

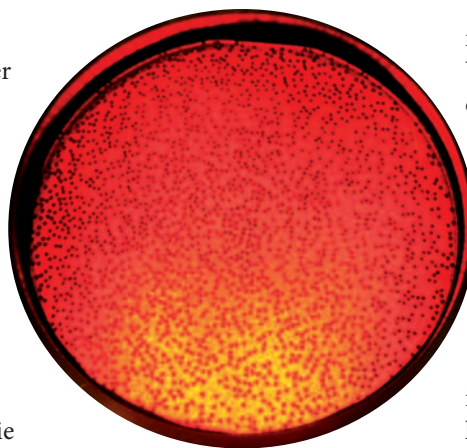
Rock 'n' Roll in der Petrischale

Neue Experimente mit einem Granulat aus gerüttelten Stahlkugeln zeigen einen zweidimensionalen Phasenübergang in einem Nichtgleichgewichtssystem und bereiten damit vielleicht den Weg zu einer Theorie der „Granulodynamik“.

► **Abb. 1** 3000 Präzisionsstahlkugeln in einer vertikal gerüttelten Schale bilden ein granulares Fluid, das bei Zugabe von weiteren Teilchen kristallisiert. Die Bewegung der Kugeln ist durch zwei parallele Glasplatten auf zwei Dimensionen beschränkt. (Foto: R. Ingale, CUNY)

Granulare Materie – dazu gehören z. B. Schüttgüter in der Industrie oder Sandmeere in der Wüste – zeichnet sich u. a. dadurch aus, dass die einzelnen Körner viel zu groß sind, um durch thermische Anregung in Bewegung versetzt zu werden. Deshalb ist es im Gegensatz zu den aus Molekülen bestehenden Fluiden für granulare Systeme noch nicht gelungen, ein fundamentales „Werkzeug“ wie die Navier-Stokes-Gleichung zu finden. Es gibt ernstzunehmende Stimmen, die ein solches Ziel für aussichtslos halten, weil die körnige Struktur einen Kontinuumsansatz unmöglich machen könnte.

In der klassischen Thermodynamik wird ein System als im Gleichgewicht bezeichnet, wenn seine Gesamtentropie maximal ist. Dann gibt es keine treibenden Gradienten mehr, keine makroskopischen Material- oder Energieflüsse. Ein Beispiel ist die Milchflasche im Kühlschrank, deren Zustand durch wenige Größen wie Masse, Temperatur oder Druck eindeutig bestimmt ist. Im Gegensatz dazu bildet z. B. kochendes Wasser auf dem Herd ein offenes, dissipatives System, durch das ständig Energie gepumpt wird. Viele Informationen sind notwendig, um die darin entstehenden turbulenten Strömungs-



bewegungen zu beschreiben. Sie bilden ein sog. Fließgleichgewicht im Sinne von Ilya Prigogines Nichtgleichgewichtsthermodynamik.

In diese Klasse von Nichtgleichgewichtssystemen gehören Granulate schon deshalb, weil die miteinander wechselwirkenden Körner durch Reibung und inelastische Kollisionen ständig mechanische Energie dissipieren und nur durch äußere mechanische Anregungen wie Scherung oder Vibration in Bewegung gehalten werden können. In den vergangenen Jahren haben aufwändige Computersimulationen von Systemen mit harten Kugeln den größten Fortschritt gebracht. Die einzig halbwegs überzeugenden Experimente zu Teilchen mit vergleichbaren Potentialen („hard sphere“) wurden bisher mit Kolloiden durchgeführt [1], d. h. auf

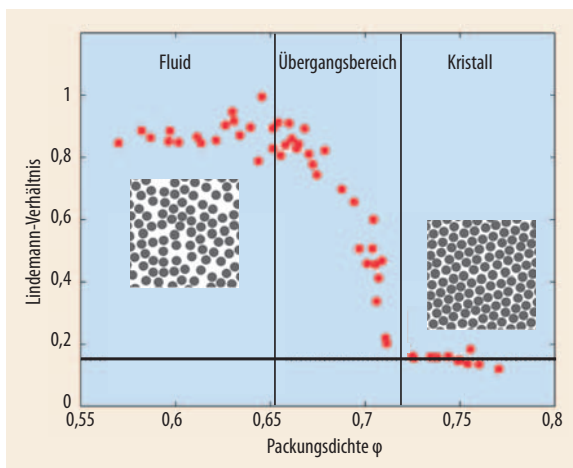
mesoskopischer Längenskala unter Verlust der direkten Sichtbarkeit der Partikeln.

Daher kommt eine aktuelle Arbeit von Pedro Reis und seinen Kollegen von der City University in New York zur rechten Zeit [2]. Sie verwendeten eine Apparatur, die aus Arbeiten anderer Kollegen [3] als eine Art „Drosophila“ der Granulatforschung bekannt ist, nämlich eine horizontale Monolage von Kugeln unter vertikaler Vibration (**Abb. 1**). Der Clou besteht nun darin, dass der Koautor Mark Shattuck die vibrierende Bodenplatte kurzerhand in seiner Garage mit einem Sandstrahler traktierte und damit ihre Oberfläche in zufälliger Weise aufraute. Dadurch geschieht die Energieeinkopplung in das granulare System durch eher stochastisch verteilte schräge anstatt rein vertikale Stöße. Eine einzelne Stahlkugel vollführt in diesem System eine Art Brownsche Molekularbewegung. Daher ist das Ensemble von mehreren tausend Kugeln eine ideale Testapparatur, um Analogien zwischen einem thermodynamischen Gleichgewichtssystem und dem hier realisierten, von außen homogen geheizten Nichtgleichgewichtssystem zu finden.

Bei der Analyse ihrer Messdaten gingen die Forscher mit großer Sorgfalt vor. Gleich vier verschiedene Kriterien wurden angelegt, um den Übergang zwischen einer fluiden Phase bei niedriger Packungsdichte und der kristallinen Phase bei hohem Füllgrad zu charakterisieren. Geradezu klassisch ist das Lindemann-Kriterium [4]: Ein Kristall schmilzt, wenn die thermischen Auslenkungen der Atome einen kritischen Bruchteil (typisch 10–15 %) des mittleren Nachbarabstandes überschreiten. Dies geschieht im betrachteten System unterhalb einer kritischen Packungsdichte von 0,719 (**Abb. 2**). Das eher empirische Lindemann-

Priv.-Doz. Dr. **Christof A. Krülle**, M. A., Experimentalphysik V, Universität Bayreuth, 95440 Bayreuth

Abb. 2 Der granulare Phasenübergang lässt sich durch das Verhältnis aus mittlerer Auslenkung und Abstand (Lindemann-Verhältnis [4]) quantitativ erfassen. Als Funktion der Packungsdichte $\phi = N[D/(2R)]^2$ gibt es einen Übergangsbereich, in dem die Beweglichkeit der Teilchen stark abfällt. Hierbei ist N die Anzahl der Stahlkugeln, $D = 1,191$ mm ihr Durchmesser und $R = 102$ mm der Radius der Schale. Bei Überschreiten einer kritischen Packungsdichte von 0,719 kristallisiert das Granulat vollständig aus.



Kriterium liefert jedoch nur wenige Informationen über Teilchenkonfigurationen. Das Erreichen der in **Abb. 2** erkennbaren vollständigen Fluidisierung für Packungsdichten kleiner als 0,652 lässt sich damit nicht präzise bestimmen. Hierfür eignen sich die Paarverteilungsfunktion und die Bindungsorientierung besser. Diese beiden Ordnungsparameter wurden schon in einer früheren Arbeit diskutiert [5]. Dort wurde der Übergangsbereich zwischen Fluid und Kristall als zweifacher kontinuierlicher Phasenübergang interpretiert, bei der die fluide Phase zuerst eine hexatische Orientierungsfernordnung¹⁾ entwickelt, bevor sich im zweiten Schritt der kristalline Zustand vollständig ausbildet. Ein ähnliches Szenario ist von der in den 1970er Jahren entwickelten Defekt-Theorie des zweidimensionalen Schmelzens bekannt (KTHNY-Theorie). Wie genau diese Gleichgewichtstheorie auf das hier vorgestellte granulare System passt, lässt sich – wie Reis und Kollegen zugeben – nur durch genauere Untersuchungen der Defektopologie im Übergangsbereich bei einem beträchtlich größer gewählten Bildausschnitt klären.

In der aktuellen Veröffentlichung gehen die Autoren einen Schritt weiter – aber in eine andere Richtung: angeregt durch Monte-Carlo-Simulationen eines Systems aus harten Scheiben im thermodynamischen Gleichgewicht [6] wurde die zunehmende Ordnung bei Erhöhung der Packungsdichte durch einen neuartigen Ordnungsparameter charakterisiert. Wenn man die Massenmittelpunkte der Stahlkugeln als Ausgangspunkte einer Voronoi-Zerlegung²⁾ der Schalenfläche nimmt, dann lässt sich für alle so gefundene Polygone der „Formfaktor“ $\zeta = U^2/(4\pi A)$ als Maß für ihre Rundheit bestimmen. Das ist das Verhältnis aus dem Quadrat des Polygonumfangs zur Polygonfläche. Normiert mit dem Faktor 4π , ergibt sich für den Grenzfall eines Kreises $\zeta_{\text{Kreis}} = 1$ und für regelmäßige Sechsecke $\zeta_{\text{Hexagon}} = 2\sqrt{3}/\pi \approx 1,103$. Wenn sich im Experiment mit den gerüttelten Stahlkugeln durch Zugabe weiterer Kugeln die granulare Pa-

ckung der Kristallstruktur annähert, zeigt sich eine charakteristische Verschiebung der Wahrscheinlichkeitsverteilung der Formfaktoren zu einem deutlichen Maximum bei $\zeta = \zeta_{\text{Hexagon}}$. Dies ist eine bemerkenswerte Übereinstimmung mit den numerischen Simulationen.

Wie die Autoren betonen, besteht der große Fortschritt ihrer Studie darin, dass es hier erstmals gelungen ist, die schon früher beobachtete Kristallisation eines extern angeregten Granulats in feinsten Einzelheiten mit den Eigenschaften eines Gleichgewichtsystems in Übereinstimmung zu bringen. Hierfür scheint die Homogenität der Energieeinkopplung wichtiger zu sein als die Energieerhaltung im System. Ob der untersuchte Phasenübergang mit dem Prinzip der Entropiemaximierung wie bei den Harte-Kugel-Systemen erklärt werden kann, bleibt offen.

Wie weit die Analogie trägt, müssen weitere Analysen z. B. der Geschwindigkeitsverteilung der Teilchen und daraus gewonnene Erkenntnisse über Druck und granulare Temperatur zeigen. Letztlich wäre es erstrebenswert, für die Granulodynamik etwas Ähnliches wie die Hauptsätze der Thermodynamik zu finden. Ein erster Schritt auf dem langen Weg dorthin ist getan.

Christof Krülle

- [1] P. N. Pusey und W. van Meegen, *Nature* **320**, 340 (1986); M. A. Rutgers et al., *Phys. Rev. B* **53**, 5043 (1996)
- [2] P. M. Reis, R. A. Ingale und M. D. Shattuck, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 258001 (2006)
- [3] J. S. Olafsen und J. S. Urbach, *Phys. Rev. E* **60**, R2468 (1999)
- [4] J. J. Gilvarry, *Phys. Rev.* **102**, 308 (1956)
- [5] J. S. Olafsen und J. S. Urbach, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 098002 (2005)
- [6] F. Moučka und I. Nezbeda, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 040601 (2005)

1) Hexatisch bedeutet, dass beim Übergang von der völlig „amorphen“ Struktur des Fluids zum Kristall zuerst eine Zwischenstruktur entsteht, bei der sich schon sechs Vorzugsrichtungen bzw. -winkel in der Fläche herausstellen, im Nahbereich um jede einzelne Kugel aber noch keine erkennbare Ordnung mit festem Kugelabstand zu erkennen ist.

2) Bei der Voronoi-Zerlegung wird eine Fläche komplett mit Polygonen gefüllt. Alle Punkte innerhalb einer Polygonfläche liegen am nächsten zu dem Messpunkt, der zentral in diesem Polygon liegt. In der Kristallographie kennt man das unter dem Namen Wigner-Seitz-Zelle.