Die Großen landen immer oben

Entmischen durch Mischen

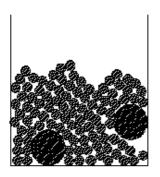
H.J. Schlichting, V. Nordmeier, D. Jungmann Universität GH Essen

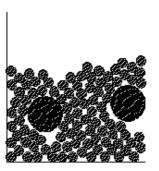
Es kullert, bullert, rollt und rüttelt,
• Wird auf und nieder durchgeschüttelt,
Bis das geplagte Element
Vor Angst in Groß und Klein sich trennt.

frei nach Wilhelm Busch

Phänomene

Müslimischungen u.ä. zeichnen sich vielfach dadurch aus, daß sie keine besonders guten Mischungen sind. Jedenfalls werden häufig die größeren Bestandteile, z.B. Haselnüsse, vermehrt in den oberen Schichten der Packung angetroffen, obwohl in der Fabrik für eine ordentliche Durchmischung gesorgt wurde.





An manchen Stränden entdeckt man zuweilen auf relativ kleiner Fläche konzentrierte größere Ansammlungen von Kieselsteinen oder Muscheln, die oft auch noch nach Größe "sortiert" sind.

Ältere Bauern sind manchmal davon überzeugt, daß Steine wachsen. Sie berichten, daß ihr Acker seit Generationen alljährlich von Steinen befreit wird. Trotzdem sei nicht abzusehen, daß dadurch der Acker einmal steinfrei würde.



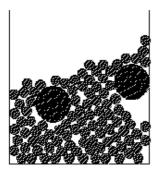


Bild 1: Wenn ein Gemisch von großen und kleinen Kugeln rhythmisch geschüttelt wird, landen schließlich die großen Kugeln oben. (Momentaufnahmen von oben links nach unten rechts).

Derartige körnige Substanzen, Granulate, verhalten sich unterschiedlich je nachdem ob man sie einzeln oder im Kollektiv betrachtet (ein verständlicher Überblick über verschiedene Aspekte der Physik von Granulaten findet man in Ref. [1]). Im ersteren Fall ähneln sie Festkörpern, im letzteren eher einer Flüssigkeit. Bei näherer Betrachtung zeigen sich jedoch tiefgreifende Unterschiede zwischen Flüssigkeit und Granulat: Eine Flüssigkeit breitet sich horizontal aus, ein Granulat bildet einen Kegel aus. Die Geschwindigkeit, mit der eine Flüssigkeit aus einem Loch ausströmt, hängt von der Höhe der darüber befindlichen Flüssigkeitsmenge ab. Beim Granulat ist - wie man von der Sanduhr weiß - die Ausströmgeschwin-

digkeit unabhängig von der Höhe (siehe jedoch [2]). Der merkwürdigste Unterschied besteht jedoch in dem oben beschriebenen Entmischungs und dem Auftriebsverhalten der größeren Bestandteile.

Modell

Um im Prinzip zu verstehen, wie derartige Entmischungen zustandekommen, betrachten wir die einfachste denkbare Situation. Wir füllen ein verschließbares durchsichtiges Gefäß, z.B. ein Marmeladenglas, etwa zu drei Vierteln mit unterschiedlich großen Teilchen. Dabei muß es sich nicht unbedingt um Kugeln handeln. Beliebig geformte Teilchen, z.B. hohlzylinderartige Perlen als kleine und Plastikwürfel als große Teilchen, aber auch Lebensmittel, wie etwa Hirse u.ä. Granulate erweisen sich als brauchbar. Wichtig ist, daß die großen Teilchen nicht von geringerer Dichte sind als die kleinen. Die Anzahl der größeren Teilchen sollte deutlich geringer sein als die der kleineren.

Indem man das Gefäß rhythmisch auf- und abbewegt, beobachtet man das Gegenteil eines Mischvorganges: Die Kugeln entmischen sich. Die großen Kugeln driften im Rhythmus des Auf und Ab nach oben, um schließlich in den oberen Schichten zu verbleiben.

Neuerdings ist sogar ein Spielzeug unter dem Namen Magic Sand Wand erhältlich, in dem eine in einem feinen Granulat (vermutlich gefärbter Sand) eingebettete Stahlkugel durch vertikales Schütteln von unten nach oben transportiert wird. Da der Durchmesser der einzigen Stahlkugel nicht viel kleiner ist als der des Behälters, kann dieses Spielzeug jedoch nur als Spezialfall der oben beschriebenen Systeme angesehen werden.

Erklärung

1. Das "Lückenmodell"

Um das überraschende Ergebnis des Schüttelvorgangs zu verstehen, gehen wir von einer gut durchmischten Anfangskonstellation aus. Bewegt man das Gefäß nach oben und anschließend schnell nach unten, so daß die Teilchen schon aus Gründen der Trägheit keine Gelegenheit haben, dieser Bewegung zu folgen, so geraten sie - wenn auch nicht gerade in einen freien Fall - so doch in eine Situation, in der die Schwerkraft stark herabgesetzt und damit die die Anfangskonstellation stabilisierenden Reibungskräfte vermindert werden. Infolgedessen reichen kleine Störungen aus, die Teilchen gegeneinander zu verschieben und in eine neue Konstellation zu bringen, die sich im Augenblick der Bewegungsumkehr von Abwärts nach Aufwärts in einem neuen Anfangszustand stabilisiert. Dabei ist die Wahrscheinlichkeit, daß kleine Teilchen in die verhältnismäßig großen Lücken in der Nähe der großen Teilchen geraten, größer, als daß umgekehrt große Teilchen in die kleinen Zwischenräume der kleinen Teilchen gelangen. Außerdem: Während des Falls ist es wahrscheinlicher, daß kleine Teilchen ein Stück an den großen Teilchen vorbeiziehen als umgekehrt. Denn da die großen Teilchen einen größeren Querschnitt ausfüllen, würde ihr Überholvorgang stets von mehreren kleinen Teilchen behindert.

Nehmen die kleinen Teilchen, die auf diese Weise in die Lücken der großen geraten, mehr Platz ein, als ihnen die Lücken bieten - was aufgrund des fast kräftefreien Zustands bei der Abwärtsbewegung leicht möglich ist - so landen die großen Teilchen bei der Bewegungsumkehr und der damit verbundenen erneuten schwerkraftsbedingten Fixierung des Agglomerats in einer leicht erhöhten Endlage. Die Endlage wird im Augenblick der erneuten Aufwärtsbewegung zum neuen Anfangzustand. Der soeben beschriebene Prozeß kann sich wiederholen mit der Folge, daß die kleinen Teilchen immer etwas weiter nach unten geraten, bis sich die großen Teilchen schließlich alle oben befinden. Die Effektivität dieses "Auftriebs" für große Teilchen hängt sicherlich vom Verhältnis der Radien beider Kugelarten ab. Es ist jedoch nicht unmittelbar einzusehen, in welcher Weise. Einerseits erscheint es plausibel, daß eine große Kugel pro Schüttelzyklus umso höher gehoben wird, je größer die kleine Kugel ist, die in den Zwischenraum gerät. Andererseits ist die Wahrscheinlichkeit, daß dies tatsächlich passiert, natürlich umso größer, je kleiner die kleinen Teilchen sind. Es ist daher zu erwarten, daß es ein optimales Verhältnis der Radien geben muß, bei dem der mittlere Hub von großen Teilchen maximal ist.

2. Das "Strömungsmodell"

Nicht immer lassen sich die Schüttelphänomene mit dem "Lückenmodell" erklären. Wenn der Durchmesser des Gefäßes groß ist im Vergleich zum Teilchendurchmesser und die Gefäßwände nicht allzu glatt sind,

unterliegen die Teilchen eine kollektive Konvektionsbewegung. Dies kann man dadurch sichtbar machen, daß man eine Schicht gleichartiger aber verschiedenfarbiger Teilchen (z.B. Glaskugeln) einfügt. Die Teilchen steigen in der Mitte auf und sinken an den Wandseiten des Gefäßes ab. Dieser Konvektionsbewegung unterliegen auch die großen Teilchen. und sie geraten auf diese Weise nach oben. Allerdings machen die großen Teilchen dann, wenn sie deutlich größer sind als die kleinen, die Abwärtsbewegung nicht mit und bleiben in der oberen Schicht.

Der Antrieb für die Konvektionsbewegung ist vermutlich auf die Reibung der Randteilchen mit der Gefäßwand zurückzuführen. Beim Schütteln werden die Randteilchen wegen der Reibung nicht so stark angehoben wie die übrigen, bleiben hinter diesen zurück und bewegen sich mit jedem Schüttelzyklus ein wenig abwärts. Aus Kontinuitätsgründen werden in der Mitte in gleichem Maße Teilchen nach oben getrieben.

Daß die größeren Teilchen oben bleiben, mag einerseits darauf beruhen, daß sie mehrere Teilchenlagen einnehmen. Sie reichen damit in einen Bereich hinein, in dem die kleinen Teilchen keine Randreibung mehr "spüren". Die abwärtsgerichtete Kraft beschränkt sich daher nur auf die Randseite der großen Teilchen. Sie reicht daher nicht aus, sich gemeinsam mit den kleinen Randteilchen abwärtszubewegen. Andererseits wird der im Lückenmodell beschriebene Auftriebsmechanismus auch hier wirksam sein und sich der Konvektionsbewegung überlagern, was im Falle der Aufwärtsbewegung den Auftrieb der großen Teilchen unterstützt, im Falle der Abwärtsbewegung aber behindert.

Wie groß der Einfluß des einen oder anderen Mechanismus jeweils ist, läßt sich mit diesen groben Versuchen natürlich nicht genauer bestimmen [3].

Entstehung von Ordnung durch Mischen?

Die Erfahrung, daß natürliche Vorgänge nur in einer Richtung ablaufen, wird physikalisch durch den 2. Hauptsatz der Thermodynamik konzeptualisiert. Demnach läßt sich die Einseitigkeit der Ablaufrichtung durch die Dissipation von Energie bzw. Zunahme von Entropie beschreiben. In vielen Fällen kann die Energiedissipation bzw. Entropiezunahme anschaulich mit der Zunahme von Unordnung in Verbindung gebracht werden. Beispiele dafür sind insbesondere Mischungsvorgänge:

- Schüttelt man einen Behälter mit zuvor getrennten (gleichgroßen) zweier verschiedenfarbiger Kugelsorten, so stellt sich ein Gemisch ein, das um so homogener wird, je länger man schüttelt. Ordnung ist in Unordnung übergegangen.
- Etwas entsprechendes beobachtet man, wenn man etwas Tinte in ein Gefäß mit Wasser gibt und das Gefäß kräftig schüttelt. Es entsteht ein hellblaues homogenes Gemisch wäßriger Tinte.
- Zwei Gase, z.B. Stickstoff und Wasserstoff, die man in einen Behälter füllt, vermischen sich so schnell von selbst, daß gar kein Schütteln mehr nötig ist.
- Selbst die Umwandlung von kinetischer Energie in Wärme, z.B. bei einem ausrollenden Ball läßt sich als Zunahme der Unordnung interpretieren. Denn beim Ausrollen verschwindet allmählich die der thermischen Bewegung der Moleküle des Balls überlagerte gerichtete und daher geordnete Bewegung zugunsten der ungerichteten und daher ungeordneten thermischen Bewegung.

Wie läßt sich angesichts dieser Beispiele für Mischvorgänge die offensichtliche Entmischung und damit die Zunahme von Ordnung durch Schütteln eines Ensembles großer und kleiner Teilchen mit dem 2. Hauptsatz in Einklang bringen? Da das Schütteln der Teilchen dazu dienen sollte, die reibungsbedingten "Verhakungen" zu lösen, um dem System dadurch die Gelegenheit zu geben, sich dem Gleichgewichtszustand anzunähern, wählen wir ein alternatives Mischverfahren aus. Wir rühren die Teilchen in dem Gefäß mit einem Stab um und stellen fest, daß auf diese Weise die großen und kleinen Teilchen durcheinandergebracht werden und die Unordnung des Systems erhöht wird.

Sollte das Schütteln in Form der rhythmischen Auf- und Abbewegung der Teilchen eine Einwirkung auf das Kugelsystem darstellen, die es statt dem thermischen Gleichgewicht zuzuführen umgekehrt vom thermischen Gleichgewicht entfernt? Alles spricht dafür, daß diese Vermutung richtig ist. Die durch das rhythmische Schütteln bedingte Zufuhr von mechanischer Energie treibt das Kugelsystem aus dem thermischen Gleichgewicht heraus und macht aus dem statischen Agglomerat einzelner Teilchen ein dynamisches System kooperierender Teilchen. Der sichtbarste Ausdruck dieser Kooperation besteht in dem uns interessierenden Problem gerade darin, daß die großen Teilchen in den oberen Schichten des Systems driften. Ein

anderes Merkmal dieser Kooperation besteht in einer relativ geordneten zyklischen Umwälzung (Konvektion), der Teilchen als Ganzes. Ein derartig kohärentes Verhalten fällt insbesondere dann ins Auge, wenn man für einen gleichmäßigen Schüttelrhythmus sorgt.

Das dynamische Teilchensystem ist energiedurchflossen. Ihm wird durch das Schütteln hochwertige mechanische Energie zugeführt, die im Verlauf der Umwälzungen der Teilchen dissipiert wird (Reibung der Teilchen untereinander und mit der Gefäßwand). Die Ordnungszunahme innerhalb des Systems aufgrund der nach oben transportierten großen Teilchen wird durch die mit dieser Dissipation verbundene Unordnungszunahme auf der Energieebene mehr als kompensiert. Auf diese Weise steht das Gesamtverhalten des Systems in Einklang mit dem 2. Hauptsatz.

Damit ist einmal mehr gezeigt, daß in einem offenen energiedurchflossenen System die Entstehung von Ordnung in vollem Einklang mit dem Entropieprinzip erfolgt. Mehr noch: Der Transport der großen Teilchen an die Oberfläche des Systems und deren dortiger Verbleib im weiteren Verlauf des gerichteten Schüttelns ist lediglich als Indikator einer kohärenten Dynamik der Teilchen anzusehen. Diese werden durch die mit dem Schütteln verbundene Energiezufuhr aus ihrer statistischen Unabhängigkeit befreit und einer durch langreichweitige Korrelation bestimmten kollektiven zyklischen Bewegung unterworfen.

Der von dem Teilchensystem eingenommene Endzustand, bei dem alle großen Teilchen in den oberen Schichten des Systems anzutreffen sind, ist nicht statisch wie bei den oben genannten Mischvorgängen, sondern stationär: Er wird durch Dissipation von Energie aufrechterhalten. Wenn der rhythmische Schüttelantrieb zum Erliegen kommt, verbleibt das System zwar aufgrund der reibungsbedingten "Verhakungen" zunächst in diesem Zustand. Es wird aber jede "Gelegenheit ausnutzen", z.B. beim Umrühren, ins thermodynamische Gleichgewicht überzugehen.

Die Teilchen organisieren sich selbst

Die Tatsache, daß die Teilchen trotz der relativ unspezifisch zugeführten Energie ein sehr spezifisches Verhalten an den Tag legen, deutet auf Mechanismen der Selbstorganisation hin: Das Kugelsystem muß auf irgendeine Weise "Kenntnis" von den jeweiligen Veränderungen erlangen, die sich im Laufe der Entwicklung einstellen, um das Verhalten dementsprechend jeweils neu festlegen zu können. Betrachtet man den Vorgang des Schütteln zyklusweise, so ist der Endzustand, der sich nach dem oben beschriebenen Mechanismus eingestellt hat, jeweils der Anfangszustand des nächsten Schüttelzyklus. Auf diese Weise besteht eine unmittelbare Rückkopplung zwischen End- und Anfangszustand, eine wesentliche Voraussetzung für die Möglichkeit der Selbstorganisation.

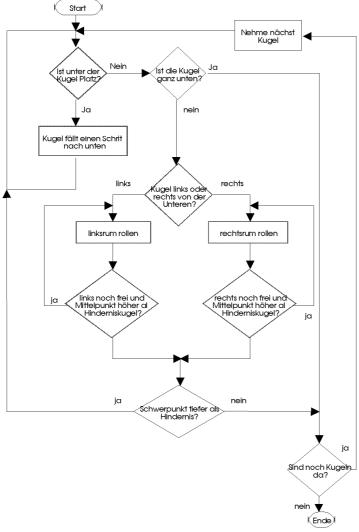
Die Umwälzungen aufgrund des Schüttelns, bei denen sich ganze Teilchengruppen wie einzelne Teilchen verhalten, stellen wie gesagt eine Art Konvektion dar. Thermische Konvektionserscheinungen kommen dadurch zustande, daß ein von unten erwärmtes Fluid Konvektionswalzen ausbildet, sobald die Energiezufuhr ein kritisches Maß überschreitet. Dem hier beschriebenen Teilchensystem (z.B. Kugeln) wird zwar keine thermische, sondern mechanische Energie zugeführt, das Endverhalten ist aber rein phänomenologisch betrachtet ähnlich.

Die Ähnlichkeit geht sogar so weit, daß Entmischungserscheinungen auch durch Erwärmungen hervorgebracht werden können. Das oben erwähnte Wasserstoff- Kohlenstoffdioxidgemisch zeigt nämlich bei Erwärmung von unten ebenfalls Entmischungserscheinungen (siehe z.B. [4]).

Simulation der Entmischung

Der oben beschriebene Mechanismus der Selbstorganisation kann auf einfache Weise in einen Algorithmus umgesetzt werden, mit dem das Verhalten der Teilchen simuliert wird. Der Einfachheit halber benutzen wir in der Simulation zweidimensionale "Kugeln" als Teilchen. Wie im Flußdiagramm (Bild 2) dargestellt, wird die Ausgangssituation dadurch geschaffen, daß die beiden Kugelsorten in zufälliger Reihenfolge in einen Behälter fallen. Wie der Fallvorgang im einzelnen realisiert wird, geht aus dem Flußdiagramm in Bild 3 hervor. Vereinfacht gesagt, fallen die Kugeln in diskreten Schritten, wobei stets überprüft wird, ob eine Kollision mit einer anderen Kugel erfolgt oder nicht. Wenn im Falle einer Kollision Ausweichmöglichkeiten nach links oder rechts bestehen, kommt es zu einem entsprechenden Abrollen der Kugeln. Anderenfalls

haben sie ihren Endzustand erreicht. Das für die vertikale Driftbewegung der großen Kugeln entscheidende



Argument, die Wahrscheinlichkeit, daß kleine Kugeln in Lücken von großen Kugeln geraten, sei größer als der umgekehrte Fall, wird in unserem Algorithmus durch die Abrollbewegung der Kugeln aneinander berücksichtigt. Denn da durch das Abrollen kleinere Kugeln mit größerer Wahrscheinlichkeit eine tiefere Position einnehmen als größere, genügt es anschließend, die Endkonstellation dadurch zu erfassen, daß die Kugeln in der Reihenfolge zunehmender Höhe durchnumeriert werden. Mit dieser Endkonstellation als neuer Ausgangskonstellation wird der Vorgang des Fallenlassens und Abrollens wiederholt, die neue Endkonstellation durch erneutes Durchnumerieren erfaßt, als neue Ausgangskonstellation genommen usw.

Indem das System auf diese Weise am Ende eine von der Anfangskonstellation verschiedene Endkonstellation erreicht, vermag es ständig die eigenen Anfangsbedingungen so zu verändern, daß sie der durch das Schütteln verursachten neuen Konstellation entsprechen (Rückkopplung). Dem Sy-stem entgehen daher mögliche zufallsbedingte Veränderungen nicht, die durch äußere Störungen veranlaßt sein mögen. In Bild 4 sind vier Momentaufnahmen aus dem Schüttelvorgang der Computersimulation dargestellt, aus der deutlich der "Auftrieb" der

großen "Kugeln" hervorgeht.

Die Simulation des Entmischens hat in jüngster Zeit in den Fachwissenschaften einige Aufmerksamkeit erlangt. Die erste Arbeit die sich explizit dieser Problematik annimmt, stammt unseres Wissens von A. Rosato et al. und trägt den beziehungsreichen Titel: Why the Brazil Nuts Are on Top: Size Segregation of Particulate Matter by Shaking [5].

Literatur

- [1] H. M. Jaeger, S. R. Nagel: Physics of the Granular State. Science 255, 1523 (1992)
- [2] D. Bideau, M. Ammi, A. Hansen: Le tic- tac du sablier. La Recherche 261/25, 92 (1994)
- [3] J. B. Knight, H. M. Jaeger, S. R. Nagel: Vibration- Induced Size Separation in Granular Media: The Convection Connection. Phys. Rev. Lett. 70/24, 3728 (1993).
- [4] R. W. Pohl: Mechanik, Akustik und Wärmelehre. Berlin etc.: Springer 1969, S.314.
- [5] A. Rosato, K. J. Strandburg, F. Prinz, R. H. Swendsen: Why the Brazil Nuts Are on Top: Size Segregation of Particulate Matter by Shaking (Phys. Rev. Lett. 58/10, 1038 (1987)).