungen für die systematische Beschleunigung in Normalenrichtung (6.21) und in tangentialer Richtung (6.22), sowie die Winkelbeschleunigung (6.23) stellen ein *gekoppeltes, nichtlineares Differentialgleichungssystem* dar, wobei zur vollständigen Beschreibung noch die jeweiligen *stochastischen Kräfte* hinzukommen.

Die Reibungskoeffizienten in tangentialer Richtung und der Rotation eines asymmetrischen TT unterscheiden sich erst bei Berücksichtigung von Termen der Ordnung $\mathcal{O}(\varepsilon, \vec{u}, \omega)^3$. Für den Fall kleiner TT-Massen spielen die *drei verschiedenen Reibungskoeffizienten* in normaler und tangentialer Richtung sowie der Rotation für die *Dauer* und das *Maximum* der gerichteten Beschleunigung asymmetrischer TT offenbar eine entscheidende Rolle. Der Rotationsfreiheitsgrad der TT relaxiert um einen Faktor 1 – 2 *langsamer* als die tangentialen Freiheitsgrade zum Gleichgewicht (Abb. 5.1b). Abb. 6.9 zeigt den zeitlichen Verlauf der mittleren Geschwindigkeit eines TT-Ensembles mit den Anfangsbedingungen $\vec{u} = 0, \omega = 0$ für drei verschiedene Massenverhältnisse. Der *maximale Effekt* der gerichteten Bewegung wird bei asymmetrischen TT der Masse $M = \frac{61}{9} m$ beobachtet. Auf der Grundlage der Gl. (6.21) kann die nichtmonotone ε -Abhängigkeit der systematischen Beschleunigung nicht erklärt werden. Dieser Effekt, der von dritter und höherer Ordnung in \vec{u}, ω und ε ist, ist auf die unterschiedlichen Reibungskoeffizienten in tangentialer Richtung (6.22) und der Rotation (6.23) leichter asymmetrischer TT zurückzuführen.

Auch asymmetrische TT, bei denen die Translationsfreiheitsgrade zum Startzeitpunkt maxwellverteilt waren, zeigen gemäß (6.21) infolge des Terms ($\sim \xi [\omega^2 - 1]$) eine kurzzeitige, gerichtete Beschleunigung in Normalenrichtung (Abb. 6.10). Je nachdem, ob der Wert der mittleren quadratischen Winkelgeschwindigkeit kleiner oder größer als Eins ist, zeigt das Ergebnis der Computersimulation in Übereinstimmung mit (6.21) eine Beschleunigung der TT in positiver (Punkt-Strich-Kurve) oder negativer z -Richtung (durchgezogene Kurve).

Betrachten wir nun ein Ensemble rotierender, asymmetrischer TT mit den Anfangsbedingungen $\vec{u} = \mathcal{M}, \omega = 1$ genauer. Für diese Situation liefert der Ausdruck (6.21) eine verschwindende systematische Beschleunigung. Dagegen ist eine geringfügige systematische Beschleunigung der TT nach links, d.h. in negativer z -Richtung in der Abb. 6.10 (gestrichelte Kurve) deutlich zu erkennen. Offensichtlich liefern Terme der Ordnung $\mathcal{O}(\varepsilon)^3$ und höher zusätzliche Beiträge zur systematischen Beschleunigung leichter TT.

6.4 Nichtlineare Effekte symmetrischer Testteilchen

Es stellt sich die Frage, ob die zeitliche Entwicklung (Relaxation) zweier TT-Ensembles mit jeweils unterschiedlichem Trägheitsmoment ins Gleichgewicht unterschiedlich verläuft. Hierzu untersuchen wir symmetrische TT mit total diffus-elastisch reflektierender Oberfläche. Wir zeigen, daß der Reibungskoeffizient eines leichten TT in Normalenrichtung bei $\mathcal{R}_{d(\kappa)}$ von ξ und bei $\mathcal{R}_{d(\sigma)}$ von σ abhängig ist. Wir vergleichen die analytischen Resultate mit den Ergebnissen der Computersimulation.

Wir berücksichtigen in der *systematischen Beschleunigung* (5.4) neben dem linearen Reibungsterm (5.16) zusätzlich nichtlineare Terme *dritter Ordnung* in \vec{u} , ω und ε

$$\begin{aligned} \frac{du_z}{dt} \Big|_{\mathcal{R}_{d(\kappa)}}^{\mathcal{O}(\vec{u}, \omega, \varepsilon)^3} &= - \underbrace{\frac{68 \varepsilon}{9} \left(1 - \varepsilon^2 \left(1 + \frac{2\xi}{85} \right) \right)}_{\gamma_z(\varepsilon, \xi)} u_z \\ &\quad - \frac{16 \varepsilon^3}{45} u_z \left(\frac{46}{16} u_z^2 + u_x^2 + u_y^2 + \frac{\xi}{2} \omega^2 \right). \end{aligned} \quad (6.25)$$

Für die Herleitung dieser Gleichung wurde das Programmpaket "SysB" [85] verwendet. Offensichtlich ist der Reibungskoeffizient $\gamma_z(\varepsilon, \xi)$ eines leichten, rotierenden, total diffus-elastisch reflektierenden TT von ξ (Abschn. 2.1) abhängig.

Die *systematische Beschleunigung* eines leichten TT mit tensorieller Masse bis zur ersten Ordnung in \vec{u} lautet (5.48):

$$\begin{aligned} \frac{du_z}{dt} \Big|_{\mathcal{R}_{d(\sigma)}}^{\mathcal{O}(\vec{u})^1} &= -\gamma_z(\varepsilon_n, \sigma) u_z \\ &= -\frac{4}{3} \frac{\varepsilon_n}{1 + \varepsilon_n^2} \left(5 + \frac{\arctan\left(\sqrt{\frac{\sigma}{1-\sigma}}\right)}{\sigma^{\frac{3}{2}} \sqrt{1-\sigma}} - \frac{1}{\sigma} \right) u_z \end{aligned} \quad (6.26)$$

In Analogie zu (5.49) - (5.51) berechnen wir nun $\gamma_z(\varepsilon_n, \sigma)$ für die Spezialfälle

$$\gamma_z(\varepsilon_n, \sigma) = \frac{60}{9} \frac{\varepsilon_n}{1 + \varepsilon_n^2} \quad \text{für } -\sigma \gg 1, \quad (6.27)$$

$$\gamma_z \Big|_{\mathcal{R}_{d(3)}} = \lim_{\sigma \rightarrow 0} \gamma_z(\varepsilon_n, \sigma) = \frac{68}{9} \frac{\varepsilon_n}{1 + \varepsilon_n^2} \quad \text{für } \sigma = 0 \quad (6.28)$$

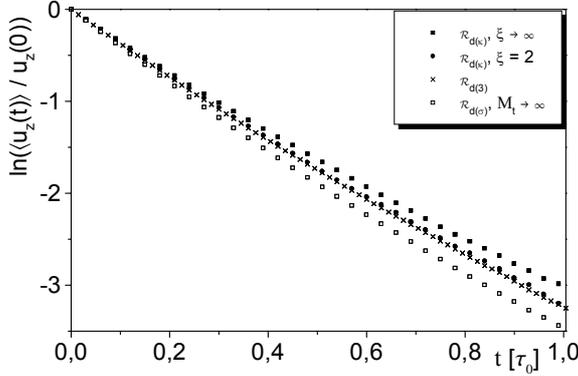


Abbildung 6.11a: Logarithmische Darstellung der mittleren Geschwindigkeit verschiedener Ensembles (siehe Legende) von 10^8 Testteilchen der Masse $M = M_n = m$ für die Anfangsbedingungen $u_z(0) = \sqrt{\langle u_z^2 \rangle}$ und $u_x(0) = u_y(0) = \omega(0) = 0$: volle Quadrate: $\mathcal{R}_{d(\kappa)}, \xi \rightarrow \infty$; volle Kreise: $\mathcal{R}_{d(\kappa)}$; Kreuze: $\mathcal{R}_{d(3)}$; leere Quadrate: $\mathcal{R}_{d(\sigma)}, M_t \rightarrow \infty$. Die Abkürzungen werden im Text (S. 17, 45) erklärt.

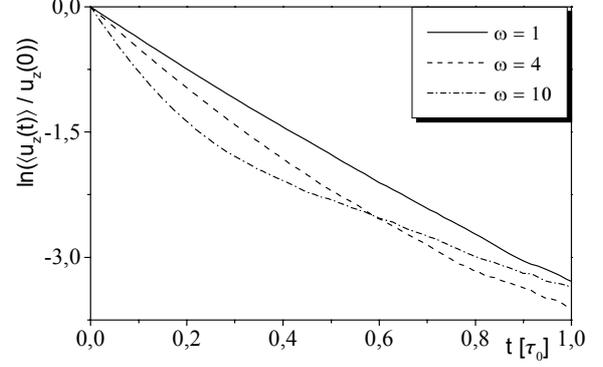


Abbildung 6.11b: Wie Abb. 6.11a, jedoch für rotierende Testteilchen ($\mathcal{R}_{d(\kappa)}, \xi = 2$) für verschiedene Anfangswinkelgeschwindigkeiten: durchgezogene Kurve: $\omega(0) = 1$; gestrichelte Kurve: $\omega(0) = 4$; Punktstrich-Kurve: $\omega(0) = 10$.

und

$$\lim_{\varepsilon_t \rightarrow 0} \gamma_z(\varepsilon_n, \sigma) \simeq \frac{68}{9} \varepsilon_n - \frac{308}{45} \varepsilon_n^3 + \mathcal{O}(\varepsilon_n)^5 \quad \text{für } \varepsilon_t \rightarrow 0 \quad (0 < \sigma < 1). \quad (6.29)$$

Für das Verhältnis zwischen den Reibungskoeffizienten $\gamma_z(\varepsilon_n, \sigma)$ (6.26), $\gamma_z(\varepsilon, \xi)$ (6.25) und $\gamma_z|_{\mathcal{R}_{d(3)}}$ folgt (vgl. (5.41) - (5.43), (5.52)):

$$\gamma_z(\varepsilon_n, \sigma) \text{ bzw. } \gamma_z(\varepsilon, \xi) < \gamma_z|_{\mathcal{R}_{d(3)}} \quad \text{für } 1 \leq \xi \leq \infty \text{ oder } \sigma < 0,$$

$$\gamma_z(\varepsilon_n, \sigma) = \gamma_z|_{\mathcal{R}_{d(3)}} \quad \text{für } \sigma = 0, \quad (6.30)$$

$$\text{und } \gamma_z(\varepsilon_n, \sigma) > \gamma_z|_{\mathcal{R}_{d(3)}} \quad \text{für } 0 < \sigma < 1.$$

Die entsprechenden Resultate der Computersimulation (Abb. 6.11a) sind in Tabelle 6.5 dargestellt. Sie bestätigen qualitativ die Voraussagen (6.30). Danach relaxiert der Normalen-Freiheitsgrad rotierender TT im Vergleich zu dem Fall "nichtrotierender TT" für $\sigma = 0$ langsamer in den Gleichgewichtszustand [17].

TT-Modell	γ_z (Computersimulation)	$\gamma_z _{\mathcal{R}_{d(3)}}$
nichtrotierende TT	3.23613	$\doteq \gamma_z$
rotierende TT ($\xi = 2$)	3.22288	$> \gamma_z$
rot. TT mit inh. Massenv. ($\xi \rightarrow \infty$)	3.01384	$> \gamma_z$
nichtr. TT mit tens. Masse ($\varepsilon_t \rightarrow 0$)	3.46743	$< \gamma_z$

Tabelle 6.5: Vergleich (qualitativ) der numerischen Reibungskoeffizienten von verschiedenen beidseitig total diffus-elastisch reflektierenden Testteilchen der Masse $M = M_n = m$ mit den analytischen Ergebnissen (6.25) und (6.30). Die Computersimulation umfaßte 10^8 Testteilchen.

Dieser Effekt wird auf die *Translations-Rotations-Kopplung* zurückgeführt und durch die Computersimulation qualitativ bestätigt (Abb. 6.11a).

Wir merken an, daß $\gamma_z(\varepsilon, \xi)$ mit zunehmenden ξ nach Gl. (6.25) abnimmt (Abb. 6.11a).

In Abb. 6.11b ist die mittlere Geschwindigkeit rotierender TT mit unterschiedlichen Anfangswinkelgeschwindigkeiten [87] dargestellt. Interessant ist die Tatsache, daß sich die *Geschwindigkeits-Autokorrelationsfunktionen* verschiedener TT-Ensembles, die alle zum Startzeitpunkt dieselbe Translationsgeschwindigkeit aber unterschiedliche Anfangswinkelgeschwindigkeiten besitzen, schneiden.

Betrachten wir ein Ensemble solcher TT, die mit der Anfangswinkelgeschwindigkeit $\omega(0) = 1$ (durchgezogene Kurve) starten. Ein TT-Ensemble mit einer betragsmäßig größeren Anfangswinkelgeschwindigkeit $\omega(0) = 4$ (gestrichelte Kurve) erfährt bei seiner Bewegung in Normalenrichtung (z -Richtung) vergleichsweise zunächst eine größere Reibung.

Dieses überraschende Verhalten wird durch die nichtlinearen Terme dritter Ordnung in \vec{u} , ω und ε der systematischen Beschleunigung (6.25) qualitativ sehr gut beschrieben. Die unterschiedliche zeitliche Entwicklung (Relaxation) der TT-Ensembles verschwindet natürlich mit der vollständigen Relaxation des Rotationsfreiheitsgrades.

Der unterschiedliche Verlauf der Geschwindigkeits-Autokorrelationsfunktionen bei verschiedenen Anfangswinkelgeschwindigkeiten zeigt ebenfalls, daß die einzelnen Freiheitsgrade der TT miteinander gekoppelt sind (*Translations-Rotations-Kopplung*).

Ein ähnlicher Effekt des Schneidens der Geschwindigkeits-Autokorrelationsfunktionen beidseitig spiegelnd-elastisch reflektierender TT wurde in Ref. [55] und [57] diskutiert.

Kapitel 7

Gerichtete Bewegung von Testteilchen durch asymmetrische stochastische Kräfte

In diesem Kapitel stellen wir ein neues Testteilchen-Modell vor, bei dem ebenfalls unter bestimmten Bedingungen (Nichtgleichgewicht) und einer Asymmetrie eine gerichtete Bewegung der Testteilchen (TT) entstehen kann. TT zeigen bei einer *Asymmetrie der stochastischen Kraft* (bei gleichem Druck) eine *kurzzeitige, gerichtete Beschleunigung* im Nichtgleichgewichtszustand, ohne das irgendeine äußere Kraft oder Gradient vorliegt. Dieser Effekt, der hier für *diskus-* und *kugelförmige*, symmetrische TT für den Wechselwirkungsmechanismus der spiegelnd-elastischen Reflexion nachgewiesen wird, ist eine unabhängige, zusätzliche Erklärungsmöglichkeit für das Auftreten einer gerichteten Bewegung (vgl. dazu auch die Einleitung). In diesem Kapitel zeigen wir, daß der Effekt in diesem Fall weitaus größer ist als der Effekt bei asymmetrischen TT (vgl. Abschn. 6.3). Außerdem zeigen wir, daß die Größe des Effekts wesentlich von der TT-Geometrie abhängig ist.

7.1 Modell

Im Folgenden wird eine gerichtete Bewegung symmetrischer TT durch asymmetrische, stochastische Kräfte nachgewiesen. Wir betonen, daß der Druck auf den beiden Seitenflächen des TT natürlich gleich groß ist.

Wir betrachten ein *beidseitig spiegelnd-elastisch reflektierendes* TT (Abb. 7.1). Ein solches TT bewege sich in einem im Laborsystem ruhend gedachten Zylinder in Normalenrichtung (z -Richtung), da die auftreffenden Medienteilchen (MT) nicht zu einer Impulsübertragung auf das TT in tangentialer Richtung beitragen. Dabei unterteile das TT das System (Volumen des Zylinders) in zwei voneinander getrennte Teilsysteme. Wir gehen davon aus, daß in beiden Teilsystemen sich jeweils ein stark verdünntes Mediengas bei gleicher Temperatur T im Gleichgewichtszustand befindet.

7 GERICHTETE BEWEGUNG VON TESTTEILCHEN
DURCH ASYMMETRISCHE STOCHASTISCHE KRÄFTE

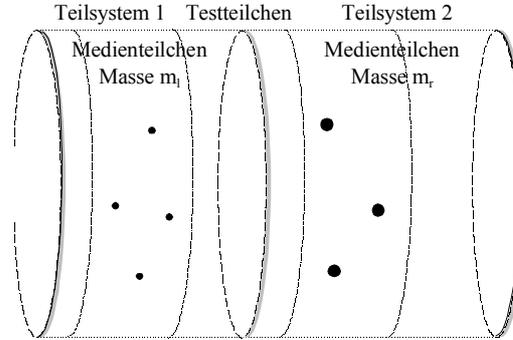


Abbildung 7.1: Zylindermodell: Das beidseitig spiegelnd-elastisch reflektierende, diskusförmige Testteilchen der Masse M bewege sich immer innerhalb eines (gedachten) Zylinders und unterteile diesen stets in zwei Teilsysteme. In den jeweiligen Teilsystemen befinden sich Medienteilchen der Masse m_l bzw. m_r .

Wir nehmen außerdem an, daß die auf der linken (Teilsystem 1) bzw. rechten Seite (Teilsystem 2) des TT auftreffenden MT *unterschiedliche* Massen, m_l bzw. m_r , besitzen. Die Geschwindigkeitsverteilungsfunktion der MT ist im thermodynamischen Gleichgewicht die MAXWELLverteilung (vgl. (2.1))

$$f_M^{(l/r)}(v_z) dv_z = \sqrt{\frac{m_{l/r}}{2\pi k_B T}} \exp\left(-\frac{m_{l/r} v_z^2}{2k_B T}\right) dv_z. \quad (7.1)$$

Weiterhin führen wir die Parameter

$$\varepsilon_l = \sqrt{\frac{m_l}{M}} \quad \text{und} \quad \varepsilon_r = \sqrt{\frac{m_r}{M}} \quad (7.2)$$

ein. Eine weitergehende Modifikation des Modells (Zylindermodell) hinsichtlich der Dichte des Gases von MT (der sogenannte *Schneepflugeffekt* [57]) ist leicht zu realisieren und für zukünftige Untersuchungen wünschenswert.

7.1.1 Diskusförmige Testteilchen

Zunächst untersuchen wir den *Strom* von MT (3.41) auf die linke Seite eines diskusförmigen TT (in den reduzierten Einheiten (5.6))

$$\begin{aligned}
 J_l(u_z) &= \frac{1}{A} \int dA \int_{u_z}^{\infty} (v_z - u_z) f_M^{(l)}(v_z) dv_z \\
 &= \frac{1}{\varepsilon_l} \exp\left(-\frac{\varepsilon_l^2 u_z^2}{2}\right) + \sqrt{\frac{\pi}{2}} u_z \left[\operatorname{erf}\left(\frac{\varepsilon_l u_z}{\sqrt{2}}\right) - 1 \right].
 \end{aligned} \tag{7.3}$$

Für den mittleren Strom $J_r(u_z)$ zur rechten Seitenfläche des TT gilt ein analoger Ausdruck, nur daß in (7.3) u_z durch $-u_z$ und ε_l durch ε_r zu ersetzen ist.

Der mittlere normierte Strom zur linken Seitenfläche des TT (Abb. 7.2) lautet:

$$p_l(u_z, \varepsilon_l, \varepsilon_r) = \frac{J_l(u_z, \varepsilon_l)}{J_l(u_z, \varepsilon_l) + J_r(u_z, \varepsilon_r)} \tag{7.4}$$

$p_l(u_z, \varepsilon_l, \varepsilon_r)$ ist einfach die Wahrscheinlichkeit, daß ein Stoß auf der linken Seite des TT mit der Geschwindigkeit u_z stattfindet. Wir berechnen nun $p_l(u_z)$ für zwei Spezialfälle; ein ruhendes ($u_z = 0$) und ein vollständig thermalisiertes, diskusförmiges TT ($u_z = \mathcal{M}$):

$$p_l(u_z = 0) = \frac{\varepsilon_r}{\varepsilon_r + \varepsilon_l} \quad \text{und} \quad p_l(u_z = \mathcal{M}) = \left(1 + \frac{\varepsilon_l}{\varepsilon_r} \sqrt{\frac{1 + \varepsilon_r^2}{1 + \varepsilon_l^2}} \right)^{-1} \tag{7.5}$$

Für $p_r(u_z, \varepsilon_l, \varepsilon_r)$ gelten analoge Ausdrücke.

Weiterhin nehmen wir an, daß m_r viel größer als m_l ($\varepsilon_l \ll \varepsilon_r$) ist. Wir entwickeln (7.4) bis zu Termen erster Ordnung in $\varepsilon_l/\varepsilon_r$ und erhalten:

$$p_l(u_z, \varepsilon_l, \varepsilon_r) \simeq 1 - \frac{\varepsilon_l}{\varepsilon_r} J_r(u_z) \quad \text{für} \quad \varepsilon_l \ll \varepsilon_r \tag{7.6}$$

In diesem Fall nimmt $p_l(u_z)$ nur allmählich mit steigender Geschwindigkeit $u_z \gtrsim 0$ des TT ab (Abb. 7.2).

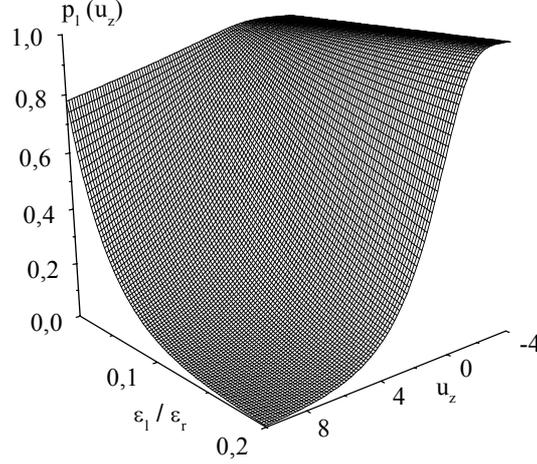


Abbildung 7.2: Mittlerer normierter Strom (7.4) zur linken Seitenfläche des TT in Abhängigkeit von der Geschwindigkeit u_z und dem Verhältnis $\varepsilon_l/\varepsilon_r = \sqrt{\frac{m_l}{m_r}}$.

Wir untersuchen nun die Änderung der Geschwindigkeit durch einen Stoß auf der linken bzw. rechten Seite des diskusförmigen TT

$$\Delta u_z = \frac{2 \varepsilon_{l/r}^2}{1 + \varepsilon_{l/r}^2} (v_z - u_z). \quad (7.7)$$

Die Geschwindigkeitsänderung des TT ist nach dem ersten Treffer auf der linken Seite wesentlich kleiner

$$\Delta^{(l)} u_z = \frac{2 \varepsilon_l^2}{1 + \varepsilon_l^2} v_z \ll \Delta^{(r)} u_z = \frac{2 \varepsilon_r^2}{1 + \varepsilon_r^2} v_z \text{ für } u_z = 0 \quad (7.8)$$

als bei einem Treffer auf der rechten Seite des TT, jedoch erfolgen die Stöße auf der linken Seite entsprechend häufiger und damit auch in kürzeren Zeitintervallen (s. Abb. 7.3b).

Wir nehmen an, daß der jeweils *erste* erzeugte Geschwindigkeitszuwachs $\Delta u_{z,i}$ des i -ten TT in einem Zeitintervall Δt stattfindet.

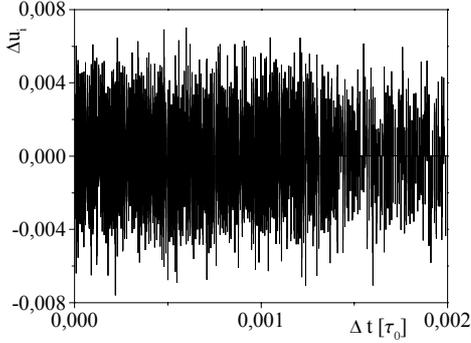


Abbildung 7.3a: Die Abbildung zeigt den jeweils ersten erzeugten Geschwindigkeitszuwachs $\Delta u_{z,i}$ des i -ten Testteilchens der Masse $M = 1000 m$ ($m = m_l = m_r$), das bei $t = 0$ mit $u_z(0) = 0$ gestartet ist (symmetrische stochastische Kräfte).

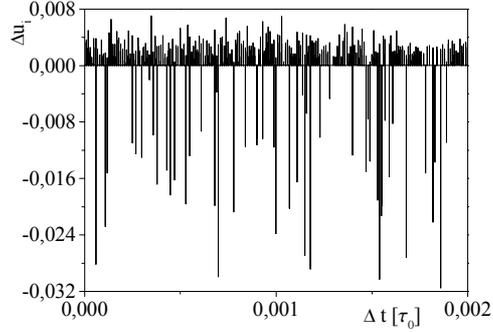


Abbildung 7.3b: Wie Abb. 7.3a. Die Massen der Medienteilchen m_l bzw. m_r im Teilsystem 1 bzw. 2 (Abb. 7.1) sind hier jedoch verschieden $m_r = 6 m_l$ (asymmetrische stochastische Kräfte).

Zur Veranschaulichung ist in Abbildung 7.3 der jeweilige Geschwindigkeitszuwachs für sehr schwere TT der Masse $M = 1000 m$ (BROWNSche Teilchen) für den Fall $m = m_r = m_l$ (a) und $m_r = 6 m_l$ (b) dargestellt.

Falls $\varepsilon_l \ll \varepsilon_r$ und $u_z = 0$, d.h. $p_l \simeq 1$ (7.6) ist, tragen in Δt sehr viele kleine positive Geschwindigkeitsänderungen $\Delta u_{z,i}$ (Abb. 7.3b) zur mittleren Geschwindigkeitsänderung

$$\Delta u_z = \sum_{\Delta t} \left(\Delta^{(l)} u_{z,i} + \Delta^{(r)} u_{z,i} \right) \quad (7.9)$$

bei. Die mittlere Geschwindigkeit des Ensembles genau einmal getroffener TT ist wegen der hohen Trefferwahrscheinlichkeit auf der linken Seite des TT positiv. Selbst danach überwiegen in diesem Ensemble wieder diejenigen TT, die jeweils auf der linken Seite von MT getroffen werden (vgl. Abb. 7.9b). Das Ensemble erfährt dabei annähernd eine konstante positive Beschleunigung. Im Vergleich dazu führt ein Treffer auf der rechten Seite des TT zu einer großen Geschwindigkeitsänderung, wenngleich dieses Ereignis viel seltener stattfindet (vgl. Abb. 7.8a).

7.1.2 Kugelförmige Testteilchen

Der Strom von MT auf die linke Seite eines kugelförmigen TT lautet:

$$J_l = \frac{1}{A_K} \int dA_K \int_{u_n}^{\infty} \varepsilon_l (v_n - u_n) \exp\left(-\frac{\varepsilon_l^2 v_n^2}{2}\right) dv_n \quad (7.10)$$

Das Oberflächenelement auf einem kugelförmigen TT ist $dA_K = R_K^2 \sin \vartheta d\vartheta d\varphi$, wobei R_K der Radius des TT ist. Wir weisen *ausdrücklich* darauf hin, daß hierbei $A_K = 2\pi R_K^2$ der *Halbkugelflächeninhalt* ist. Die Normalengeschwindigkeit u_n eines Oberflächenelementes auf dem Breitengrad ϑ der Kugel ist $u_n = u \cos \vartheta$, wobei u der Betrag der Geschwindigkeit des TT ist. Da bei dem spiegelnd-elastischen Stoß sich die tangentielle Geschwindigkeit des TT jedoch nicht ändert, ist $u_n = u_z \cos \vartheta$. Die Integration über v_n liefert:

$$\begin{aligned} J_l(u_z) &= \int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin \vartheta d\vartheta \left[\frac{1}{\varepsilon_l} \exp\left(-\frac{\varepsilon_l^2 u_z^2 \cos^2 \vartheta}{2}\right) + \sqrt{\frac{\pi}{2}} u_z \cos \vartheta \left(\operatorname{erf}\left(\frac{\varepsilon_l u_z \cos \vartheta}{\sqrt{2}}\right) - 1 \right) \right] \\ &= \frac{1}{2\varepsilon_l} \exp\left(-\frac{\varepsilon_l^2 u_z^2}{2}\right) + \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{u_z}{2} \left[(1 + \varepsilon_l^{-2} u_z^{-2}) \operatorname{erf}\left(\frac{\varepsilon_l u_z}{\sqrt{2}}\right) - 1 \right]. \end{aligned} \quad (7.11)$$

Für den Strom $J_r(u_z)$ gilt ein analoger Ausdruck. Der Breitengrad ϑ wird nach der Verteilungsfunktion

$$\begin{aligned} f(\vartheta) d\vartheta &\sim \frac{1}{\varepsilon_{l/r}} \exp\left(-\frac{\varepsilon_{l/r}^2 u_z^2 \cos^2 \vartheta}{2}\right) \sin \vartheta d\vartheta \\ &+ \sqrt{\frac{\pi}{2}} u_z \left[\operatorname{erf}\left(\frac{\varepsilon_{l/r} u_z \cos \vartheta}{\sqrt{2}}\right) \mp 1 \right] \cos \vartheta \sin \vartheta d\vartheta \end{aligned} \quad (7.12)$$

ausgewürfelt. Das Minuszeichen in der eckigen Klammer gilt dabei für Treffer auf der linken Seite, das Pluszeichen entsprechend für Treffer auf der rechten Seite des TT.

Die Geschwindigkeitsänderung eines kugelförmigen TT ergibt sich aus Impuls- und Energieerhaltungssatz

$$u_z + \varepsilon_{l/r}^2 v_n \cos \vartheta = u'_z + \varepsilon_{l/r}^2 v'_n \cos \vartheta, \quad (7.13)$$

$$u_z^2 + \varepsilon_{l/r}^2 v_n^2 = u'^2_z + \varepsilon_{l/r}^2 v'^2_n \quad (7.14)$$

zu [70]

$$\Delta^{(l/r)} u_z = \frac{2\varepsilon_{l/r}^2 \cos \vartheta}{1 + \varepsilon_{l/r}^2 \cos^2 \vartheta} (v_n - u_z \cos \vartheta). \quad (7.15)$$

7.2 Systematische Beschleunigung und Reibungskoeffizienten

Im Rahmen des Zylindermodells berechnen wir nun die *systematische Beschleunigung* eines diskusförmigen, spiegelnd-elastisch reflektierenden TT in Normalenrichtung (5.4), wobei wir $u \equiv u_z$, $v \equiv v_z$ setzen. Mit (7.3) und (7.7) wird

$$\begin{aligned} \frac{du}{dt} \Big|_{\mathcal{R}_e^l}^{\text{diskf. TT}} &= \frac{2 \varepsilon_l^3}{1 + \varepsilon_l^2} \int_u^\infty (v - u)^2 \exp\left(-\frac{\varepsilon_l^2 v^2}{2}\right) dv \\ &= -\frac{2 \varepsilon_l^2 u J_l(u) - \sqrt{2\pi} \operatorname{erfc}\left[\frac{\varepsilon_l u}{\sqrt{2}}\right]}{1 + \varepsilon_l^2}. \end{aligned} \quad (7.16)$$

$J_l(u)$ ist der mittlere u -abhängige Strom von MT auf die linke Seite des TT. Entsprechend gilt auf der rechten Seite

$$\begin{aligned} \frac{du}{dt} \Big|_{\mathcal{R}_e^r}^{\text{diskf. TT}} &= -\frac{2 \varepsilon_r^3}{1 + \varepsilon_r^2} \int_{-u}^\infty (v + u)^2 \exp\left(-\frac{\varepsilon_r^2 v^2}{2}\right) dv \\ &= -\frac{2 \varepsilon_r^2 u J_r(u) + \sqrt{2\pi} \left(\operatorname{erf}\left[\frac{\varepsilon_r u}{\sqrt{2}}\right] + 1\right)}{1 + \varepsilon_r^2}. \end{aligned} \quad (7.17)$$

Wir entwickeln (7.16) und (7.17) bis zu Termen zweiter Ordnung in u , ε_l bzw. ε_r und erhalten

$$\frac{du}{dt} \Big|_{\mathcal{R}_e^l}^{\mathcal{O}(u, \varepsilon_l)^2} = \sqrt{2\pi} - 4 \varepsilon_l u - \sqrt{2\pi} \varepsilon_l^2 (1 - u^2) \quad (7.18)$$

und

$$\frac{du}{dt} \Big|_{\mathcal{R}_e^r}^{\mathcal{O}(u, \varepsilon_r)^2} = -\sqrt{2\pi} - 4 \varepsilon_r u + \sqrt{2\pi} \varepsilon_r^2 (1 - u^2). \quad (7.19)$$

Man erhält nach Addition der beiden Gleichungen

$$\frac{du}{dt} \Big|_{\mathcal{R}_e}^{\mathcal{O}(u, \varepsilon_l, \varepsilon_r)^2} = -\gamma^{\text{diskf.}} u + \alpha^{\text{diskf.}} (1 - u^2), \quad (7.20)$$

mit den Reibungskoeffizienten

$$\gamma^{\text{diskf.}} = 4(\varepsilon_l + \varepsilon_r) \quad \text{und} \quad \alpha^{\text{diskf.}} = \sqrt{2\pi} (\varepsilon_r^2 - \varepsilon_l^2). \quad (7.21)$$

7 GERICHTETE BEWEGUNG VON TESTTEILCHEN
DURCH ASYMMETRISCHE STOCHASTISCHE KRÄFTE

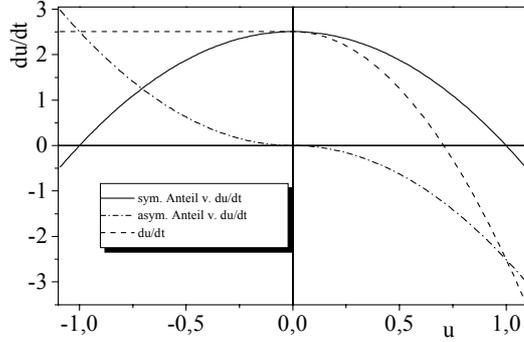


Abbildung 7.4a: Systematische Beschleunigung einschließlich ihres symmetrischen und antisymmetrischen Anteils in Abhängigkeit von der Geschwindigkeit $u \equiv u_z$ diskusförmiger Testteilchen. Die Parameter sind: $\varepsilon_l = 0$, $\varepsilon_r = 100$.

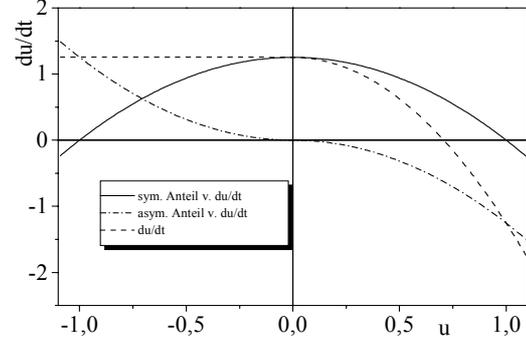


Abbildung 7.4b: Wie Abb. 7.4a, jedoch für kugelförmige Testteilchen. Die Kurven sind Resultate einer numerischen Integration von Gl. (7.22) und (7.23).

Erwartungsgemäß ist der Ausdruck für $\gamma^{\text{diskf.}}$ (in nichtreduzierte Einheiten) für $\varepsilon_l = \varepsilon_r = \varepsilon$ mit den Ausdruck (5.17) identisch.

Aus (7.10), (7.15) folgen analog die entsprechenden Ausdrücke für ein kugelförmiges TT

$$\frac{du}{dt} \Big|_{\mathcal{R}_e^l} \Big|_{\text{kuglf. TT}} = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{2 \varepsilon_l^3 \cos \vartheta}{1 + \varepsilon_l^2 \cos^2 \vartheta} \sin \vartheta d\vartheta \int_{u_n}^{\infty} (v_n - u_n)^2 \exp\left(-\frac{\varepsilon_l^2 v_n^2}{2}\right) dv_n \quad (7.22)$$

und

$$\frac{du}{dt} \Big|_{\mathcal{R}_e^r} \Big|_{\text{kuglf. TT}} = - \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{2 \varepsilon_r^3 \cos \vartheta}{1 + \varepsilon_r^2 \cos^2 \vartheta} \sin \vartheta d\vartheta \int_{-u_n}^{\infty} (v_n + u_n)^2 \exp\left(-\frac{\varepsilon_r^2 v_n^2}{2}\right) dv_n. \quad (7.23)$$

Wir führen die Integration über u_n durch und setzen $u_n = u \cos \vartheta$ ($u \equiv u_z$) ein. Die Integration über ϑ in den jeweiligen Gleichungen ist jedoch in geschlossener Form nicht darstellbar. Wir entwickeln die jeweiligen resultierenden Ausdrücke wieder bis zu Termen zweiter Ordnung in u , ε_l bzw. ε_r .

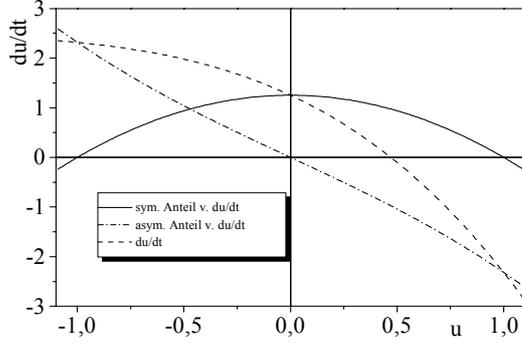


Abbildung 7.5a: Wie Abb. 7.4a, jedoch mit den Parametern: $\varepsilon_l = 0$, $\varepsilon_r = 1$.

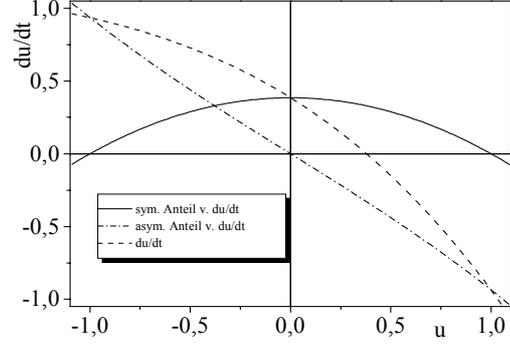


Abbildung 7.5b: Wie Abb. 7.5a, jedoch für kugelförmige Testteilchen. Die Kurven sind Resultate einer numerischen Integration der Gl. (7.22) und (7.23).

Wir erhalten eine Gleichung der Form (7.20) für die Reibungskoeffizienten eines kugelförmigen TT

$$\gamma^{\text{kuglf.}} = \frac{4}{3}(\varepsilon_l + \varepsilon_r) \quad \text{und} \quad \alpha^{\text{kuglf.}} = \frac{\sqrt{2\pi}}{4}(\varepsilon_r^2 - \varepsilon_l^2). \quad (7.24)$$

Der lineare Reibungskoeffizient $\gamma^{\text{kuglf.}}$ lautet für $\varepsilon_l = \varepsilon_r = \varepsilon$ in nichtreduzierte Einheiten

$$\gamma_{\text{sp.-el.}}^{\text{kuglf.}} = \frac{8}{3} n A_K \sqrt{\frac{m}{M}} \sqrt{\frac{k_B T}{2\pi M}} = \frac{2}{3} n A_K \frac{m}{M} \langle v \rangle. \quad (7.25)$$

Wegen dem Halbkugelflächeninhalt A_K (7.10) ist der entsprechende Ausdruck in der Literatur [70] um den Faktor 1/2 kleiner. Der Reibungskoeffizient für kugelförmige TT stimmt mit entsprechenden Resultaten der Computersimulation für TT der Masse $M = 100m$ (Abb. 7.6) gut überein.

7.3 Ergebnisse der Computersimulation

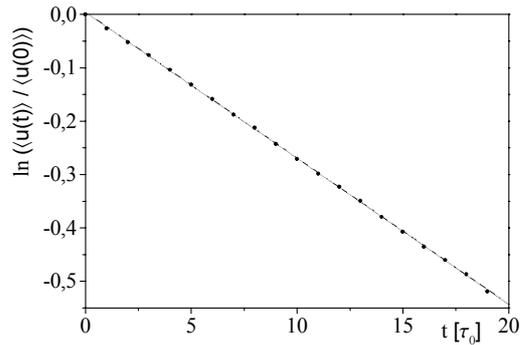


Abbildung 7.6: Logarithmische Darstellung der mittleren Geschwindigkeit eines Ensembles von 10^8 kugelförmigen Testteilchen der Masse $M = 100m$ ($m = m_l = m_r$), die alle mit der Geschwindigkeit $u(0) = \sqrt{\langle u^2 \rangle}$ gestartet sind (symmetrische stochastische Kraft). Die gestrichelte Kurve zeigt den linearen Fit.

Als erster Test für eine fehlerfreie Computersimulation werden erneut die ersten beiden Momente der Geschwindigkeit (Tabelle 7.1) untersucht.

ε_l	ε_r	$\langle p_l \rangle$	$\langle p_r \rangle$	$\langle u \rangle$	$\langle u^2 \rangle$	TT-Geometrie
0.01	1	.986051345	0.013948655	-.00050682	1.00054431	diskf.
0.01	100	.986059605	0.013940395	.00029428	.99932087	diskf.
0.01	1	.98865176	0.011348	-.000673	1.001161	kuglf.

Tabelle 7.1: Momente der Geschwindigkeit (Computersimulation von $2 \cdot 10^8$ Stöße) für spiegelnd-elastisch reflektierende (diskusförmige/kugelförmige) Testteilchen. $\langle p_l \rangle / \langle p_r \rangle$ ist der normierte Strom (Zeitmittel) zur linken/rechten Seitenfläche des TT (vgl. (7.5)).

Auch hier stimmen die numerischen Momente im Rahmen der statistischen Genauigkeit mit den theoretischen Werten überein (vgl. S. 53). Darüber hinaus zeigt Tabelle 7.1 die aus der Computersimulation erhaltenen Werte für p_l bzw. p_r (7.4). Diese Werte stimmen mit den entsprechenden theoretischen Werten (7.5) für ein vollständig thermalisiertes TT (Äquivalenz von Ensemble- und Zeitmittel) nahezu exakt überein. Nach (7.5) beträgt $\langle p_l \rangle = 0.986056$ für $\varepsilon_l = 0.01$ und $\varepsilon_r = 1$.

Die systematische Beschleunigung eines schwereren diskusförmigen TT im Rahmen des Zylindermodells wird durch die Gl. (7.20) beschrieben, sie hat dieselbe Form wie (6.13).

Für das Verhältnis

$$\frac{\varepsilon_l}{\varepsilon_r} = \frac{149}{140} \text{ für } 1 > \varepsilon_l > \varepsilon_r = \varepsilon, \quad (7.26)$$

unterscheiden sich die Gleichungen nur durch eine unterschiedliche Zeitskala.

Speziell für die Anfangsgeschwindigkeit $u(0) = 0$ und $\varepsilon_l \ll \varepsilon_r$ bewirkt der Term $\alpha^{\text{diskf.}}$ (7.21) eine systematische Beschleunigung der TT in positiver z -Richtung (Abb. 7.7), bis der Normalen-Freiheitsgrad der TT vollständig zum Gleichgewicht relaxiert ist. Die systematische Beschleunigung solcher TT führt zu *ähnlichen* nichtlinearen Effekten, wie bei den *asymmetrischen TT*.

Bei dem Zylindermodell ist der konstante Term $\alpha^{\text{diskf.}}$ und der quadratische Term in der Geschwindigkeit (7.20) eine unmittelbare Folge der *Asymmetrie der stochastischen Kraft* (Abb. 7.3b). Bei dem Grundmodell (Kap. 6) sind die in u symmetrischen Terme in (6.13) auf die *unterschiedlichen Reflexionseigenschaften* der Seitenflächen des asymmetrischen TT zurückzuführen.

Interessant ist auch die Tatsache, daß im Unterschied zu (5.4), die Entwicklung der Gln. (7.16) und (7.17) zwar einen u^2 -Term, jedoch keine Terme von höherer, gerader Ordnung in u liefert.

In der weiteren Diskussion nehmen wir an, daß die auf der linken Seite des TT auftreffenden MT (Teilsystem 1) eine verschwindend kleine Masse $m_l \rightarrow 0$ besitzen, d.h. $\varepsilon_l \rightarrow 0$. Dieser Fall bedeutet, daß Stöße dieser MT für diesen Grenzfall nur eine konstante Beschleunigung

$$\lim_{\varepsilon_l \rightarrow 0} \frac{du}{dt} \Big|_{\mathcal{R}_e^l}^{\text{diskf. TT}} = \sqrt{2\pi} \text{ und } \lim_{\varepsilon_l \rightarrow 0} \frac{du}{dt} \Big|_{\mathcal{R}_e^l}^{\text{kuglf. TT}} = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \quad (7.27)$$

nach rechts, d.h. in positiver Richtung auf die TT ausüben. Weiter folgt (7.4):

$$\lim_{\varepsilon_l \rightarrow 0} p_l(u_z) = 1 \text{ und } \lim_{\varepsilon_l \rightarrow 0} p_r(u_z) = 0 \quad (7.28)$$

Wir weisen ausdrücklich darauf hin, daß bei den numerischen Untersuchungen notwendigerweise ein endliches ε_l gewählt werden muß.

Bei weiteren Untersuchungen betrachten wir zwei Spezialfälle:

- 1 Die Masse des MT im Teilsystem 2 ist sehr viel größer als die des TT, d.h. $m_r \gg M$ bzw. $\varepsilon_r \gg 1$ (Abb. 7.4).
- 2 Die TT und MT im Teilsystem 2 besitzen eine vergleichbare Masse, speziell wählen wir $m_r = M$ bzw. $\varepsilon_r = 1$ (Abb. 7.5).

Für diese Fälle berechnen wir den Beitrag der rechten Seite eines ruhenden TT ($u = 0$) zur systematischen Beschleunigung. Aus (7.17) und (7.23) folgt für den Fall (1):

$$\lim_{\varepsilon_r \rightarrow \infty} \frac{du}{dt} \Big|_{\mathcal{R}_e^r, u=0}^{\text{diskf. TT}} = \lim_{\varepsilon_r \rightarrow \infty} \left(-\frac{\sqrt{2\pi}}{1 + \varepsilon_r^2} \right) = 0, \quad (7.29)$$

$$\lim_{\varepsilon_r \rightarrow \infty} \frac{du}{dt} \Big|_{\mathcal{R}_e^r, u=0}^{\text{kuglf. TT}} = \lim_{\varepsilon_r \rightarrow \infty} \left(-\sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\log(1 + \varepsilon_r^2)}{\varepsilon_r^2} \right) = 0$$

und für den Fall (2):

$$\lim_{\varepsilon_r \rightarrow 1} \frac{du}{dt} \Big|_{\mathcal{R}_e^r, u=0}^{\text{diskf. TT}} = -\sqrt{\frac{\pi}{2}} \quad \text{und} \quad \lim_{\varepsilon_r \rightarrow 1} \frac{du}{dt} \Big|_{\mathcal{R}_e^r, u=0}^{\text{kuglf. TT}} = -\sqrt{\frac{\pi}{2}} \log(2) \quad (7.30)$$

Wir berücksichtigen in (7.16) und (7.17) nur Terme bis zur zweiten Ordnung in u :

$$\begin{aligned} \frac{du}{dt} \Big|_{\mathcal{R}_e^r, u \ll 1}^{\text{diskf. TT}} &= \left(\frac{\sqrt{2\pi}}{1 + \varepsilon_l^2} - \frac{\sqrt{2\pi}}{1 + \varepsilon_r^2} \right) - 4 \left(\frac{\varepsilon_l}{1 + \varepsilon_l^2} + \frac{\varepsilon_r}{1 + \varepsilon_r^2} \right) u \\ &\quad + \left(\frac{\sqrt{2\pi} \varepsilon_l^2}{1 + \varepsilon_l^2} - \frac{\sqrt{2\pi} \varepsilon_r^2}{1 + \varepsilon_r^2} \right) u^2 \end{aligned} \quad (7.31)$$

Für den Fall (1) folgt:

$$\lim_{\varepsilon_r \rightarrow \infty} \lim_{\varepsilon_l \rightarrow 0} \frac{du}{dt} \Big|_{\mathcal{R}_e^r, u \ll 1}^{\text{diskf. TT}} = \sqrt{2\pi} (1 - u^2) \quad (7.32)$$

Auf ruhende diskusförmige TT wirkt im Mittel eine nahezu *konstante*, positive Beschleunigung der Größe $\sqrt{2\pi} \simeq 2.5$.

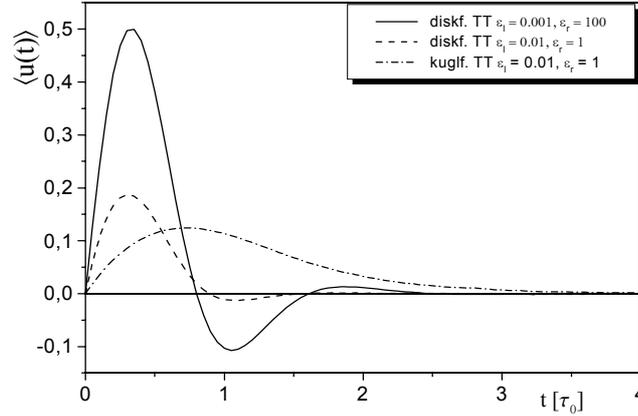


Abbildung 7.7: Mittlere Geschwindigkeit eines Ensembles von N spiegelnd-elastisch reflektierenden Testteilchen (TT), die alle mit der Anfangsgeschwindigkeit $u(0) = 0$ gestartet sind: durchgezogene Kurve: Verlauf bei $N = 3 \times 10^6$ diskusförmigen TT, wobei $\varepsilon_l = 0.001$ und $\varepsilon_r = 100$ (siehe Text) ist; gestrichelte Kurve: Verlauf bei $N = 6 \times 10^7$ diskusförmigen TT, jedoch mit den Parametern: $\varepsilon_l = 0.01$ und $\varepsilon_r = 1$; Punkt-Strich-Kurve: Verlauf bei $N = 5 \times 10^7$ kugelförmigen TT, ebenfalls für $\varepsilon_l = 0.01$ und $\varepsilon_r = 1$.

Aus (7.31) folgt im Falle $\varepsilon_l \rightarrow 0$ für den symmetrischen Anteil der systematischen Beschleunigung:

$$\left. \frac{du}{dt} \right|_{\mathcal{R}_e, \text{sym. Anteil}}^{\text{diskf. TT}} = \sqrt{2\pi} \left(1 - \frac{1}{1 + \varepsilon_r^2} - \frac{\varepsilon_r^2}{1 + \varepsilon_r^2} u^2 \right) \quad (7.33)$$

Dieser Anteil ist für $\varepsilon_r = 100$ in Abb. 7.4a (durchgezogene Kurve) dargestellt. Analog ergibt sich der antisymmetrische Anteil (Punkt-Strich-Kurve) einfach aus der Differenz der systematischen Beschleunigung (gestrichelte Kurve) und dem Ausdruck (7.33). Aufgrund der fehlenden Terme der Ordnung $\mathcal{O}(u)^{2(n+2)}$ in (7.16) und (7.17) ist diese einfache Trennung des symmetrischen und antisymmetrischen Anteils einfach möglich. Die systematische Beschleunigung (7.33) verschwindet in jedem Fall im thermodynamischen Gleichgewicht.

7 GERICHTETE BEWEGUNG VON TESTTEILCHEN
DURCH ASYMMETRISCHE STOCHASTISCHE KRÄFTE

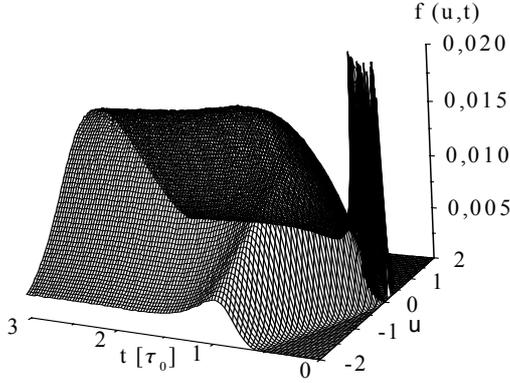


Abbildung 7.8a: Zeitliche Entwicklung der Geschwindigkeits-Verteilungsfunktion $f(u, t)$ eines Ensembles von 6×10^7 Testteilchen, das mit $f(u) = \delta(u - 0)$ gestartet wurde. Die Parameter sind: $\varepsilon_l = 0.01$ und $\varepsilon_r = 100$.

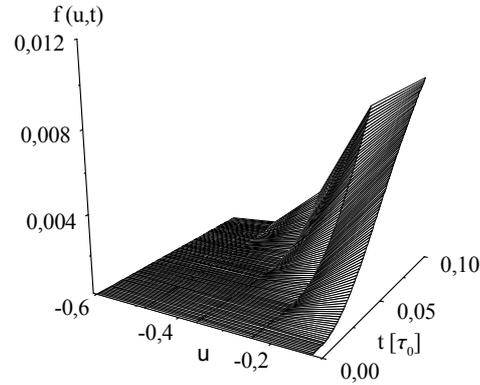


Abbildung 7.8b: Vergrößerter Ausschnitt von $f(u, t)$ für $u < 0$ für kleine Zeiten. Für die Darstellung wurden nur die Werte $f(u, t) \leq 0.02$ verwendet.

Wir vergleichen wieder die analytischen Resultate mit den Ergebnissen der Computersimulation. Bei den numerischen Resultaten dieses Abschnitts wird die Zeiteinheit

$$\tau_0 := \frac{2}{nA\sqrt{\frac{8k_B T}{\pi M}}} \quad (7.34)$$

verwendet, die natürlich für $M = m_l = m_r$ mit (3.44) identisch ist.

Abb. 7.7 zeigt den zeitlichen Verlauf der mittleren Geschwindigkeit eines Ensembles von TT, die alle mit der gleichen Anfangsgeschwindigkeit $u(0) = 0$ gestartet sind. In Übereinstimmung mit den theoretischen Voraussagen wächst die mittlere Geschwindigkeit der TT (durchgezogene Kurve) bis zum Zeitpunkt $t = 0.05$ ($\langle u(t) \rangle = 0,12$) nahezu linear mit der Zeit an. Der numerische Wert für die konstante Beschleunigung beträgt dabei 2.4675 und weicht damit nur geringfügig von dem theoretischen Wert $\sqrt{2\pi} \simeq 2.5$ ab.

Mit steigender, mittlerer Geschwindigkeit nimmt die gerichtete Beschleunigung des Ensembles wieder ab. In dieser Situation gewinnen die Reibungsterme dritter Ordnung in u ((7.16), (7.17)) zunehmend an Bedeutung (vgl. (7.32)). Die maximal erreichte mittlere Geschwindigkeit des Ensembles für das Verhältnis $\varepsilon_l/\varepsilon_r = 10^{-5}$ beträgt $\langle u(t) \rangle^{\max} = 0.5$ und läßt sich nicht mehr durch ein noch kleineres $\varepsilon_l/\varepsilon_r$ mehr steigern.

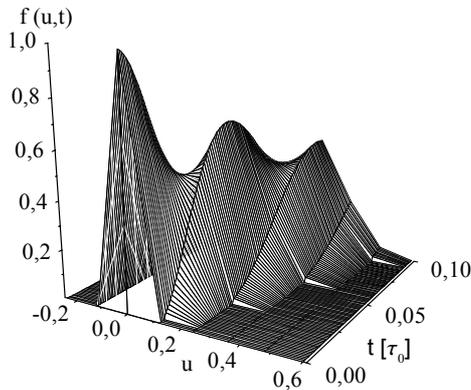


Abbildung 7.9a: Wie Abb. 7.8. Für die Darstellung wurden nur die Werte $f(u, t) > 0.02$ verwendet.

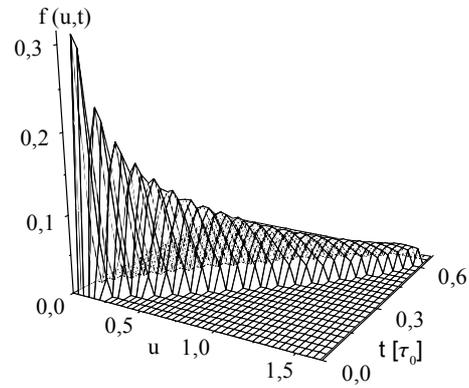


Abbildung 7.9b: Erweiterter Ausschnitt von $f(u, t)$ für $u \geq 0$. Die deltaförmige Anfangsverteilung wurde herausgenommen.

Wir stellen fest: Der Effekt der gerichteten Bewegung ist bei einer *Asymmetrie der stochastischen Kraft* also um einen **Faktor** 15 – 30 größer als der Effekt, der bei *asymmetrischen TT* (vgl. Abb. 6.9) beobachtet wurde.

Der Vergleich des zeitlichen Verlaufs der mittleren Geschwindigkeit eines Ensembles diskusförmiger TT (Abb. 7.7, gestrichelte Kurve) mit dem Verlauf kugelförmiger TT (Punkt-Strich-Kurve) für den Fall (2) zeigt, daß die *Größe des Effekts* der gerichteten Bewegung wesentlich von der *Geometrie des TT* abhängt. Bei kugelförmigen TT ist die maximale gerichtete Geschwindigkeit um einen Faktor $\frac{2}{3}$ kleiner als bei diskusförmigen TT, sie hält jedoch aufgrund des kleineren, linearen Reibungskoeffizienten ($\gamma^{\text{kuglf.}} = \frac{\gamma^{\text{diskf.}}}{3}$) vergleichsweise länger vor.

Zuletzt betrachten wir noch die Geschwindigkeits-Verteilungsfunktion $f(u, t)$ (Abb. 7.8 und 7.9). Die deltaförmige Anfangsverteilung $\delta(u - u(0)) du$ verbreitert sich allmählich hin zur Gleichgewichtsverteilung.

Kapitel 8

Störungsrechnung

Im ersten Teil dieses Kapitels betrachten wir wiederum symmetrische Testteilchen (TT) für den Fall einer *Asymmetrie der stochastischen Kraft* (Kap. 7, Zylindermodell). Aus der systematischen und stochastischen Beschleunigung (additives Rauschen) solcher TT folgt eine nichtlineare, erweiterte LANGEVIN-Gleichung, die sowohl mit Hilfe einfacher *Störungsrechnung* in erster Näherung als auch in der Form einer speziellen Riccatischen Differentialgleichung gelöst wird. Die Behandlung von Testteilchen mit Hilfe der Störungsrechnung ist für $\varepsilon \ll 1$ besonders geeignet, da in diesem Fall die Computersimulation sehr zeitaufwendig ist. Die analytischen Resultate werden durch die Computersimulation leichterer TT bestätigt und liefern neue Einsichten, die insbesondere für das Verständnis der *gerichteten Bewegung* der TT von Vorteil sind.

Im zweiten Teil wird schließlich auch eine analytische Näherungslösung für die mittlere Geschwindigkeit und Winkelgeschwindigkeit rotierender, asymmetrischer Testteilchen mittels Störungsrechnung abgeleitet und mit Ergebnissen der Computersimulation verglichen.

8.1 Lösung der nichtlinearen Langevin-Gleichung

8.1.1 Einleitung

Die verallgemeinerte LANGEVIN-Gleichung ([88] - [90], [79])

$$\frac{du}{dt} = -\gamma(u) u + \mathbb{A}(u, t) \quad (8.1)$$

ist eine nichtlineare stochastische Differentialgleichung (DGL), wobei der Reibungskoeffizient $\gamma(u(t))$ und entsprechend die stochastische Beschleunigung $\mathbb{A}(t, u(t))$ phänomenologisch (für einen Gaußschen weißen Prozeß) als geschwindigkeitsabhängig angenommen werden.

Aus (8.1) folgt formal für den Zuwachs Δu während eines Zeitschrittes Δt ([78], [79]):

$$\Delta u = u(t + \Delta t) - u(t) = -\gamma(u) u \Delta t + \int_t^{t+\Delta t} \mathbb{A}(u, t') dt' + \mathcal{O}(\Delta t) \quad (8.2)$$

Die Interpretation des stochastischen Prozesses auf der Grundlage von (8.1) ist aufgrund der u -Abhängigkeit von \mathbb{A} nicht eindeutig. Es gibt eine elementare Interpretation von ITO und MC KEAN ([91], [92]) und eine alternative von STRATONOVICH [93]. $\mathbb{A}(u, t')$ wird in (8.2) nach ITO und MC KEAN durch $\mathbb{A}(u(t), t')$, nach STRATONOVICH dagegen durch $\mathbb{A}(u(t'), t')$ ersetzt. Es folgen zwei unterschiedliche FOKKER-PLANCK-Gleichungen, obwohl der stochastische Prozeß eindeutig durch eine konkrete FOKKER-PLANCK-Gleichung beschrieben wird. Modelliert man also einen stochastischen Prozeß auf der Basis der nichtlinearen LANGEVIN-Gleichung (8.1), so unterscheidet sich die Form des Prozesses je nach Wahl der Interpretation [94].

In Ref. [55] wurde eine nichtlineare stochastische Differentialgleichung der Form

$$\frac{du}{dt} = -\gamma(\varepsilon) u(t) - \gamma_3(\varepsilon) u^3(t) + \mathbb{A}(t, u(t)) \quad (8.3)$$

abgeleitet, wobei γ_3 ein Reibungskoeffizient von der Ordnung $\mathcal{O}(\varepsilon)^3$ ist. Diese DGL beschreibt z.B. die eindimensionale Bewegung eines symmetrischen, spiegelnd-elastisch reflektierenden Testteilchens (TT) in Normalenrichtung (5.7), das aufgrund seiner Masse ($\varepsilon = \sqrt{\frac{m}{M}} \approx 1$) nicht mehr als ein BROWNSches Teilchen (BT) angesehen werden kann. In Ref. [55] wurde außerdem ein expliziter Ausdruck für die geschwindigkeitsabhängige, stochastische Kraft $\mathbb{A}(t, u(t))$ angegeben und die Autokorrelation der stochastischen Beschleunigung berechnet. Danach ist eine Abänderung des FDT II (5.2), speziell für die spiegelnd-elastische Reflexion, nur dann erforderlich, wenn Terme der Ordnung $\mathcal{O}(u, \varepsilon)^3$ in Gl. (8.3) berücksichtigt werden.

Geht man dagegen von einer geschwindigkeitsunabhängigen stochastischen Beschleunigung $\mathcal{A}(t)$ aus, so stellt (8.3) die *univariate stochastische Differentialgleichung* dar. Eine Störungsentwicklung für diese Gleichung, die man durch Feynman-Graphen veranschaulichen kann, wird in [78] behandelt. Außerdem werden zwei nichtstörungstheoretische Methoden, die Molekularfeld-Näherung und die SCHWINGER-DYSON-Näherung am Beispiel der unvarianten stochastischen Differentialgleichung vorgestellt.

In diesem Abschnitt betrachten wir wiederum diskusförmige, spiegelnd-elastisch reflektierende TT im Rahmen des Zylindermodells (Kap. 7). Wir beschränken uns weiterhin auf den Fall

$$\varepsilon_l \rightarrow 0 \text{ und } \varepsilon \equiv \varepsilon_r < 1. \quad (8.4)$$

Wir gehen davon aus, daß die auf das TT ausgeübte Kraft sich analog (5.1) aus der systematischen Beschleunigung (7.20) und der geschwindigkeitsunabhängigen, stochastischen Beschleunigung $\mathcal{A}(t)$ zusammensetzt. Mit anderen Worten: wir setzen ein additives Rauschen voraus. Mit diesem Ansatz ergibt sich eine nichtlineare, erweiterte LANGEVIN-Gleichung der Form

$$\frac{du}{dt} = -\gamma u + \alpha (1 - u^2) + \mathcal{A}(t), \quad \gamma = 4\varepsilon \text{ und } \alpha = \sqrt{2\pi} \varepsilon^2. \quad (8.5)$$

Auch die eindimensionale Bewegung *asymmetrischer* (linke Seite total inelastisch wechselwirkend (spiegelnd-elastisch reflektierend), rechte Seite spiegelnd-elastisch reflektierend (total diffus-elastisch reflektierend)) TT in Normalenrichtung (vgl. (6.13) und S. 67) wird durch die nichtlineare, stochastische DGL (8.5) beschrieben, jedoch mit jeweils anderen Reibungskoeffizienten.

Es ist zu prüfen, bis zu welchem ε die Gl. (8.5) anwendbar ist. Für $\varepsilon \ll 1$ ist der Term α in (8.5) um die Ordnung ε kleiner als der lineare Reibungskoeffizient γ . Aus diesem Grund muß ε hinreichend groß genug gewählt werden. Aus den Ergebnis der Computersimulation (Abb. 8.4a) ist ersichtlich, daß bereits ein TT der Masse $M = 100m$ bzw. $\varepsilon = 0.1$ geeignet ist. In diesem Zusammenhang ist zu beachten, daß bei symmetrischen TT (6.25) nur Terme ungerader Ordnung in ε eine Rolle spielen. Mit anderen Worten: ein solches TT kann mit derselben Masse durchaus noch als ein BT (vgl. Abb. 6.2) angesehen werden.

Wir führen die neue reduzierte Zeitskala (s. o.)

$$t^* = \gamma t = \frac{t}{\tau_b} \quad (8.6)$$

in Einheiten der charakteristischen Dämpfungszeit τ_b des TT ein und lassen weiterhin den Stern weg. Die Gl. (8.5) hat dann die Form

$$\frac{du}{dt} = -u(t) + \chi(1 - u^2(t)) + \mathcal{A}(t), \quad \chi = \frac{\alpha}{\gamma} = \varepsilon \sqrt{\frac{\pi}{8}}. \quad (8.7)$$

Der neue Koeffizient χ ist nun von der Ordnung $\mathcal{O}(\varepsilon)^1$, da die neue Zeitskala (8.5) linear in ε ist.

Eine nichtlineare, erweiterte LANGEVIN-Gleichung der Form (8.7) ist unseres Erachtens bisher noch nicht diskutiert worden. Der Grund liegt offenbar darin, daß man die in der vorliegenden Arbeit untersuchten Asymmetrien der TT in dieser Form noch nicht betrachtet hat.

Im Sinne einer nichtlinearen, *deterministischen* Differentialgleichung könnte (8.5) als RICCATISCHE Differentialgleichung (RDGL) [95]

$$\frac{dy}{dt} = cy(t) + dy^2(t) + f(t) \quad (8.8)$$

angesehen werden. Die RDGL ist im allgemeinen Fall nicht durch Quadraturen und die elementaren Funktionen in "geschlossener" Form lösbar. Ist jedoch eine spezielle Lösung der RDGL bekannt, dann läßt sich die RDGL auf eine *lineare DGL* zurückführen [95].

Falls eine der analytischen Lösungen (LSG) der RDGL, die zeitliche Entwicklung der *mittleren* Geschwindigkeit der TT auf der Grundlage der Gl. (8.7) korrekt beschreibt, dann muß diese LSG sich grundlegend von der LSG der gemittelten LANGEVIN-Gleichung (LDGL) (LSG der *homogenen* Gleichung) unterscheiden.

Weiterhin verwenden wir für die *stochastischen* Größen u und \mathcal{A} , die sich auf die Gl. (5.1) bzw. (8.7) beziehen, den unteren Index L (für LANGEVIN) bzw. R (für RICCATI). Anschaulich ist klar, daß im Grenzfall $\varepsilon \ll 1$ die Funktion $u_R(t)$ in $u_L(t)$ übergehen muß.

Wir merken an, daß für $c = -\gamma$, $f(t) = \chi$ und $d = -\chi$ in (8.8) die systematische Beschleunigung nach Gl. (7.20) folgt. Der Fall $f(t) = 0$ und $d = 1$ liefert die sogenannte VERHULST-Gleichung [78]. Diese Gleichung beschreibt z.B. die Population einer Spezies, wobei c zunächst ein nicht fluktuierender Wachstumsparameter ist. In Ref. [78] wird der Einfluß der Umgebung auf c durch $c \rightarrow c + \mathcal{A}(t)$ (multiplikatives Rauschen) berücksichtigt. Mit Hilfe der resultierenden nichtlinearen stochastischen DGL (interpretiert im Sinne von STRATONOVICH) wird die stationäre Lösung der entsprechenden FOKKER-PLANCK-Gleichung berechnet.

8.1.2 Näherungslösung

In diesem Abschnitt leiten wir eine analytische *Näherungslösung* für die *mittlere* Geschwindigkeit spiegelnd-elastisch reflektierender TT (bei einer Asymmetrie der stochastischen Kraft) mit Hilfe einer einfachen Störungsrechnung bis zur ersten Näherung ab.

Ausgangspunkt der folgenden Ableitung ist eine Potenzreihenentwicklung nach ε für die Geschwindigkeit

$$u_R(t) = u_0(t) + \varepsilon u_1(t) + \dots + \varepsilon^n u_n(t) \quad (8.9)$$

und die stochastische Beschleunigung

$$\mathcal{A}_R(t) = \mathcal{A}_0(t) + \varepsilon \mathcal{A}_1(t) + \dots + \varepsilon^n \mathcal{A}_n(t). \quad (8.10)$$

Der Einfachheit halber betrachten wir ausschließlich TT, die zum Startzeitpunkt die Anfangsgeschwindigkeit $u_R(0) = u_L(0) = 0$ besitzen. Einsetzen der Potenzreihenentwicklungen für $u_R(t)$ und $\mathcal{A}_R(t)$ in (8.7) und separate Darstellung der Koeffizienten und Funktionen derselben Ordnung in ε , führt auf die Folge von Gleichungen

$$\frac{du_0}{dt} + u_0 = \mathcal{A}_0(t) \quad (8.11)$$

und

$$\varepsilon \left[\frac{du_1}{dt} + u_1 \right] = \varepsilon \left[\chi_1 (1 - u_0^2) + \mathcal{A}_1(t) \right], \quad (8.12)$$

die die nullte bzw. erste Näherung der Störungsrechnung darstellen. Mit dem unteren Index der Größen u , \mathcal{A} und $\chi = \varepsilon \chi_1$ kennzeichnen wir die (wegen der neuen Zeitskala (8.6)) um eins reduzierte Ordnung in ε . Gleichung (8.11) stellt die LDGL (5.1) mit $u_0 \equiv u_L$ und $\mathcal{A}_0 \equiv \mathcal{A}_L$ dar.

Der Entwicklungsparameter ε entspricht beim vorliegenden Problem der Wurzel aus dem Massenverhältnis $\varepsilon = \sqrt{\frac{m}{M}}$. Dies beinhaltet, daß wir nur die erste Näherung der Störungsrechnung zu berücksichtigen haben, da Terme der Ordnung $\mathcal{O}(\varepsilon)^2$ in (8.7) nicht berücksichtigt wurden.

Wir berechnen das mittlere, zeitabhängige Geschwindigkeitsquadrat BT für die o.g. Anfangsbedingung ($u_L(0) = 0$):

$$\langle u_L^2(t) \rangle \equiv \langle u_0^2(t) \rangle = \exp(-2t) \int_0^t \int_0^t \langle \mathcal{A}_0(\zeta) \mathcal{A}_0(\zeta') \rangle \exp(\zeta + \zeta') d\zeta d\zeta' \quad (8.13)$$

Die Klammer " $\langle \rangle$ " kennzeichnet die Ensemblemittelung. Mit der Autokorrelation der stochastischen Beschleunigung (5.2)

$$\mathcal{C}_0(\tau) d\tau = \langle \mathcal{A}_0(\zeta) \mathcal{A}_0(\zeta + \tau) \rangle d\tau \text{ mit } \tau = \zeta' - \zeta, s = \zeta' + \zeta \quad (8.14)$$

wird das Integral

$$\frac{1}{2} \int_0^{2t} \exp(s) ds \int \mathcal{C}_0(\tau) d\tau = \frac{1}{2} (\exp(2t) - 1) \int \mathcal{C}_0(\tau) d\tau. \quad (8.15)$$

Es ergibt sich also

$$\langle u_0^2(t) \rangle = \frac{\int \mathcal{C}_0(\tau) d\tau}{2} (1 - \exp(-2t)). \quad (8.16)$$

Das BT thermalisiert im Langzeitverhalten vollständig, d.h. für $t \rightarrow \infty$ muß $\langle u_0^2(t) \rangle = 1$ gelten (in reduzierten Einheiten (5.6), (8.6)). Also erhält man für das Korrelationsintegral

$$\int \mathcal{C}_0(\tau) d\tau = 2. \quad (8.17)$$

Wir führen eine Ensemblemittelung von Gl. (8.12) durch und ersetzen $\langle u_0^2(t) \rangle$ durch den Ausdruck (8.16). Wir erhalten die gemittelte, lineare DGL

$$\frac{d \langle u_1(t) \rangle}{dt} + \langle u_1(t) \rangle = \chi_1 \exp(-2t) + \langle \mathcal{A}_1(t) \rangle. \quad (8.18)$$

Der Mittelwert von $\mathcal{A}_1(t)$ verschwindet, die erste Näherungslösung lautet:

$$\langle u_1(t) \rangle = \chi_1 \exp(-t) [1 - \exp(-t)] \quad (8.19)$$

Um die gesamte LSG für $\langle u(t) \rangle$ zu erhalten, haben wir die Lösungen der nullten und der ersten Näherung zu addieren. Da die LSG der nullten Näherung für die o.g. Anfangsbedingung *direkt* keinen Beitrag zu $\langle u(t) \rangle$ liefert, gilt:

$$\langle u(t) \rangle = \langle u_L(t) \rangle + \varepsilon \langle u_1(t) \rangle = \varepsilon \langle u_1(t) \rangle \quad (8.20)$$

8.1.3 Lösung der Fokker-Planck-Gleichung

Ersetzt man den u^2 - Term in (8.7) einfach durch den Ausdruck (8.16), so ergibt sich die lineare, stochastische DGL

$$\frac{du(t)}{dt} + u(t) = \chi \exp(-2t) + \mathcal{A}(t). \quad (8.21)$$

Für die o.g. Anfangsbedingung ist die Lösung von (8.21) für $\langle u(t) \rangle$ mit (8.20) ($\langle \mathcal{A}(t) \rangle = 0$) identisch. Wir interessieren uns wiederum für das mittlere Geschwindigkeitsquadrat

$$\langle u^2(t) \rangle = \frac{\int \mathcal{C}(\tau) d\tau}{2} (1 - \exp(-2t)) + \chi^2 \exp(-2t) (1 - \exp(-t))^2. \quad (8.22)$$

Wie erwartet liefert der Grenzwert für $t \rightarrow \infty$ und die Verwendung des Gleichverteilungssatzes erneut für das Korrelationsintegral den Wert Zwei (8.17).

Im Weiteren bestimmen wir die Lösung der zugehörigen Fokker-Planck-Gleichung. Mit $u(t) = z(t) + w(t)$ geht die Gleichung (8.21) in

$$\frac{dz(t)}{dt} + \frac{dw(t)}{dt} = -(z(t) + w(t)) + \chi \exp(-2t) + \mathcal{A}(t) \quad (8.23)$$

über. Wählt man $w(t)$ so, daß

$$\frac{dw(t)}{dt} = -w(t) + \chi \exp(-2t) \quad (8.24)$$

gilt, also

$$w(t) = \chi \exp(-t) (1 - \exp(-t)) \text{ für } w(0) = 0 \quad (8.25)$$

ist, so gilt für $z(t)$ eine Gleichung der Form (5.1). Die zugehörige FOKKER-PLANCK-Gleichung [6] (in reduzierte Einheiten)

$$\frac{\partial f(z, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(z + \frac{\partial f(z, t)}{\partial z} \right) f(z, t) \quad (8.26)$$

ist in geschlossener Form lösbar. Als Anfangsbedingung wählen wir $f(z, 0) = \delta(z - z(0))$, hier speziell für $z(0) = 0$. Führen wir unsere ursprünglichen Variablen wieder ein, so wird

$$f(u, t) = \sqrt{\frac{1}{2\pi(1 - \exp(-2t))}} \exp\left(-\frac{(u - \chi \exp(-t)(1 - \exp(-t)))^2}{2(1 - \exp(-2t))}\right). \quad (8.27)$$

Die stationäre Verteilung $f_{stat}(u)$ ist erwartungsgemäß die Maxwellverteilung (siehe dazu auch Abb. 8.1a und b).

8.1.4 Mittelwert und Varianz

Wir leiten nun Aussagen über die stochastische Beschleunigung $\mathcal{A}_R(t)$ mit der Methode von EINSTEIN und HOPF ab. Darüber hinaus bestimmen wir den Mittelwert und die Varianz von Δu_R (vgl. (8.2)).

Wir integrieren die Gl. (8.7) über eine Zeit Δt in der hinreichend viele Stöße seitens der MT auf das TT erfolgen. Dabei nehmen wir an, daß $\mathcal{A}_R(t)$ innerhalb von Δt bereits sehr oft sein Vorzeichen gewechselt hat und sich dabei die Geschwindigkeit $u_R(t)$ des TT kaum geändert hat. Diese Annahme wird durch die Bedingung

$$\frac{\tau_0}{\tau_b} \ll \Delta t \ll 1 \quad (8.28)$$

mit τ_0 nach (7.34) erfüllt. Mit $u_{R,i}$ bezeichnen wir die Geschwindigkeit des TT zur Zeit $i\Delta t$ und mit

$$G_{R,i} = \int_{i\Delta t}^{(i+1)\Delta t} \mathcal{A}_R(\zeta) d\zeta \quad (8.29)$$

den in der Zeit Δt von $\mathcal{A}_R(t)$ erzeugten Geschwindigkeitszuwachs. Nach Integration erhalten wir

$$u_{R,i+1} = u_{R,i} \beta + \chi (1 - u_{R,i}^2) (1 - \beta) + G_{R,i}, \text{ wobei } \beta = 1 - \Delta t \text{ ist.} \quad (8.30)$$

Die Berechnung der Varianz von (8.29) ($\langle G_R^2 \rangle$) erfolgt in Analogie zu dem Fall BT. Dieser Fall, ausführlich in [76] diskutiert, führt auf (in nicht reduzierten Einheiten)

$$\langle G_L^2(\Delta t) \rangle = 2 \frac{k_B T}{M} \gamma \Delta t. \quad (8.31)$$

Man eliminiert die Gleichungen $u_{R,1}, u_{R,2}, \dots, u_{R,j-1}$ (8.30), indem man die l -te Gleichung mit β^{j-l} multipliziert und alle so entstehenden Gleichungen addiert

$$u_{R,j} = \beta^j u_{R,0} + \sum_{k=1}^j \beta^{k-1} G_{R,j-k} + \chi \sum_{k=1}^j \beta^{k-1} (1 - \beta) (1 - u_{R,j-k}^2) \quad (8.32)$$

Weiterhin gehen wir davon aus, daß die Größen $G_{R,i}$ (8.29) für verschiedene i und von $u_{R,0}$ statistisch unabhängig sind.

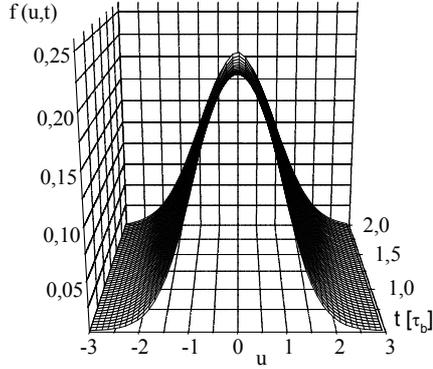


Abbildung 8.1a: Zeitliche Entwicklung (analytische Lösung) der Geschwindigkeits-Verteilungsfunktion $f(u, t)$ (8.27) eines Ensembles von Testteilchen, das mit $f_A(u) = \delta(u - 0)$ startet, für den Fall einer symmetrischen stochastischen Kraft ($\chi = 0$). Vergleiche dazu (7.21), (8.4) und (8.7).

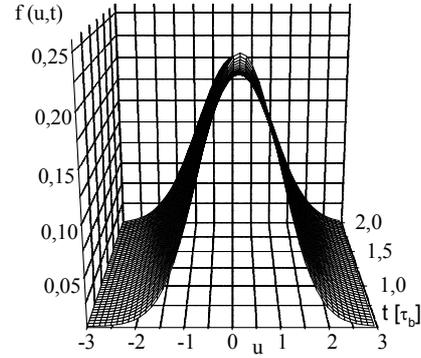


Abbildung 8.1b: Wie Abb. 8.1a, jedoch für den Fall einer asymmetrischen stochastischen Kraft und $\chi = \sqrt{\frac{\pi}{8}}$.

Quadrieren und Ensemblemittelung liefert

$$\langle u_R^2 \rangle = \frac{\langle G_R^2 \rangle}{1 - \beta^2} + \frac{\chi^2 (1 - \langle u_R^2 \rangle)^2}{1 - \beta^2} (1 - \beta)^2, \quad (8.33)$$

wegen

$$\langle u_{R,j}^2 \rangle = \langle u_{R,0}^2 \rangle = \langle u_R^2 \rangle, \quad \langle u_{R,j}^n \rangle = \langle u_{R,0}^n \rangle = \langle u_R^n \rangle = 0 \quad \text{für } n = 1, 3 \quad (8.34)$$

und

$$\langle G_{R,n} G_{R,m} \rangle = \langle G_R^2 \rangle \delta_{nm}, \quad \langle G_{R,n} \rangle = 0. \quad (8.35)$$

Gl. (8.33) schreiben wir mit $\beta = 1 - \Delta t$ in der Form

$$\langle G_R^2(\Delta t) \rangle = 2\Delta t \langle u_R^2 \rangle - \left(\langle u_R^2 \rangle + \chi^2 (1 - \langle u_R^2 \rangle)^2 \right) (\Delta t)^2. \quad (8.36)$$

Unter Verwendung des Gleichverteilungssatzes folgt wegen (8.28) der gleiche Ausdruck wie (8.31) (in reduzierten Einheiten).

Wie in (8.2), integrieren wir (5.1) und (8.7) erneut über ein Zeitintervall $(t, t + \Delta t)$

$$\Delta u_L = -u_L \Delta t + \Delta \mathcal{W}_L + \mathcal{O}(\Delta t) \quad (8.37)$$

und

$$\Delta u_R = [-u_R + \chi(1 - u_R^2)] \Delta t + \Delta \mathcal{W}_R + \mathcal{O}(\Delta t), \quad (8.38)$$

wobei

$$\Delta \mathcal{W}_{L/R} = \int_t^{t+\Delta t} \mathcal{A}_{L/R}(t') dt' \quad (8.39)$$

ist. Aus (8.31) und (8.36) erhält man jeweils für das zweite Moment

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\langle \Delta u_{L/R}^2 \rangle}{\Delta t} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\langle (\Delta \mathcal{W}_{L/R})^2 \rangle}{\Delta t} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\langle G_{L/R}^2(\Delta t) \rangle}{\Delta t} = 2. \quad (8.40)$$

Erst bei Berücksichtigung von Termen der Ordnung $\mathcal{O}(\varepsilon, u)^3$ ist eine u -Abhängigkeit des zweiten Moments [79] zu erwarten.

An dieser Stelle muß ein außerordentlich wichtiger Punkt angemerkt werden.

Sowohl $\Delta \mathcal{W}_L$ als auch $\Delta \mathcal{W}_R$ sind von der Ordnung $\sqrt{\Delta t}$ ([96], [78]) da $\mathcal{A}_{L/R}(t)$ von u unabhängig ist (vgl. (8.2)). Man erkennt sofort, daß u_L^2 bzw. u_0^2 (8.13) den Beitrag $(\Delta \mathcal{W}_L)^2 \sim \Delta t$ (8.39) enthält.

Ein Vergleich von (8.7) und (8.12) zeigt, daß in Δu_R (8.38) über den u_R^2 -Term der Beitrag $(\Delta \mathcal{W}_R)^2 \sim \Delta t$ von der Ordnung $\mathcal{O}(\Delta t)$ ([96], [78]) implizit enthalten ist. Dies ist der *einzigste Term* von der Ordnung Δt , die übrigen Terme sind von höherer Ordnung.

Unter Berücksichtigung dieses Sachverhalts erhält man für die jeweils ersten Momente (8.37), (8.38)

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\langle \Delta u_L \rangle}{\Delta t} = -u_L \quad \text{und} \quad \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\langle \Delta u_R \rangle}{\Delta t} = -u_R + \chi(1 - u_R^2) \quad (8.41)$$

Betrachten wir nun eine Funktion $f(u_R)$ der stochastischen Größe u_R . Der Zuwachs für $f(u_R)$ während eines Zeitschritts Δt enthält explizit $(\Delta \mathcal{W}_R)^2$ (zweiter Term der Taylorentwicklung). Nach der ITO-Formel [78] darf man diesen Term durch die Varianz $\langle (\Delta \mathcal{W}_R)^2 \rangle$ ersetzen, die nach (8.40) mit $\langle (\Delta \mathcal{W}_L)^2 \rangle$ übereinstimmt.

8.1.5 Lösung der speziellen Riccatischen Differentialgleichung

Wir wollen der Frage nachgehen, worin die eigentliche Approximation der LSG für die mittlere Geschwindigkeit der TT (8.20) besteht. Hierzu betrachten wir die Ersetzung von $\langle u_0^2(t) \rangle$ der nullten Näherung durch die von BT $\langle u_L^2(t) \rangle$ (8.13) und des Entwicklungsparameters ε durch die Wurzel aus dem Massenverhältnis zwischen TT und MT als zwei unterschiedliche Aspekte der Näherung.

Die Zusammenstellung der Ordnungen bezüglich u , \mathcal{A} und χ nach ε bedeutet, daß die mittlere Geschwindigkeit der TT gemäß (8.20) linear mit der Wurzel aus dem Massenverhältnis zwischen TT und MT geht, da die zweite Ordnung ($\sim \varepsilon^2 \langle u_2(t) \rangle$) in der Ausgangsgleichung vernachlässigt wurde.

Verwenden wir dagegen einen Parameter $\tilde{\varepsilon}$ um die Ordnungen der Potenzreihenentwicklung zu sortieren und nehmen an, daß sich $\tilde{\varepsilon}$ von ε unterscheidet, so heben wir diesen Teilaspekt der Näherung auf. Summation der Potenzen in $\tilde{\varepsilon}$ nach Gl. (8.9) und (8.10) liefert:

$$\begin{aligned} & \frac{d(u_0 + \tilde{\varepsilon} u_1 + \dots + \tilde{\varepsilon}^n u_n)}{dt} + (u_0 + \tilde{\varepsilon} u_1 + \dots + \tilde{\varepsilon}^n u_n) \\ &= \chi [1 - (u_0^2 + \tilde{\varepsilon}^2 u_1^2 + \dots + \tilde{\varepsilon}^{2n} u_n^2)] + (\mathcal{A}_0(t) + \tilde{\varepsilon} \mathcal{A}_1(t) + \dots + \tilde{\varepsilon}^n \mathcal{A}_n(t)) \end{aligned} \quad (8.42)$$

Die Kenntnis einer analytischen LSG der DGL (8.42) mit diesem allgemeineren Ansatz ermöglicht uns die Genauigkeit der o.g. Approximation zu überprüfen. Wir weisen ausdrücklich darauf hin, daß der Koeffizient χ notwendigerweise von der Ordnung ($\mathcal{O}(\varepsilon)^1$) sein muß.

Wir führen eine Ensemblemittelung von Gl. (8.42) durch und ersetzen erneut $\langle u_L^2(t) \rangle$ durch (8.16). Wir fassen die verbleibenden Potenzen der Reihenentwicklung in u_R und $\mathcal{A}_R(t)$ zusammen und erhalten

$$\frac{d \langle u_R(t) \rangle}{dt} = \underbrace{- \langle u_R(t) \rangle + \chi [1 - \langle u_R^2(t) \rangle]}_{\text{systematischer Anteil}} - \chi [1 - \exp(-2t)] + \langle \mathcal{A}_R(t) \rangle. \quad (8.43)$$

Gleichung (8.43) zeigt explizit, wie die *Gesamtkraft* in zwei Anteile zerfällt. Der erste Anteil entspricht der systematischen Beschleunigung (7.20), der verbleibenden Anteil beschreibt den Einfluß der stochastischen Kraft auf die mittlere Geschwindigkeit der TT. Im Anhang A leiten wir für $\langle \mathcal{A}_R(t) \rangle = 0$ dieselbe spezielle RDGL mit einer völlig anderen Methode ab. Bei dieser Vorgehensweise ist unser Hauptaugenmerk auf eine spezielle Bedingung (A.2) gerichtet, die mit der Lösbarkeit der allgemeinen RDGL (8.8) verknüpft ist. Wir nehmen an, daß diese Bedingung die spezielle LSG der RDGL festlegt. Diese Überlegungen führen ebenfalls auf die spezielle RDGL (8.43). Nochmals, wir gewinnen diese DGL aus der Forderung, daß die LSG der LANGEVIN-Gleichung eine spezielle LSG der allgemeinen RDGL (8.8) ist. Wir haben bereits darauf hingewiesen, daß falls eine spezielle LSG der RDGL bekannt ist, sich diese DGL auf eine lineare DGL zurückführen läßt.

Wir lösen nun die nichtlinearen DGL (8.43) um die LSG mit $\langle u(t) \rangle$ zu vergleichen. Falls nun $\varepsilon = \tilde{\varepsilon}$ ist, dann entspricht offensichtlich die LSG für $\langle u(t) \rangle$ (8.20) der LSG für $\langle u_R(t) \rangle$ der o.g. linearen DGL. Mit der Transformation

$$\langle u_R(t) \rangle = \langle \Psi(t) \rangle \exp(-t) \quad \text{also} \quad \langle \dot{u}_R(t) \rangle = \exp(-t) \left(\langle \dot{\Psi}(t) \rangle - \langle \Psi(t) \rangle \right) \quad (8.44)$$

können wir das lineare Glied der DGL (8.43) eliminieren. Wir erhalten:

$$\frac{d\langle \Psi(t) \rangle}{dt} = \chi \exp(-t) \left(1 - \langle \Psi(t) \rangle^2 \right) \quad (8.45)$$

Schließlich führen wir durch

$$d\mathcal{z} = \exp(-t) dt \quad \text{die neue Zeitskala} \quad \mathcal{z} = 1 - \exp(-t) \quad (8.46)$$

ein. Mit diesen Transformationen wird die nichtlineare, homogene Differentialgleichung (8.43) auf die Form

$$\frac{d\langle \Psi(\mathcal{z}) \rangle}{d\mathcal{z}} = \chi \left(1 - \langle \Psi(\mathcal{z}) \rangle^2 \right) \quad (8.47)$$

gebracht. Die spezielle RDGL [95] ist in geschlossener Form

$$\langle \Psi(\mathcal{z}) \rangle = \tanh(\chi(\varepsilon) \mathcal{z}) \quad (8.48)$$

angebar und genügt der Anfangsbedingung: $\langle \Psi(0) \rangle = \langle u_R(0) \rangle = 0$. Führen wir die ursprünglichen Variablen ein, so wird

$$\langle u_R(t) \rangle = \exp(-t) \tanh[\chi(1 - \exp(-t))]. \quad (8.49)$$

Angenommen wir haben statt (8.7) die lineare stochastische Differentialgleichung zweiter Ordnung der Form

$$\frac{d^2 u}{dt^2} + \hat{\gamma} \frac{du}{dt} + \nu_0^2 u = \mathcal{A}(t), \quad u(0) = 0 \quad \text{und} \quad \dot{u}(0) = \chi. \quad (8.50)$$

Wir betrachten nun die Lösung

$$\langle u(t) \rangle = \chi \exp\left(-\frac{t}{2}(\hat{\gamma} - \hat{\gamma}_1)\right) (1 - \exp(-\hat{\gamma}_1 t)) \quad (8.51)$$

für das spezielle Anfangswertproblem, wobei $\hat{\gamma}_1 = \sqrt{\hat{\gamma}^2 - 4\nu_0^2}$ ist.

Gl. (8.50) beschreibt die BROWNSche Bewegung eines *gedämpften harmonischen Oszillators* ([6], [7]), wobei $\langle u(t) \rangle$ dem mittleren Aufenthaltsort des Oszillators entspricht. $\langle u(t) \rangle$ erfüllt die homogene Differentialgleichung (vgl. (8.47)) der Form

$$\frac{d\langle \tilde{\Psi}(\hat{z}) \rangle}{d\hat{z}} = \chi, \text{ mit } \langle u(t) \rangle = \langle \tilde{\Psi}(t) \rangle \exp\left(-\frac{1}{2}(\hat{\gamma} - \hat{\gamma}_1)t\right) \text{ und } \hat{z} = (1 - \exp(-\hat{\gamma}_1 t)). \quad (8.52)$$

Wir betrachten nun den aperiodischen Fall ($\hat{\gamma} > \nu_0$), d.h. in einer asymptotischen Annäherung (bei $t \rightarrow \infty$) an die Gleichgewichtslage (ohne Schwingungen). Für $\hat{\gamma} = 3$ und $\nu_0 = \sqrt{2}$ ($\hat{\gamma}_1 = 1$) sind die Lösungen (8.20) und (8.51) identisch, wie man sich leicht überzeugen kann. Die Anfangsbedingung wird verständlich, wenn man bedenkt, daß die TT zum Startzeitpunkt die systematische Beschleunigung χ (8.7) erfahren.

Der stochastische Prozeß und damit die entsprechende Lösung der jeweiligen FOKKER-PLANCK-Gleichung ist jedoch vollkommen verschieden. Man vergleiche dazu einfach die jeweilige Korrelationsfunktion der Geschwindigkeit (8.22) und [6].

Selbst im Schwingungsfall ($\hat{\gamma} \leq \nu_0$) zeigt die Lösung (8.51) und das Ergebnis der Computersimulation (durchgezogene Kurve in Abb. 7.7) ein ähnliches Verhalten.

8.1.6 Vergleich mit Ergebnissen der Computersimulation

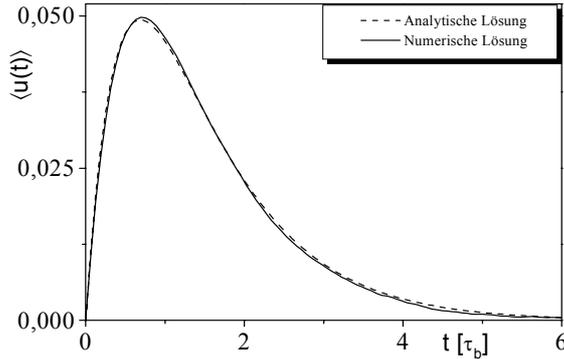


Abbildung 8.2a: Zeitliche Entwicklung der mittleren Geschwindigkeit eines Ensembles spiegelnd-elastisch reflektierender, diskusförmiger Testteilchen (Zylindermodell) der Masse $M = 10 m$ ($m_l \rightarrow 0, m_r = m$ (8.4)), die mit der Anfangsgeschwindigkeit $u(0) = 0$ gestartet sind.

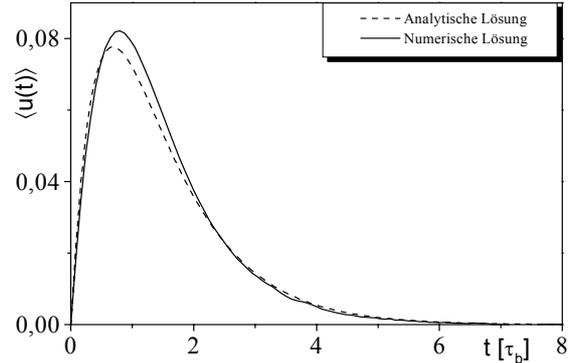


Abbildung 8.2b: Wie Abb. 8.2a. Die Masse der Testteilchen ist hier $M = 4 m$. Die gepunktete Kurve ist das Resultat der analytischen Lösung (8.49), die durchgezogene Kurve das entsprechende Ergebnis der Computersimulation.

Der konkrete Vergleich der analytischen Lösung (8.49) mit entsprechenden Resultaten der Computersimulation (Abb. 8.2) zeigt eine gute Übereinstimmung für TT der Masse $M = 10 m$ bzw. $\varepsilon = 0.316228$. In Übereinstimmung mit theoretischen Vorhersagen der Störungsrechnung weicht mit größer werdenden ε die analytische von der numerischen LSG zunehmend ab. Dies geht aus den Resultaten für TT der Masse $M = 4 m$ bzw. $\varepsilon = 0.5$, dargestellt in Abb. 8.2b, hervor. Die größten Abweichungen liegen dabei in dem Bereich, wo die TT annähernd ihre maximale gerichtete Geschwindigkeit erreicht haben.

Wir vergleichen nun die analytische LSG $\langle u_R(t) \rangle$ (8.49) der speziellen RDGL für verschiedene Massenverhältnisse ($\varepsilon = \sqrt{\frac{m}{M}}$) zwischen TT und MT mit der zugehörigen Näherungslösung $\langle u(t) \rangle$ (8.20). Abb. 8.3a zeigt die zeitliche Entwicklung von $\langle u_R(t) \rangle$, Abb. 8.3b hingegen den Betrag der Differenz der beiden Lösungen $\langle u_R(t) \rangle$ und $\langle u(t) \rangle$, jeweils für verschiedene ε . Die Lösungen unterscheiden sich für den Fall $0 < \varepsilon < 1$ nur unwesentlich voneinander. Entwickeln wir die Funktion $\langle u_R(t) \rangle$ nach ε , so finden wir erneut die LSG für $\langle u(t) \rangle$ (8.20). Äquivalent können wir auch den $\langle \Psi^2(\mathcal{X}) \rangle$ -Term in (8.45) als vernachlässigbar ($\langle \Psi^2(\mathcal{X}) \rangle \sim 0$) klein annehmen und erhalten wieder (8.20).

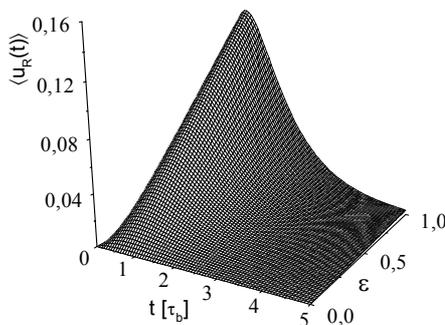


Abbildung 8.3a: Mittlere Geschwindigkeit $\langle u_R(t) \rangle$ (analytische Lösung (8.49)) eines Ensembles spiegelnd-elastisch reflektierender, diskusförmiger Testteilchen (Zylindermodell), für verschiedene ε , die alle mit der Anfangsgeschwindigkeit $u_R(0) = 0$ gestartet sind.

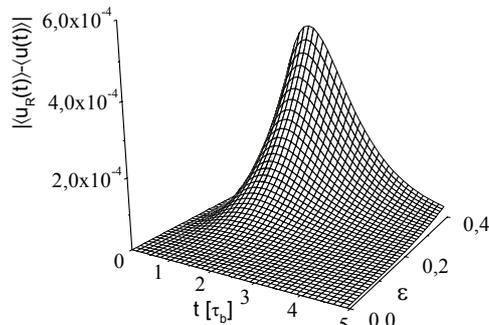


Abbildung 8.3b: Betrag von der Differenz der beiden analytischen Lösungen $\langle u_R(t) \rangle$ (8.49) und $\langle u(t) \rangle$ (8.20).

Aus dem Vergleich der beiden analytischen Lösungen (8.20) und (8.49) schließen wir: Für den relevanten Parameterbereich ($0 < \varepsilon < 1$) für ε , für den die Gl. (8.5) genähert gültig ist, entspricht der Entwicklungsparameter $\tilde{\varepsilon}$, der Wurzel aus dem Massenverhältnis zwischen TT und MT.

Nach dem oben Gesagten ist anschaulich klar, daß für Werte ε aus dem o.g. Bereich auch die genannten Funktionen $\langle u_R(t) \rangle$ und $\langle u(t) \rangle$ identisch sein müssen. Weiterhin stellt die DGL (8.21) offenbar die mehrfach genannte lineare DGL dar, die sich bei Kenntnis einer speziellen LSG der RDGL ergibt.

Wir wollen hier lediglich anmerken, daß weitere Größen ebenfalls mit der ersten Näherung berechnet werden können. Dazu gehört beispielsweise das *mittlere Verschiebungsquadrat* $\langle x^2 \rangle$ [6]. Interessant ist auch die Abhängigkeit der maximal erreichten mittleren Vorzugsgeschwindigkeit der TT

$$\langle u(t) \rangle^{\max} = \frac{\chi}{4} (1 - u(0)^2) \left(1 + \frac{u(0)}{\chi (1 - u(0)^2)} \right)^2 \quad (8.53)$$

vom Massenverhältnis ε für eine beliebige Anfangsgeschwindigkeit $u(0)$.

Ein Vergleich mit entsprechenden Resultaten der Computersimulation Abb. 8.2a bzw. b liefert eine relative Abweichung von 0.48723% bzw. 4.8765%.

8.2 Lösung der gekoppelten, nichtlinearen Langevin-Gleichungen

Mit Hilfe der Störungsrechnung leiten wir nun für *rotierende, asymmetrische TT* (linke Seite: spiegelnd-elastisch reflektierend, rechte Seite: total diffus-elastisch reflektierend) eine analytische Näherungslösung für die mittlere Geschwindigkeit in Normalenrichtung ab. Wir vergleichen diese Lösung mit entsprechenden Resultaten der Computersimulation. Darüber hinaus werden die Näherungslösungen für die mittlere Tangentialgeschwindigkeit und Winkelgeschwindigkeit der TT berechnet.

In Analogie zu Gl. (8.9) - (8.12) stellen wir die systematische Beschleunigung der Translation ((5.60), (6.22)) und die Winkelbeschleunigung (6.23) einschließlich des stochastischen Anteils

- $\mathcal{A}(t)$ wäre demnach der Betrag der stochastischen Kraft!!

$\mathcal{A}(t)$ (additives Rauschen) in der Form einer Potenzreihenentwicklung dar. Dabei ist die neue Zeitskala (8.6) in Einheiten von $\tau_b = (\gamma_z^{\text{asym.}})^{-1}$ (5.61) zu beachten.

Es folgt für die Geschwindigkeit in Normalenrichtung in nullter Näherung:

$$\frac{du_{z,0}}{dt} + u_{z,0} = \mathcal{A}_{z,0}(t), \quad (8.54)$$

in erster Näherung

$$\varepsilon \left[\frac{du_{z,1}}{dt} + u_{z,1} \right] = \varepsilon \left[\chi_{n,1} \left(u_{z,0}^2 - \frac{u_{x,0}^2 + u_{y,0}^2 + \frac{\xi}{2} (\omega_0^2 - 1)}{2} \right) + \mathcal{A}_{z,1}(t) \right] \quad (8.55)$$

und analog für die Geschwindigkeit in tangentialer Richtung

$$\frac{du_{i,0}}{dt} + \chi_{t,0} u_{i,0} = \mathcal{A}_{i,0}(t), \quad (8.56)$$

$$\varepsilon \left[\frac{du_{i,1}}{dt} + \chi_{t,0} u_{i,1} + \chi_{t,1} u_{i,0} u_{z,0} \right] = \varepsilon \mathcal{A}_{i,1}(t) \quad \text{für } i = x, y, \quad (8.57)$$

sowie für die Winkelgeschwindigkeit

$$\frac{d\omega_0}{dt} + \chi_{\omega,0} \omega_0 = \mathcal{A}_{\omega,0}(t), \quad (8.58)$$

$$\varepsilon \left[\frac{d\omega_1}{dt} + \chi_{\omega,0} \omega_1 + \chi_{\omega,1} \omega_0 u_{z,0} \right] = \varepsilon \mathcal{A}_{\omega,1}(t). \quad (8.59)$$

Wir haben hier bereits neue Reibungskoeffizienten

$$\chi_{t,0} = \frac{\gamma_t^{\text{asym.}}}{\gamma_z^{\text{asym.}}} = \frac{9}{70}, \quad \chi_{\omega,0} = \frac{\gamma_\omega^{\text{asym.}}}{\gamma_z^{\text{asym.}}} = \frac{\xi}{2} \frac{9}{70}, \quad (8.60)$$

$$\chi_n = \frac{\beta_n}{\gamma_z^{\text{asym.}}} = \frac{\frac{\sqrt{2\pi}}{8} \varepsilon^2}{\frac{70}{9} \varepsilon} = \frac{9}{280} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \varepsilon = \varepsilon \chi_{n,1}, \quad (8.61)$$

$$\chi_t = \frac{\delta_t^{\text{asym.}}}{\gamma_z^{\text{asym.}}} = \frac{9}{70} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \varepsilon = \varepsilon \chi_{t,1} \quad \text{und} \quad \chi_\omega = \frac{\delta_\omega^{\text{asym.}}}{\gamma_z^{\text{asym.}}} = \frac{\xi}{2} \frac{9}{70} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \varepsilon = \varepsilon \chi_{\omega,1}, \quad (8.62)$$

die sich aufgrund der Zeitskala (8.6) mit ((5.61), (6.24)) ergeben, eingeführt. Der untere erste bzw. zweite Index der Größen in (8.54) - (8.62) kennzeichnet wiederum die um "Eins" reduzierte Ordnung in ε .

Auf der Grundlage der Gln. (8.54), (8.55) leiten wir für rotierende, asymmetrische TT ($\mathcal{R}_e^l / \mathcal{R}_{d(\kappa)}^r$) nun die analytische Lösung in erster Näherung für die mittlere Geschwindigkeit in Normalenrichtung ab. Dabei beschränken wir uns auf die spezielle Anfangsbedingung $\vec{u}(0) = 0$ und $\omega(0) = 0$ zum Startzeitpunkt. Wir führen eine Ensemblemittelung der Gl. (8.55) durch und setzen den Ausdruck für $\langle u_{z,0}^2(t) \rangle = \langle u_0^2(t) \rangle$ nach Gl. (8.16) ein.

In Analogie zu (8.13) - (8.17) berechnen wir zusätzlich die Korrelationsfunktionen der tangentialen Geschwindigkeit und der Winkelgeschwindigkeit BT. Dazu benötigen wir die jeweilige Lösung der LANGEVIN-Gleichung (5.1) für die beiden tangentialen Freiheitsgrade (8.57)

$$u_{i,0}(t) = u_i(0) \exp(-\chi_{t,0} t) + \int_0^t \exp(-\chi_{t,0}(t-\zeta)) \mathcal{A}_{i,0}(\zeta) d\zeta \quad \text{für } i = x, y \quad (8.63)$$

und den Rotationsfreiheitsgrad (8.59) des BT

$$\omega_0(t) = \omega(0) \exp(-\chi_{\omega,0} t) + \int_0^t \exp(-\chi_{\omega,0}(t-\zeta)) \mathcal{A}_{\omega,0}(\zeta) d\zeta. \quad (8.64)$$

Nach Quadrieren und Ensemblemittelung von Gl. (8.63) und (8.64), unter Beachtung der o.g. Anfangsbedingungen und des Korrelationsintegrals analog zu (8.17), folgt

$$\langle u_{i,0}^2(t) \rangle = (1 - \exp(-2t \chi_{t,0})) \quad (8.65)$$

und

$$\langle \omega_0^2(t) \rangle = (1 - \exp(-2t \chi_{\omega,0})) \quad \text{für } i = x, y. \quad (8.66)$$

Wir setzen diese Ausdrücke ebenfalls in die Gleichung (8.55) (nach Ensemblemittelung) ein und erhalten schließlich

$$\frac{d \langle u_{z,1}(t) \rangle}{dt} = - \langle u_{z,1}(t) \rangle \quad (8.67)$$

$$+ \chi_{n,1} \left(\exp(-2 \chi_{t,0} t) + \frac{\xi}{2} \frac{\exp(-2 \chi_{\omega,0} t)}{2} - \exp(-2t) \right) + \langle \mathcal{A}_{z,1}(t) \rangle.$$

Wir diskutieren zunächst diese lineare DGL näher, bevor wir sie explizit lösen. Gl. (8.67) beschreibt näherungsweise die zeitliche Entwicklung der mittleren Geschwindigkeit rotierender, asymmetrischer TT in Normalenrichtung. Die drei Exponentialfunktionen in (8.67) geben den Einfluß der Translationsfreiheitsgrade und des Rotationsfreiheitsgrades auf die mittlere Beschleunigung der TT wieder. Die Entwicklung der Gl. (8.67) nach t liefert insbesondere eine positive Beschleunigung aufgrund der *unterschiedlichen Relaxationszeiten* des Normalen-Freiheitsgrades ($\sim 2t$), der tangentialen Freiheitsgrade ($\sim 2 \chi_{t,0} t$) und des Rotationsfreiheitsgrades ($\sim 2 \chi_{\omega,0} t$) der TT.

Den letzten Ausdruck in der Klammer der Gl. (8.67), die Exponentialfunktion mit dem Argument ($\sim 2t$), kennen wir bereits von der linearen DGL (8.18). Wir haben früher darauf hingewiesen, daß auch die eindimensionale Bewegung asymmetrischer TT in Normalenrichtung durch die DGL (8.7) beschrieben wird, jedoch mit anderen Reibungskoeffizienten.

Sieht man von den Exponentialfunktionen mit den Argumenten ($\sim \chi_{t,0} t$) und ($\sim \chi_{\omega,0} t$) in Gl. (8.67) ab, so erhält man (vgl. (8.18))

$$\frac{d \langle u_{z,1}(t) \rangle}{dt} + \langle u_{z,1}(t) \rangle = -\chi_{n,1} \exp(-2t) + \langle \mathcal{A}_{z,1}(t) \rangle. \quad (8.68)$$

Unter Berücksichtigung von Gl. (8.20) und $\langle \mathcal{A}_{z,1}(t) \rangle = 0$ ergibt sich

$$\langle u_z(t) \rangle = -\chi_n \exp(-t) [1 - \exp(-t)]. \quad (8.69)$$

Diese analytische Lösung beschreibt näherungsweise die mittlere Normalengeschwindigkeit *asymmetrischer TT mit tensorieller Masse* ($\mathcal{R}_e^l / \mathcal{R}_{d(\sigma)}^r$) für $\varepsilon = \varepsilon_n$ und $\varepsilon_t \rightarrow 0$ (eindimensionaler Fall). Der zeitliche Verlauf von $\langle u_z(t) \rangle$ ist für $\varepsilon = 0.1$ in Abb. 8.6a (Punkt-Strich-Kurve) dargestellt.

Vernachlässigt man nur die Exponentialfunktion mit den Argument ($\sim \chi_{\omega,0} t$) in Gl. (8.67), so ergibt sich

$$\frac{d \langle u_{z,1}(t) \rangle}{dt} = - \langle u_{z,1}(t) \rangle + \chi_{n,1} (\exp(-2 \chi_{t,0} t) - \exp(-2t)) + \langle \mathcal{A}_{z,1}(t) \rangle, \quad (8.70)$$

mit der Näherungslösung

$$\langle u_z(t) \rangle = \frac{9\sqrt{\frac{\pi}{2}}\varepsilon}{7280} \exp(-2t) \left(26 - 61 \exp(t) + 35 \exp\left(\frac{61t}{35}\right) \right) \quad (8.71)$$

für die mittlere Geschwindigkeit in Normalenrichtung für *nichtrotierende, asymmetrische TT* ($\mathcal{R}_e^l/\mathcal{R}_{d(3)}^r$) (Abb. 8.6a, gestrichelte Kurve).

Analog lösen wir nun die vollständige DGL (8.67)

$$\begin{aligned} \langle u_z(t) \rangle = & \frac{\varepsilon}{(7280(9\xi - 70))} \left[9\sqrt{\frac{\pi}{2}} \left\{ -455 \exp\left(-\frac{9\xi t}{70}\right) \xi + \exp(-2t) \right. \right. \\ & \left. \left. \times (-1820 + 234\xi + 35 \exp\left(\frac{61t}{35}\right) (9\xi - 70) - 2 \exp(t) (47\xi - 2135)) \right\} \right]. \end{aligned} \quad (8.72)$$

Die Abbildungen 8.4a - d zeigen die zeitliche Entwicklung der mittleren Geschwindigkeit in Normalenrichtung für ein Ensemble von 10^8 rotierenden, asymmetrischen TT für vier verschiedene Massenverhältnisse. Dargestellt ist das analytische Ergebnis (gestrichelte Kurve) nach Gl. (8.72) für $\xi = 2$ und das entsprechende Resultat (durchgezogene Kurve) der Computersimulation.

Für TT der Masse $M = 100m$ bzw. $\varepsilon = 0.1$ (Abb. 8.4a) wird das numerische Resultat nahezu exakt durch Gl. (8.72) beschrieben. Mit zunehmendem ε wächst die Abweichung zwischen der analytischen Lösung und dem entsprechenden Ergebnis der Computersimulation, in Übereinstimmung mit den theoretischen Voraussagen der Störungsrechnung.

Wir unterstreichen, daß der maximale Effekt der gerichteten Beschleunigung der TT von dem Parameter ξ (Abschn. 2.1) abhängig ist. In Analogie zu (8.53) kann man mittels numerischer Verfahren [75] die maximale gerichtete Geschwindigkeit $\langle u_z(t) \rangle^{\max}$ der rotierenden, asymmetrischen TT bestimmen. In Abb. 8.5a ist $\langle u_z(t) \rangle^{\max}$ für $\varepsilon = 0.1$ in Abhängigkeit von ξ aufgetragen. Im Vergleich zu homogenen TT (vgl. Abb. 8.4a) nimmt $\langle u_z(t) \rangle^{\max}$ für $\xi > 2$ zu.

In der Abb. 8.5b ist $\langle u_z(t) \rangle^{\max}$ für TT mit tensorieller Masse (Punkt-Strich-Kurve), für nicht-rotierende (gestrichelte Kurve) und rotierende TT (durchgezogene Kurve) ($\xi = 2$) in Abhängigkeit von ε dargestellt. In allen genannten Fällen ist $\langle u_z(t) \rangle^{\max}$ natürlich linear in ε .

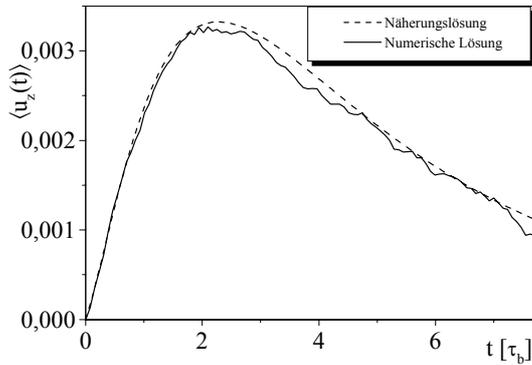
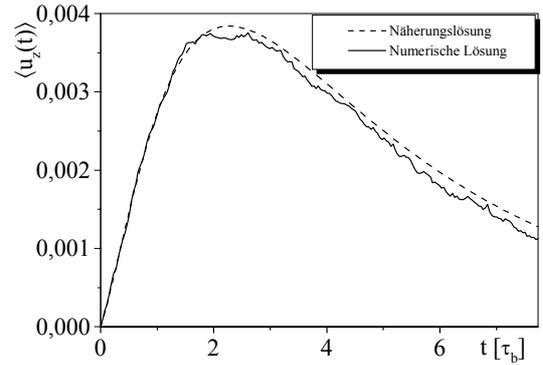
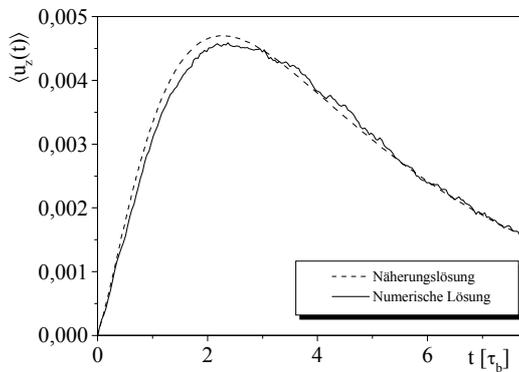
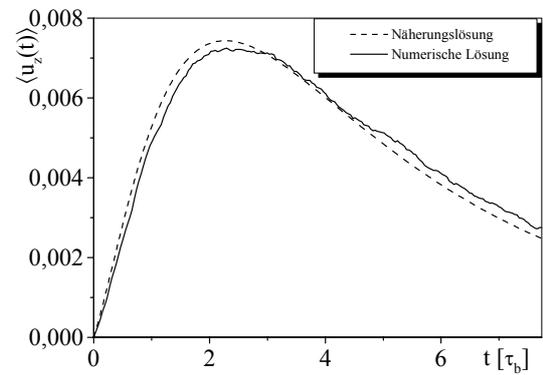
a) $M = 100 m$ b) $M = 75 m$ c) $M = 50 m$ d) $M = 25 m$

Abbildung 8.4: Zeitliche Entwicklung der mittleren Geschwindigkeit in Normalenrichtung für ein Ensemble rotierender, asymmetrischer Testteilchen (siehe Text) für verschiedene Massen M/m und den Anfangsbedingungen $\vec{u}(0) = 0, \omega(0) = 0$. Die gestrichelten Kurven sind Resultate der analytischen Lösung (8.72) für $\xi = 2$, die durchgezogenen Kurven jeweils die dazugehörigen Werte der Computersimulation.

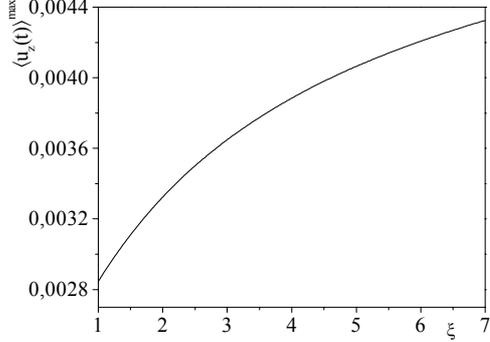


Abbildung 8.5a: ξ -Abhängigkeit der maximalen mittleren Vorzugsgeschwindigkeit $\langle u_z(t) \rangle^{\max}$ rotierender, asymmetrischer Testteilchen der Masse $M = 100 m$ für die Anfangsbedingungen $\vec{u}(0) = \omega(0) = 0$ (siehe Text).

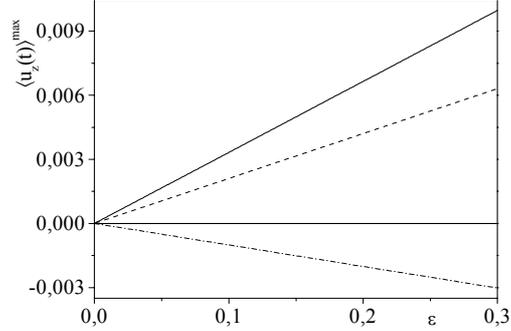


Abbildung 8.5b: ε -Abhängigkeit von $\langle u_z(t) \rangle^{\max}$ verschiedener asymmetrischer Testteilchen: durchgezogene Kurve: $\mathcal{R}_e^l/\mathcal{R}_{d(\kappa)}^r$; gestrichelte Kurve: $\mathcal{R}_e^l/\mathcal{R}_{d(3)}^r$; Punkt-Strich-Kurve: $\mathcal{R}_e^l/\mathcal{R}_{d(\sigma)}^r$, $\varepsilon_i \rightarrow 0$, $\varepsilon = \varepsilon_n$. Die Abkürzungen werden im Text (S. 17, 45) erklärt.

Zum Abschluß dieses Kapitels geben wir noch die zu (8.67) analogen linearen Differentialgleichungen für die tangentialen Freiheitsgrade

$$\begin{aligned} \frac{d \langle u_{i,1}(t) \rangle}{dt} = & -\chi_{t,0} \langle u_{i,1}(t) \rangle + u_i(0) u_z(0) \chi_{t,1} \exp(-t(\chi_{t,0} + 1)) \\ & + \langle \mathcal{A}_{i,1}(t) \rangle \text{ für } i = x, y \end{aligned} \quad (8.73)$$

und den Rotationsfreiheitsgrad

$$\frac{d \langle \omega_1(t) \rangle}{dt} = -\chi_{\omega,0} \langle \omega_1(t) \rangle + \omega(0) u_z(0) \chi_{\omega,1} \exp(-t(\chi_{\omega,0} + 1)) + \langle \mathcal{A}_{\omega,1}(t) \rangle \quad (8.74)$$

an.

Die Gl. (8.73) bzw. (8.74) lösen wir für die Anfangsbedingung $u_i(t_0) = u_i(0)$, $i = x, y$ bzw. $\omega(t_0) = \omega(0)$ und $u_z(t_0) = u_z(0)$ zum Startzeitpunkt. Unter Berücksichtigung der nullten Näherung (8.63) und $\langle \mathcal{A}_{i,1}(t) \rangle = 0$ folgt für die Geschwindigkeit in tangentialer Richtung

$$\begin{aligned} \langle u_i(t) \rangle = & \langle u_{i,0}(t) \rangle + \varepsilon \langle u_{i,1}(t) \rangle = \exp\left(-\frac{9t}{70}\right) u_i(0) \\ & \times \frac{1 + \varepsilon \left(1 - \frac{9\sqrt{2\pi}}{140} u_z(0) (1 - \exp(-t))\right)}{1 + \varepsilon} \text{ für } i = x, y \end{aligned} \quad (8.75)$$

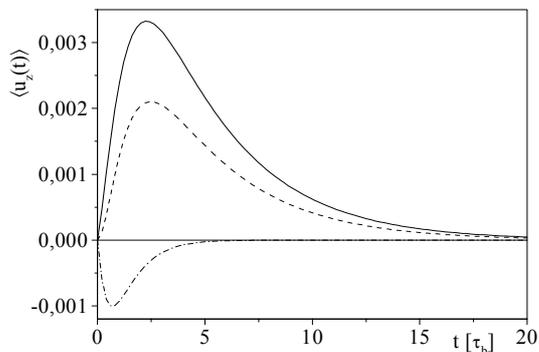


Abbildung 8.6a: Mittlere Geschwindigkeit (analytische Lösung) eines Ensembles verschiedener, asymmetrischer Testteilchen der Masse $M = M_n = 100 m$ für die Anfangsbedingungen $\vec{u}(0) = \omega(0) = 0$: durchgezogene Kurve: $\mathcal{R}_e^l/\mathcal{R}_{d(\kappa)}^r$, (8.72) (vgl. Abb. 8.4a); gestrichelte Kurve: $\mathcal{R}_e^l/\mathcal{R}_{d(3)}^r$, (8.71); Punkt-Strich-Kurve: $\mathcal{R}_e^l/\mathcal{R}_{d(\sigma)}^r$, $\varepsilon_t \rightarrow 0$, (8.69) (vgl. Abb. 6.7 bzw. 6.8). Die Abkürzungen werden im Text (S. 17, 45) erklärt.

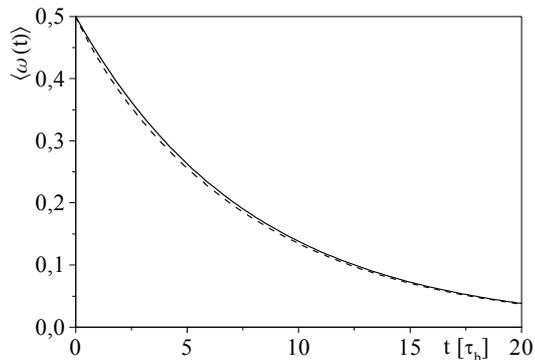


Abbildung 8.6b: Mittlere Winkelgeschwindigkeit eines Ensembles symmetrischer TT für die Anfangsbedingungen $u_z(0) = \omega(0) = 0.5$: durchgezogene Kurve: analytische Lösung (8.64); gestrichelte Kurve: analytische Lösung (8.76).

und analog für die Winkelgeschwindigkeit

$$\langle \omega(t) \rangle = \langle \omega_0(t) \rangle + \varepsilon \langle \omega_1(t) \rangle = \exp\left(-\frac{9t}{70}\right) \omega(0) \quad (8.76)$$

$$\times \frac{1 + \varepsilon \left(1 - \frac{9\xi\sqrt{\pi}}{140} u_z(0) (1 - \exp(-t))\right)}{1 + \varepsilon}.$$

In Übereinstimmung mit numerischen Resultaten (vgl. Abb. 6.1) findet man für $u_z(0) \neq 0$ zeitweilig ein abweichendes Verhalten z.B. der Lösung für $\langle \omega(t) \rangle$ (Abb. 8.6b) von dem exponentiellen Verlauf der entsprechenden Lösung BT (8.64). Die Ursache liegt darin, daß die Winkelgeschwindigkeit über den mittleren Strom (3.42) mit der Normalengeschwindigkeit leichter TT *gekoppelt* ist. Diese Situation ändert sich jedoch mit der vollständigen Relaxation des Normalen-Freiheitsgrades der TT, die beiden Kurven in Abb. 8.6b fallen zusammen. Die Größe des Effekts hängt von der Anfangsgeschwindigkeit der TT in Normalenrichtung (8.76) ab.

Kapitel 9

Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wurde das Verhalten von Testteilchen (TT) in einem stark verdünnten Gas von Medienteilchen (MT) analytisch und mittels Computersimulationen detailliert untersucht.

Zur Vereinfachung wurde im Kapitel 2 das Modell eines flachen, diskusförmigen, räumlich fest orientierten TT eingeführt, um grundlegende physikalische Eigenschaften zu untersuchen. In diesem Modell (Grundmodell) wird neben den drei Translationsfreiheitsgraden des TT ein **zusätzlicher** Rotationsfreiheitsgrad (um eine fest in Normalenrichtung orientierte Drehachse) berücksichtigt (Abb. 2.1). Das Gas von MT befindet sich stets im thermodynamischen Gleichgewicht. Darüber hinaus wurden Erweiterungen des Grundmodells (erweitertes Modell, Zylindermodell) betrachtet.

Neben der *spiegelnd-elastischen Reflexion* wurden besonders die nichttrivialen Wechselwirkungen: *total diffus-elastische Reflexion* und *total inelastische Wechselwirkung (totale Akkomodation)*, letztere für beliebige Adsorptionszeiten τ_a , untersucht.

Im Mittelpunkt des Interesses standen *asymmetrische TT*, die unter bestimmten Nichtgleichgewichtsbedingungen (z.B. bei einer Anfangsgeschwindigkeit $u(0) = 0$), jedoch ohne Vorhandensein irgendwelcher Gradienten, eine kurzzeitige, **gerichtete Bewegung** aus dem weißen Rauschen heraus erfahren. Die **Asymmetrie** entsteht durch die unterschiedlichen Wechselwirkungsmechanismen (z.B. spiegelnd-elastische Reflexion und total diffus-elastische Reflexion) auf gegenüberliegenden Seiten des TT.

Im Rahmen des Grundmodells wurde im Kapitel 3 zunächst der total diffus-elastische Stoß zwischen einem rotierenden TT der Masse M und dem Trägheitsmoment θ und einem MT der Masse m behandelt. Die dabei auftretende **Translations-Rotations-Kopplung** wurde näher betrachtet. Aus der Erhaltung der Energie der Relativbewegung folgt, daß die Relativgeschwindigkeiten der Translation und die Relativwinkelgeschwindigkeit die Gleichung eines zusammengedrückten Rotationsellipsoids erfüllen. Die Translationsgeschwindigkeit und Winkelgeschwindigkeit des TT nach dem Stoß ist durch die konstanten Halbachsen des Rotationsellipsoids und den (beliebig wählbaren) Reflexions- und Azimutwinkel festgelegt.

Unter der Voraussetzung, daß alle gleich großen Phasenraumvolumenelemente auf der Energieschale des Rotationsellipsoids (Abb. 3.2) die gleiche a priori Wahrscheinlichkeit besitzen (*mikrokanonisches Ensemble*), wurde die Reflexionswinkelverteilung für die total diffus-elastische Reflexion ermittelt.

Im Kapitel 5 wurde die systematische Beschleunigung der Translation und die systematische Winkelbeschleunigung von verschiedenen symmetrischen und asymmetrischen TT berechnet. Für den Fall sehr schwerer TT, d.h. $\varepsilon = \sqrt{\frac{m}{M}} \ll 1$ (BROWNSche Teilchen (BT)), müssen nur Terme erster Ordnung in der Translationsgeschwindigkeit \vec{u} , der Winkelgeschwindigkeit ω und ε in der systematischen Beschleunigung und Winkelbeschleunigung berücksichtigt werden. Dagegen spielen bei leichteren TT auch Terme zweiter und höherer Ordnung in ε eine Rolle.

Wir stellen zuerst Ergebnisse für **symmetrische** TT vor. Der lineare Reibungskoeffizient eines *rotierenden* BT in Normalenrichtung stimmt mit dem entsprechenden Ausdruck für ein *nichtrotierendes* BT überein. Anders verhält es sich bei leichteren TT. Der Normalen-Freiheitsgrad *rotierender* TT relaxiert im Vergleich zu *nichtrotierenden* TT langsamer in den Gleichgewichtszustand. Dieser Effekt wird bei rotierenden TT auf die *Translations-Rotations-Kopplung* zurückgeführt und durch Computersimulation bestätigt (Abb. 6.11a).

Auch die Winkelgeschwindigkeit (Gl. (5.26)) ist indirekt über den Strom der einfallenden MT mit der Normalengeschwindigkeit der TT gekoppelt. Die Relaxationszeit des Normalen-Freiheitsgrades total diffus-elastisch reflektierender und inelastisch wechselwirkender TT ($\tau_a \rightarrow 0$) ist verschieden. Daher wurde im Nichtgleichgewichtszustand kurzzeitig eine unterschiedliche Relaxation der mittleren Winkelgeschwindigkeit total diffus-elastisch reflektierender und inelastisch wechselwirkender TT gefunden (Abb. 6.1).

Für TT der Masse $M = m$ folgt für das Verhältnis zwischen den Reibungskoeffizienten der Rotation und den Reibungskoeffizienten in tangentialer Richtung ein analytischer Wert von 0.61. Der Rotationsfreiheitsgrad relaxiert damit *langsamer* als die tangentialen Freiheitsgrade des TT zum Gleichgewicht (Abb. 5.1b, Abb. 6.1).

Für BT ($\varepsilon \ll 1$) stimmen die entsprechenden linearen Reibungskoeffizienten dagegen überein. Die analytischen Resultate für BT wurden durch Computersimulation für TT der Masse $M = 100m$ (Abweichung $< 1.3\%$) bestätigt (Abb. 6.1, Tabelle 6.2).

Im Abschnitt 4.2 wurde die Rotation von TT bei inelastischer Wechselwirkung für den Fall einer endlichen Adsorptionszeit τ_a betrachtet (Abb. 4.1). Dieser Fall zeichnet sich sowohl durch eine zeitlich *stochastisch veränderliche Masse* als auch durch ein zeitlich *stochastisch veränderliches Trägheitsmoment* des TT (genauer des **TT-MT-Clusters**) aus. Für jede Massenbelegung und jedes Trägheitsmoment ist erwartungsgemäß der Gleichverteilungssatz der statistischen Mechanik erfüllt (Abb. 6.4). Allerdings gilt $\langle \theta \rangle \langle \omega^2 \rangle \neq k_B T$.

Weiterhin stellen wir die Ergebnisse für **asymmetrische TT** vor. Bei rotierenden, asymmetrischen TT treten in der systematischen Beschleunigung in Normalenrichtung neben Termen erster Ordnung auch Terme zweiter Ordnung in der Translationsgeschwindigkeit \vec{u} und der Winkelgeschwindigkeit ω auf. Diese Terme führen zu einer **gerichteten Beschleunigung** der TT, solange nicht alle Freiheitsgrade der TT zum thermodynamischen Gleichgewicht relaxiert sind. Diese systematische Beschleunigung ist proportional zu $2 \langle u_z^2 \rangle - (\langle u_x^2 \rangle + \langle u_y^2 \rangle) + [\langle \omega^2 \rangle - 1]$. Die Terme in der eckigen Klammer, die bei nichtrotierenden TT fehlen, sind eine Folge der *Translations-Rotations-Kopplung*. Diese Terme wurden für asymmetrische TT erstmalig erhalten. Aufgrund des Terms $[\langle \omega^2 \rangle - 1]$ zeigen asymmetrische TT, bei denen die Translationsfreiheitsgrade zum Startzeitpunkt maxwellverteilt sind und allein der Rotationsfreiheitsgrad sich im Nichtgleichgewicht befindet, eine gerichtete Beschleunigung (Abb. 6.10). Zur Startzeit vollkommen ruhende TT mit einem Rotationsfreiheitsgrad (Abb. 6.9) erfahren eine größere gerichtete Beschleunigung als nichtrotierende TT.

Aus der Erhaltung der Energie der Relativbewegung für ein hypothetisches, nichtrotierendes TT mit *tensorieller Masse* (Abschn. 5.4.1) folgt, daß die Relativgeschwindigkeiten ebenfalls der Gleichung eines Rotationsellipsoids genügen. Das Rotationsellipsoid ist durch einen Parameter σ (ein Maß für die Abweichung der tensoriellen von der skalaren Masse) bestimmt. Die *gerichtete Beschleunigung* solcher TT in Normalenrichtung ist proportional zu $m/M_n (2 \langle u_z^2 \rangle - [\langle u_x^2 \rangle + \langle u_y^2 \rangle]) + \sigma ([\langle u_x^2 \rangle + \langle u_y^2 \rangle] - 2)$, wobei M_n die Masse des TT in Normalenrichtung ist. Speziell für die Anfangsbedingung $\vec{u}(0) = 0$ erfahren asymmetrische TT mit tensorieller Masse für $\sigma < 0$ (zusammengedrücktes Rotationsellipsoid) ebenfalls eine größere gerichtete Beschleunigung als nichtrotierende TT ($\sigma = 0$). Die umgekehrte Situation ergibt sich dagegen für den Fall $0 < \sigma < 1$ (langgestrecktes Rotationsellipsoid).

Für leichtere rotierende, asymmetrische TT wurde erstmals im Abschnitt 8.2 ein System gekoppelter, nichtlinearer LANGEVIN-Gleichungen hergeleitet. Diese wurden mit Hilfe einer Störungsrechnung bis zur Ordnung ε^2 gelöst. Für hinreichend kleine ε stimmt die analytische Näherungslösung für die mittlere Normalengeschwindigkeit der TT mit entsprechenden Resultaten der Computersimulation sehr gut überein (Abb. 8.4a).

Im Abschnitt 4.1 wurden in dem Grundmodell zusätzliche, maxwellverteilte Rotationsfreiheitsgrade kugelförmiger MT (Hartkugelgas) berücksichtigt. Im Rahmen dieses Modells (*erweitertes Modell*) wurde die Rotation von TT bei inelastischer Wechselwirkung (totale Akkomodation) für den Fall $\tau_a \rightarrow 0$ untersucht. Es wurde gezeigt, daß die Rotationsfreiheitsgrade von TT und MT miteinander gekoppelt sind (**Rotations-Rotations-Kopplung**).

Im Abschnitt 5.3 wurde für das erweiterte Modell die systematische Winkelbeschleunigung leichter symmetrischer TT berechnet und die Rotations-Rotations-Kopplung (Abb. 5.1a) detailliert untersucht. Analog zu dem Grundmodell folgt ein linearer Reibungskoeffizient der Rotation für BT, der mit entsprechenden Resultaten der Computersimulation für TT der Masse $M = 100m$ ebenfalls sehr gut (Abweichung 0.95%) übereinstimmt (Tabelle 6.3). Die Berücksichtigung zusätzlicher Rotationsfreiheitsgrade kugelförmiger MT führt im Vergleich zu dem Grundmodell zu einem größeren linearen Reibungskoeffizienten der Rotation, als Konsequenz der *Rotations-Rotations-Kopplung* (Abb. 6.3).

Im Kapitel 7 wurden beidseitig spiegelnd-elastisch reflektierende, diskus- und kugelförmige TT betrachtet, die sich in einem Zylinder in Normalenrichtung bewegen können (*Zylindermodell*, Abb. 7.1). Dabei sollen auf die linke Seite des TT stets MT der Masse m_l und auf die rechte Seite MT der Masse m_r ($\neq m_l$) auftreffen, wobei der Druck auf beiden Seiten gleich sein soll. Daraus resultiert eine **Asymmetrie der stochastischen Kraft** bzgl. ihrer Stärke und Stoßfrequenz (Abb. 7.3b).

Für diesen Fall folgt ebenfalls eine kurzzeitige, *gerichtete Beschleunigung* der TT, solange ihre Normalen-Freiheitsgrade nicht zum thermodynamischen Gleichgewicht relaxiert sind. Die gerichtete Beschleunigung diskusförmiger TT ist dabei größer als die kugelförmiger TT (Abb. 7.7) und deutlich größer, als die gerichtete Beschleunigung *asymmetrischer* TT (Abb. 6.9).

Aus der systematischen und stochastischen Beschleunigung der TT für den Fall einer *Asymmetrie der stochastischen Kraft* folgt eine eindimensionale, nichtlineare LANGEVIN-Gleichung, die ebenfalls mittels einfacher Störungstheorie bzgl. ε gelöst wurde. Für TT der Masse $M = 10m$ wurde eine nahezu völlige Übereinstimmung zwischen der Näherungslösung für die mittlere Geschwindigkeit der TT in Normalenrichtung und dem entsprechenden Resultat der Computersimulation (Abb. 8.2a) gefunden.

Anhang A

Ableitung einer speziellen Riccatischen Differentialgleichung

In diesem Anhang leiten wir eine *spezielle* RICCATISCHE Differentialgleichung [95] aus der allgemeinen Form ((8.7), (8.8))

$$\frac{dy}{dt} = -y(t) - \chi(\varepsilon) y^2(t) + f(t) \quad (\text{A.1})$$

ab. Es werden die Notationen aus dem Abschnitt 8.1 verwendet. Die RICCATISCHE Differentialgleichung ist im allgemeinen Fall durch elementare Funktionen in geschlossener Form lösbar, falls für geeignet gewählte Konstanten c_1, c_2 die Bedingung

$$z(t) = \exp(-t) \left[c_1 + c_2 \int f(\zeta) \exp(\zeta) d\zeta \right] = \sqrt{\frac{f(t)}{-\chi}} \quad (\text{A.2})$$

erfüllt ist, d.h. wenn z eine Lösung der linearen DGL

$$\frac{dz}{dt} = -z(t) + c_2 f(t) \quad (\text{A.3})$$

ist. Die Lösbarkeit der RICCATISCHEN Differentialgleichung (RDGL) ist an die Bedingung (A.2) mit der Funktion $f(t)$ verknüpft. Sie legt im Allgemeinen die spezielle Lösung der RDGL fest. Interpretieren wir die Funktion $f(t)$ im Integranden des mittleren Ausdrucks der Gl. (A.2) als $\mathcal{A}_L(t)$ der LANGEVIN-Gleichung (LDGL), so setzt diese Relation die LDGL (5.1) und die RDGL (8.7) und damit die Lösungen u_L und u_R in Beziehung. (A.2) besagt, daß die Lösung $u_L(t) = z(t)$ der LDGL mit $c_1 = u_L(0)$, $c_2 = 1$, $f(t) = \mathcal{A}_L(t)$ eine spezielle Lösung der nichtlinearen, stochastischen DGL (A.1) ist. Nach Quadrieren der Gl. (A.2) und Ensemblemittelung stellt der entstehende Ausdruck

$$\begin{aligned} \langle u_L^2(t) \rangle &= \exp(-2t) \left(u_L^2(0) + \int \mathcal{A}_L(\zeta) \exp(\zeta) d\zeta \right)^2 \\ &= (1 - (1 - u_L^2(0)) \exp(-2t)), \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

das mittlere, zeitabhängige Geschwindigkeitsquadrat BROWNScher Teilchen dar. Wir betonen, daß die Funktion $f(t, \varepsilon) = \mathcal{A}_R(t) + \chi(\varepsilon)$ (8.7) der Gl. (A.1) nicht mit dem $f(t) = \mathcal{A}_L(t)$ der Gl. (A.3) übereinstimmt. Tragen wir diesem Sachverhalt Rechnung, so können wir die Funktion $f(t, \varepsilon)$ in der Form

$$f(t, \varepsilon) = \chi(\varepsilon) \left((1 - u_L^2(0)) \exp(-2t) \right) \quad (\text{A.5})$$

schreiben. Dieser Ausdruck für $f(t, \varepsilon)$ mit der notwendigen Bedingung

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} f(t, \varepsilon) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (\mathcal{A}_R(t) + \chi(\varepsilon)) = f(t) = \mathcal{A}_L(t) \quad (\text{A.6})$$

ist nur dann *korrekt*, wenn man bei seiner Ersetzung in Gl. (A.1) die *Ensemblemittelung* beachtet. Die spezielle RDGL lautet (in der Notation des Abschn. 8.1)

$$\frac{d \langle u_R(t) \rangle}{dt} = - \langle u_R \rangle + \chi \left((1 - u_L^2(0)) \exp(-2t) - \langle u_R^2 \rangle \right). \quad (\text{A.7})$$

Diese geht unmittelbar für die spezielle Anfangsbedingung $u_L(0) = u_R(0) = 0$ in die DGL (8.43) über.

Literaturverzeichnis

- [1] R. Brown, *Philos. Mag.* **4**, 161 (1828); **6**, 161 (1829)
- [2] A. Einstein, *Ann. d. Physik* **17**, 549 (1905); **19**, 371 (1906)
- [3] Smoluchowski, *Ann. d. Physik* **21**, 756 (1906)
- [4] P. Langevin, *Comptes rendus* **146**, 530 (1908)
- [5] G. E. Uhlenbeck, L. S. Ornstein, *Phys. Rev.* **36**, 823 (1930)
- [6] S. Chandrasekhar, *Rev. Mod. Phys.* **15**, 1 (1943)
- [7] Ming Chen Wang, G. E. Uhlenbeck, *Rev. Mod. Phys.* **17**, 323 (1945)
- [8] M. S. Green, *J. Chem. Phys.* **20**, 1281 (1952); **22**, 398 (1954)
- [9] R. Zwanzig, *Ann. Rev. Phys. Chem.* **16**, 67 (1955)
- [10] H. Mori, *Prog. Theor. Phys.* **33**, 423 (1965); **34**, 399 (1965)
- [11] G. Wyllie, *Physics Reports* **61**: (6), 329 (1980)
- [12] B. J. Alder, Lecture Notes in Physics: *Computations in statistical mechanics*, (Springer-Verlag 1975)
- [13] D. L. Ermak, J. A. McCammon, *J. Chem. Phys.* **69**: (4), 1352 (1978)
- [14] G. Cicotti, J.-P. Pyckkaert, *J. Mol. Phys.* **40**: (1), 141 (1980)
- [15] F. Fernandez, J. Marro, *J. Stat. Phys.* **71**: (1/2), 225 (1993)
- [16] W. Schaertl, H. Sillescu, *J. Stat. Phys.* **74**: (3/4), 687 (1994)
- [17] K. F. Freed, M. Muthukumar, *J. Chem. Phys.* **69**: (6), 2657 (1978)

LITERATURVERZEICHNIS

- [18] E. Dickinson, S. A. Allison, J. A. McCammon,
J. Chem. Soc. Faraday Trans. 2 **81**, 591 (1985)
- [19] M. W. Evans, *Phys. Rev. Lett.* **55**: (15), 1551 (1985)
- [20] A. Rau, R. W. Gerling, *Z. Phys. B - Condensed Matter* **78**, 275 (1989)
- [21] IS. Beloborodov, VY. Orekhov, AS. Arseniev, *J. Magn. Reson.* **132**: (2), 328, (1998)
- [22] MF. Gelin, *Chem. Phys.* **240**: (1/2), 265 (1999)
- [23] M. Ohl, F. Mayr, M. Reehuis, e. a., *Physica B* **276**, 471 (2000)
- [24] E. Frey, *Phys. Bl.* **57**: Nr. 2, 63 (Februar 2001)
- [25] MJ. Saxton, K. Jacobson, *Ann. Rev. Biophys. and Biomolec. Struc.* **26**, 373 (1997)
- [26] K. Svoboda, C. F. Schmidt, B. J. Schnapp, S. M. Block, *J. Nature* **365**, 721 (1993)
- [27] J. Maddox, *J. Nature* **369**, 181 (1994)
- [28] J. Denur, *Phys. Rev. A* **40**: (9), 5390 (1989)
- [29] M. O. Magnasco, *Phys. Rev. Lett.* **71**: (10), 1477 (1993)
- [30] S. Leibler, *J. Nature* **370**, 412 (1994)
- [31] J. Rousselet, e. a., *J. Nature* **370**, 446 (1994)
- [32] R. D. Astumian, M. Bier, *Phys. Rev. Lett.* **72**: (11), 1766 (1994)
- [33] J. Prost, J.-F. Chauwin, L. Peliti, A. Ajdari, *Phys. Rev. Lett.* **72**: (16), 2652 (1994)
- [34] C. R. Doering, W. Horsthemke, J. Riordan, *Phys. Rev. Lett.* **72**: (19), 2984 (1994)
- [35] C. Pöppe, *Spektrum der Wissenschaft* 38, Nov. 1994
- [36] R. Bartussek, P. Hänggi, *Phys. Bl.* **51**: Nr. 6, 506 (1995)
- [37] M. M. Millonas, *Phys. Rev. Lett.* **74**: (1), 10 (1995)
- [38] L. P. Faucheux, L. S. Bourdieu, P. D. Kaplan, A. J. Libchaber,
Phys. Rev. Lett. **74**: (9), 1504 (1995)
- [39] M. Gorman, M. el-Hamdi, B. Pearson, K. A. Robbins, *Phys. Rev. Lett.* **76**: (2), 228 (1996)
- [40] YX. Li, *Physica A* **251**: (3/4), 382 (1998)

LITERATURVERZEICHNIS

- [41] JD. Bao, YZ. Zhuo, *Phys. Lett. A* **239**: (4/5), 228 (1998)
- [42] C. Van den Broeck, P. Reimann, R. Kawai, P. Hänggi, Lecture Notes in Physics: *Statistical Mechanics of Biocomplexity*, (Springer-Verlag 1999)
- [43] J. Luczka, *Physica A* **274**: (1/2), 200 (1999)
- [44] C. Jarzynski, O. Mazonka, *Phys. Rev. E* **59**: (6), 6448 (1999)
- [45] YX. Li, XZ. Wu, YZ. Zhuo, *Int. J. Mod. Phys. B* **14**: (24), 2609 (2000)
- [46] L. Cao, DJ. Wu, *Phys. Rev. E* **62**: (5), 7478 Part B (2000)
- [47] YX. Li, XZ. Wu, YZ. Zhuo, *Mod. Phys. Lett. B* **14**: (13), 479 (2000)
- [48] M. Porto, M. Urbakh, J. Klafter, *Phys. Rev. Lett.* **84**: (26), 6058 (2000)
- [49] C. Kettner, P. Hänggi, F. Müller, Realisierung von rauschinduziertem Transport mit periodischem Antrieb, in: Technische Anwendungen von Erkenntnissen der Nichtlinearen Dynamik, ed. H. Hoffschulz, (VDI-Technologiezentrum Physikalische Technologien, Düsseldorf, 1999), **ISBN 3-931384-25-X**
- [50] C. Kettner, P. Reimann, P. Hänggi, F. Müller, *Phys. Rev. E* **61**, 312 (2000)
- [51] GR. Ivanitsky, AB. Medvinsky, AA. Deev, MA. Tsyganov, *Uspekhi Fizicheskikh Nauk* **168**: (11), 1221 (1998)
- [52] JR. Dennis, J. Howard, V. Vogel, *Nanotechnology* **10**: (3), 232 (1999)
- [53] K. Handrich, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **96**, 905 (1989)
- [54] K. Handrich, *Wiss. Zeitschrift der TH Leuna-Merseburg* **31**, 457 (1989)
- [55] U. Heiber, *Ph. D. thesis*, TU Ilmenau, (Shaker, Aachen 1996), **ISBN 3-8265-1286-3**
- [56] K. Handrich, F.-P. Ludwig, *J. Stat. Phys.* **86**: (5/6), 1067 (1997)
- [57] F.-P. Ludwig, *Dissertation*, (TU Ilmenau 1999)
- [58] K. Handrich, *unpublished*
- [59] TP. Chang, HC. Chang, *Mechanics of Structures and Machines* **25**: (4), 397 (1997)
- [60] D. R. Chialvo, M. M. Millonas, *Phys. Lett. A* **209**, 26 (1995)
- [61] J. Kula, T. Czernik, J. Luczka, *Phys. Lett. A* **214**, 14 (1996)

LITERATURVERZEICHNIS

- [62] J. L. Lebowitz, J. K. Percus, *Phys. Rev.* **155**: (1), 122 (1967)
- [63] L. D. Landau, E. M. Lifschitz, Lehrbuch der Theoretischen Physik vol. X, *Physikalische Kinetik*, (Akademie, Berlin 1990)
- [64] B. J. Alder, T. E. Wainwright, *Phys. Rev. Lett.* **18**: (23), 988 (1967)
- [65] B. J. Alder, T. E. Wainwright, *Phys. Rev. A* **1**: (1), 18 (1970)
- [66] J. R. Dorfman, E. G. D. Cohen, *Phys. Rev. A* **6**: (2), 776 (1972)
- [67] N. Mishima, T. Y. Petrowsky, H. Minowa, S. Goto, *Am. J. Phys.* **48**: (12), 1050 (1980)
- [68] P. D. Fedele, Y. W. Kim, *Phys. Rev. Lett.* **44**: (11), 691 (1980)
- [69] A. J. Masters, P. A. Madden, *J. Chem. Phys.* **74**: (4), 2450 (1981)
- [70] R. S. Modak, *Am. J. Phys.* **52**: (1), 43 (1984)
- [71] A. Yu. Boris, V. S. Galkin, *Izv. Akad. Nauk SSSR, Mekh. Zhidk. i Gaza* vol. **21**, 157 (1986)
- [72] H. Babovsky, Die Boltzmann-Gleichung: *Modellbildung-Numerik-Anwendungen*, (Teubner, Stuttgart, Leipzig 1998)
- [73] H. Grabert, *Phys. Bl.* **46**: Nr. 4, 113 (1990)
- [74] M. Henzler, W. Göpel, *Oberflächenphysik ...*, (Teubner, Stuttgart 1991)
- [75] S. Wolfram, Das Mathematica Buch: *Mathematica Version 3*, (Addison-Wesley-Langman 1997)
- [76] R. Becker, *Theorie der Wärme*, (Springer, New York 1966)
- [77] L. M. Raff, J. Lorenzen, B. C. McCoy, *J. Chem. Phys.* **46**: (11), 4265 (1967)
- [78] J. Honerkamp, *Stochastische Dynamische Systeme*, (VCH, Weinheim 1990)
- [79] R. Kubo, M. Toda, N. Hashitsume, *Statistical Physics II: Nonequilibrium Statistical Mechanics*, (Springer, New York 1991)
- [80] C. W. Gardiner, *Handbook of stochastic methods*,
Physics for Chemistry and the natural sciences, (Springer 1994)
- [81] F. Perrin, *J. Phys. Radium* **5**, 497 (1934)
- [82] B. K. P. Scaife, *Complex Permittivity*, (English Universities, London, 1971)

LITERATURVERZEICHNIS

- [83] R. E. D. McClung, *J. Chem. Phys.* **73**: (5), 2435 (1980)
- [84] JY. Jang, RM. Stratt, *J. Chem. Phys.* **112**: (17), 7524, (2000)
- [85] Eine Version des Programmes *SysB* kann bei dem Autor angefordert werden.
Die Adresse lautet: Dirk Lehmkuhl, Weimarer Str. 15, 98693 Ilmenau
- [86] I. S. Gradshteyn, I. M. Ryzhik, *Table of integrals, Series, and Products*, Fifth Edition,
(Academic Press, 1997)
- [87] G. Ryskin, *Phys. Rev. Lett.* **61**: (13), 1442 (1988)
- [88] G. W. Ford, J. T. Lewis, J. McConnell, *Phys. Rev. A* **19**: (2), 907 (1979)
- [89] Y. Zhang, T. E. Bull, *Phys. Rev. E* **49**: (6), 4886 (1994)
- [90] A. Yoshimori, *Phys. Rev. E* **59**: (6) 6535 (1999)
- [91] K. Ito, *Proc. Impl. Acad. Tokyo* **20**, 519 (1944)
- [92] K. Ito, H.P. Jr. McKean, *Diffusion Processes and their Sample Paths*,
(Springer, Berlin, Heidelberg 1996)
- [93] R. Stratonovich, *J. SIAM control* **4**, 362 (1966)
- [94] R. E. Mortensen, *J. Stat. Phys.* **1**, 271 (1969)
- [95] E. Kamke, *Gewöhnliche Differentialgleichungen*,
(Akademische Verlagsgesellschaft, Leipzig 1959)
- [96] W. Paul, J. Baschnagel, *Stochastic Processes*,
(Springer, Berlin, Heidelberg, New York 1999)

Verzeichnis der Abkürzungen

A	Flächeninhalt einer Seite des diskusförmigen Testteilchens
A_K	halber Flächeninhalt des kugelförmigen Testteilchens
BT	BROWNSche Teilchen
DGL	Differentialgleichung
ε	Wurzel aus dem Massenverhältnis zwischen Medienteilchen und Testteilchen
η	reduziertes Trägheitsmoment
FDT II	Fluktuations-Dissipations-Theorem zweiter Art
$\gamma_x, \gamma_y, \gamma_z$	lineare Reibungskoeffizienten der Translation
γ_ω	linearer Reibungskoeffizient der Rotation
\mathcal{K}	körperfestes, rotierendes Koordinatensystem
κ	Verhältnis zwischen der reduzierten Masse und dem Trägheitsmoment des Testteilchens
\mathcal{L}	Laborsystem
λ	Wurzel aus dem Verhältnis der Trägheitsmomente von kugelförmigen Medienteilchen und diskusförmigen Testteilchen
LDGL	LANGEVIN-Gleichung

VERZEICHNIS DER ABKÜRZUNGEN

LSG	Lösung
\mathcal{M}	die Geschwindigkeitskomponenten der Testteilchen sind <i>maxwellverteilt</i> und im Gleichgewicht mit dem Mediengas
M	Masse des Testteilchens
m	Masse des Medienteilchens
MT	Medienteilchen
μ	reduzierte Masse
\mathcal{O}	Ordnung
R	Radius des Testteilchens
\mathcal{R}	Reflexion
\mathcal{R}_a	total inelastische Wechselwirkung (totale Akkomodation)
$\mathcal{R}_{a(\kappa,\lambda)}$	total inelastischer Stoß zwischen rotierenden Testteilchen und rotierenden, kugelförmigen Medienteilchen
\mathcal{R}_d	total diffus-elastische Reflexion
$\mathcal{R}_{d(3)}$	total diffus-elastischer Stoß zwischen nichtrotierenden Testteilchen und punktförmigen Medienteilchen
$\mathcal{R}_{d(\kappa)}$	total diffus-elastischer Stoß zwischen rotierenden Testteilchen und punktförmigen Medienteilchen
$\mathcal{R}_{d(\sigma)}$	total diffus-elastischer Stoß zwischen nichtrotierenden Testteilchen mit tensorieller Masse und punktförmigen Medienteilchen
RDGL	RICCATISCHE Differentialgleichung
S	Schwerpunkt des diskusförmigen Testteilchens

VERZEICHNIS DER ABKÜRZUNGEN

σ	Abweichung der tensoriellen gegenüber der skalaren Masse des Testteilchens
τ_0	mittlere Zeit zwischen zwei Treffern von Medienteilchen auf eine Seite eines ruhenden Testteilchens
τ_a	mittlere Adsorptionszeit
τ_b	Relaxationszeit
$\tau_{b,e}$	Relaxationszeit bei der spiegelnd-elastischen Reflexion
Θ	Trägheitsmoment kugelförmiger Medienteilchen
θ	Trägheitsmoment diskusförmiger Testteilchen
V_{RR}	Verhältnis der linearen Reibungskoeffizienten der Rotation mit und ohne Berücksichtigung von Rotationsfreiheitsgraden der Medienteilchen
V_{TR}	Verhältnis zwischen den Reibungskoeffizienten der Rotation und den in tangentialer Richtung
ξ	Für den Fall einer ortsabhängigen Massendichte auf dem TT ergeben sich Werte für ξ im Bereich $1 \leq \xi \leq \infty$

Danksagung

An dieser Stelle bedanke ich mich besonders bei Prof. K. Handrich für die kontinuierliche Betreuung dieser Arbeit. Durch seine vielfältigen Ideen, Anregungen und Diskussionen hat er maßgeblichen Anteil am Gelingen dieser Arbeit.

Für die unterstützende Begleitung dieser Promotion möchte ich mich an dieser Stelle auch bei allen anderen Mitarbeitern des Instituts für Physik, insbesondere bei Dr. B. Günther und Dipl.-Phys. R. Ötting bedanken.

Ich bedanke ich mich bei Dr. H. Grille für die zuverlässige Betriebsbereitschaft der Rechentchnik. Der freundlichen sowie äußerst kompetenten Benutzerberatung des Hochschulrechenzentrums durch Dipl.-Ing. H. Schwanbeck und Dipl.-Ing. F. Specht bin ich ebenfalls zu Dank verpflichtet.

Weiterhin möchte ich mich bei Dipl.-Ing. F. Scharmann und Dr. J. Pezold vom Institut für Festkörperphysik, Fachgebiet Nanotechnologie für weiterführende Anregungen bedanken. Im Rahmen einer gemeinsamen Arbeit konnte der Oberflächendiffusionskoeffizient des Kohlenstoffs erstmalig während der Ausbildung der Kohlenstoff induzierten Si(111) ($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$) $R 30^\circ - C-$ und der Si(100) $c(4 \times 4) - C-$ Rekonstruktionen bestimmt werden.

Nicht zuletzt danke ich meiner Familie und Prof. A. Rau von der Carl von Ossietzky Universität Oldenburg, die mich bei meinem Werdegang unterstützt haben. Mein Dank gilt darüber hinaus meinen Freunden Michael Staroska, Maritza Bensen und Regina Kessler für ihre seelische Unterstützung.

Erklärung

Hiermit erkläre ich, daß ich die vorliegende Arbeit selbständig und nur unter Verwendung der angegebenen Literatur und Hilfsmittel angefertigt habe.

Ilmenau, den 1. Juni 2001