

# Jamming für Wechselwirkungen mit unterschiedlichen Reichweiten

Bachelorarbeit aus der Physik

Vorgelegt von  
Nicolas Wohlleben  
12.09.2019

Institut für Theoretische Physik I  
Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg



Betreuer: Prof. Dr. M. Schmiedeberg

## Zusammenfassung

Eine Vielzahl von Systemen lässt sich durch Potentiale mit langen Reichweiten charakterisieren. Beispiele sind kolloidale Suspensionen, welche aus mesoskopischen Teilchen bestehen, die in einer Flüssigkeit aufgelöst sind. Wir untersuchen in der folgenden Arbeit für solche Systeme mit langen Reichweiten das Jamming-Phänomen, also den Übergang ungeordneter Materie zu einem starren Zustand, wobei wir die Reichweite der Wechselwirkungen durch einen Cutoff des Potentials kontrollieren. In der Literatur beschränkt sich die Betrachtung zumeist auf Systeme mit kurzen Reichweiten. Zu Beginn der Arbeit stellen wir die theoretischen Grundlagen des Jamming-Phänomens, als auch die Wechselwirkungen in kolloidalen Systemen dar, bevor wir im weiteren Verlauf den Aufbau der Computersimulation zusammenfassen und die wesentliche Funktionsweise der verwendeten Methoden beschreiben. Wir untersuchen durch Auswertung unterschiedlich parametrisierter, simulierter Systeme die Energie pro Teilchen und den dadurch nachweisbaren Jamming-Übergang. Insbesondere diskutieren wir die Bedeutung der Cutoff-Länge  $R_c$  und der Abschirmlänge  $R_s$  und weisen eine  $1/R_c^3$ -Abhängigkeit der kritischen Packungsdichte  $\phi_J$  nach. Mit Hilfe der radialen Verteilungsfunktion untersuchen wir im Weiteren die Struktur des Systems und stellen einen besonderen Einfluss des Cutoffs auf diese fest.

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Theoretische Grundlagen</b>	<b>3</b>
1.1	Das Jamming-Phänomen . . . . .	3
1.2	Jamming von weichen, reibungsfreien Teilchen . . . . .	4
1.3	Die DLVO-Theorie . . . . .	4
1.4	Jamming mit weitreichenden Wechselwirkungen . . . . .	5
<b>2</b>	<b>Simulation und Methoden</b>	<b>6</b>
2.1	Überblick der Simulation . . . . .	6
2.2	Die Conjugate-Gradient-Methode . . . . .	6
2.3	Die Line-Search-Methode . . . . .	7
<b>3</b>	<b>Durchführung und Ergebnisse</b>	<b>8</b>
3.1	RCP-Wert für das harmonische Potential . . . . .	8
3.2	Jamming-Übergang für verschiedene Reichweiten . . . . .	9
3.3	Bedeutung von Cutoff und Packungsdichte . . . . .	11
3.4	Radiale Verteilungsfunktion . . . . .	12
<b>4</b>	<b>Ausblick</b>	<b>15</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>16</b>
	<b>Eidesstattliche Erklärung</b>	<b>17</b>

# 1 Theoretische Grundlagen

Bevor wir das im Jahre 1998 von Liu und Nagel vereinheitlichte Konzept des Jamming<sup>[1]</sup> genauer untersuchen, ist ein fundiertes Wissen über die theoretischen Grundlagen nötig. Hierzu betrachten wir vorerst Jamming im Allgemeinen und im Fall von weichen, reibungsfreien Teilchen, bevor uns die DLVO-Theorie zur Untersuchung des Jamming-Phänomens von Systemen mit längeren Reichweiten führt.

## 1.1 Das Jamming-Phänomen

Im Allgemeinen beschreibt das Jamming-Phänomen den Übergang ungeordneter Materie zu einem starren Zustand<sup>[2]</sup>. Dieser Übergang wird durch verschiedene Parameter – sowohl thermodynamischer als auch mechanischer Natur – kontrolliert. Werden thermodynamische Wechselwirkungsenergien jedoch vernachlässigt, wird der Jamming-Übergang im Wesentlichen durch die Packungsdichte  $\phi$  und die Scherbelastung  $\tau$  beeinflusst<sup>[3]</sup>: mit steigender Packungsdichte sinkt das Volumen, das jedem Teilchen zur Verfügung steht, bis sich unvermeidbar mechanische Stabilität einstellt, sobald alle Teilchen in direkten Kontakt mit ihren Nachbarn treten und die kritische Packungsdichte  $\phi_J$  überschritten wird. Diese kann durch Scherbelastung verändert werden, indem sich, bedingt durch die Scherung, starke Kräfte zwischen den Teilchen ausbilden, die ebenfalls einen robusten Jamming-Zustand zur Folge haben.

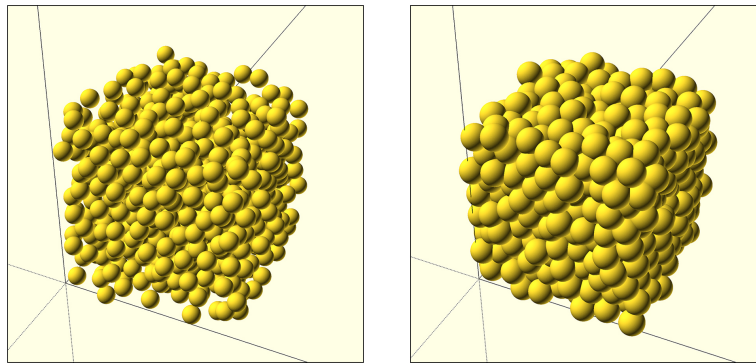


Abbildung 1: Teilchenverhalten für verschiedene Packungsdichten: ein ungejammtter Zustand unterhalb der kritischen Packungsdichte  $\phi < \phi_J$  (links); ein gejammtter, fester Zustand mit  $\phi > \phi_J$  (rechts).

Das Jamming-Phänomen findet unabhängig von Teilchengröße und -sorte statt, da nur ausschlaggebend ist, wie sich die verschiedenen Teilchen blockieren, wenn man sie in einem gegebenen Volumen umordnet<sup>[3]</sup>. Somit ist Jamming ein sehr allgemei-

nes Phänomen, das bei einer Vielzahl von Materie auftreten kann: lose, granulare Materie und kolloidale Suspensionen werden fest, sobald die kritische Packungsdichte überschritten wird; flüssige Schäume werden starr, wenn die Scherbelastung sinkt.

## 1.2 Jamming von weichen, reibungsfreien Teilchen

Ein idealisiertes, aber zur Untersuchung des Jamming-Phänomens gut geeignetes Modell ist das der weichen und reibungsfreien Kugeln<sup>[2]</sup>. Gravitation und Temperatur werden Null gesetzt und die Kugeln interagieren paarweise gemäß des Potentials:

$$V(r_{ij}) = \begin{cases} \frac{\epsilon}{\alpha} \left(1 - \frac{r_{ij}}{\sigma_{ij}}\right)^\alpha, & r_{ij} \leq \sigma_{ij} \\ 0, & r_{ij} > \sigma_{ij} \end{cases} \quad (1)$$

Dabei entspricht  $\epsilon$  der Energieskalierung des Systems,  $r_{ij}$  beschreibt den Abstand der Mittelpunkte von Teilchen  $i$  und  $j$  und  $\sigma_{ij}$  ist die Summe der zwei Radien.

Wir wählen  $\alpha = 2$ , um harmonische Wechselwirkungen zwischen den Teilchen zu untersuchen. Um harte Kugeln zu untersuchen, wählt man  $\alpha = 0$ , während  $\alpha = 3/2$  nichtlineare, abstoßende Wechselwirkungen beschreibt<sup>[4]</sup>.

Das harmonische Potential beschreibt die Interaktion von weichen Kugeln. Sinkt der Abstand von zwei Kugeln auf einen Wert kleiner als die Summe ihrer beiden Radien, stoßen sie sich gegenseitig ab. Das Potential steigt dann quadratisch mit der Überlappung und die so entstehenden abstoßenden Kräfte sorgen dafür, dass sich die Teilchen voneinander entfernen.

Packt man die Teilchen jedoch zu dicht und überschreitet so die kritische Packungsdichte, ist es ihnen nicht mehr möglich, sich vollständig voneinander zu lösen. Die Energie pro Teilchen sinkt dann nicht mehr auf Null und es entsteht ein gejammerter, fester Zustand. Bei dreidimensionalen, weichen und reibungsfreien Teilchen mit einer zufälligen Anfangskonfiguration ist dies der Fall, sobald das Gesamtvolumen der Teilchen mehr als 64% des Raumvolumens einnimmt<sup>[5]</sup>. Der Wert  $\phi = 0.64$  ist als Random Close Packing (RCP) bekannt und liegt deutlich unter der maximalen Packungsdichte für harte Kugeln in kristalliner Anordnung von  $\phi = 0.74$ .

Wir wollen mit Hilfe unserer Simulation den RCP-Wert für das harmonische Potential reproduzieren, bevor wir uns den Wechselwirkungen mit längeren Reichweiten widmen.

## 1.3 Die DLVO-Theorie

Das Teilchenverhalten in kolloidalen Systemen – also Stoffgemischen aus Flüssigkeiten und darin fein verteilten Festkörpern – wird bestimmt durch die Tendenz des Systems zur Aggregation. Diese resultiert aus den attraktiven und repulsiven Kräften zwischen den Teilchen, die durch die Van-der-Waalschen Wechselwirkungen und die

elektrochemischen Doppelschichten an der Oberfläche der kolloidalen Partikel entstehen<sup>[6]</sup>. Die DLVO-Theorie, die unabhängig voneinander von Derjaguin, Landau und Verwey, Overbeek entwickelt wurde, kombiniert diese attraktiven und repulsiven Wechselwirkungsenergien und beschreibt so das Gesamtpotential zwischen zwei kugelförmigen Teilchen mit Radius  $a$ , Oberflächenladung  $Z$  und Abstand  $r$  als

$$V_{\text{DLVO}}(r) = \frac{Z^2}{\epsilon} \left( \frac{\exp(\kappa a)}{1 + \kappa a} \right)^2 \frac{\exp(-\kappa r)}{r} \quad (2)$$

mit  $\epsilon$  als Dielektrizitätskonstante und  $\kappa^{-1}$  als Debye-Hückel-Abstand oder auch Abschirmlänge<sup>[7]</sup>.

Aufgrund der Coulomb-Abstoßung ist das Potential proportional zu  $1/r$ . Wegen der Abschirmung reduziert sich die Abstoßung jedoch auf einen exponentiellen Abfall. Der somit unterschiedliche Einfluss der zwei Komponenten auf das Gesamtpotential bedingt verschiedene Bereiche, in denen jeweils eine der beiden Komponenten dominiert. Insbesondere bei mittleren und längeren Abständen ist dies für den exponentiellen Term der Fall. Diese Eigenschaft nutzen wir als Ausgangspunkt in der weiteren Betrachtung von Jamming mit weitreichenden Wechselwirkungen.

#### 1.4 Jamming mit weitreichenden Wechselwirkungen

Wir wollen das Jamming-Phänomen von Teilchen untersuchen, die über weite Strecken miteinander interagieren, was in kolloidalen Systemen, in denen die Teilchen nach dem DLVO-Potential aus Gleichung (2) wechselwirken, der Fall ist. Betrachten wir den Bereich, in dem die Abschirmung dominiert, so können wir das DLVO-Potential vereinfacht darstellen als

$$V(r_{ij}) = \epsilon \cdot \exp(-\kappa r_{ij}). \quad (3)$$

Der Parameter  $\epsilon$  beschreibt hier analog zum harmonischen Potential aus Kapitel 1.2 nur noch eine Energieskalierung.

Im Gegensatz zum harmonischen Potential wird das Exponential-Potential nicht Null, wenn der Abstand der zwei Teilchen steigt. Die Teilchen interagieren nun auch über beliebig große Distanzen. Dies bedeutet gleichzeitig, dass die Teilchen keine konkreten Radien mehr besitzen, weshalb wir später in der Simulation den Wert  $R_s = 1/\kappa$  als Normierung und „Quasi-Radius“ bzw. Abschirmlänge der Teilchen setzen. Außerdem führen wir den Cutoff-Wert  $c$  ein: wir werden das Exponentialpotential für verschiedene Cutoff-Werte untersuchen, über die wir die Stelle  $\sigma_c = c \cdot \sigma_s = c \cdot 2R_s$  ermitteln, an der wir das Potential abschneiden, um so die Reichweite zu kontrollieren. Damit die Ableitung dennoch stetig bleibt, substrahieren wir einen Korrekturterm  $V(\sigma_c)$ , sodass das Potential beim Cutoff gleich Null ist.

## 2 Simulation und Methoden

Um das Jamming-Phänomen zu untersuchen und Jamming-Übergänge zu finden, simulieren wir das System in der Programmiersprache C++. Das Programm versucht, alle Teilchen so weit voneinander zu entfernen, dass das Gesamtpotential – und damit auch die Energie pro Teilchen – auf Null reduziert wird.

### 2.1 Überblick der Simulation

Zu Beginn platzieren wir  $N$  kugelförmige Teilchen mit Radius  $R$  zufällig in einer quadratischen Box der Länge  $L$  mit periodischen Randbedingungen. Teilchen wechselwirken also auch über den Rand hinaus miteinander. Die Länge  $L$  berechnet sich für die Packungsdichte  $\phi$  über

$$L = \left( \frac{V_{\text{Teilchen}}}{\phi} \right)^{1/3} \quad (4)$$

wobei  $V_{\text{Teilchen}} = N \cdot \frac{4}{3}\pi R^3$  die Summe der Kugelvolumina beschreibt.

Zwei Teilchen interagieren gemäß des herrschenden Potentials. Das Gesamtpotential ergibt sich dann aus der Summe der Paarpotentiale. Ziel der Simulation ist es, die Energielandschaft zu minimieren. Dies geschieht mit Hilfe der Conjugate-Gradient-Methode und einer Line Search.

### 2.2 Die Conjugate-Gradient-Methode

Da es sich bei der Minimierung des Potentials um ein  $3N$ -dimensionales Optimierungsproblem handelt, welches nicht analytisch lösbar ist, verwenden wir das numerische Verfahren der Conjugate-Gradient-Methode.

Alle Teilchen werden hierbei schrittweise nach der Vorschrift

$$r_{k+1} = r_k + \alpha_k d_k \quad (5)$$

bewegt. Dabei beschreibt  $r$  die Position aller Teilchen und  $\alpha$  die Schrittweite, die wir durch den Line-Search-Algorithmus (vgl. Kapitel 2.3) bestimmen. Die Richtung der Bewegung  $d$  ermitteln wir über den Gradienten  $g$  des Potentials:

$$d_k = \begin{cases} -g_k, & k = 1 \\ -g_k + \beta_k d_{k-1}, & k \geq 2 \end{cases} \quad (6)$$

Hier liegt die Besonderheit der Conjugate-Gradient-Methode: Die Berechnung der Bewegungsrichtung geschieht nicht nur über den Gradienten – wie es beispielsweise bei der Methode des Steepest Descent der Fall wäre – sondern ab dem zweiten Itera-

tionsschritt auch mit Hilfe einer zum Gradienten konjugierten Richtung  $d_{k-1}$ . So beschleunigen wir den Minimierungsprozess, indem unnötige „Zick-Zack“-Bewegungen nahe am Minimum vermieden werden, wie sie für die Steepest-Descent-Methode typisch sind<sup>[8]</sup>.

Den Faktor  $\beta$  berechnen wir nach E. Polak und G. Ribière<sup>[9]</sup>:

$$\beta_k = \frac{g_k^T \cdot (g_k - g_{k-1})}{g_{k-1}^2} \quad (7)$$

### 2.3 Die Line-Search-Methode

Bei der Bewegung der Teilchen nach Gleichung (5) ist also die ursprüngliche Teilchenposition  $r_k$ , als auch die Bewegungsrichtung  $d_k$  bekannt. Gesucht wird nun lediglich die passende Schrittlänge  $\alpha$ , sodass der Wert des Potentials in Bewegungsrichtung minimal ist:

$$\min V(r_k + \alpha_k d_k). \quad (8)$$

Das Problem reduziert sich also zu einem eindimensionalen Optimierungsproblem entlang der Bewegungsrichtung, daher auch der Name Line Search.

Wir beginnen mit einer festgelegten Schrittlänge  $\alpha = 0.1$  und berechnen die Potentiale an den Stellen  $V_1(r_k)$ ,  $V_2(r_k + \alpha_k d_k)$  und  $V_3(r_k + 2\alpha_k d_k)$ .

Gilt  $V_1 > V_2 > V_3$ , fahren wir fort und betrachten drei Potentiale eine Schrittlänge  $\alpha$  weiter. Gilt wiederum  $V_2 < V_3$ , haben wir ein Minimum eingeschlossen. In diesem Fall reduzieren wir  $\alpha$  um den Faktor 10, und wiederholen von der Stelle des Potentials  $V_1$  aus den Algorithmus.

Wir verfeinern die Suche so oft, bis wir das Potentialminimum bis auf eine Genauigkeit von  $10^{-10}$  Längeneinheiten gefunden haben. Die Teilchen werden entsprechend bewegt, bevor in der Conjugate-Grading-Methode eine neue Bewegungsrichtung berechnet wird.



### 3 Durchführung und Ergebnisse

Um die verschiedenen Potentiale zu untersuchen, simulieren wir das System unter geeigneter Wahl der Teilchenzahl  $N$ , der Packungsdichte  $\phi$  und bei weitreichenden Wechselwirkungen auch des Cutoff-Werts  $c$ . Als Radius der Teilchen setzen wir stets  $R = 1$  und analog für das Exponentialpotential  $\kappa = 1$ .

#### 3.1 RCP-Wert für das harmonische Potential

Um die Funktion unserer Simulation zu verifizieren, bestätigen wir im Folgenden den RCP-Wert von  $\phi = 0.64$  für das harmonische Potential. Hierzu simulieren wir 1000 Teilchen für Packungsdichten zwischen  $\phi = 0.5$  und  $\phi = 0.7$  und betrachten den Wert der Energie pro Teilchen, der sich für lange Zeiten einstellt. In unserem Fall bedeutet das, dass wir den Minimierungsalgorithmus maximal 200 Schritte iterieren lassen. Gestoppt wird außerdem, sobald die Energie pro Teilchen Null wird oder die Änderung der Energie pro Schritt kleiner als  $10^{-10}$  ist.

Wir erwarten, dass die Energie pro Teilchen bis zur kritischen Packungsdichte auf Null fällt, da alle Teilchen genug Platz haben, sich frei von anderen Teilchen im Raum zu platzieren. Für  $\phi = 0.64$  sollte die Energie dann auf einen Wert größer Null steigen, bevor sie mit steigender Packungsdichte weiter wächst.

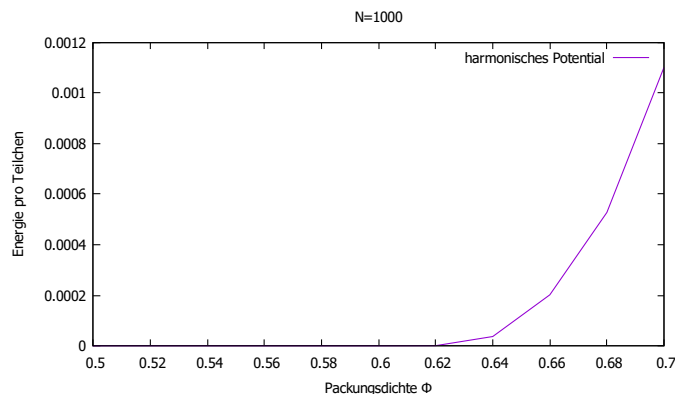


Abbildung 2: Nachweis des RCP-Werts von  $\phi = 0.64$  für 1000 Teilchen im harmonischen Potential.

Betrachten wir die Ergebnisse aus Abbildung 2, so können wir den RCP-Wert von  $\phi = 0.64$  nachweisen; der Jamming-Übergang ist jedoch nicht scharf. Dies ist darauf zurückzuschließen, dass wir die Energie pro Teilchen, und nicht wie sonst üblich die Anzahl der Nachbarn betrachten: diese steigt an der kritischen Packungsdichte  $\phi_J$  instantan auf sechs Nachbarn pro Teilchen, während die Energie lediglich quadratisch zunimmt (vgl. Kapitel 1.2). Außerdem kommen sogenannte „finite size“-Effekte zum Tragen, da wir nur 1000 Teilchen simulieren<sup>[10]</sup>. Ferner müssten wir insbesondere

nahe am Übergang noch längere Simulationszeiten – also mehr Iterationsschritte – in Erwägung ziehen, um exaktere Ergebnisse zu erhalten. Betrachten wir die einzelnen Minimierungsprozesse in Abbildung 3, wird dies deutlich.

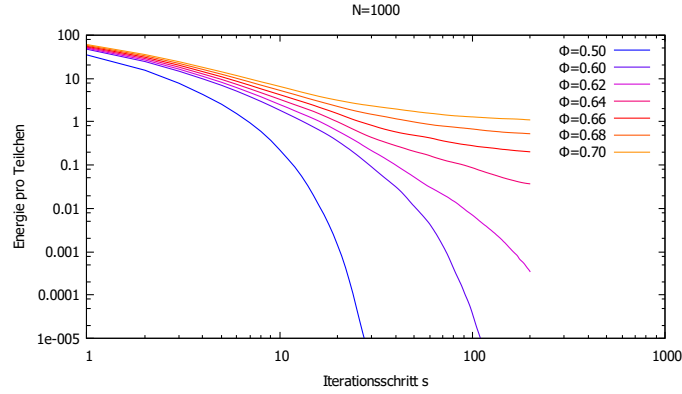


Abbildung 3: Minimierungsprozesse für verschiedene Packungsdichten  $\phi$ .

Während die Energien für Packungsdichten von  $\phi = 0.5$  und  $\phi = 0.6$  zügig gegen Null streben, erreicht die Energie pro Teilchen für  $\phi = 0.62$  in 200 Iterationsschritten die Null nicht mehr. Für mehr Iterationsschritte wäre der Jamming-Übergang also schärfer.

### 3.2 Jamming-Übergang für verschiedene Reichweiten

Um den Einfluss der weitreichenden Wechselwirkungen mit unterschiedlichen Cutoff-Werten auf den Jamming-Übergang zu untersuchen, betrachten wir ein System von 700 Teilchen jeweils für Packungsdichten zwischen  $\phi = 0.1$  und  $\phi = 1.0$ . Erneut tragen wir die Energie pro Teilchen auf, die sich für lange Zeiten einstellt.

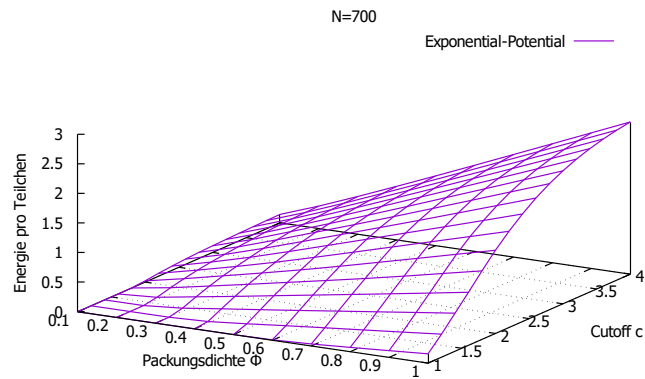


Abbildung 4: Energie pro Teilchen für verschiedene Packungsdichten und Cutoff-Werte zwischen  $c = 1$  und  $c = 4$ .

Analysieren wir das Ergebnis aus Abbildung 4, fällt auf, dass das Jamming-Verhalten im Exponential-Potential für einen Cutoff-Wert von  $c = 1$  dem des harmonischen Potentials ähnelt. Zwischen  $\phi = 0.5$  und  $\phi = 0.7$  findet ein Übergang zu einem jammten Zustand statt: die Energie pro Teilchen steigt auf einen Wert größer Null. Dies liegt an der Ähnlichkeit der beiden Potentiale, da sich die Kraft des Exponentialpotentials am Cutoff linear annähern lässt.

Mit steigenden Cutoff-Werten sinkt der Wert der kritischen Packungsdichte  $\phi_J$ , bevor er ab circa  $c = 2$  unterhalb von  $\phi = 0.1$  liegt und sich somit unserer Betrachtung entzieht. Dieses Verhalten wirft die Frage nach der Abhängigkeit zwischen dem Cutoff  $c$  und der kritischen Packungsdichte  $\phi_J$  auf, die wir im weiteren Verlauf untersuchen.

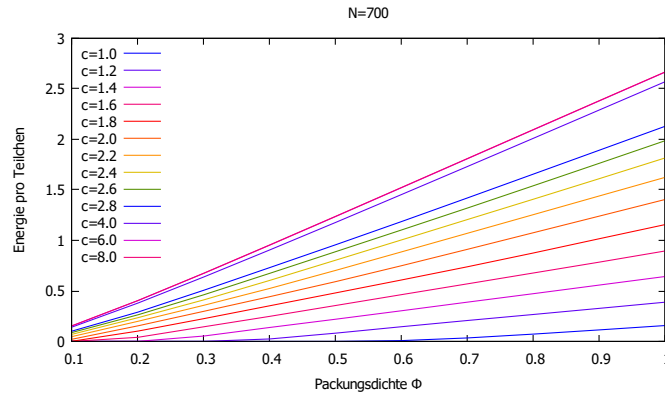


Abbildung 5: Energie pro Teilchen für verschiedene Packungsdichten und Cutoff-Werte zwischen  $c = 1$  und  $c = 8$ .

Des Weiteren steigt die Energie pro Teilchen für fixe  $\phi$ -Werte mit wachsenden Cutoff an (vgl. Abbildung 4 und Abbildung 5): durch die längere Reichweite wechselwirken selbst weit entfernte Teilchen miteinander. Je größer der Cutoff-Wert – und damit die Reichweite – desto mehr Potential pro Teilchen, selbst bei geringen Packungsdichten. Einen weiteren Einfluss liefert der Korrekturterm, den wir vom Potential subtrahieren (vgl. Kapitel 1.4). Dieser sinkt mit steigendem Cutoff, was eine höhere Energie pro Teilchen zur Folge hat. Aufgrund des exponentiellen Abfalls wird diese Einwirkung von  $V(\sigma_c)$  jedoch schnell vernachlässigbar.

Für größere Cutoff-Werte konvergiert die Energie pro Teilchen gegen endliche, nur noch von der Packungsdichte abhängige Werte (siehe Abbildung 6): überschreitet die Reichweite der Wechselwirkung die Grenzen der simulierten Box, gibt es keine Teilchen mehr, mit denen interagiert werden kann. Folglich kann auch die Energie pro Teilchen nicht mehr steigen. Erneut handelt es sich um ein Phänomen der endlichen Größe unseres Systems.

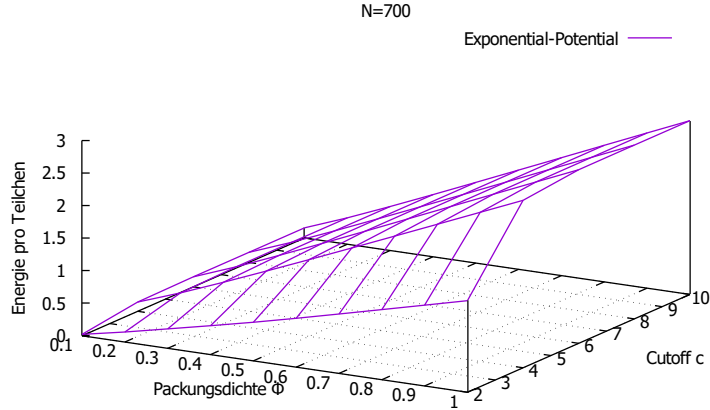


Abbildung 6: Energie pro Teilchen für Cutoff-Werte zwischen  $c = 2$  und  $c = 10$ .

### 3.3 Bedeutung von Cutoff und Packungsdichte

Um die Bedeutung der Cutoff-Länge  $R_c$  und der Abschirmlänge  $R_s = 1/\kappa$  zu verstehen, definieren wir zwei unterschiedliche Packungsdichten:

$$\phi_s = \frac{\pi}{6} \sigma_s^3 \cdot \rho \quad \text{und} \quad \phi_c = \frac{\pi}{6} \sigma_c^3 \cdot \rho \quad (9)$$

mit  $\sigma_s = 2R_s$ ,  $\sigma_c = 2R_c$  und  $\rho = N/V$ .

Sowohl  $R_s$  als auch  $R_c$  sind Radien, die die Teilcheninteraktion kontrollieren. Dies legt die Vermutung nahe, dass die kritische Packungsdichte proportional zu  $1/R_s^3$  oder  $1/R_c^3$  ist, da sie mit steigender Reichweite sinkt – analog zum Radius. Falls nur  $R_c$  eine Rolle beim Jamming spielt, erwarten wir, dass Übergänge der Energie auf einer  $\phi_c$ -Achse an der selben Stelle auftreten, da wir die x-Achse gerade mit dem Faktor  $R_c^3$  skalieren:

$$\phi_c = \frac{\pi}{6} \sigma_c^3 \cdot \rho = \frac{R_c^3}{R_s^3} \cdot \phi_s. \quad (10)$$

Wie in Abbildung 7 zu erkennen, bestätigt sich unsere Vermutung. Alle Übergänge liegen im Bereich von  $\phi_c = 0.5 \pm 0.1$  und somit an einer ähnlichen Stelle, was die Abhängigkeit der Packungsdichte zu  $1/R_c^3$  bestätigt.

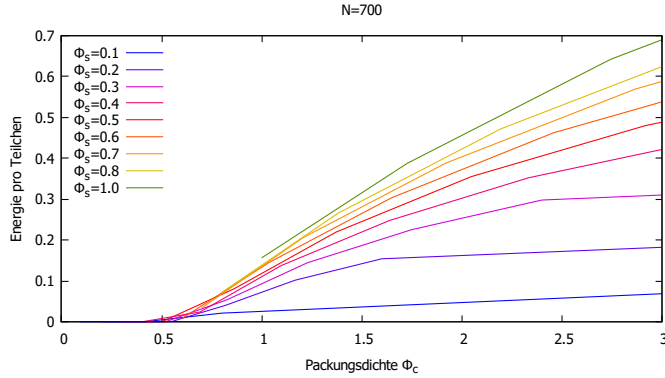


Abbildung 7: Jamming-Übergang auf der  $\phi_c$ -Achse für verschiedene  $\phi_s$ -Werte.

### 3.4 Radiale Verteilungsfunktion

Um die Einflüsse der Cutoff-Länge  $R_c$  und der Abschirmlänge  $R_s$  weiter zu analysieren, wollen wir die radiale Verteilungsfunktion (RDF) für verschieden parametrisierte Systeme untersuchen. Hierzu bestimmen wir die Anzahl von Teilchen innerhalb einer Kugelschale der Dicke  $dr$  um ein ausgewähltes Teilchen unter Variation des Radius bzw. Abstands  $r$ . Wiederholen wir diesen Vorgang jeweils für jedes Teilchen und halten die Einträge in einem Histogramm  $H(r)$  fest, erhalten wir die radiale Verteilungsfunktion<sup>[11]</sup> durch geeignete Normierung über

$$g(r) = \frac{V}{4\pi r^2 dr N^2} \cdot H(r). \quad (11)$$

Mit Hilfe der radialen Verteilungsfunktion kann man zum Beispiel die Struktur auf kurzen Längen charakterisieren oder über die Kirkwood-Buff-Theorie makroskopische Stoffeigenschaften mit mikroskopischen in Verbindung setzen. Außerdem ist es möglich, durch eine Fourier-Analyse den Strukturfaktor des Systems zu bestimmen<sup>[12]</sup>.

Wir können nun für verschieden parametrisierte Systeme die RDF bestimmen, wobei wir einmal die Packungsdichte  $\phi_s$  festhalten, ein anderes Mal die Packungsdichte  $\phi_c$ . Wir fixieren die Abschirmlänge und tragen die radiale Verteilungsfunktion für verschiedene Cutoff-Werte gegen den Abstand  $r$  auf (vgl. Abbildung 8). Je größer der Wert der RDF ist, desto wahrscheinlicher finden wir ein Teilchen in dem zugehörigen Abstand. Für  $c = 1$  ist dies im Abstand  $r = 2 = \sigma_c$  der Fall: die Teilchen sind am nächstmöglichen Energieminimum im Potential platziert, da durch den Cutoff im Abstand  $r = \sigma_c$  das Potential Null wird. Wären die Entfernung geringer, würden sie überlappen und energetisch werden, was im statistischen Mittel unwahrscheinlich ist. Erhöhen wir den Cutoff, verschiebt sich das Energieminimum in Richtung größerer Abstände. Für  $c = 1.4$  (und analog auch für  $c = 1.8$ ) ist die Energie erst im Abstand

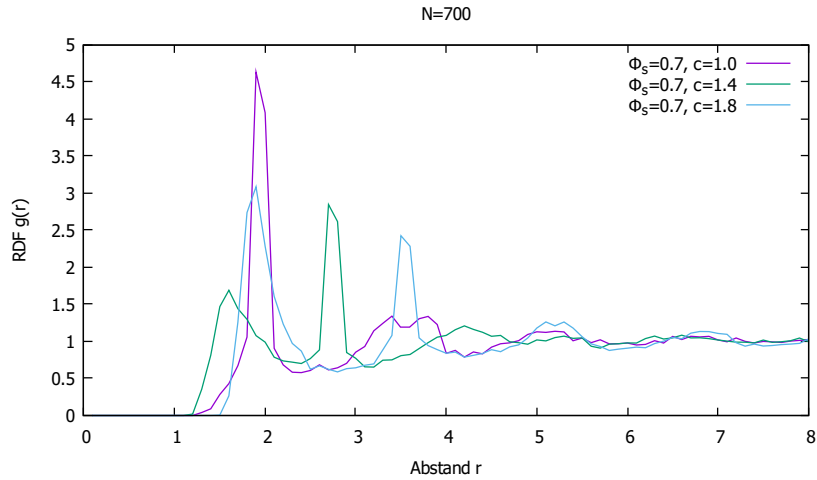


Abbildung 8: Radiale Verteilungsfunktion (RDF) für fixe  $\phi_s$ -Werte

$r = 2.8 = \sigma_c$  gleich Null, und somit auch die Wahrscheinlichkeit ein Teilchen zu finden an dieser Stelle am größten. Der Cutoff spielt also eine wesentliche Rolle in der Struktur des Systems. Insbesondere gibt es besonders viele Teilchen im Abstand  $r = \sigma_c$ . Die anderen Peaks in Abbildung 8 sind nicht so einfach zu verstehen und es ist unklar, ob diese eher von  $R_s$  oder  $R_c$  abhängen.

Den Einfluss der Abschirmlänge untersuchen wir, indem wir den Cutoff  $R_c$  fixieren und das System für verschiedene Packungsdichten  $\phi_s$  betrachten. Die Ergebnisse sind in Abbildung 9 zu sehen.

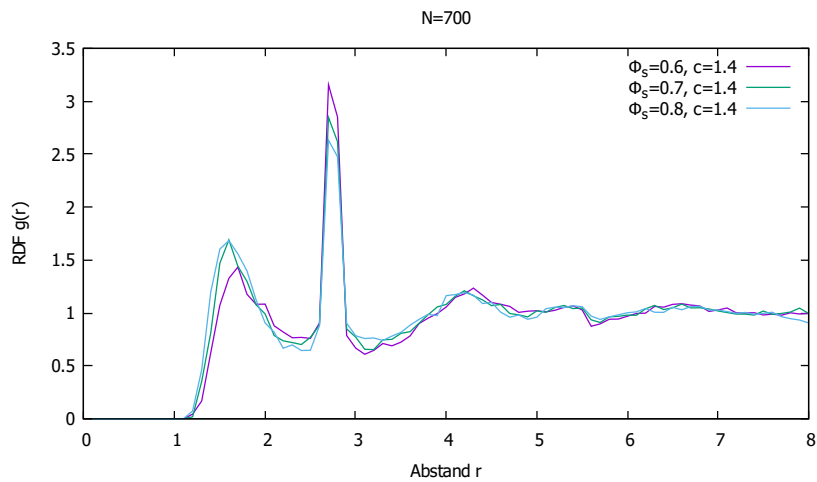


Abbildung 9: Radiale Verteilungsfunktion (RDF) für fixe  $\phi_c$ -Werte

Auf kurzen Längen unterscheidet sich die Verteilung der Teilchen – und damit die Struktur des Systems – für verschiedene Abschirmlängen kaum. Wieder finden wir den jeweils höchsten Peak der RDF an der Stelle  $r = 2.8 = \sigma_c$ , also dort, wo

sich bedingt durch den Cutoff das nächstliegende Energieminimum befindet. Die Abschirmlänge spielt also eine mindere Rolle in Bezug auf den höchsten Peak in  $g(r)$ . In Bezug auf andere Strukturelemente wären noch genauere Untersuchungen notwendig.

## 4 Ausblick

In dieser Arbeit haben wir den Jamming-Übergang im harmonischen Potential untersucht und den RCP-Wert von  $\phi = 0.64$  nachgewiesen. Wir haben außerdem das Jamming-Phänomen für verschieden reichweitige Wechselwirkungen im Exponentialpotential analysiert. Die Simulationen zeigen eine  $1/R_c^3$ -Abhängigkeit der Überlappungsenergie pro Teilchen von der Cutoff-Länge  $R_c$ . Für die Struktur des Systems auf kurzen Längen, die wir mit Hilfe der radialen Verteilungsfunktion untersucht haben, scheint ebenfalls der Einfluss der Cutoff-Länge wesentlich zu sein. Handelt es sich bei  $R_c$  doch um eine rein technische Variable, spielt die physikalisch relevante Größe der Abschirmlänge  $R_s = 1/\kappa$  eine mindere Rolle im Einfluss auf den Verlauf der radialen Verteilungsfunktion. Ausgehend von diesen Ergebnissen stellen sich folgende zusammenfassende Fragen: Inwieweit stehen die typischen Größen, die zur Untersuchung des Jamming-Phänomens betrachtet werden, für Systeme mit längeren Reichweiten unter Einfluss des Cutoffs? Und wie dominant ist dieser Einfluss im Vergleich zu dem der Abschirmlänge  $R_s$ ?

Um diese Fragen zu beantworten, bedarf es weiterer – und exakterer – Analysen der angesprochenen Größen: Wie verhält sich die Anzahl der Nachbarteilchen  $Z$ , die mit einem Teilchen überlappen, für verschiedene Cutoff-Werte? Welche Wirkung hat der Cutoff auf den Druck  $p$  oder das Schermodul  $\tau$ ? Wie ändert sich das Kontaktnetzwerk nahe der kritischen Packungsdichte für  $\phi_s$  bzw.  $\phi_c$ ? Des Weiteren ist eine Analyse für andere weitreichende Wechselwirkungen interessant. Wie verhält sich das System beispielsweise für Potentiale in Form inverser Potenzgesetze?



## Literaturverzeichnis

- [1] LIU, A.J. UND NAGEL, S.R.: *Jamming is not just cool anymore*. Nature, 396:21–22, 1998.
- [2] VAN HECKE, M.: *Jamming of soft particles: geometry, mechanics, scaling and isostaticity*. Journal of Physics: Condensed Matter, 22:033101, 2009.
- [3] JAEGER, H.M.: *Celebrating soft matter’s 10th anniversary: Toward jamming by design*. Soft matter, 11:12–27, 2015.
- [4] JOHNSON, K.L.: *Contact Mechanics*. Cambridge University Press, 1985.
- [5] O’HERN, C.S. UND LANGER, S.A. UND LIU A.J. UND NAGEL S.R.: *Random packings of frictionless particles*. Physical Review Letters, 88:075507, 2002.
- [6] SPIEGLER, U.M.: *Adsorption von Polykationen unterschiedlicher Struktur und deren Einfluß auf das Flockungsverhalten von Silikuspensionen*. Doktorarbeit, Technische Universität München, 1999.
- [7] LÖWEN, H. UND KRAMPOSTHUBER, G.: *Optimal effective pair potential for charged colloids*. EPL (Europhysics Letters), 23:673, 1993.
- [8] SHEWCHUK, J.R.: *An Introduction to the Conjugate Gradient Method Without the Agonizing Pain*. Technischer Bericht, Pittsburgh, PA, USA, 1994.
- [9] POLAK, E. UND RIBIERE, G.: *Note sur la convergence de méthodes de directions conjuguées*. ESAIM: Mathematical Modelling and Numerical Analysis-Modélisation Mathématique et Analyse Numérique, 3:35–43, 1969.
- [10] KOEZE, D.J. UND TIGHE, B.P.: *Sticky Matters: Jamming and Rigid Cluster Statistics with Attractive Particle Interactions*. Physical review letters, 121:188002, 2018.
- [11] LEACH, A.R.: *Molecular modelling: principles and applications*. Pearson education, 2001.
- [12] CHANDLER, D.: *Introduction to modern statistical mechanics*. Oxford University Press, 1987.

## Eidesstattliche Erklärung

Ich versichere, dass ich die Bachelorarbeit ohne fremde Hilfe und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Quellen angefertigt habe und dass die Arbeit in gleicher oder ähnlicher Form noch keiner anderen Prüfungsbehörde vorgelegen hat. Alle Ausführungen der Arbeit, die wörtlich oder sinngemäß übernommen wurden, sind als solche gekennzeichnet.

Erlangen, den

---

NICOLAS WOHLLEBEN