

УДК 539.2
УКПІ ХХХХХХ
№ держреєстрації 0116U008375
Інв. №

Міністерство освіти і науки України
Одеський державний екологічний університет
(ОДЕКУ)
65016, м.Одеса, вул. Львівська, 15;
тел. (0482) 63 62 09; e-mail: info@odeku.edu.ua



ЗАТВЕРДЖУЮ
Проректор з НР ОДЕКУ
д-р геогр. наук, проф.
Гуцковенко Ю.С.

2020.12.15

ЗВІТ ПРО НАУКОВО-ДОСЛІДНУ РОБОТУ

**«Теоретичні моделі об'єктів м'якої матерії (гранульованих матеріалів) в
задачах фізики та технологіях використання і захисту навколишнього
середовища» (2016-2020рр).
(заключний)**

Керівник НДР
зав. каф. загальної та
теоретичної фізики
д-р фіз.-мат. наук, проф.

Герасимов О.І.

2020

Рукопис закінчено 10.12.2020р.
Результати цієї роботи розглянуто на Науково-технічній раді ОДЕКУ
прот.№ 5 від 24.12, 2020р.

СПИСОК АВТОРІВ

Керівник НДР,
зав. каф. загальної та
теоретичної фізики,
д-р фіз.-мат. наук, проф.



О. Герасимов
(реферат, висновки, розділи 1-4)

Доцент, канд. фіз.-мат. наук,



І. Андріанова
(розділи 1, 3-4)

Доцент, канд. фіз.-мат. наук,



В. Курятников
(розділи 3, 4)

Старший викладач



А. Співак
(розділи 2-4)

Асистент



А. Кільян
(розділи 3, 4)

Завідувач навч. лабораторією



Л. Сідлецька
(вступ, розділ 3)

Нормоконтролер



А. Кільян

РЕФЕРАТ

Звіт про НДР: 107 с., 8 рис., кількість джерел – 163.

МІКРО-МЕХАНІЧНІ СИСТЕМИ, НЕЛІНІЙНІСТЬ, НЕОДНОРІДНІСТЬ,
БІ-ДИСПЕРСНА МІКРО-МЕХАНІЧНА СУМІШ, ЛЕВІТАЦІЯ,
ЕКТРОФОРЕЗ, АДСОРБЦІЯ, ОКСИД ГРАФЕНУ

Об'єкт дослідження – складні системи на прикладі динамічних дисипативних матеріалів у гранульованих фазах. Мета роботи – розбудова теоретичних моделей об'єктів м'якої матерії, зокрема гранульованих матеріалів (ГМ), їхньої поведінки у фізичних процесах та технологіях використання і захисту навколишнього середовища. Метод дослідження – теоретичне і чисельне моделювання, фізичний експеримент (на лабораторних майданчиках організацій – партнерів).

Для одновимірного неоднорідного силового ланцюжку із нелінійними герцевськими контактами детально досліджена мультимодова хвильова динаміка у вигляді згорток циліндричних хвиль та резонансних мод. Апарат теорії Кірквуда-Баффа та модель твердих сфер Карнахана-Старлінга-Мансорі, з урахуванням феноменологічних даних, вперше і ефективно використовується для універсального теоретичного опису та обґрунтування емпіричних даних, щодо компактизації та стисливості бінарної суміші у повному інтервалі значень об'ємної (чи молярної) фракції. Розроблена гібридна левітаційно-електрофоретична модель мікро-механічного дрейфового руху, та запропоновані теоретичної основи технології високоефективного тонкого пилочищення забруднених пилом поверхонь із складною морфологією.

Результати НДР використані при написанні монографій, статей в наукових виданнях, матеріалах лекційних курсів, кваліфікаційних та дисертаційних робіт, а також включені до програм спільних досліджень із організаціями партнерами.

Умови одержання звіту: за договором. 65016, Одеса-16, вул. Львівська, 15, ОДЕкУ.

ЗМІСТ

Вступ.....	6
1 Фракційна динаміка пористих середовищ.....	8
2 Модель хвильового транспорту у неоднорідному герцівському ланцюжку (мультимасштабний підхід).....	11
2.1 Переніс енергії в нелінійних гранульованих ланцюжках у континуальній границі.....	11
2.1.1 Нелінійне рівняння для неоднорідного ланцюжка в термінах перекриття частинок.....	11
2.1.2 Розв’язок задачі для однорідного ланцюжка в термінах перекриття частинок.....	14
2.1.3 Розв’язок однорідної задачі в термінах зміщення частинок відносно рівноважного стану.....	18
2.2 Переніс імпульсу в неоднорідних гранульованих ланцюжках у лінійному наближенні: континуальна межа.....	20
2.2.1 Рівняння та його розв’язок в термінах зміщення частинок відносно рівноважного стану.....	20
2.2.2 Рівняння та його розв’язок в термінах перекриття частинок.....	23
2.3 Застосування Вентцеля-Крамерса-Бриллюєна (WKB) підходу.....	25
2.3.1 WKB -анзац для випадку $y' \neq 0$	26
2.3.2 WKB -анзац для випадку $y' = 0$	30
2.4 Пошук точних часткових розв’язків рівняння руху імпульсу у герцівських ланцюжках у довгохвильовому наближенні	33
2.4.1 Часткові точні розв’язки у класі пробних функцій.....	37
2.4.2 Багатомодова динаміка імпульсу збудження у силових ланцюжках у довгохвильовому наближенні.....	42

3 Ущільнення (компактизація) впакування у бі-компонентній мікро-механічній (гранульованій) суміші.....	46
3.1 Загальні відомості про компактизацію та її роль у технологіях.....	46
3.2 Застосування формули Кірквуда-Баффа та рівняння стану Карнахана-Старлінга для опису властивостей бікомпонентних гранульованих сумішей.....	52
4 Використання властивостей гранульованих матеріалів у задачах захисту довкілля.....	61
4.1 Гранульовані матеріали в технологіях утилізації радіаційно шкідливих речовин.....	61
4.2 Технології очищення від дрібнодисперсного пилу за допомогою маніпулюємого електромагнітного поля.....	65
4.2.1 Керуючі рівняння моделі левітації та електрофорезу.....	68
4.2.2 Розв'язок моделі.....	70
4.2.3 Інтерпретація отриманих результатів.....	71
4.3 Перспективи застосування оксиду графена для очищення від шкідливих домішок	72
Висновки.....	82
Перелік посилань.....	88

ВСТУП

Метою наукового дослідження є розбудова теоретичних моделей об'єктів м'якої матерії, зокрема гранульованих матеріалів (ГМ), їхньої поведінки у фізичних процесах та технологіях використання і захисту навколишнього середовища. Здійснення порівняльного аналізу теоретичних підходів та концепцій у застосуванні до опису чисельних та фізичних експериментів які описують властивості ГМ, на шляху їхнього використання у елементній базі практичних застосувань, з урахуванням впливу внутрішніх та зовнішніх параметрів.

Протягом 2016-2020 років в рамках кафедральної НДР «Теоретичні моделі об'єктів м'якої матерії (гранульованих матеріалів) в задачах фізики та технологіях використання і захисту навколишнього середовища» дослідження були зосереджені на виконанні наступних головних задач:

- **Фракційні моделі структури та динамічних процесів в моделях гранульованих систем. Маніпуляційні моделі гранульованих потоків в неоднорідних зовнішніх полях** – конструкція двічі фракційного хвильового рівняння для опису переносу хвиль у одновимірних системах; аналітичні розв'язки рівняння з урахуванням граничних умов; розбудова діелектрофоретичної теорії гранульованих потоків у схрещених гравітаційному та неоднорідному електричному полі; порівняльний аналіз із фізичним експериментом (у співробітництві з університетом м. Месини, Італія).
- **Переніс енергії в гранульованих структурах. Квазі-зонна теорія прозорості гранульованих матеріалів в умовах конфайменту** – формулювання узагальненого нелінійного рівняння переносу збуджень у гранульованому ланцюжку у континуальному наближенні; його розв'язок для однорідної задачі в термінах як перекриття частинок, так і в термінах їх зміщення відносно рівноважного стану; розв'язки

континуального рівняння для неоднорідного гранульованого ланцюжка у лінійному наближенні в термінах як перекриття частинок, так і в термінах їх зміщення відносно рівноважного стану.

- **Хвильовий транспорт у дискретних мікро-механічних системах** – розбудова теоретичного апарату дослідження хвильової динаміки збуджень в складних (декорованих, в умовах конфайнменту, нелінійних) мікро механічних системах (матеріалах); вивчення ролі граничних умов та типу збудження, у формуванні динамічних сценаріїв поведінки систем; розробка теоретичних основ конструкції захисних екранів та інших елементів хвильової схемотехніки, які використовують особливості фізичної поведінки дискретних мікро-механічних конгломерацій у взаємодії із хвильовими та шокowymi збудженнями.
- **Надлишкові властивості полідисперсних гранульованих матеріалів** – побудова співвідношень, аналогів статистичної теорії розчинів які пов’язують надлишкові властивості макроскопічних характеристик г.с. із їх внутрішніми та структурними параметрами; розбудова технологічних розв’язків щодо проблеми пилеочищення за умов низької гравітації.
- **Використання гранульованих матеріалів в технологіях захисту навколишнього середовища та в задачах глобального екологічного матеріалознавства** – розробка концепції використання великомасштабних гранульованих зразків в задачах захисту від збурень хвильової природи; початок глобального екологічного матеріалознавства; підготовка заключного звіту.

За вихідні дані для виконання НДР приймалися сучасні публікації з виділених питань теорії, чисельного та фізичного експерименту з гранульованими матеріалами у провідних виданнях, та особистий доробок авторів наукової програми.

1 ФРАКЦІЙНА ДИНАМІКА ПОРИСТИХ СЕРЕДОВИЩ

Аномальна дифузія, яка створює елементну базу опису динамічних процесів у середовищах з неоднорідним профілем густини розглянута за допомогою методів фракційної кінетики. Запропонований підхід має широке коло застосувань від параметризації міграції рідин у пористих середовищах до розбудови фізичної кінетики та динамічних процесів, які відбуваються у гранульованих середовищах

У вказаному напрямку для опису кінетичних процесів задіяні фракційні диференціальні рівняння у часткових похідних.

Враховуючи, що у середовищах з неоднорідним профілем густини, кінетичні закономірності типу законів гаусової статистики, лінійних законів переносу (Фур'є, Фіка, та їм подібні (1.1)) не виконуються:

$$\langle x^2(t) \rangle \propto t, \quad - \text{звичайна дифузія} \quad (1.1)$$

$$\langle x^2(t) \rangle \propto t^\gamma, \quad - \text{аномальна дифузія} \quad (1.2)$$

встановлення екстраполяційних співвідношень, які характеризують вказані процеси у неевклідовських середовищах є вкрай актуальним. Так, наприклад, евклідовське визначення середньоквадратичного зміщення, яке характеризує броунівський рух насправді є наслідком граничної центральної теореми Марківського підходу до опису стохастичних процесів. Взагалі можна зробити висновок що окрім аномальної дифузії існує ціла палітра нелінійних законів, які описують характер міграційних процесів (1.2).

Можна вважати встановленим (узагальнення Леві-Гнеденко), що у зв'язку із складністю (гіпернеоднорідністю) середовищ, (скажімо, об'єктів м'якої матерії), має місце порушення центральної граничної теореми і, як

наслідок, до появи негаусівських розподілів і немарківської часової еволюції (1.2). Одним із прикладів, досить наочних, і виступають динамічні процеси у пористих, гранульованих середовищах.

Для опису явищ у вищезгаданих середовищах можна користуватися узагальненою формою відомого рівняння Фоккера-Планка,

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x,t) = D \nabla^2 P(x,t), \quad (1.3)$$

де $P(x,t)$ – щільність імовірності в просторі $x=[x_1, x_2, x_3]$;

t – час;

$D > 0$ – коефіцієнт дифузії.

А саме:

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x,t) = D \nabla^\alpha P^\beta(x,t), \quad -\infty < \alpha \leq 2, \quad \beta > -1, \quad (1.4)$$

де $P^\beta(x,t)$ - функція ймовірності, яка має бути знайдена;

$\sum_i (\partial^\alpha / \partial x^\alpha)_i$ - фракційний лапласіан ($i = 1, 2, 3$), який знаходиться за

допомогою апарату фракційного числення (Рімана-Ліувіля) [1].

Іншою більш узагальненою формою є рівняння яке містить фракційні похідні ще й по часу.

Такий модельний підхід веде до адекватного опису кінетичних процесів, які відбуваються у пористих гранульованих середовищах і дозволяє здійснити прогнозування їх динамічних станів та переходів проміж ними.

Вище висвітлена концепція дозволяє здійснити параметризацію процесів дифузії рідин у ґрунтах та інших динамічних процесів на фракційних гратках. Має сенс в плані класифікації відповідних явищ і встановлення співвідношень між показниками фракційних процесів і закономірностями її протікання.

Типовим керуючим рівнянням на цьому шляху пропонується наступне

$$\frac{\partial^\delta}{\partial t^\delta} \theta(z, t) = D \frac{\partial^2 \theta(z, t)}{\partial z^2}, \quad (1.5)$$

де $\theta(z, t)$ - є, наприклад, вміст води в залежності від часу t та глибини ґрунту z ;

δ - параметр який уявляє собою порядок дробової похідної;

$0.5 \leq \delta < 1$ - для аномальної суб-дифузії;

$\delta = 1$ – у такому випадку ми отримуємо класичну похідну, і таким чином, маємо справу із нормальною дифузією:

$\delta > 1$ – для супер-дифузії.

Підсумовуючи, зауважимо, що запропонований фракційний підхід до визначення і параметризації фізичної кінетики у неоднорідних середовищах носить цілком загальний характер і може бути застосований до вивчення динаміки неевклідовських середовищ в яких закони класичної статистичної фізики мають бути замінені на теорію динамічних систем у фракційному розумінні [2,3]. Відповідні аналітичні співвідношення, розв'язки керуючих рівнянь, які описують конкретні процеси міграції будуть надані у подальшому.

2 МОДЕЛЬ ХВИЛЬОВОГО ТРАНСПОРТУ У НЕОДНОРІДНОМУ ГЕРЦІВСЬКОМУ ЛАНЦЮЖКУ (МУЛЬТИМАСШТАБНИЙ ПІДХІД)

2.1 Переніс енергії в нелінійних гранульованих ланцюжках у континуальній границі

Переніс енергії у одновимірних ланцюжках силових центрів є традиційно актуальна задача [4-17]. Це пов'язано як з фундаментальним інтересом до задач такого плану (наприклад, питання про термалізацію системи) так і з суто практичними застосуваннями. Останні мають гарні перспективи наприклад у створенні елементів хвильової схемотехніки, які на відміну від напівпровідникових не повинні псуватись у потужних радіаційних полях.

Зведення вивчення реальних систем до розгляду їх одновимірних моделей можливе лише за виконання певних припущень, які у нижче розглянутому вважаємо такими що задовольняються.

2.1.1 Нелінійне рівняння для неоднорідного ланцюжка в термінах перекриття частинок

Розглянемо одновимірний обмежений ланцюжок який складається з N однакових макроскопічних частинок, взаємодіючих лише з близькими сусідами за нелінійним законом. Так наприклад, у випадку частинок сферичної форми така взаємодія може відбуватись за законом Герця (тобто коли сила пружної взаємодії 2-х сферичних частинок, пропорційна дробовій степені $\delta = 3/2$ від деформації ε).

Рівняння руху частинок в загальному випадку при наявності прекомпресії (наприклад, коли ланцюжок стиснутий зовнішньою силою, або розташований вертикально) має вигляд:

$$m \frac{d^2 x_n}{dt^2} = C(\varepsilon_{n-1}^\delta - \varepsilon_n^\delta) + F_n, \quad (2.1.1)$$

де x_n - координата центра n -ої гранули;

$$C = \frac{E\sqrt{d}}{3(1-\nu^2)} - \text{силова стола};$$

E - модуль пружності Юнга;

ν - коефіцієнт Пуасона;

d та m - діаметр та маса частинки n , відповідно;

ε_n - перекриття (взаємна деформація) частинок в межах n -го контакту:

$$\varepsilon_n = d - (x_{n+1} - x_n); \quad (2.1.2)$$

δ - величина яка характеризує ступень нелінійності (для герцівських контактів $\delta = 3/2$);

F_n - зовнішня сила, яка діє на частинку n :

$$1) \text{ для вертикального ланцюжка: } F_n = mg;$$

$$2) \text{ для горизонтального ланцюжка: } F_1 = -F_N = F_0, F_{2\dots(N-1)} = 0;$$

$$3) \text{ для ланцюжка який стиснутий с боків зовнішнією силою, але окрім цього ще й розташований вертикально: } F_1 = F_0 + mg, F_{2\dots(N-1)} = mg,$$

$$F_N = -F_0 + mg;$$

g - прискорення вільного падіння.

Рівноважному стану, що визначає початкові умови, відповідає стаціонарний розв'язок рівняння (2.1.1), яке може бути записано у наступному вигляді:

$$\varepsilon_n(0) = \left(\frac{F_0 + nmg}{C} \right)^{1/\delta}. \quad (2.1.3)$$

З визначення перекриття частинок ε_n (2.1.2), після диференціювання за часом лівої та правої частини (2.1.2) знаходимо:

$$\frac{d^2 \varepsilon_n}{dt^2} = \frac{d^2 x_n}{dt^2} - \frac{d^2 x_{n+1}}{dt^2}. \quad (2.1.4)$$

З урахуванням (2.1.1) та (2.1.4) отримуємо рівняння руху імпульсу в безвимірній формі в термінах перекриття ε_n частинок:

$$\frac{d^2 \varepsilon_n}{d\tau^2} = \varepsilon_{n-1}^\delta - 2\varepsilon_n^\delta + \varepsilon_{n+1}^\delta + \frac{F_n - F_{n+1}}{C}, \quad (2.1.5)$$

де $\tau = \sqrt{\gamma} \cdot t$ - перенормований час;

$\gamma = C/m$ - силова стала;

$F_n - F_{n+1}$ - величина яка залежить від характеру зовнішніх полів, завдяки яким створюється неоднорідність у ланцюжку.

Враховуючи, що у випадку вертикального ланцюжка $F_n - F_{n+1} = 0$, хоч він вже є неоднорідним завдяки неоднаковому тиску на верхні, середні та нижчі частини системи за рахунок вищележачих частин ланцюжка навіть в рівноважному (незбуреному) стані, останній доданок у рівнянні (2.1.5) у нижче наведеному матеріалі буде опущено (як такий, що дорівнює нулю). Відзначимо лише, що для випадку неоднорідних зовнішніх полів останній доданок в (2.1.5) необхідно буде утримати.

Перейдемо в (2.1.5) до змінної вигляду $\psi = \varepsilon^\delta$:

$$\frac{d^2}{d\tau^2} (\psi_n^{1/\delta}) = \psi_{n-1} - 2\psi_n + \psi_{n+1} + \frac{F_n - F_{n+1}}{C}, \quad (2.1.6)$$

та дослідимо континуальну форму (2.1.6). Скористаємось стандартним алгоритмом переходу від дискретної змінної $\Psi_n(\tau)$ до континуальної $\Psi(\tau, h)$:

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{d\tau^2}(\Psi^{1/\delta}) = & \left(\Psi - a\Psi' + a^2 \frac{\Psi''}{2!} - a^3 \frac{\Psi'''}{3!} + a^4 \frac{\Psi''''}{4!} - \dots \right) - 2\Psi + \\ & + \left(\Psi + a\Psi' + a^2 \frac{\Psi''}{2!} + a^3 \frac{\Psi'''}{3!} + a^4 \frac{\Psi''''}{4!} + \dots \right). \end{aligned} \quad (2.1.7)$$

де a - масштабний параметр; «штрих» - похідна за координатою, наприклад $\Psi' = \frac{\partial \Psi}{\partial h}$. Утримуючи в отриманому рівнянні доданки які містять a до порядку a^4 , включно, отримуємо:

$$\frac{d^2}{d\tau^2}(\Psi^{1/\delta}) = a^2 \Psi'' + \frac{a^4}{12} \Psi'''' . \quad (2.1.8)$$

Слід зазначити, що отримане в (2.1.8) рівняння є нелінійним, та отримане з дискретного рівняння, що найбільш точно моделює задачу розповсюдження збуджень у гранульованому ланцюжку, лише за континуального наближення та нехтування при цьому доданками що містять шостий та вищі порядки. При цьому рівняння описує окрім однорідного ланцюжка, ще й слабо неоднорідний (такий, наприклад, як вертикальний), лінеаризація та відповідний розв'язок якого будуть розглянуті у підрозділі 2.2.

2.1.2 Розв'язок задачі для однорідного ланцюжка в термінах перекриття частинок

Рівняння (2.1.8) для випадку однорідного (наприклад, горизонтального) герцевського ланцюжка перепишемо у вигляді:

$$\frac{d^2}{d\tau^2}(\Psi^{2/3}) = a^2 \Psi'' + \frac{a^4}{12} \Psi'''' . \quad (2.1.9)$$

Неважко переконатися безпосередньою підстановкою, що рівняння (2.1.9) має точний часний розв'язок наступного вигляду:

$$\psi(\tau, h) = A \cos^6\left(\frac{x - c\tau}{\lambda}\right), \quad (2.1.10)$$

де $A = F_{max} / C$ - величина яка пропорційна максимальній силі F_{max} що розвивається на межі контакту частинок;

c - стала, яка пропорційна швидкості переміщення збудження в ланцюжку;

λ - множник, який безрозміризує аргумент косинусу в (2.1.10).

Підстановка розв'язку (2.1.10) до рівняння (2.1.9) дозволяє встановити зв'язок між використаними в них сталими, а саме:

$$A^{1/3} = \frac{6c^2}{5a^2}, \quad \lambda^2 = 3a^2. \quad (2.1.11)$$

Розв'язок (2.1.10), описує знайдену нелінійну локалізовану моду, яка демонструє розповсюдження імпульсу збудження. Схожий розв'язок, що відрізняється коефіцієнтами, було отримано у роботах [4].

Враховуючи, що $\psi = \varepsilon^{3/2}$, з формули (2.1.10) для перекриття частинок отримуємо наступний розв'язок [17, 18]:

$$\varepsilon = \varepsilon_{max} \cos^4\left(\frac{x - vt}{\sqrt{3}a}\right), \quad (2.1.12)$$

де $\varepsilon_{max} = A^{2/3}$ - значення перекриття частинок, яке відповідає максимальному наближенню сусідніх частинок при проходженні крізь них імпульсу збудження;

$v = c\sqrt{\gamma}$ - швидкість переміщення солітона уздовж ланцюжка.

Знайдемо тепер величину максимального перекриття частинок ε_{\max} .

З урахуванням (2.1.11) та (2.1.12), отримуємо [17, 18]:

$$\varepsilon_{\max} = \frac{36v^4}{25a^4\gamma^2}. \quad (2.1.13)$$

Зазначимо, що такого значення (ε_{\max}) перекриття частинок ланцюжка досягають в тому випадку, коли його центр знаходиться точно в центрі солітона. Із (2.13) витікає нелінійний зв'язок амплітуди перекриття частинок та швидкості переміщення збудження уздовж ланцюжку ($\sim v^4$), що характерно саме для нелінійних хвиль.

Знайдемо швидкість v переміщення солітона в ланцюжку використовуючи матеріальні співвідношення. З виразів у (2.1.11), визначення A у описі до формули (2.1.10) та v у (2.1.12), підставляючи значення силових сталих з (2.1.1) та (2.1.5), після простих перетворень, швидкість руху солітона записується у наступному вигляді:

$$v = \sqrt{\frac{5}{\pi\rho}} \left(\frac{E}{3a(1-v^2)} \right)^{1/3} F_{\max}^{1/6}, \quad (2.1.14)$$

Позначимо важливість (як для теорії, так і для експерименту) співвідношення (2.1.14) у сенсі впливу на швидкість переміщення солітона і значень матеріальних сталих ($\sim a^{1/3}$, $\sim \rho^{-1/2}$, $\sim E^{1/3}$, $\sim v^{-2/3}$), та величини самого збудження ($\sim F_{\max}^{1/6}$).

Порівнюючи вираз для швидкості солітона який отримано в [8] для солітона Нестеренко:

$$v = 0.6802 \left(\frac{2E}{a\rho^{3/2}(1-v^2)} \right)^{1/3} F_{\max}^{1/6}, \quad (2.1.15)$$

із знайденим нами результатом (2.1.14)

$$v = \frac{\sqrt{\frac{5}{\pi}}}{6^{1/3}} \left(\frac{2E}{a\rho^{3/2}(1-v^2)} \right)^{1/3} F_{max}^{1/6} \approx 0.6943 \left(\frac{2E}{a\rho^{3/2}(1-v^2)} \right)^{1/3} F_{max}^{1/6}, \quad (2.1.16)$$

отримуємо їх добре співпадання (похибка має порядок 2%).

Величина похибки (~2%), вказує на необхідність відповідної точності експериментальних вимірювань швидкості солітона v ($\ll 2\%$), для можливості підтвердження того (2.1.15) чи іншого (2.1.16) результату.

Враховуючи, що аргумент у розв'язку (2.1.12) належить наступному інтервалу:

$$-\frac{\pi}{2} < \frac{h-vt}{\sqrt{3}a} < \frac{\pi}{2}, \quad (2.1.17)$$

оцінка повної ширини (дисперсії) солітона дається виразом:

$$\Delta h = \pi\sqrt{3}a, \quad (2.1.18)$$

що за умови $a = d$ відповідає

$$\Delta n = \frac{\Delta h}{a} = \pi\sqrt{3} \approx 5.44 \text{ (діаметрів частинки)}. \quad (2.1.19)$$

Отримана оцінка добре узгоджується (хоч і не співпадає точно!) з аналогічною величиною відомою для солітона Нестеренко, яка складає:

$$\frac{\pi}{2}\sqrt{10} \approx 4.97 \text{ (діаметрів частинки)}. \quad (2.1.20)$$

Зазначимо, що наведений у (2.1.17) інтервал аргументу розв'язку (2.1.12) відповідає спеціальному типу збудження ланцюжка, який призводить до утворення збурення саме із одним екстремумом. Однак, як можна бачити з розв'язку (2.1.17) він також не перечить режиму утворення багато солітонного збурення (так званий «солітонний-поїзд»).

2.1.3 Розв'язок однорідної задачі в термінах зміщень

Перейдемо до змінних, які часто використовуються багатьма авторами [4-9], і які визначаються зміщенням частинок в ланцюжку відносно їх рівноважного положення:

$$\varphi_n = x_n - x_n(0). \quad (2.1.21)$$

Підстановка (2.1.21) в (2.1.2) дає:

$$\varepsilon_n = \varepsilon_n(0) + \varphi_n - \varphi_{n+1}. \quad (2.1.22)$$

Перейдемо в (2.1.22) до континуальної межі. По аналогії з аргументацією, яка використана для отримання (2.1.7), у довгохвильовому наближенні отримуємо:

$$\varepsilon \approx \varepsilon(0) - a \frac{\partial \varphi}{\partial h}. \quad (2.1.23)$$

З урахуванням (2.1.12) та відповідної для нього умови однорідності $\varepsilon(0) = 0$, відносно зміщення φ шукаємо у вигляді наступного інтегралу:

$$\varphi = -\frac{\varepsilon_{max}}{a} \int \cos^4\left(\frac{h-vt}{\lambda}\right) dh. \quad (2.1.24)$$

Користуючись відомим представленням

$$\cos^4 \alpha = \frac{1}{8}(\cos 4\alpha + 4 \cos 2\alpha + 3), \quad (2.1.25)$$

та взявши інтеграл в (2.1.24) отримуємо:

$$\varphi = -\frac{\lambda \varepsilon_{\max}}{8a} \left(\frac{\sin 4\alpha}{4} + 2 \sin 2\alpha + 3\alpha \right). \quad (2.1.26)$$

Зазначимо, що отриманий у (2.1.26) розв'язок в термінах зміщення φ частинок для випадку $-\frac{\pi}{2} \leq \alpha \leq \frac{\pi}{2}$ має профіль гладкої сходинки, яка з часом не змінює форму та рухається уздовж ланцюжка із сталою швидкістю v , і таким чином має усі ознаки кінку.

Знайдемо швидкість зміщення частинок в ланцюжку. Диференціюючи вираз (2.1.26) за часом t , маємо:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = \frac{v \varepsilon_{\max}}{a} \cos^4 \left(\frac{h - vt}{\lambda} \right). \quad (2.1.27)$$

Із (2.1.27) з урахуванням (2.1.13) витікає, що максимальна швидкість зміщення частинок в ланцюжку дорівнює:

$$\dot{\varphi}_{\max} = \frac{36v^5}{25a^5 \gamma^2}. \quad (2.1.28)$$

Зазначимо, що такої швидкості ($\dot{\varphi}_{\max}$) частинка ланцюжка сягає у тому випадку, коли вона знаходиться точно по центру солітона.

З виразів (2.1.13), (2.1.27) та (2.1.28), легко отримати наступні обмеження:

$$\frac{\varepsilon_{max}}{a} = \frac{\dot{\varphi}_{max}}{v} = \frac{36v^4}{25a^5\gamma^2} \ll 1, \quad \frac{v}{a} = \frac{\dot{\varphi}_{max}}{\varepsilon_{max}} \gg 1.$$

Таким чином, максимальна швидкість руху частинок при проходженні імпульсу збудження відноситься до його швидкості так, як і максимальне перекриття частинок до їх діаметру, а це у свою чергу означає, що $\dot{\varphi}_{max}$ та ε_{max} приймають на порядки менші значення у порівнянні із v та a , відповідно.

Детальний аналіз умов утворення збуджень, які відповідають розглянутим тут солітонним розв'язкам, було зроблено у [17]. Запропонований метод квазічастинки дозволив дослідити також розповсюдження та взаємодію солітоноподібних збуджень. Зокрема, для нелінійного ланцюжку із герцівськими контактами описані характеристики розсіяння солітоноподібного збудження на важкому ізотопічному дефекті. Отримані теоретичні дані добре узгоджуються із експериментальними спостереженнями.

2.2 Переніс імпульсу в неоднорідних гранульованих ланцюжках у лінійному наближенні: континуальна межа

2.2.1 Рівняння та його розв'язок в термінах зміщення частинок відносно рівноважного стану

У лінійному наближенні, рівняння (у дискретній формі) руху (для імпульсу збудження в неоднорідному гранульованому ланцюжку) в термінах відносних зміщень φ , має наступний вигляд:

$$\frac{\partial^2 \varphi_n}{\partial \tau^2} = \kappa_n \varphi_{n+1} - (\kappa_n + \kappa_{n-1}) \varphi_n + \kappa_{n-1} \varphi_{n-1}, \quad (2.2.1)$$

де $\kappa_n = n^{1-1/\delta}$ – коефіцієнт, який враховує неоднорідність. Відповідно до задачі Штурма-Ліувілля, точні розв'язки (2.2.1) даються лінійними комбінаціями наприклад, плоских або циліндричних хвиль.

Застосовуючи до (2.2.1) процедуру переходу до континуальної форми (див. (2.1.7)) та обмежуючись врахуванням доданків, які містять похідні до другого порядку включно, приходимо до рівняння:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial \tau^2} = a^2 \frac{\partial^2}{\partial h^2} \left(h^\xi \frac{\partial \varphi}{\partial h} \right), \quad (2.2.2)$$

де $\xi = 1 - 1/\delta$.

Загальний розв'язок рівняння (2.2.2), для довільного збурення ланцюжка, відповідно до [19] дається як наслідок розв'язку задачі на власні значення (Штурма-Ліувілля), у вигляді:

Область $0 < h < l$. Перша краєва задача. Випадок $0 < \xi < 1$:

$$\varphi = f(h) \quad \text{для} \quad t = 0 \quad (\text{початкова умова})$$

$$\partial_t \varphi = g(h) \quad \text{для} \quad t = 0 \quad (\text{початкова умова})$$

$$\varphi = 0 \quad \text{для} \quad h = 0 \quad (\text{гранична умова})$$

$$\varphi = 0 \quad \text{для} \quad h = l \quad (\text{гранична умова})$$

Розв'язок:

$$\varphi(h, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \left[A_n \cos(\lambda_n t) + \frac{B_n}{\lambda_n} \sin(\lambda_n t) \right] X_n(h), \quad (2.2.3)$$

$$\text{де } \lambda_n = \frac{\mu_n}{2} (2 - \xi) l^{(\xi-2)/2};$$

$$A_n = \frac{1}{\|X_n\|^2} \int_0^l f(h) X_n(h) dh;$$

$$B_n = \frac{1}{\|X_n\|^2} \int_0^l g(h) X_n(h) dh;$$

$$X_n(h) = h^{(1-\xi)/2} J_p \left(\mu_n \left(\frac{h}{l} \right)^{(2-\xi)/2} \right);$$

$$\|X_n\|^2 = \int_0^l X_n^2(h) dh;$$

$$p = \left| \frac{1-\xi}{2-\xi} \right|;$$

μ_n - n -й позитивний корінь функції Бесселя: $J_p(\mu) = 0$.

Формально, точний розв'язок рівняння (2.2.2) може бути надано у вигляді лінійної комбінації циліндричних хвиль [6]:

$$\varphi(\tau, h) = \sum_i A_i e^{i\omega_i \tau} u(h), \quad (2.2.4)$$

$$u(h) = h^{1/3} H_{2/5}^{(1)} \left(\frac{6\omega}{5} h^{5/6} \right). \quad (2.2.5)$$

де A_i - ваговий коефіцієнт, який показує вплив моди на форму групового пакету;

ω - частота моди;

$H_{2/5}^{(1)}$ - функція Ганкеля.

Ваговий коефіцієнт A_i в (2.2.4) залежить від форми збуджуючого сигналу. Так для імпульсного збудження приймаючи в (2.2.4) що $A_i = 1$, після інтегрування за всіма частотами ω (від 0 до ∞) отримуємо вираз типу згортки:

$$\varphi(\tau, h) \sim \left| \tau^2 - \left(\frac{6}{5} \right)^2 h^{5/3} \right|^{3/10},$$

який характеризується полюсним доданком.

Зазначимо, що існують також часні розв'язки які задовольняють рівнянню (2.2.2). Так наприклад, для випадку імпульсного збудження, рівняння (2.2.2) задовольняє (у чому неважко переконатися безпосередньою підстановкою) розв'язок наступного вигляду:

$$\varphi(\tau, h) = \left| \tau^2 - \left(\frac{2}{\eta} \right)^2 h^\eta \right|^{\frac{\xi}{2\eta}}, \quad (2.2.6)$$

де $\eta = 1 + 1/\delta$. Не дивлячись на наявність у розв'язка (2.2.6) розриву на фронті для $h = \left(\frac{\eta}{2} \tau \right)^{2/\eta}$, цей розв'язок досить добре описує поведінку функції зміщення на віддалених від розриву ділянках. Сам розрив, може сприйматися не як артефакт, а як початкова (лінійна) стадія утворення солітона. На користь такої думки свідчить той факт, що при врахуванні у континуальному розкладанні більшої кількості доданків, може бути отримано відомий солітонний розв'язок. В [15] запропоновано, що ефекти типу тих, що доставляються рівнянням (2.2.6) можуть свідчити про можливість формування квазі-ударної хвилі, яка в даному випадку може створюватися шляхом накладання уздовж них хвиль розтягіння та стискування.

2.2.2 Рівняння та його розв'язок в термінах перекриття частинок

За аналогією з попереднім параграфом (див. п.2.2.1), здійснимо подібний аналіз для рівнянь сформульованих відносно іншої змінної, яку визначимо як відхилення перекриття частинок від його рівноважного значення:

$$\hat{\varepsilon} = \varepsilon - \varepsilon(0). \quad (2.2.7)$$

У лінійному наближенні для слабо неоднорідного (вертикального) ланцюжка дискретне рівняння в термінах відносного перекриття частинок має такий вигляд:

$$\frac{\partial^2 \hat{\varepsilon}_n}{\partial \tau^2} = \kappa_n \hat{\varepsilon}_{n+1} - 2\kappa_n \hat{\varepsilon}_n + \kappa_{n-1} \hat{\varepsilon}_{n-1}, \quad (2.2.8)$$

З дискретного рівняння (2.2.8), у континуальному наближенні з урахуванням доданків поряд з масштабним множником до a^2 включно, отримуємо наступне рівняння:

$$\frac{\partial^2 \hat{\varepsilon}}{\partial \tau^2} = a^2 \frac{\partial^2}{\partial h^2} (h^{\xi} \hat{\varepsilon}). \quad (2.2.9)$$

Точний розв'язок рівняння (2.2.9) може бути записано у вигляді лінійної комбінації циліндричних хвиль (як і в (2.2.4), але з функцією $u(h)$ трохи іншого вигляду):

$$\hat{\varepsilon}(\tau, h) = \sum_i A_i e^{i\omega_i \tau} u(h), \quad (2.2.10)$$

$$u(h) = h^{1/6} H_{3/5}^{(1)} \left(\frac{6\omega}{5a} h^{5/6} \right), \quad (2.2.11)$$

де $u(h)$ - розв'язок рівняння Бесселя, до якого зводиться рівняння (2.2.9).

Зауважимо, що розв'язок для функцій координат $u(h)$ в (2.2.11) та (2.2.5) хоч і відносяться до одного класу, вони все ж такі відрізняються як за амплітудою, так і за порядком індексу циліндричної функції.

Підкреслимо, що як у випадку функції зміщення, так і для функції перекриття частинок, у молодших порядках розв'язок доставляється лінійними комбінаціями циліндричних хвиль. В окремих випадках, згортка циліндричних функцій призводить до формально-точних розв'язків у вигляді розривних мод, подібних до ударних хвиль [15].

2.3 Застосування Вентцеля-Крамерса-Бриллюєна (WKБ) підходу

Розглянемо рівняння, яке описує поширення збуджень у вертикальному гранульованому ланцюжку (в полі тяжіння) в континуальній границі [9,11]:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial h} \left(h^\xi \frac{\partial \varphi}{\partial h} \right), \quad (2.3.1)$$

де $\varphi(t, h)$ - функція зміщення частинок (displacement), яка характеризує розповсюдження енергії збудження у ланцюжку;

t - час;

h - довжина вертикального ланцюжка, відлік якої починається з верхньої його границі;

$\xi = 1 - \frac{1}{\delta}$ - величина яка характеризує неоднорідність силових сталей у ланцюжку (для герцівського ланцюжку $\xi = 1/3$);

δ - характеризує нелінійність контакту частинок у ланцюжку ($\delta = 1$ - закон Гука, $\delta = 3/2$ - закон Герця).

Підставимо в рівняння (2.3.1) наступний пробний розв'язок:

$$\varphi = A e^{-i\omega t + \Phi(h)}, \quad (2.3.2)$$

де A - константа;

ω - частота;

$\Phi(h)$ - деяка функція, яка залежить тільки від h , вид якої і слід встановити.

Після простих перетворень отримуємо для шуканої функції Φ наступне рівняння:

$$\Phi'' + (\Phi')^2 + \frac{\xi}{h} \Phi' + \frac{\omega^2}{h^\xi} = 0. \quad (2.3.3)$$

Підстановкою $y = \Phi'$ рівняння (2.3.3) зводиться до рівняння першого порядку (типу Рікати):

$$y' + y^2 + \frac{\xi}{h} y + \frac{\omega^2}{h^\xi} = 0. \quad (2.3.4)$$

2.3.1 WKБ-анзац для випадку $y' \neq 0$

В загальному випадку, коли $y' \neq 0$, з (2.3.4) отримуємо такий вираз:

$$-h = \int \frac{dy}{y^2 + \frac{\xi}{h} y + \frac{\omega^2}{h^\xi}}. \quad (2.3.5)$$

Припускаючи, що в (2.3.5) величини $\frac{\xi}{h} = b$ і $\frac{\omega^2}{h^\xi} = c$ слабко змінюються у порівнянні із змінною інтегрування y , для інтегралу із (2.3.5) отримуємо наступні розв'язки [20]:

$$\begin{aligned} & \int \frac{dy}{y^2 + by + c} = \\ & = \frac{2}{\sqrt{4c - b^2}} \operatorname{arctg} \frac{2y + b}{\sqrt{4c - b^2}}, \quad \text{якщо } 4c > b^2; \end{aligned} \quad (2.3.6)$$

$$= \frac{2}{\sqrt{b^2 - 4c}} \ln \left| \frac{2y + b - \sqrt{b^2 - 4c}}{2y + b + \sqrt{b^2 - 4c}} \right|, \quad \text{якщо } b^2 > 4c; \quad (2.3.7)$$

$$= -\frac{2}{2y + b}, \quad \text{якщо } b^2 = 4c. \quad (2.3.8)$$

Розв'язок (2.3.6) відповідає умові $6\omega h^{5/6} > 1$. Підстановкою (2.3.6) у (2.3.5) отримуємо:

$$y = -\frac{\xi}{2h} + \frac{\sqrt{-\Delta}}{2} \operatorname{tg} \left(-h \frac{\sqrt{-\Delta}}{2} \right), \quad (2.3.9)$$

де $\Delta = b^2 - 4c$.

З врахуванням того, що $y = \Phi'$, з (2.3.9) отримуємо:

$$\Phi = \int y dh = -\frac{1}{6} \ln h - \int \frac{\sqrt{-\Delta}}{2} \operatorname{tg} \left(h \frac{\sqrt{-\Delta}}{2} \right) dh, \quad (2.3.10)$$

Підстановкою $z = h \frac{\sqrt{-\Delta}}{2} = \frac{1}{6} \sqrt{36\omega^2 h^{5/3} - 1}$, інтеграл у (2.3.10) зводиться до наступного вигляду [20]:

$$\frac{6}{5} \int \frac{z^2 \operatorname{tg} z}{z^2 + 1/36} dz \approx \int \operatorname{tg} z dz \approx -\frac{6}{5} \ln |\cos z|. \quad (2.3.11)$$

Підстановка (2.3.11) у (2.3.10) дає такий вираз для Φ :

$$\Phi \approx -\frac{1}{6} \ln h + \frac{6}{5} \ln |\cos \omega h^{5/6}|, \quad (2.3.12)$$

Підстановка (2.3.12) у (2.3.2) дає таке рішення:

$$\varphi \approx Ae^{i\omega t} h^{-1/6} \left| \cos \omega h^{5/6} \right|^{6/5}, \quad (2.3.13)$$

яке носить назву «брізер» або «дихаючий солітон».

Розв'язок (2.3.7) відповідає умові $6\omega h^{5/6} < 1$. Підстановкою (2.3.7) в (2.3.5) отримуємо вираз для y :

$$y = -\frac{1}{6h} - \frac{\sqrt{\Delta}}{2} \cdot \frac{1 + e^{-h\frac{\sqrt{\Delta}}{2}}}{1 - e^{-h\frac{\sqrt{\Delta}}{2}}}, \quad (2.3.14)$$

звідки для Φ можна записати

$$\Phi = -\frac{1}{6} \ln h - \int \frac{\sqrt{-\Delta}}{2} \cdot \frac{1 + e^{-h\frac{\sqrt{\Delta}}{2}}}{1 - e^{-h\frac{\sqrt{\Delta}}{2}}} dh. \quad (2.3.15)$$

Інтеграл у (2.3.15) наступною підстановкою $z = h\frac{\sqrt{\Delta}}{2} = \frac{1}{6}\sqrt{1 - 36\omega^2 h^{5/3}}$,

зводиться до вигляду [20]:

$$\frac{12}{5} \int \frac{z^2}{z^2 - 1/36} \cdot \operatorname{ctg} z \, dh \approx \frac{12}{5} \int \frac{z}{z^2 - 1/36} dh = \frac{6}{5} \ln \left| \frac{1}{36} - z^2 \right|. \quad (2.3.16)$$

Підстановка (2.3.16) у (2.3.15) дає наступний вираз для Φ :

$$\Phi = -\frac{1}{6} \ln h - \frac{6}{5} \ln |\omega^2 h^{5/3}|. \quad (2.3.17)$$

Підстановка (2.3.17) у (2.3.2) дає такий розв'язок:

$$\varphi \approx Ae^{i\omega t} h^{-1/6} (\omega h^{5/6})^{-12/5}, \quad (2.3.18)$$

Розв'язок (2.3.8) відповідає умові $6\omega h^{5/6} = 1$. Підстановкою (2.3.8) у (2.3.5) отримуємо:

$$y = \frac{5}{6h}, \quad (2.3.19)$$

звідки

$$\Phi = \frac{5}{6} \ln h. \quad (2.3.20)$$

Підстановка (2.3.20) у (2.3.2) дає такий розв'язок:

$$\varphi \approx Ae^{i\omega t} h^{5/6}, \quad (2.3.21)$$

Отримані тут розв'язки (2.3.13), (2.3.18), (2.3.21), відповідно:

$$6\omega h^{5/6} > 1 \quad \varphi \approx Ae^{i\omega t} h^{-1/6} |\cos \omega h^{5/6}|^{6/5},$$

$$6\omega h^{5/6} < 1 \quad \varphi \approx Ae^{i\omega t} h^{-1/6} (\omega h^{5/6})^{-12/5},$$

$$6\omega h^{5/6} = 1 \quad \varphi \approx Ae^{i\omega t} h^{5/6},$$

дозволяють провести мультимасштабний аналіз рівняння (2.3.1), тобто для різних масштабів як частоти так і довжини ланцюжка [16,21-24].

2.3.2 WKВ-анзац для випадку $y' = 0$

Припустимо, що в ланцюжку існують умови, при яких $y' = 0$. Тоді, розв'язок рівняння (2.3.4) можна шукати у вигляді коренів квадратного рівняння:

$$y^2 + \frac{\xi}{h}y + \frac{\omega^2}{h^\xi} = 0. \quad (2.3.22)$$

Корені (2.3.22) мають вигляд:

$$y_{12} = -\frac{1}{6h} \left(1 \mp \sqrt{1 - 36\omega^2 h^{5/6}} \right). \quad (2.3.23)$$

Повернувшись у розв'язку (2.3.23) до змінної Φ , отримуємо для неї наступний інтеграл:

$$\Phi = -\int_0^h \frac{1}{6h} \left(1 \mp \sqrt{1 - 36\omega^2 h^{5/6}} \right) dh. \quad (2.3.24)$$

Після заміни змінної $x = 6\omega h^{5/6}$ інтеграл (2.3.24) набуває вигляду:

$$\Phi = -\frac{1}{5} \int_0^x \frac{1 \mp \sqrt{1 - x^2}}{x} dx. \quad (2.3.25)$$

Розв'язок (2.3.25) отримуємо у вигляді [20]:

$$\Phi(0 \leq h \leq h_1) = -\frac{1}{5} \left[\mp \sqrt{1 - x^2} + \ln \left| 1 \pm \sqrt{1 - x^2} \right| \right], \quad (2.3.26)$$

$$\Phi(h \geq h_1) = -\frac{1}{5} \left[\ln x - i \left\{ \sqrt{x^2 - 1} - \arctg \sqrt{x^2 - 1} \right\} \right], \quad (2.3.27)$$

де $h_1 = (6\omega)^{-6/5}$ - тобто така глибина ланцюжка, при якій виконується умова $x = 1$.

Використовуючи верхні знаки в (2.3.26) – розв’язок рівняння (2.3.1) для $0 \leq h \leq h_1$ отримуємо у вигляді:

$$\varphi(0 \leq h \leq h_1) = \left(\frac{2}{1 + \sqrt{1 - x^2}} \right)^{\frac{1}{5}} e^{-i\omega t + \frac{1}{5}(\sqrt{1-x^2}-1)}, \quad (2.3.28)$$

а для $h \geq h_1$ в такому вигляді:

$$\varphi(h \geq h_1) = A(h_1) x^{-\frac{1}{5}} e^{-i\omega t + i \frac{1}{5}(\sqrt{x^2-1} - \arctg \sqrt{x^2-1})}, \quad (2.3.29)$$

$$\text{де } A(h_1) = \exp \left\{ \int_0^{h_1} y dh \right\} = e^{-\frac{1}{5}(1-\ln 2)}.$$

При виконанні умови $x \gg 1$, з розв’язку (2.3.29) можна отримати асимптотичний вираз справедливий, наприклад, для віддалених ділянок ланцюжка:

$$\varphi(h \gg h_1) = A(h_1) x^{-\frac{1}{5}} e^{i(-\omega t + \frac{x}{5} \frac{\pi}{10})}. \quad (2.3.30)$$

Як можна бачити з (2.3.30), асимптотично розв’язок приймає форму хвилі, що біжить (нелінійної, так як $x = 6\omega h^{5/6}$) із згасаючою амплітудою:

$$x^{-\frac{1}{5}} = (6\omega h^{5/6})^{-\frac{1}{5}} \propto h^{-1/6}. \quad (2.3.31)$$

Покладемо фазу нелінійної біжучої хвилі в (2.3.30) сталою:

$$\left(-\omega t + \frac{x}{5} - \frac{\pi}{10}\right) = \text{const}, \quad (2.3.32)$$

тоді $\left(-\omega t + \frac{x}{5}\right) = 0$. Знайдемо з останнього виразу h :

$$h = \left(\frac{5}{6}t\right)^{6/5}. \quad (2.3.33)$$

Візьмемо похідну по часу від виразу (2.3.33):

$$\frac{dh}{dt} = \left(\frac{5}{6}t\right)^{1/5} = \left(h^{5/6}\right)^{1/5} = h^{1/6}. \quad (2.3.34)$$

З (2.3.34) випливає, що фазова швидкість $v_{\text{ph}} = \frac{dh}{dt} = h^{1/6}$, тобто вона слабо, але зростає з глибиною ланцюжка. Відзначимо, що схожий результат для фазової швидкості $v_{\text{ph}} \propto h^{1/6}$ може бути отриманий при розгляді асимптотичних розв'язків дискретних диференційно-різницевих рівнянь у формі функцій Бесселя 1-го роду [16].

Розглянемо можливість отримання «згортки» з асимптотичного розв'язку, яка враховувала б комбінацію хвиль всіх можливих частот:

$$\varphi(h \gg h_1) = A(h_1) \int_0^{\infty} x^{-\frac{1}{5}} e^{i(\pm\omega t + \frac{x}{5} - \frac{\pi}{10})} dx, \quad (2.3.35)$$

тоді маємо [25]:

$$\varphi(h \gg h_1) = \frac{2A(h_1)e^{-i\frac{\pi}{10}(6h^{5/6})^{-1/5}}}{\left[t^2 - \left(\frac{6}{5}\right)^2 h^{5/3}\right]^{2/5}} \Gamma\left(\frac{4}{5}\right) \cos\left(\frac{4}{5} \operatorname{arctg} \frac{t}{-i\frac{6}{5}h^{5/6}}\right). \quad (2.3.36)$$

З (2.3.36) можна показати, що поблизу фазового фронту спостерігається полюс

$\left[t^2 - \left(\frac{6}{5}\right)^2 h^{5/3}\right]^{-4/5}$, який призводить до різкого збільшення амплітуди

імпульсу збудження. Відзначимо, що безпосередньою підстановкою схожого

виразу $\left[t^2 - \left(\frac{6}{5}\right)^2 h^{5/3}\right]^{-1/10}$ - дивись [11,14,16,26], також можна задовольнити

вихідне рівняння (2.3.1).

Наявність вище зазначеного полюса поблизу фазового фронту імпульсу збудження можна трактувати, як початок формування солітону, який в повній мірі проявляється лише при обліку в рівнянні руху похідних більшого порядку, ніж враховано в рівнянні (2.3.1).

2.4 Пошук точних часткових розв'язків рівняння руху імпульсу у герцівських ланцюжках у довгохвильовому наближенні

Починаючи з семінальної роботи Fermi, Pasta, Ulam [27], задачі про нелінійний механізм термалізації у твердих тілах приділяється велика увага багатьох теоретиків та експериментаторів. Зокрема, одним із часткових випадків розвитку цієї задачі можна вважати застосування у ланцюжках

силових центрів моделі герцівського контакту [28,29]. Багато теоретичних та експериментальних робіт присвячені різноманітним сценаріям динаміки збудження у таких моделях [4-6,9,11-15,30,31]. Ми зосередимо увагу на розгляді слабкої неоднорідності (скажімо такої, яка існує у вертикально розташованому ланцюжку, тобто із початковою прекомпресією внаслідок дії сили тяжіння), а також слабких збурень ланцюжків слабо нелінійних (на практиці лінеаризованих) силових центрів, які описуються наступним керуючим рівнянням:

$$m \frac{d^2 x_n}{dt^2} = C(\varepsilon_{n-1}^\delta - \varepsilon_n^\delta) + F_n, \quad (2.4.1)$$

де: x_n - зміщення n -ї сферичної частинки;

$C = \frac{E\sqrt{d}}{3(1-\nu^2)}$ - силова стала; E - модуль пружності Юнга;

ν - коефіцієнт Пуассона;

d та m - діаметр та маса n -ї частинки, відповідно;

ε_n - перекриття сусідніх n та $n+1$ сфер у місці їх контакту, яке визначається наступним чином:

$$\varepsilon_n = d - (x_{n+1} - x_n); \quad (2.4.2)$$

δ - величина, яка характеризує ступінь нелінійності (для герцівських контактів $\delta = 3/2$);

F_n - зовнішня сила, яка діє на частинку n . Для вертикального ланцюжка: $F_n = mg$ (де g - прискорення вільного падіння). Для горизонтального ланцюжка: $F_1 = -F_N = F_0$, $F_{2\dots(N-1)} = 0$. Для ланцюжка, який стиснуто з боків, але який ще й вертикально розташований: $F_1 = F_0 + mg$, $F_{2\dots(N-1)} = mg$, $F_N = -F_0 + mg$.

Рівняння (2.4.1) задовольняється умовою рівноваги на кожному контакті:

$$\varepsilon_n(0) = \left(\frac{F_0 + nmg}{C} \right)^{1/\delta}. \quad (2.4.3)$$

В термінах нової змінної φ_n :

$$\varphi_n(t) = x_n(t) - x_n(0), \quad (2.4.4)$$

$$\text{де } x_n(0) = d(n-1) - \sum_{k=1}^{n-1} \varepsilon_k(0);$$

рівняння (2.4.1) можна переписати у наступному вигляді:

$$m \frac{d^2 \varphi_n}{dt^2} = C(\varepsilon_{n-1}(0) + \varphi_{n-1} - \varphi_n)^\delta - C(\varepsilon_n(0) + \varphi_n - \varphi_{n+1})^\delta + F_n. \quad (2.4.5)$$

В роботі Нестеренко [4], нехтуючи у рівнянні (2.4.5) початковими перекриттями $\varepsilon_n(0) = 0$ та переходячи до континуальної межі $\varphi_n(t) \rightarrow \varphi(t, h)$ (довгохвильове наближення), у лінійному наближенні за степенями градієнту зміщення $\left(-\frac{\partial \varphi}{\partial h} \right)$, було отримане рівняння для якого існує розв'язок наступного вигляду [4]:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = \frac{25v^4}{16C_1} \cos^4 \left(2 \frac{h - vt}{\sqrt{10a}} \right), \quad (2.4.6)$$

де v - швидкість руху солітону уздовж ланцюжку.

Розв'язок (2.4.6) прийнято називати солітоном Нестеренко [4]. Характерними властивостями солітонного розв'язку (2.4.6) є: степенева залежність

швидкості розповсюдження солітону від його амплітуди, а також незалежність дисперсії солітона від його швидкості. Зазначимо, що на відміну від (2.4.6), відомий розв'язок солітонного типу рівняння КдВ показує, що із зростанням амплітуди дисперсія зменшується.

Зазначимо, що у вище наведених рівняннях відсутні доданки які враховують дисипацію, яка, як відомо, відіграє важливу роль у поведінці гранульованих матеріалів [14,31-34]. Усі вищезазначені фактори огрублення (неврахування початкової прекомпресії, довгохвильове наближення, часткова лінеаризація, відсутність дисипації) у рівнянні Нестеренко діють одночасно та у наслідок їх перекриття (інтерференції) не дозволяють строго кажучи відслідкувати окремо внесок кожного з зазначених механізмів у впливі на протікання явища.

Позбавляючись у рівнянні (2.4.5) від нелінійності, але при цьому враховуючи слабку неоднорідність (аналогічно таму, як це було зроблено у випадку вертикального ланцюжка) отримуємо:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial \tau^2} = \frac{\partial}{\partial h} \left(h^\xi \frac{\partial \varphi}{\partial h} \right), \quad (2.4.7)$$

де $\xi = 1 - 1/\delta$ (у випадку $\delta = 3/2$ отримуємо: $\xi = 1/3$).

Загальний розв'язок рівняння (2.4.7) формально може бути записаний для довільних початкових та граничних умов за допомогою функції Гріна в класі циліндричних функцій [19]. Зупинимось тут на часткових розв'язках, які задовольняють спеціальним умовам (яким може бути надано конкретний фізичний зміст).

Для розв'язку диференціального рівняння (2.4.7) можна використати підхід (метод наближення) Вентцеля-Крамерса-Брюллоєна (так званий, WKB-анзац). Підстановка до рівняння (2.4.7) пробного розв'язку у вигляді плоскої хвилі (із залежною від глибини як амплітудою так і фазою) у вигляді:

$$\varphi(\tau, h) = A(h)e^{i(\omega\tau + kh^\xi)}, \quad (2.4.8)$$

призводить до наступного рівняння для амплітуди $A(h)$ хвилі (2.4.8):

$$\frac{\partial^2 A}{\partial h^2} + \frac{1}{3h} \cdot \frac{\partial A}{\partial h} + \left[\frac{\omega^2}{h^{1/3}} - \left(\frac{C}{A} \right)^4 h^{-2/3} \right] A = 0. \quad (2.4.9)$$

Як можна бачити з (2.4.9), це рівняння є нелінійним (з нелінійним доданком $\sim A^{-3}$), отже воно не має загального розв'язку, але може мати окремі часткові розв'язки.

Зокрема, підстановка до рівняння (2.4.9) пробного виразу для амплітуди $A \sim h^{-1/12}$ (який ґрунтується на чисельних розрахунках [9,30]), дозволяє позбутися нелінійності. Отримане при цьому рівняння має форму рівняння Бесселя, подальша підстановка до якого амплітуди $A \sim h^{-1/12}$ дозволяє встановити дисперсійне співвідношення, якому повинне задовольняти значення частоти ω . Воно свідчить про частотну трансформацію енергії коливань, яка відбувається внаслідок гравітаційно індукованої неоднорідності із глибиною ланцюжку.

2.4.1 Часткові точні розв'язки у класі пробних функцій

Застосуємо метод змінних які розділяються. Розділяючи у рівнянні (2.4.7) змінні $\varphi(\tau, h) = T(\tau) \cdot X(h)$:

$$\frac{1}{T} \cdot \frac{\partial^2 T}{\partial \tau^2} = const = \frac{1}{X} \cdot \frac{\partial}{\partial h} \left(h^\xi \frac{\partial X}{\partial h} \right), \quad (2.4.10)$$

та покладаючи $const = -\omega^2$ (де $\omega \sim \frac{1}{\tau}$ - масштаб релаксації), отримуємо систему рівнянь, що складається з рівнянь гармонічного осцилятора (за часом) та Бесселя (в координатному представленні), відповідно:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial \tau^2} + \omega^2 T = 0, \quad \frac{\partial^2 X}{\partial h^2} + \frac{\xi}{h} \cdot \frac{\partial X}{\partial h} + \frac{\omega^2}{a^2 h^\xi} X = 0. \quad (2.4.11)$$

Періодичним граничним умовам відповідає точний розв'язок (2.4.11), який виражається через циліндричну функцію [9,30]:

$$\varphi(\tau, h, \omega) = A e^{i\omega\tau} \cdot h^{1/3} H_{2/5}^{(1)}\left(\frac{6\omega}{5} h^{5/6}\right), \quad (2.4.12)$$

де: $H_{2/5}^{(1)}\left(\frac{6\omega}{5} h^{5/6}\right)$ - функція Ганкеля 1-го роду;

ω - частота;

A - константа.

Характерними властивостями розв'язку (2.4.12) є: періодичність у часі, з амплітудою яка спадає у просторі за законом $\sim h^{-1/12}$.

Одним з можливих типів граничних умов для рівняння (2.4.7), може бути ударне збудження ланцюжка, яке характеризується відносно малим часом дії, а також наявністю великої кількості мод (взагалі кажучи, розподілених за деяким законом). Покладемо, наприклад, що розв'язок (2.4.12) відповідає деякому каналу для поданого на вхід ланцюжка сигналу з виділеною частотою ω . Тоді існує розв'язок рівняння (2.4.7) для будь якого заданого збудження із відомим спектром $A(\omega)$:

$$\varphi(\tau, h) = \int_0^\infty A e^{i\omega\tau} \cdot h^{1/3} H_{2/5}^{(1)}\left(\frac{6\omega}{5} h^{5/6}\right) d\omega. \quad (2.4.13)$$

Коли $A = const$, з (1.13) отримуємо:

$$\begin{aligned} \varphi(\tau, h) &= \frac{Ah^{1/3}\tilde{A}}{\sqrt{\tau^2 - \lambda^2}} \cdot \left\{ \frac{\left(\tau - \sqrt{\tau^2 - \lambda^2}\right)^{2/5}}{\lambda^{2/5}} - \frac{\lambda^{2/5}}{\left(\tau - \sqrt{\tau^2 - \lambda^2}\right)^{2/5}} \right\} = \\ &= A \cdot \tilde{A} \cdot \frac{\left(\tau + \sqrt{\tau^2 - \lambda^2}\right)^{2/5} - \left(\tau - \sqrt{\tau^2 - \lambda^2}\right)^{2/5}}{\sqrt{\tau^2 - \lambda^2}}, \end{aligned} \quad (2.4.14)$$

$$\text{де: } \lambda = \frac{6}{5}h^{5/6};$$

$$\tilde{A} = -2\sin\frac{\pi}{10} \cdot \left(\frac{5}{6}\right)^{2/5} \approx -0.5746.$$

Із (2.4.14) можна бачити, що розв'язок містить доданки із особливістю для $\tau = \frac{6}{5}h^{5/6}$, поблизу якої здається $\varphi(\tau, h)$ може почати різко зростати, але аналіз цієї межі показує що це не так, і величина (2.4.14) прямує до певного значення [16]. Зазначимо, що результат (2.4.14) справедливий при виконанні наступної умови (вона накладається на існування інтегралу у наданій в (2.4.14) формі):

$$\operatorname{Re}(\tau) > \operatorname{Im}(i\lambda) \quad \rightarrow \quad \frac{\tau}{\lambda} > 1, \quad (2.4.15)$$

тобто на часах (великих) які задовольняють співвідношенню $\tau > \frac{6}{5}h^{5/6}$.

Рівняння (2.4.7) має формально точний розв'язок із розривним характером [11], який може бути отриманий наступним чином. Переходячи в (2.4.7) до нової змінної $\mu(\tau, h) = (\tau + c_3)^2 + \beta h^\alpha$, перепишемо його у такому вигляді:

$$\mu \cdot \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \mu^2} + \frac{11}{10} \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial \mu} = 0. \quad (2.4.16)$$

Розв'язуючи (2.4.16) та повертаючись до початкових змінних τ та h для рівняння (2.4.7) отримуємо розв'язок у наступній формі [11]:

$$\varphi(\tau, h) = c_1 + c_2 \left| (\tau + c_3)^2 - \left(\frac{2}{\eta} \right)^2 h^\eta \right|^{-\frac{\xi}{2\eta}}, \quad (2.4.17)$$

де: c_1, c_2, c_3 - константи;

$\eta = 1 + \frac{1}{\delta}$ - параметр, який залежить від типу нелінійності, тобто

величини δ в початковому нелінійному рівнянні (2.4.1). Так для герцевського

($\delta = 3/2$) ланцюжка маємо: $\eta = 5/3$ та $\frac{\xi}{2\eta} = \frac{1}{10}$.

Характерними властивостями розв'язку (2.4.17) є: наявність розриву в області значень параметрів визначаючих фронт ударної хвилі, швидкість розповсюдження якої пропорційна $\sim h^{1/6}$. Така хвиля неоднорідно (спочатку швидко, а далі все повільніше) розповсюджується у глиб ланцюжку. В свою

чергу на великих часах, тобто для $(\tau + c_3)^2 \gg \left(\frac{2}{\eta} \right)^2 h^\eta$ - розв'язок обирає риси

сходинки (кінку) з плавно зростаючою амплітудою при наближенні до

фронту. На малих часах $(\tau + c_3)^2 \sim \left(\frac{2}{\eta} \right)^2 h^\eta$ - розв'язок (2.4.17) має

асиметричний профіль, і таким чином нагадує резонанс Фано.

Можливість існування розривних розв'язків (хвилі-стиснення та розрядження) для гранульованих ланцюжків була встановлена у роботах [15], де чисельно досліджувалася трансформація спочатку симетричного (за законом синуса) збудження герцівського ланцюжку в континуальному наближенні.

Константи c_1 , c_2 у (2.4.17) визначаються з початкових/граничних умов $\varphi(0,0)=0$ та $\frac{\partial\varphi(0,0)}{\partial\tau}=\dot{\varphi}_0$ (так зване, динамічне збудження) наступним чином:

$$c_1 = \frac{\eta}{\xi} \dot{\varphi}_0 c_3^2, \quad c_2 = -\frac{\eta}{\xi} \dot{\varphi}_0 c_3^{2+\frac{\xi}{\eta}}, \quad (2.4.18)$$

де c_3 - довільна константа, яка впроваджена для зсуву особливості розв'язку (2.4.17) в область нефізичних значень.

Можна показати, що лінійна комбінація (інтегрування за всіма частотами) розв'язків (2.4.12) в класі циліндричних функцій, із ваговим множником $A \sim \omega^{-2/5}$, дає розв'язок з точно таким ж полюсним доданком як у (2.4.17), а саме:

$$\varphi = \tilde{A} h^{2/3} F\left(\frac{1}{2}, \frac{2}{5}; \frac{7}{5}; \frac{-\lambda^2}{\tau^2 - \lambda^2}\right) \cdot |\tau^2 - \lambda^2|^{-\frac{1}{2}} + \tilde{B} \cdot |\tau^2 - \lambda^2|^{-\frac{1}{10}}, \quad (2.4.19)$$

$$\text{де: } \tilde{A} = -\left(\frac{3}{5}\right)^{2/5} \cdot \frac{\text{ctg} \frac{2\pi}{5}}{\Gamma\left(\frac{7}{5}\right)} = -0.2985;$$

$$\tilde{B} = \left(\frac{5}{3}\right)^{2/5} \cdot \frac{\Gamma\left(\frac{1}{5}\right)}{\Gamma\left(\frac{3}{5}\right)} \text{ctg} \frac{2\pi}{5} = 1.2287.$$

Зазначимо, що результат (2.4.19) також як і (2.4.14) справедливий за виконання умови (2.4.15), тобто на великих часах ($\tau > \frac{6}{5} h^{5/6}$). Отож, аргумент

гіпергеометричної функції у (2.4.19) відповідає нерівності $z = \frac{-\lambda^2}{\tau^2 - \lambda^2} \leq 0$, а

сама функція приймає значення з наступного діапазону

$0 \leq F(1/2, 2/5; 7/5; z) \leq 1$. Доречи на великих часах, для яких $z\left(\frac{\tau}{\lambda} \rightarrow \infty\right) = 0$,

асимптотично отримуємо $F(1/2, 2/5; 7/5; 0) = 1$, а поблизу полюса вона прямує до нуля: $F(1/2, 2/5; 7/5; -\infty) = 0$. У підсумку аналізу розв'язку (2.4.19) можна зробити висновок про переваження другого доданку (із степенем « $-1/10$ ») над першим на початку ланцюжку $h \sim 0$, а також поблизу полюса, однак на великих часах та далеко від початку ланцюжка перший доданок (із степенем « $-1/2$ ») стає суттєвим та підлягає урахуванню.

Отриманий результат в (2.4.19) базується на наявності у збурення великої кількості мод (інакше неможна було б перейти до інтегрування), що характерно для ударного типу збудження. В наслідок чого утворюється велика кількість каналів пропускання, що збільшує імовірність прозорості середовищ для такого типу збуджень.

Таким чином, можна припустити, що розв'язок типу (2.4.17) відноситься до хвиль ударного типу, які можуть мати властивості частинки (наприклад, бути локалізованими).

В решті, для лінійного рівняння (2.4.7), показано існування розв'язків як у вигляді хвилі (2.4.12) так і у вигляді частинки (2.4.17) та (2.4.19). Відзначимо, що зазначені властивості розв'язків можуть виявитися корисними для створення «фотонних» елементів схемотехніки.

2.4.2 Багатомодова динаміка імпульсу збудження у силових ланцюжках у довгохвильовому наближенні

У загальному випадку кроссовер звук (хвиля) – солітон (частинка), відбувається під впливом багатьох факторів. Зокрема, важливу роль відіграють початкові та граничні умови, матеріальні константи, неоднорідність, невпорядкованість, нелінійність, дисипація. Спробуємо визначити критерій зміни режимів за допомогою швидкості (v) солітона.

Критерієм, який визначає початок суттєвого впливу нелінійності, будемо вважати перехід до стану руху солітону із швидкістю (v) більшою, за

максимальну швидкість звуку $c_0 = a\varepsilon_0^{1/4} \sqrt{\frac{3}{2}\gamma}$, яка відповідає низькочастотним модам коливань частинок у ланцюжку ($\omega \rightarrow 0$):

$$v > c_0. \quad (2.4.20)$$

Формально, вираз для швидкості солітону $v = a\varepsilon_{\max}^{1/4} \sqrt{\frac{5}{6}\gamma}$ задовольняє збудженням із довільною амплітудою. Звернемо увагу, що в (2.4.20) враховані два аспекти (які наразі дозволяють сформулювати критерій зміни режимів). А саме: з одного боку – саме завдяки нелінійності солітон починає рух із швидкістю більше, за максимальну швидкість звуку c_0 ; з іншого боку – у лінійній, звуковій границі (коли впливом нелінійності можна знехтувати), як можна показати солітон втрачає стійкість.

Підставляючи у (2.4.20), відповідні значення швидкостей $v = a\varepsilon_{\max}^{1/4} \sqrt{\frac{5}{6}\gamma}$ та $c_0 = a\varepsilon_0^{1/4} \sqrt{\frac{3}{2}\gamma}$, сформульований вище критерій зміни режимів можна записати у термінах взаємного перекриття частинок:

$$\varepsilon_{\max} > \frac{81}{25} \varepsilon_0 = 3.24\varepsilon_0. \quad (2.4.21)$$

Із (2.4.21) витікає, що у випадку коли прекомпресія зростає внаслідок неоднорідності, солітонне збудження починає «розсипатися» (формується так званий солітонний потяг [9]) перетворюючись в решті на хвилю. Аналогічно, можна уявити собі і зворотній процес, коли «хвиля» локалізується і перетворюється на «частинку».

Якщо скористатися моделлю Герця $F = C\varepsilon^{3/2}$, критерій (2.4.21) для перекриттів можна записати наступним чином (тобто в термінах герцівських сил):

$$F_{\max} > \left(\frac{9}{5}\right)^3 F_0 = 5.832 F_0. \quad (2.4.22)$$

Порівнюючи відносний параметр збудження $\left(\frac{F_{\max}}{F_0}\right)$, розрахований за експериментальними даними з роботи [5]) із критерієм з (2.4.22), бачимо, що незначна частина солітоноподібних збуджень не задовольняє заданому критерію. Зокрема, для таких збуджень $\frac{F_{\max}}{F_0} < 5.832$. Тим не менш, вони все одно розглядаються авторами як солітони типу Нестеренко [5]. Формально, зазначений клас імпульсів збуджень слід було б віднести до якогось проміжного типу збуджень (який розділяє звук та солітони, типу Нестеренко моди), скажімо, до солітону типу КдВ.

Визначений вище критерій, припускає також вираз через максимальну швидкість $\dot{\varphi}_{\max}$ зміщення частинок у ланцюжку. Враховуючи, що $\dot{\varphi}_{\max} = \varepsilon_{\max} \frac{v}{a}$, та співвідношення (2.4.20), отримуємо:

$$\dot{\varphi}_{\max} > \varepsilon_{\max} \frac{c_0}{a},$$

маніпулюючи (2.4.22) та матеріальними співвідношеннями, отримуємо наступне співвідношення:

$$\dot{\varphi}_{\max} > \frac{81}{25} \sqrt{\frac{3}{2}} \gamma \cdot \varepsilon_0^{5/4} = 3.968 \sqrt{\gamma} \cdot \varepsilon_0^{5/4}. \quad (2.4.23)$$

Вираз (2.4.23) вказує – на співвідношення між швидкостями зміщення частинок у солітоні, відносно звуковий хвилі.

На підставі вищесказаного можна отримати оцінку для швидкості збудження для отримання солітону типу Нестеренко. Скориставшись

отриманим у [17] виразом $\dot{\phi}_{max} = 0.5886v_s$ (де v_s - швидкість «стрікера», тобто збуджуючої частинки, маса якого вибирається ідентичною до частинок ланцюжка), та підставляючи його у співвідношення (2.4.23), отримуємо:

$$v_s > \frac{1}{0.5886} \cdot \frac{81}{25} \sqrt{\frac{3}{2}} \gamma \cdot \varepsilon_0^{5/4} = 6.7417 \sqrt{\gamma} \cdot \varepsilon_0^{5/4}. \quad (2.4.24)$$

Критерій (2.4.24), безпосередньо пов'язує параметр (швидкість) збудження (v_s) як із матеріальними константами (γ), так і з граничними (перекриття) умовами (ε_0). Не безпосередньо, але фактично, критерій (2.4.24) пов'язаний також із нелінійним характером системи, оскільки і визначає умову, коли роль нелінійності стає суттєвою.

З УЩІЛЬНЕННЯ (КОМПАКТИЗАЦІЯ) ВПАКУВАННЯ У БІ-КОМПОНЕНТНІЙ МІКРО-МЕХАНІЧНІЙ (ГРАНУЛЬОВАНИЙ) СУМІШІ

3.1 Загальні відомості про компактизацію та її роль у технологіях

Використання матеріалів, які знаходяться у гранульованих (мікро-механічних) станах є притаманним багатьом галузям виробництва та технологій. Наприклад, саме гранульовані матеріали складають переважний відсоток продукції, яка виробляється, споживається, чи використовується в окремих стадіях будівельної, легкої та харчової, гірничо-видобуваючої, хіміко-фармацевтичної, металургійної та деяких інших видах промисловості. Різноманітність та різноплановість застосувань таких матеріалів потребує вміння надійно параметризувати їхні макроскопічні властивості із урахуванням зовнішніх впливів, які виникають при маніпулюванні ними. Суттєву роль відіграє також зв'язок між макроскопічними властивостями гранульованого матеріалу (наприклад, впорядкуванням у вигляді кристалізації) та макроскопічними його параметрами, які суто визначають його здатність підтримувати штатні режими та забезпечувати необхідне маніпулювання ними (скажімо, затримувати, чи пропускати випромінювання різної природи, утримувати навантаження завдяки арочному ефекту, чи уникати агрегації при перемішуванні). Один із прикладів, в якому суттєво відбувається необхідність існування алгоритмів спрямованого маніпулювання макроскопічними параметрами за допомогою зовнішнього впливу є конструкції в яких використовуються захисні модулі, що містять гранульовану речовину. Такі «гранульовані екрани» потенційно можуть достатньо надійно виконувати свої штатні функції і при цьому володіють очевидним, у порівнянні із монолітними системами перевагами. Так, зокрема, вони:

- a) уникають радіаційного охрупчування;
- b) прості в маніпулюванні;
- c) припускають ущільнення та розпушення;
- d) легкі у заміні та транспортуванні;
- e) економічні (у сенсі отримання та експлуатації).

Взагалі, задачі про суміші займають помітне місце в інженерних моделях прогнозування стану навколишнього середовища. Так, наприклад робота [35], присвячена прогнозуванню переносу осадів та морфодинаміки річок (що є складним завданням у річках із гравійним руслом, де осадкові суміші мають різний розмір частинок). Автори показують що проблема бінарної упаковки має важливе значення для коректного розрахунку пористості гравійного шару. На практиці, вона може поєднуватися з розрахунками динамічних моделей транспортування осадів для прогнозування морфодинаміки в річках із гравійним руслом.

Теоретичні моделі гранульованих матеріалів, які дозволяли б описувати та прогнозувати їхні властивості розроблені досить ретельно для випадків конкретних умов їх створення та використання, зокрема розмірності, щільності впакування, характеру зовнішнього впливу. Нажаль, досі не існує універсальної теорії гранульованих матеріалів, яка враховує всі властивості що спостерігаються. Але в багатьох конкретних випадках вдається запропонувати більш менш адекватні моделі опису їх спостерігаємих властивостей.

Матеріали, які застосовуються, наприклад, в атомних реакторах, відчують вплив інтенсивних потоків іонізуючого випромінювання, головним чином, швидких нейтронів, що є продуктами поділу ядерного палива. Нейтрони, взаємодіючи з речовиною, передають свою енергію атомам за допомогою пружних зіткнень, а також служать джерелом утворення швидких заряджених частинок (електронів, протонів, α -часток). Кінцевий підсумок цих процесів зводиться до руйнування впорядкованого розташування атомів у кристалічній ґратці металу й утворенню сторонніх

атомів, наприклад, гелію й водню. Сукупність внесених опроміненням змін структури матеріалу прийнято називати радіаційним ушкодженням [36].

Характерним явищем, яке може супроводжувати радіаційне ушкодження матеріалу є зсув атомів з вузлів кристалічної решітки й утворення точкових дефектів - вакансій і міжвузельних атомів. Типовою рисою опромінення швидкими нейтронами є виникнення в опромінюваному матеріалі, каскадів атомних зіткнень, що призводять до утворення мікроскопічних областей структурного ушкодження з високою концентрацією точкових дефектів. Під впливом температури початковий стан ушкодження змінюється в результаті термічно активованої міграції точкових дефектів, що супроводжується їхньою взаємною рекомбінацією, анігіляцією на стоках, утворенням або дисоціацією скупчень.

В радіаційній галузі відомо, що крихке руйнування металів на практиці має місце за умов досягнення критерію міцності 500-600 МПа. З'ясовано [36], що опромінений метал містить концентратори напружень у вигляді крихких тріщин причиною яких може виступати також і пластична деформація.

Зрозуміло, що такого роду процеси протікають за абсолютно іншими сценаріями у гранульованій речовині, будь-якого ступеню впакування. Така речовина, так би мовити, вже є повністю охрупченою. Тому використання мікромеханічних систем в якості захисних модулів, які знаходяться у безпосередньому контакті із радіаційним опроміненням виглядає привабливою інноваційною ідеєю [37]. Безумовно, що найбільш ефективним буде такий матеріал в якому разом із розупорядкуванням вдається відносно простим способом досягнути і максимального ущільнення (компактизації).

В пропонуємій роботі, ми зосередимося на розгляді питання про засоби досягнення максимального ущільнення у бі-компонентній гранульованій системі, як за абсолютною величиною, так і за швидкістю досягнення такого стану.

Дослідження фізичних властивостей простих бікомпонентних сумішей за допомогою методів статистичної механіки є однією із традиційно актуальних і водночас складних задач статистичної фізики розчинів. Загально відомим теоретичним підходом у цій області, який має статистичне обґрунтування, є підхід Кірквуда–Баффа (КБ) [38], який дозволяє записати основні термодинамічні величини в термінах кореляційних інтегралів.

Як відомо, гранульовані суміші (наприклад, двох-компонентні) показують різні за ступенем впакування стани в залежності від асиметрії (співвідношення мольних фракцій та розмірів їх компонент). Хоча граничну фракцію впакування можна параметризувати за допомогою лише геометричних побудов (Вороного-Делоне), динаміка гранул у конгломераціях, які знаходяться під впливом зовнішніх невеликих струсів, залишається достатньо складним для опису, мульти-параметричним процесом. Метод геометричних побудов Вороного завдяки своїй, суто геометричній природі, дозволяє описувати структуру досить широкого класу систем. Для їх побудови для даного набору точок необхідно навколо кожної точки системи виділити простір, в якому знаходяться усі точки, які є найближчими до неї, з трансляцією цієї умови на решту точок системи. Таким чином кожна точка (координата якої визначається положенням центру мас частинки-гранули) асоціюється із власним характерним об'ємом (або площею). Більше того, об'єми фігур є адитивними і повністю покривають об'єм системи. Це є важливою рисою саме для застосування підходу у випадку гранульованих суміші. Важливо зауважити, що характер взаємодії проміж частинками безпосередньо не впливає на процедуру розбиття [39]. Експериментальні дослідження гранульованих сумішей дозволяють отримати інформацію про розподіл центрів частинок у певний момент часу і, таким чином, параметризувати структуру за допомогою методу Вороного. Дослідження структури за допомогою геометричних побудов Вороного базується на аналітичному аналізі розподілів площ усіх частинок системи. Очевидно, такий підхід дозволяє отримати інформацію не лише про порядок

(симетрію), чи розупорядкування системи, але й про розподіл вільного об'єму та його зміни, які відбуваються завдяки зовнішнім збуренням. Вільний об'єм виступає головним параметром, який контролює поведінку гранульованих сумішей. Експериментально спостерігалось, що характерний час ущільнення може розходитися за умов наближення співвідношення розмірів частинок-компонентів до деякого критичного значення. При цьому рухливість гранул в упаковці є найнижчою у околі порога просочення (коли дрібні частинки ще можуть проходити через порожнечі, залишені проміж великими). Також з'явилися повідомлення про пришвидшення динаміки ущільнення, при достатньо великих значеннях відношення розмірів компонентів [40].

Питання про те, яка максимальна кількість твердих однакових сферичних частинок (гранул) може заповнити завданий об'єм (завданої форми), – належить до однієї із традиційних математичних проблем [41–45]. Характерним параметром, який характеризує ступінь впакування η , виступає, як правило, об'єм усіх частинок, поділений на спостерігаємий об'єм. Прийнято вважати, що його максимальне значення відповідає гранецентричній симетрії (*fcc*), $\eta_{fcc} = \pi / \sqrt{18} = 0,74$. При цьому, характерними масштабами впакування додатково виступають ще й так зване розупорядковане (заморожене) впакування (*rcp*), якому відповідає $\eta_{rcp} = 0,64$, а також, розупорядковане пухке впакування (*rlp*), що характеризує механічно стійку конфігурацію у гравітаційному полі Землі $\eta_{rlp} = 0,60$ [46–48]. В умовах зменшеної гравітації (мікро-гравітації), за деякими даними [42,48,49] η може знижуватися до $\eta_{rlp} = 0,55$. Треба зауважити, що зв'язок між η та характером (симетрією) розташування гранул у впакованій структурі ще й досі залишається недостатньо вивченим [42,48].

Коли ступінь впакування перевищує η_{rcp} спостерігаються ефекти впорядкування (симетризації) системи. Зокрема, в [50–52] повідомляється, про спостереження (при додержанні певних умов) явища кристалізації у

впакуванні твердих сфер. У двохвимірних системах твердих дисків кристалізацію спостерігали на шляху ущільнення, тобто за умов м'якого струшування системи [50]. Кристалізація в низці робіт визнається фактично рушієм для процесів гранульованого ущільнення, а закони зростання кристалічної фази цілком задовільно описують закономірності ущільнення, які спостерігаються. Тривимірна задача є звичайно більш складною і водночас більш наближеною до практичних застосувань. В окремих роботах припускається сценарій, в якому фігурують тетраедричні структури в якості ядер росту щільних областей [52]. Також слід згадати, що, кристалізація може бути отримана за допомогою занурення системи до зовнішнього поля вібро-прискорювань [53,54], або за допомогою збурень типу циклічного зсуву [55].

Зважаючи на дані, що свідчать про те що гранульовані суміші впаковуються помітно щільніше за монодисперсні (які складаються з однакових, у найпростішому випадку – сферичних гранул) питання про залежність параметрів таких процесів від складу, а також від розміру частинок постає вельми актуальним. На цьому шляху ведуться, як безпосередні фізичні [56], так і чисельні [57-59] дослідження. Так, у [60] чисельно вивчається гранульована суміш що складається із зерен різних розмірів. Автори дійшли до висновку про те, що співвідношення розмірів та молярних концентрацій компонентів суміші є основними параметрами, що визначають формування поточної та граничної (максимально досяжної) фракцій впакування. Більше того, зважаючи на те, що вібрація груп частинок, є властивістю, надійно доступною до параметризації лише у чисельних моделюваннях, вона виступає фактором, який фактично перешкоджає спостереженню змін параметрів суміші. Інколи (див. [61]) такого роду складнощі не є предметом обговорення авторів публікацій і це фактично залишає нез'ясованим роль вищезгаданого фактору.

Як запропоновано в роботі [62], можна розглядати два граничні випадки для бінарних сумішей, виготовлених з маленьких та великих кульок.

У першому випадку частка великих (за розмірами) частинок висока, так що вони утворюють систему, де менші частинки займають відповідні порожнечі, залишені великими. Коли співвідношення розмірів частинок достатньо велике, менші частинки можуть просочуватися скрізь порожнечі, навколо великих. Навпаки, коли частка малих частинок збільшується, великі частинки опиняються ізольованими в оточенні малих. У першому випадку систему можна умовно кваліфікувати як “гравій”, тоді, як у другому, як “пудинг”. Зрозуміло, що обидва крайні випадки призводять до різних значень впакування. Однак теоретичний опис таких граничних випадків зазвичай проводиться відокремлено один від одного. Єдиного підходу, який би містив обидва вищезазначені граничні випадки досі не існувало. Саме розбудові такого підходу і буде присвячена наша робота. На цьому шляху, ми пропонуємо використовувати співвідношення статистичної фізики, незважаючи на природно дисипативний характер досліджуваних систем. Практично всі вони володіють низкою квазістаціонарних станів в яких їх можна розглядати такими, що приблизно задовольняють критеріям застосування апарату статистичної механіки для визначення їх макроскопічних властивостей [33,34].

3.2 Застосування формули Кірквуда-Баффа та рівняння стану Карнахана-Старлінга для опису властивостей бікомпонентних гранульованих сумішей

Класична формула Кірквуда-Баффа для бі-компонентної суміші має вигляд [63]:

$$\beta_T^{(12)} = \frac{1}{k_B T} \cdot \frac{1 + n_1 G_{11} + n_2 G_{22} + n_1 n_2 (G_{11} G_{22} - G_{12}^2)}{n_1 + n_2 + n_1 n_2 (G_{11} + G_{22} - 2G_{12})}, \quad (3.1)$$

де $\beta_T^{(12)}$ - ізотермічна стисливість суміші, компоненти якої нумеруються як 1 і 2;

$$n_1 = \frac{N_1}{V} \quad \text{та} \quad n_2 = \frac{N_2}{V} \quad - \quad \text{парціальні щільності кількості частинок,}$$

відповідно;

G_{11} , G_{22} та G_{12} – так звані кореляційні інтеграли;

$k_B T$ - масштаб енергії.

Кореляційні інтеграли $G_{\alpha\beta}$ пов'язані із парціальними структурними факторами $S_{\alpha\beta}(0)$ наступним співвідношенням:

$$S_{\alpha\beta}(0) = x_\alpha \delta_{\alpha\beta} + x_\alpha x_\beta n_{12} G_{\alpha\beta}, \quad (3.2)$$

де x_α , x_β – мольні частки компонент суміші;

$\delta_{\alpha\beta}$ - дельта символ Кронекера;

$$n_{12} = \frac{N}{V} = \frac{N_1 + N_2}{V} = n_1 + n_2 \quad - \quad \text{щільність кількості частинок для суміші.}$$

Користуючись формулою (3.2) легко отримати:

$$S_{11}(0) = (1-x) + (1-x)^2 n_{12} G_{11}, \quad (3.3)$$

$$S_{22}(0) = x + x^2 n_{12} G_{22}, \quad (3.4)$$

$$S_{12}(0) = x(1-x) n_{12} G_{12}, \quad (3.5)$$

де x – мольна частка 2-ї компоненти суміші.

Підставляючи співвідношення (3.3)-(3.5) до формули Кірквуда–Баффа (3.1), знаходимо зв'язок проміж ізотермічною стисливістю бі-компонентної суміші та парціальними структурними факторами у наступному вигляді:

$$\beta_T^{(12)} = \frac{1}{n_{12}k_B T} \cdot \frac{S_{11}(0)S_{22}(0) - S_{12}^2(0)}{x^2 S_{11}(0) - 2x(1-x)S_{12}(0) + (1-x)^2 S_{22}(0)}. \quad (3.6)$$

Зважаючи на те що структурний фактор монодисперсної системи визначається як:

$$S(0) = 1 + nG = nk_B T \beta_T, \quad (3.7)$$

та враховуючи (3.3) та (3.4), знаходимо, вирази для парціальних структурних факторів монодисперсних фаз $S_{11}(0)$ та $S_{22}(0)$ із парціальними ізотермічними стисливістями $\beta_T^{(1)}$ та $\beta_T^{(2)}$:

$$S_{11}(0) = (1-x) \cdot n_1 k_B T \beta_T^{(1)}, \quad (3.8)$$

$$S_{22}(0) = x \cdot n_2 k_B T \beta_T^{(2)}. \quad (3.9)$$

Парціальні ізотермічні стисливості $\beta_T^{(1)}$ та $\beta_T^{(2)}$ можуть бути визначені, із використанням модельних рівнянь стану. Наприклад, користуючись рівнянням стану Карнахана-Старлінга може бути знайдений наступний вираз для стисливості [64]:

$$\beta_T^{(i)} = \frac{1}{n_i k_B T} \cdot \frac{(1-\eta_i)^4}{1+4\eta_i+4\eta_i^2-4\eta_i^3+\eta_i^4}, \quad i=1;2, \quad (3.10)$$

де $\eta_i = \frac{1}{6} \pi \sigma_i^3 n_i$ - парціальний параметр, який характеризує ступінь компактизації i -ї компоненти суміші.

Використовуючи дані про ізотермічну стисливість суміші $\beta_T^{(12)}$, отримані із альтернативних джерел, наприклад, з експерименту, або шляхом

чисельного моделювання, розв'язуючи (6) відносно структурного фактора $S_{12}(0)$ отримуємо:

$$S_{12}(0) = x(1-x)f_{12} \pm \sqrt{x^2(1-x)^2 f_{12}^2 + S_{11}S_{22} - f_{12} \{x^2 S_{11} + (1-x)^2 S_{22}\}}, \quad (3.11)$$

де $f_{12} = n_{12}k_B T \beta_T^{(12)}$ – величина, яка у свою чергу, може бути визначена за допомогою рівняння стану бінарної суміші сферичних частинок [65], за формулою:

$$\beta_T^{(12)} = \frac{1}{n_{12}k_B T} \cdot \frac{(1-\eta)^4}{1 + a\eta + b\eta^2 + c\eta^3 + d\eta^4}, \quad (3.12)$$

де a, b, c, d – залежать (відомим чином) від x (або $f = \eta_2/\eta$), та від $\alpha = \sigma_1/\sigma_2$ (де σ_1 та σ_2 – діаметри 1-ї та 2-ї компонент суміші, відповідно).

Наведемо також корисні співвідношення:

$$f = \frac{x}{\alpha^3 - (\alpha^3 - 1) \cdot x}, \quad x = \frac{\alpha^3 \cdot f}{1 + (\alpha^3 - 1) \cdot f}. \quad (3.13)$$

В роботі [40] отримані експериментальні данні для компактизації бінарної суміші сферичних частинок із різною ступінню розбіжності у розмірах $\alpha = 2 \div 35$. Параметризація отриманих даних проводиться фактично у двох характерних границях (станах) суміші в одному з яких переважає вміст більших за розмірами частинок (гравій), а в другому – менших за розмірами (пудинг). В роботі [66] робиться спроба опису отриманих експериментальних даних у всіх проміжних станах із використанням вагових функцій які відіграють роль підгоночних параметрів і, строго кажучи, спрямованих фактично до тих самих граничних станів. Таким чином, незважаючи на попередні результати, теоретичний опис макроскопічних

властивостей (зокрема компактизації) бінарної суміші в рамках єдиної теорії досі залишається актуальним завданням.

В пропонуємій нами роботі розвинуто саме єдиний підхід до опису компактизації суміші із використанням елементів статистичної теорії сумішей та модельних рівнянь стану. Отримані результати порівнюються із даними безпосередніх експериментальних вимірювань виконаних в [40].

А саме, із урахуванням формул (3.3)-(3.4), (3.8)-(3.10), та (3.12), знайдемо спочатку $S_{12}(0)$ (формула (3.11)). На Рис. 3.1 наведені результати відповідних чисельних розрахунків величини $S_{12}(0)$ проведених із використанням експериментальних даних отриманих в [40].

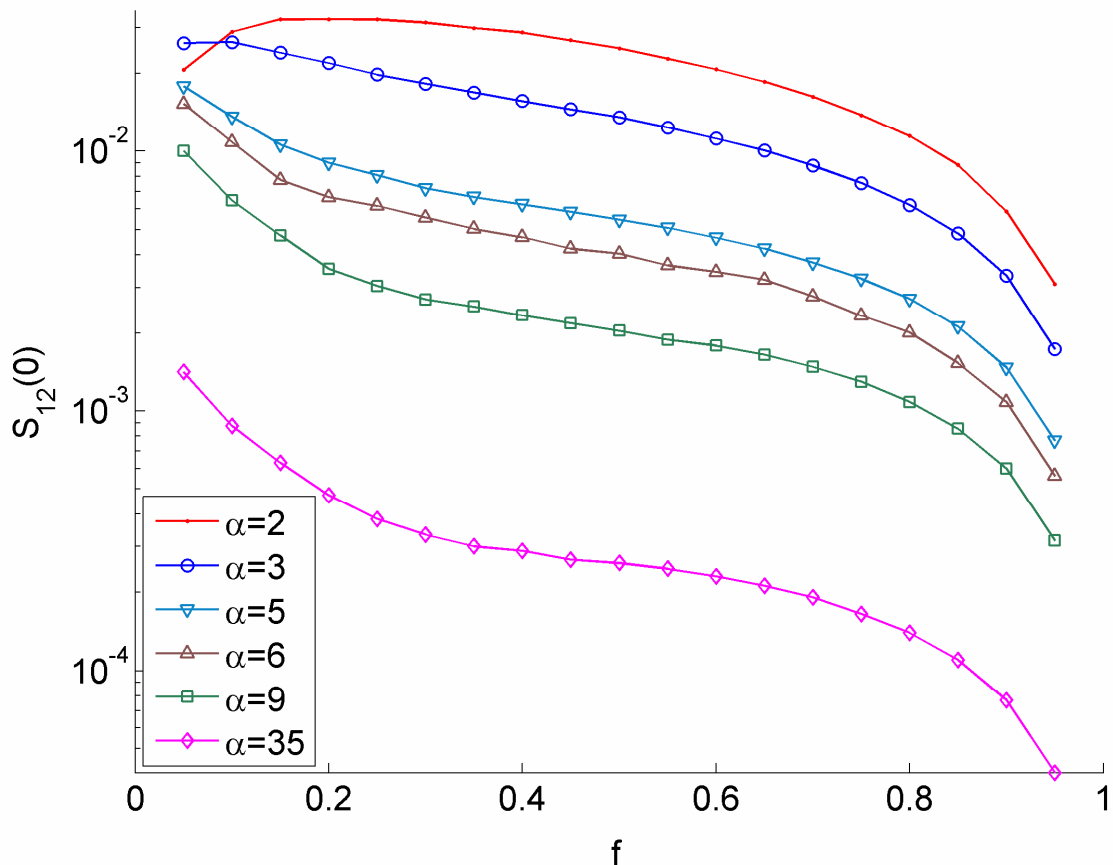


Рисунок 3.1 – Величина парціального структурного фактора $S_{12}(0)$ бінарної суміші, в залежності від об'ємної частки дрібної компоненти (f), розрахованого за формулою (3.11) із використанням експериментальних даних отриманих в [40]. Розбіжність у розмірах частинок компонентів суміші параметрично змінюється у межах $\alpha = 2 \div 35$.

Так як якісний склад локальної структури у випадку суміші встановити практично неможливо [62], покладемо величину $S_{12}(0)$ параметром, який визначається шляхом порівняння отриманого теоретично виразу із експериментальними спостереженнями. На цьому шляху, користуючись формулою Кірквуда-Баффа (3.1), з урахуванням отриманих на базі рівнянь стану Карнахана-Старлінга формул (3.10) та (3.12), можна отримати алгебраїчне рівняння 12-ї степені відносно параметра впакування (η). На Рис. 3.2 представлені дані чисельних розв'язків такого рівняння у порівнянні із відповідними експериментальними даними.

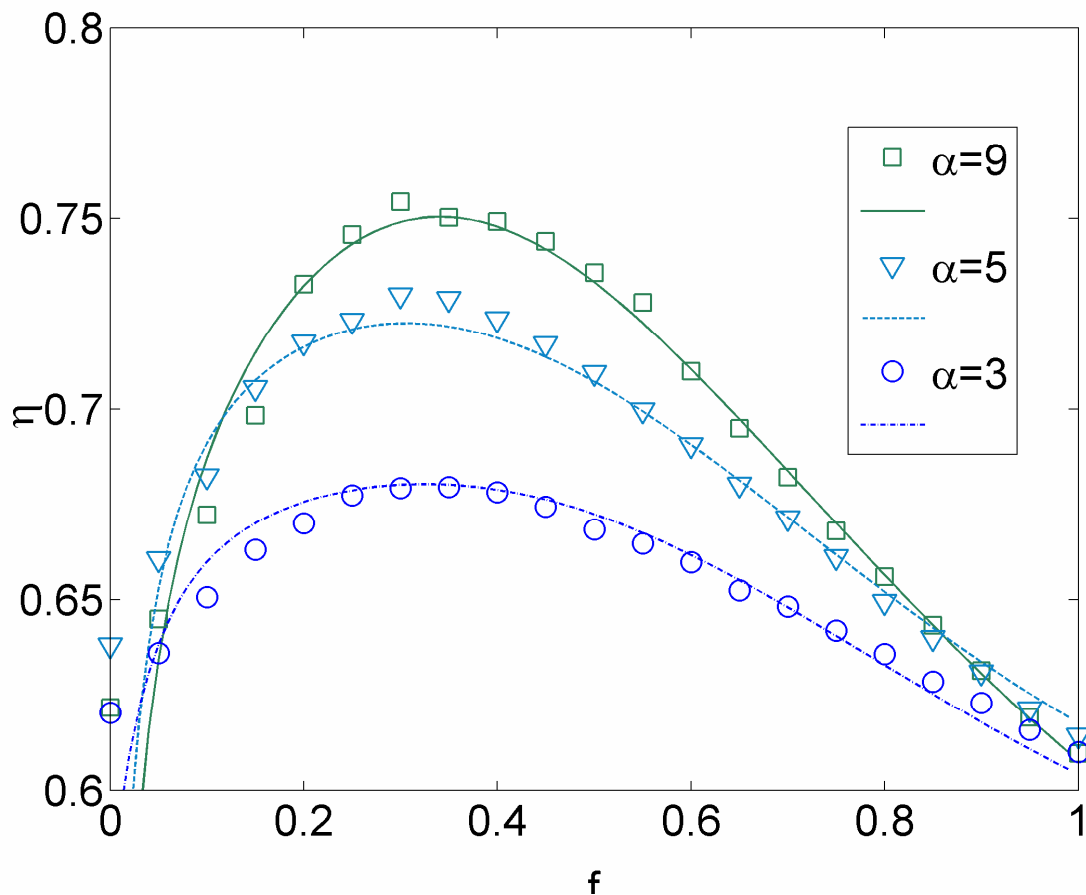


Рисунок 3.2 – Параметр впакування (η) для суміші, як функція (f): (-) – теоретична апроксимація в рамках побудованого теоретичного підходу; (o) – експериментальні дані [40].

Як випливає з Рис. 3.2, ми отримали гарне узгодження теоретичного підходу із даними експериментальних спостережень у всьому інтервалі можливих значень об'ємної фракції. Зауважимо, що задіяні теоретичні моделі, на відміну від попередніх підходів, не містять обмежень по відношенню до об'ємної фракції компонентів.

Ще одне зауваження треба зробити по відношенню до швидкості впакування бі-компонентної мікро-механічної суміші для якої в [40], встановлена можливість аномального зростання. Враховуючи, що впакування гранульованої речовини описується відомим логарифмічним законом, отриманим в [53], начебто, ця обставина знаходиться у відповідності до оцінок для характерного часу впакування $\tau \sim \exp\left\{\frac{\eta\eta_{\infty}}{\eta_{\infty} - \eta}\right\}$ (де η_{∞} – відповідає асимптотичному впакуванню), які випливають із моделі вільного об'єму [33] за умов $\eta \rightarrow \eta_{\infty}$. Однак, треба звернути увагу на те що формула для оцінки τ встановлена для монодисперсної системи, і строго кажучи, її застосування для гранульованої суміші потребує більш змістовного обґрунтування, яке на теперішній час поки що відсутнє.

Задіяні моделі використовують уявлення про частинки-гранули у формі твердих сфер, нехай із різними діаметрами, що для реальних систем є, безумовно, ідеалізацією. Вплив морфології частинок на їх структурну агрегацію вивчався у [67]. Де зокрема, було з'ясовано, що морфологія гранул суттєво впливає на динаміку ущільнення. Анізотропні зерна призводять до двох різних режимів ущільнення, розділених “сплеском” фракції впакування. Присутність тертя, також змінює порядок розміщення зерен у купі. Ці спостереження підтверджуються чисельним моделюванням. Можлива поява когезійних сил між частинками може призводити до стримування ущільнення і зниження значень фракції впакування.

Розвинений підхід може бути використаний на випадок деяких рідких сумішей, для яких ефекти впакування (компактизації) відіграють помітну роль [38, 68]. Так, наприклад, використовуючи модель Карнахана-Старлінга

та дані експериментів, виконаних в [68], можна показати, що залежність надлишкових факторів компактизації та стисливості від мольної (чи об'ємної) фракції одного із компонентів описуються немонотонними законами, і показують наявність екстремумів (див. Рис. 3.3).

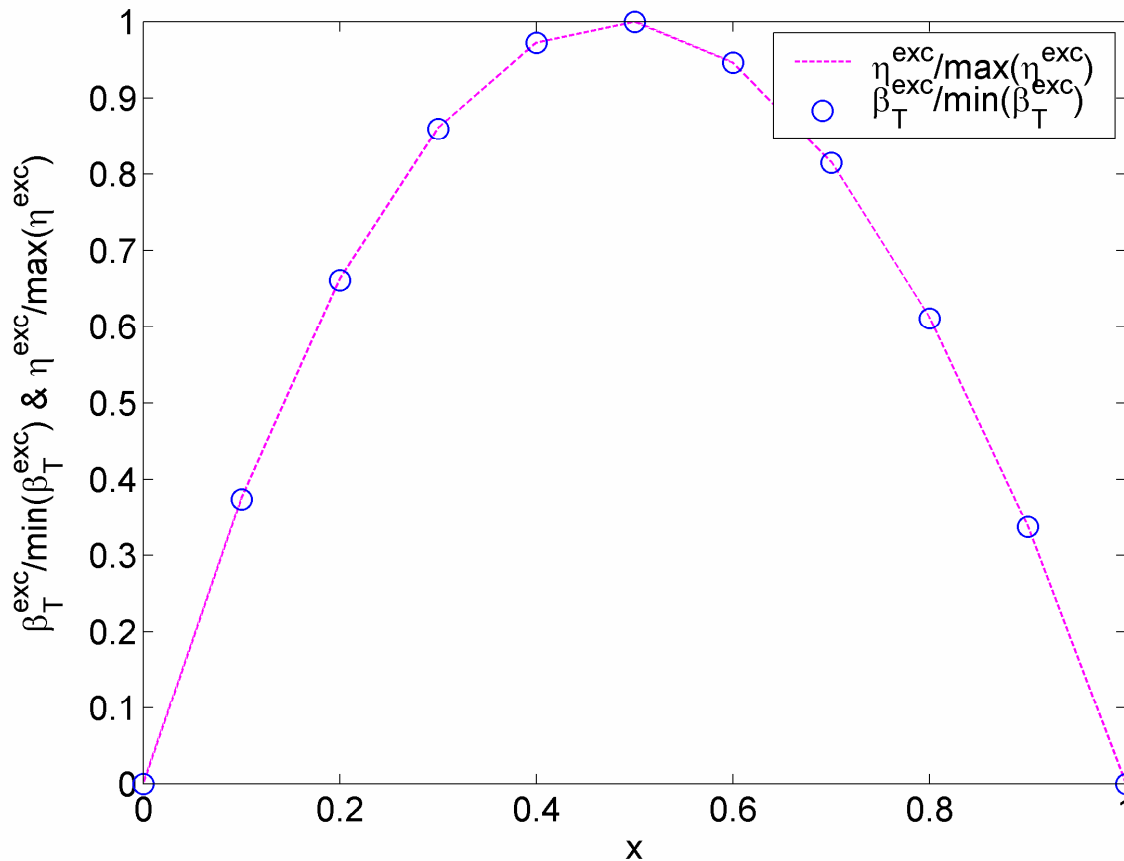


Рисунок 3.3 – Надлишкові фактори компактизації $\eta^{exc} = \eta - \eta^{id}$ та стисливості $\beta_T^{exc} = \beta_T - \beta_T^{id}$ (нормовані на відповідні значення в екстремумах) для рідкої суміші $\text{CCl}_4 + \text{CHCl}_3$ від мольної фракції x другого компонента визначені за допомогою розвиненого в нашій роботі підхода. Значення функцій η^{id} та β_T^{id} , які описують відповідні характеристики так званих «ідеальних» станів наближено визначаються за допомогою їх лінійної апроксимації в інтервалі від $x=0$ до $x=1$ (т.з. закон Рауля). В границях визначеного інтервалу x , η^{id} та β_T^{id} описують значення функцій η та β_T для монодисперсних (reference data) станів суміши (тобто чистих компонент).

Встановлені закономірності відкривають можливість застосувань запропонованого підходу до принципово різних за фізичними властивостями систем, як мікромеханічних, так і рідин (із принципово різним характером міжчастинкових взаємодій) з метою формування їх прогнозованих властивостей у відповідності до потреб та умов їх використання в технологічних процесах.

4 ВИКОРИСТАННЯ ВЛАСТИВОСТЕЙ ГРАНУЛЬОВАНИХ МАТЕРІАЛІВ У ЗАДАЧАХ ЗАХИСТУ ДОВКІЛЛЯ

4.1 Гранульовані матеріали в технологіях утилізації радіаційно шкідливих речовин

Деякі сучасні системи для упаковки та утилізації радіоактивних відходів використовують інженерно облаштовані модулі зберігання, які, свою чергу, містять контейнери з радіоактивними відходами. Як відомо, коли контейнери, що містять відходи поміщують в модулі де вони в подальшому і зберігаються, навколо контейнерів в модулі може створюватися порожній простір. Це явище, внаслідок потенціальної можливості потрапляння в порожній простір речовин (наприклад ззовні, чи з відходів), які послаблюють захисні функції контейнеру є небажаним, так як може призвести до міграції радіонуклідів за межі модуля. В практиці конструкції таких модулів зберігання, вищезазначений порожній простір, заповнюється цементуючим матеріалом, який перетворюється в суцільну тверду речовину. Як правило, для цієї мети використовується рідкий розчин сформований з Портланд-цементу. Після того, як цемент або рідкий розчин твердіє, модулі вилучаються з району, де вони завантажуються у відвали, де зберігаються протягом тривалого часу (в залежності від типу відходів, і, відповідно, періодів їх напіврозпаду, це може бути період тривалістю до 200 років). Тому модулі повинні бути стабільними та мати міцну конструкцію.

Звичайний спосіб утилізації модулів - є поховати їх в спеціально підготовлених підземних місцях поховання. Таке місце може мати траншеї, має плоску підлогу з системою моніторингу, щоб періодично контролювати потрапляння води в траншеї і визначити, чи дійсно радіоактивні речовини якимось чином просочилися з модулів. Шар гравію осідає на підлогу для дренажу, а також модулі складені над шаром гравію в колонках примикають

один до одного. Укладені один на одного колони модулів потім покриті безліччю шарів ґрунтів і пісків. Прикладом такого місця поховання також розкрито в патенті США No.4681706. Після того, як укладені один на одного модулі були повністю покриті, вони можуть зберігатися на невизначений термін, поки радіоактивний матеріал, що міститься в них, не розпадається на нешкідливість.

Хоча модулі зберігання створюються з монолітного достатньо товстого бетону, щоб зробити їх механічно міцними і несприйнятливими до води, може виникнути проблема виникнення тріщин, охрупчування, тощо. Таке дефектоутворення може виникнути в результаті сейсмічного збурення, просідання або радіаційного опромінення. Цементна затірка використовується в якості додаткового бар'єру для іммобілізації радіоактивних відходів всередині модуля де можуть розвинути тріщини, які, у свою чергу, можуть призвести до міграції води і, можливо, матеріалів відходів через стінки модулів. Таким чином, незважаючи на те, що модуль після цементуючої затірки, потенційно здатних забезпечити зберігання контейнерів радіоактивних відходів протягом тривалого періоду часу, існують умови, які можуть привести до виникнення тріщин і подальшого витоку небезпечних речовин. Якщо уявити, що такий витік трапляється повинна розвиватися адекватно сконструйована система моніторингу, яка повинна повідомити оператора на місці поховання про неприйнятну ситуацію. Аварійний модуль зберігання має бути виявлений і вилучений для ремонту або заміни. Проте, видалення затверділого цементного розчину в аварійному модулі може бути ускладнено завдяки затвердінню цементного розчину. Іще один недолік, пов'язаний з використанням цементного розчину є спливання (видавлювання) легких контейнерів під час загрузки в модуль цементного розчину. Коли це відбувається, стає необхідним підштовхування контейнеру назад у внутрішній простір модуля до того, як цементний розчин затвердіє (зазвичай, ця функція вимагає участі оператора) так, що кришка модуля буде відповідати належним чином. Це останнє сповільнює процедуру

створення модуля, а також збільшує тривалість радіаційного опромінення операторів.

Існують інші методи постійного зберігання радіаційних відходів в підземному депозитарії, який фіксує матеріали відходів всередині твердого масиву, утворений шляхом додавання до композиції затвердіваючих рідких розчинів. Однак такі методи не надають можливості для вилучення матеріалу заповнювача, якщо виникає проблема його заміни.

Очевидно, що існує потреба розробки найбільш оптимізованої системи (технології) упаковки і зберігання системи і конструкції модуля, які б усували порожній простір, але в той же час дозволяли б в разі потреби легко вилучати контейнери з модулів зберігання. В ідеалі такий модуль повинен був би включати стійкий бар'єр проти формування тріщин, здатний шляхом спрацювання відповідних фізичних механізмів перешкоджати формуванню потоку рідких відходів, щоб запобігти міграції радіоактивних нуклідів в навколишнє середовище. І, нарешті, було б бажано, щоб формування такого бар'єру не викликало будь-яких шкідливих перетворень у контейнері з відходами (розміщеного у модулі) під час конструкції.

На цьому шляху можна запропонувати гранульований або порошковий наповнювач, який забезпечує легку можливість вилучення відходів з модуля зберігання і майже повністю (з точністю, яка визначається параметром впакування $\eta = \frac{V_0}{V}$, де V - вміщуючий об'єм, V_0 - об'єм матеріалу частинок) заповнює порожній простір, який виникає між контейнером чи фракцією відходів і модулем, та діяти як бар'єр (пористе середовище, мембрана), здатний частково блокувати дифузійні (міграційні) процеси переносу (наприклад рідини). Гранульований наповнювач не тільки утримує конгломерацію відходів в модулі, а й забезпечує гідні умови для іммобілізації відходів самих у разі її пошкодження (активізації). Він здібний утримувати і зберігати радіоактивні або інші небезпечні відходи і не викликає яких-небудь

небажаних деформацій чи змін у вміщеному в модуль контейнері з відходами.

В якості гранульованого наповнювача може бути використаний пісок з включенням від 20% до 80% бентоніту (глинистого матеріалу, що представляє собою твердий абсорбуючий матеріал), який може поглинути кількість води, яка в кілька разів перевищує його власний об'єм і може поглинути від 10% до 40% кількості нуклідів в розчині. Наповнювач також може містити додаткові матеріали для адсорбції радіонуклідів і запобігання їхній міграції з відходів.

Вкажемо також на можливості гранульованих матеріалів самих по собі шляхом багатократного розсіяння до арешту (поглинання) будь-якого випромінювання та локалізації його енергії [14], що додає якості до захисних функцій конструкції модуля (дивись рисунок 4.1).

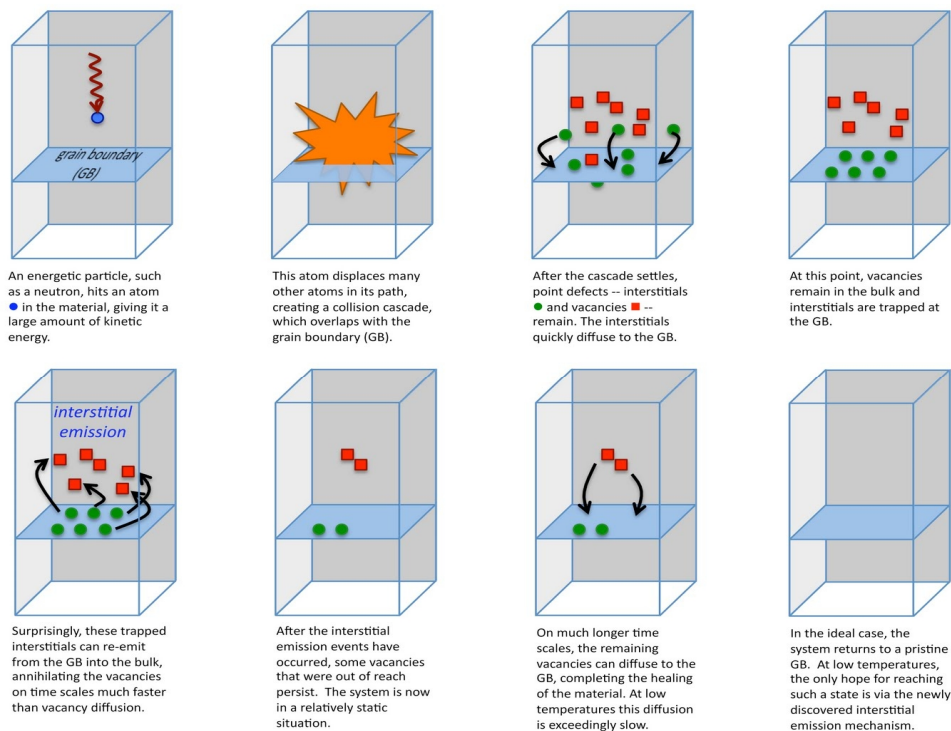


Рисунок 4.1 – Скетч для умовної демонстрації взаємодії опромінення з гранульованим шаром.

Саме гранульовані матеріали є стійкими до утворення тріщин, а структуроутворення в них можуть бути маніпульовані за рахунок впливу слабких низькочастотних віброполів [14]. Нарешті, гранульований матеріал легко заповнює порожнину і також легко з неї вилучається.

Безумовно, ефективність використання гранульованого заповнювача в структурі модуля зберігання в значній мірі визначається також конкретними матеріальними властивостями речовин та конструктивними особливостями контейнерів [37]. Відповідні розрахунки фізичних та інженерних параметрів моделі складають предмет подальших досліджень.

4.2 Технології очищення від дрібнодисперсного пилу за допомогою маніпулюємого електро-магнітного поля

Структура та склад пилу залежить від особливостей процесу його виникнення і властивостей речовин, з яких він складається. Однією з важливих характеристик пилу є його дисперсний склад. Визначаються типові дисперсні характеристики, які характеризуються відповідними інтервалами дисперсності. За інтервалами дисперсності пил поділяється на крупнодисперсний, потрапляючий в інтервал ≥ 10 мкм; середньодисперсний в інтервалі від 0.25 до 10 мкм, та дрібнодисперсний в інтервалі ≤ 0.25 мкм. В залежності від типу дисперсності обирається метод видалення пилу. Необхідність видалення пилу обумовлена шкідливим впливом на здоров'я людини чи технологічні процеси.

Для видалення дрібнодисперсного пилу недостатньо використовувати механічні засоби очищення. Тому видалення дрібнодисперсного пилу потребує тонких методів очищення. Дрібнодисперсність частинок обумовлює особливі форми поведінки пилу в умовах діючих сил, затримуючих пил на різних поверхнях забруднених просторів. Крім того, дрібнодисперсний пил проникає та затримується у важкодоступних місцях. Процес підйому

частинок пилу, які долають дію комплексу утримуючих пил сил називається левітуючим рухом.

Використання маніпулюємого електромагнітного поля у технології очищення приміщень від дрібнодисперсного пилу передбачає поєднання процесу левітації з процесом електрофорезу. Для цього модель, яка описує процес, містить параметри визначаючі силу тяжіння та напруженість електричного поля. Ці параметри визначають умови левітації пилових частинок в електричному полі.

Процес левітації означає, що пилова конгломерація в електричному полі піднімається над поверхнею і зависає над нею. Процес електрофорезу, який поєднується з процесом левітації, спричиняється поляризацією частинок завдяки прикладеному електричному полю. Таким чином, отримаємо відразу комбінування двох ефектів: 1) Левітаційного - пов'язаного з підйомом пилу з поверхні та утворенням пилової конгломерації, яка витягується із зовнішнього електричного поля; 2) Електрофоретичного, який пов'язаний з поляризацією частинок дрібнодисперсного пилу.

Метою дослідження є теоретичний розгляд гібридної левітаційно-електрофоретичної моделі, яка базується на прикладанні зовнішнього електричного поля. Частинки пилової конгломерації можуть бути потенційно заряджені, або ні і тому пропонується розглядати два механізми (електрофоретичний і діелектрофоретичний). В даній роботі ми зосереджуємося на розгляданні саме електрофоретичного та левітаційного процесу.

Технології видалення пилу, описані в цьому розділі, ґрунтуються на концепції електричної завіси, яка була розроблена Ф.В. Татом та співробітниками НАСА у 1967 році [69]. Подальший розвиток дослідження набули у розробках Масуди у Токійському університеті у 1970-х роках [70-71]. Показано, що цей метод піднімає і транспортує заряджені і незаряджені частинки за допомогою електростатичних і діелектрофоретичних сил.

Пилозахисний щит складається з серії паралельних електродів, з'єднаних з джерелом змінного струму, які генерують біжучу хвилю, що діє як безконтактний конвеєр. Частинки повторно видаляються електродами, використовуваними для створення поля, і переміщуються уздовж або проти напрямку хвилі в залежності від їх полярності. Електроди завіси можуть збуджуватися однофазною або багатофазною напругою змінного струму. В однофазній електричній завісі паралельні циліндричні електроди, що підключені до джерела змінної напруги, генерують електричне поле, напрямок якого коливається назад і вперед у міру зміни полярності електродів. У цьому випадку створюється стояча хвиля, яка буде генерувати силу на будь-якій зарядженій частинці в області поля [72].

Оскільки сітка електродів зазвичай покрита тонким ізолюючим шаром для збільшення пробивної напруги, незаряджені частинки, які падають на поверхню до включення поля, можуть заряджатися шляхом повторного контакту з ізолюючим шаром, якщо вони відскакують або через електрофоретичної сили, і буде зрушена полем після його включення. Багатофазна електрична завіса створює біжучу хвилю, так як потенціал на кожному електроді змінюється східчасто внаслідок фазового зсуву. Заряджена частинка в цій області буде рухатися з цією хвилею або проти неї, в залежності від її полярності.

Повна сила відштовхування на частинках, яка левітує їх над поверхнею, може бути виражена як суперпозиція електродинамічної сили та гравітаційної сили. Через складну природу взаємодії частинок і полів, коли рух частинок є нелінійним і пов'язаним, рівняння їх руху не може бути розв'язане аналітично.

За допомогою методів мікро- і нанотехнологій можна створювати різноманітні конструкції фільтрів, наприклад у вигляді звивистих каналів, фільтрів в формі гребінки і ступеневої типу, з метою ефективного розділення одних частинок від інших. Тому для розділення частинок зазвичай застосовують різні варіанти діелектрофореза. Через простоту діелектрофорез

широко використовується в мікрочіпових приладах для розділень бактерій, ракових клітин, стовбурових клітин та субпопуляцій лейкоцитів. На відміну від мікрофільтрації діелектрофоретичне розділення не обмежене відмінностями в розмірах між клітинами або частинками. В принципі, різні типи клітин можуть бути відокремлені з однією і тією ж конструкцією електрода якщо ретельно підібрати відповідної частоти для кожного типу частинки. Переваги діелектрофореза в гнучкості, контрольованості і зручності для автоматизації.

4.2.1 Керуючі рівняння моделі левітації та електрофорезу

Якщо розглядати мікрочастинки як конгломерат молекул, представлених у вигляді диполів, то на кожную молекулу, вміщену в електричне поле з напруженістю E , діє сила F . Сумарна сила, яка веде до руху мікрочастинки, буде складатися з окремих електрокінетичних сил. Крім цього, для подібних мікрочастинок характерні особливі властивості, наприклад подвійний електричний шар, який оточує мікрочастинки і зміщується в зовнішньому електричному полі. Отже, сумарна електрична сила, що діє на частинку масою m з розподіленим зарядом Q в неоднорідному електричному полі E , визначається напруженістю цього поля і може бути розрахована [73]:

$$\vec{F} = Q\vec{E} + \delta q\vec{E}(r^+) - \delta q\vec{E}(r^-) = Q\vec{E} + (p\nabla)\vec{E}, \quad (4.1)$$

де ∇ - оператор градієнту;

p - дипольний момент частинки.

У випадках, коли частинка не має заряду або при частотах поля ω вище 1 кГц (коли електрофоретичні ефекти незначні), права частина рівняння (містить дипольний момент і градієнт електричного поля) значно переважає.

Діелектрофоретична сила залежить від розміру частинки, від величини і ступеня неоднорідності прикладеного електричного поля (градієнт амплітуди

або фази). Вектор цієї сили залежить від полярності вимушеного диполя, який в свою чергу визначається провідністю і поляризацією мікрочастинки. Ця сила виникає тільки в разі неоднорідних полів. В інших випадках сила дорівнює нулю [73,74].

Найбільш простим способом створення неоднорідного електричного поля для діелектрофореза є застосування електродів різної форми. Сучасні методи мікро- і нанотехнологій дозволяють отримати будь-яку геометрію електродів в потрібному обсязі.

Існують різноманітні конструкції електродів, але найпоширенішими є поєднання пластинчатих і голчастих електродів. Поблизу пластинчастого електрода формується електричне поле з меншою напруженістю, в той час як у голчастого формується поле з більшою напруженістю.

Розглянемо модель формування і маніпулювання конгломераціями гранул у вигляді кластерів і струмів за допомогою сконфігурованого неоднорідного електричного поля, сформованого між двома електродами.

Діелектрофоретична сила, яка виникає внаслідок взаємодії наведеного дипольного моменту частинки (частинок) з зовнішнім полем виявляється достатньою для створення умов спрямованого руху поляризованих частинок.

Розглядаючи питання про дію діелектрофореза можна відзначити, що діелектрофорез діє на матерію, яка має здатність до поляризації, навіть коли вона не заряджена. Це відбувається тільки в неоднорідних електричних полях. Через те, що сила пропорційна градієнту E^2 , його напрямок не змінюється при інверсії електричного поля. Залежно від знака і величини фактора Клаузиуса-Моссотті зважені частинки або притягуються, або відштовхуються від областей з високою інтенсивністю поля [75].

Завдяки наведеним властивостям діелектрофорез надає змогу формувати безліч концепцій групування і маніпулювання частинками. Це надає можливість практичного застосування експериментальних ефектів маніпулювання рухом частинок у сформованому зовнішньому неоднорідному електричному полі в таких сферах, як маніпуляція та

евакуація середньо та дрібнодисперсного пилу, а також різні напрямки електрофоретичних та діелектрофоретичних технологій.

Левітація – стійка рівновага об'єкта у гравітаційному полі без безпосереднього контакту з іншими тілами. Левітація пилових конгломератів визначається балансом сил та істотно залежить від розміру частинок.

Зазвичай, для опису умов левітації окремих частинок розглядають лише баланс сили тяжіння mg (саме вона визначає умови левітації пилових частинок) і електростатичної qE [76].

4.2.2 Розв'язок моделі

Існує поверхня і на ній зависають частинки на яких діє гравітаційне поле і прикладене неоднорідне електричне поле. Електрод перший – точковий, а інший, це сама заряджена поверхня на якій лежить пил. На поверхню прикладається електричне поле, яке змушує шар речовини (пил) зависати, незважаючи на гравітаційне поле.

Такому зависанню сприяє умова, коли середнє значення радіуса вектора прямує до сталої величини ($\langle r \rangle = const$). Складаємо рівняння руху частинки пилу:

- для електрофорезу (частинка заряджена):

$$m\ddot{\vec{r}} = m\vec{g} + q\vec{E} + \chi\dot{\vec{r}}, \quad (4.2)$$

де χ - стала, яка характеризує дисипативні взаємодії;

$\ddot{\vec{r}}$ та $\dot{\vec{r}}$ - друга та перша похідна радіус-вектора за часом, тобто прискорення та швидкість частинки відповідно.

Якщо частинка не заряджена, то діє інша сила. Вона пропорційна градієнту від квадрата напруженості. Тому рівняння набуває такий вигляд:

- для діелектрофорезу (частинка не заряджена):

$$m\ddot{\vec{r}} = m\vec{g} + \gamma\nabla(\vec{E}^2) + \chi\dot{\vec{r}}, \quad (4.3)$$

$$z(t) = C_1 \frac{g}{|\chi|} + C_2 e^{-|\chi|t} - C_2 F(z) \frac{\cos\left(\arctan\frac{\omega}{|\chi|} + \omega t\right)}{|\chi|^2 + \omega^2}, \quad (4.4)$$

де γ , C_1 та C_2 - сталі;

$F(z)$ - функція, яка визначає геометрію левітуючого шару.

Наведений у (4.4) розв'язок рівняння (4.3), вказує на наявність умов для формування левітуючого шару заряджених частинок у зовнішньому електричному полі, а саме: функція $F(z)$, а також фазова функція $arctg$ визначають просторову конфігурацію та топологію левітуючого шару заряджених частинок [76,77].

4.2.3 Інтерпретація отриманих результатів

Необхідними умовами для левітації є наявність вертикальної сили, що компенсує силу тяжіння, та наявність горизонтальних сил. Коли положення рівноваги левітованої частинки є стабільним, то частинка повертається до рівноважного положення у разі незначного відхилення від рівноваги, і ми можемо говорити про автокерованість збудження частинки. Вимірювання частоти цих коливань забезпечує додаткову інформацію, яка може використовуватися для визначення параметрів системи. Зовнішнє однорідне електричне поле спричиняє поляризацію частинок, внаслідок чого левітована частинка та відштовхувальна частинка є джерелами неоднорідних електричних полів, обумовлених поляризацією.

Існує багато методів використання левітації, і одним з них є можливість визначення властивостей і параметрів частинок, які левітують внаслідок їхньої поляризації у зовнішньому електричному полі.

4.3 Перспективи застосування оксиду графена для очищення від шкідливих домішок

Графен - це атоми вуглецю, зібрані в плоску гратку із зчленованих шестикутників (див.Рис.4.2). Принципово (і водночас-унікально!), що графен має одноатомну товщину.

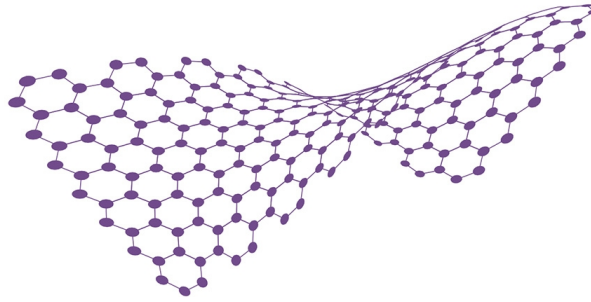


Рисунок 4.2 – Схематичне зображення графену

Двовимірна алотропна модифікація вуглецю (див. Рис.4.2), утворена шаром атомів вуглецю завтовшки в один атом (діаметр атома вуглецю $\approx 0,07$ нм), що знаходяться в sp^2 -гібридизації і з'єднаних в гексагональну двовимірну кристалічну решітку. Стала гексагональної гратки графену становить $0,246$ нм.

Унікальні властивості графену були передбачені фізиками-теоретиками ще в середині 20-го сторіччя, але отримати зразки графену на практиці вдалося відносно недавно, а саме у 2005 році. До недавніх часів отримання графену відносилось скоріше до наукових експериментів ніж до масового виробництва (також достатньо труднощів виникало при спостереженні та зберіганні зразків графену).

Домінуючим із існуючих в даний час способів отримання графена є заснований на механічному відщепленні шарів графіту [78]. Він дозволяє отримувати найбільш якісні зразки з високою рухливістю носіїв заряду (максимальна рухливість електронів серед усіх відомих матеріалів), що робить його перспективним матеріалом для використання, зокрема у

сучасній наноелектроніці. В межах такого способу, графенові листи відокремлюються від кристалічного графіту в результаті тертя невеликих кристаликів графіту один об одного, або за допомогою липкої стрічки, подальше розчинення якої в кислоті приводить до отримання моношарових графенових зразків.

Існує також метод розшарування графіту на окремі графенові листи заснований на використанні поверхнево-активних органічних рідин [79].

Такий підхід використовує шарувату структуру кристалічного графіту, завдяки якій можливе проникнення атомів або молекул різної природи в простір між шарами. Це призводить до збільшення відстані між шарами і, як наслідок, до зниження енергії взаємодії між ними. В результаті створюється можливість поділу графітових шарів при механічному впливі на них.

Ефективним є, також, підхід заснований на використанні хімічних окислювачів [80]. При такому підході, на графіт діють сильними газоподібними окислювачами, до яких в першу чергу відносяться кисень і галогени. В результаті відбувається окислення внутрішніх шарів графіту. Це як і у попередньому методі супроводжується збільшенням міжшарової відстані в кристалі і відповідно зниженням енергії взаємодії між шарами. В результаті полегшується можливість поділу графітових шарів в рідкій фазі, що дозволяє синтезувати зразки оксиду графену з поперечним розміром порядку сотень мікрометрів.

Більшість вражаючих властивостей графену притаманні оксиду графену. Під оксидами графена розуміють частки графена з приєднаними по краях або всередині вуглецевої сітки кисневмісними функціональними групами і/або молекулами. Номенклатура цих груп доволі обширна: гідроксильні, фенольні, карбонільні, карбоксильні, арильні, ефірні, містять фосфор. Різновидом є оксиди графена, модифіковані полімерами, такими, як поліетиленгліколь, поліефіри, полівініл, поліакрили і т.п. Ще одну групу оксидів графену складають доповані сполуки [81].

Зокрема, відомі оксиди графена, що містять у своїй структурі один або кілька атомів бору, азоту, алюмінію, фосфору, кремнію, сірки або ж групи на їх основі, наприклад меламін, фосфін, силан, полісілоксан, сульфідиди і т.п. Найвразливіші оксиди графена виходять при інкорпорації молекулами краун-ефірів [82] (див.Рис.4.3).

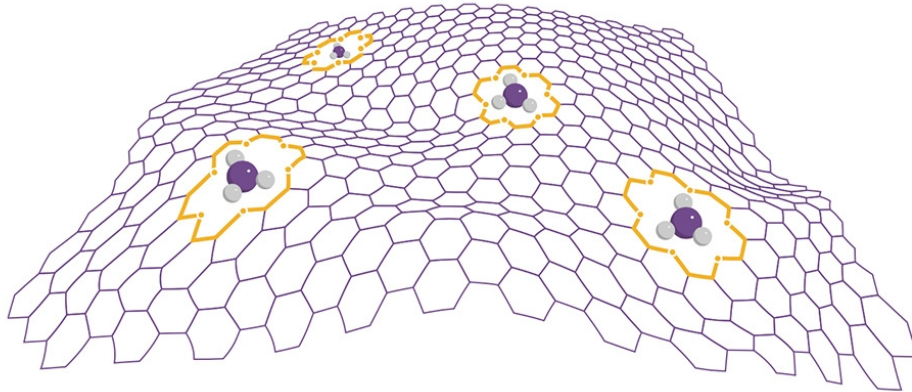


Рисунок 4.3 – Схематичне зображення графенової матриці декорованої молекулами краун-ефіра

Розмір і форма порожнини, сформованої молекулою краун-ефіру, залежать від його складу. Тому новий матеріал може сорбувати іони строго виділеного діаметру. Сильні електростатичні зв'язку молекул ефіру, інкорпорованих в графенову матрицю, відкривають привабливі перспективи в біотехнологіях, для хімічної сепарації, екстракції металів, очищення від радіонуклідів (дезактивації), рециклінгу рідкоземельних металів і зберігання даних.

Оксиди графена за сорбційною ємністю значно перевершують іонообмінні смоли на полімерній основі і інші традиційні сорбенти. Це і становить суть інтересу до оксидів графена в якості новітніх матеріалів для створення нових технологій на основі супер-сорбентів нового покоління.

Сорбційні рекорди оксидів графену можуть реалізовуватися кількома шляхами, наприклад абсорбцією; адсорбцією; іонним обміном; фізичної адсорбцією; хемосорбцією; з встановленням ковалентних або ж нековалентних зв'язків; з встановленням водневих зв'язків; внаслідок Ван-

дер-ваальсової взаємодії. В результаті сорбції можуть утворюватися колоїди, відбуватися коагуляція речовини і подальше утворення випадінь.

Фахівцям відомі п'ять основних різновидів оксидів графена за формою частинок, а саме: плівки на інертних підкладках; нанопорошки з розміром плоских частинок (лусочок) порядку 905 нм; пластівці з розміром частинок 1-5 мкм; стрічки (з відношенням довжини до ширини більше 10); помпони з розміром сфероподібних частинок діаметром 3-6 мкм [83].

З них самі незвичайні, є мабуть помпони, тобто зростки пелюсток графена в формі помпона [84].

Сьогоднішня цінова доступність оксидів графену (на рівні \$50/г), безсумнівно, підвищує їх привабливість для промислового застосування в інноваційних секторах.

Всі з чотирьох основних методів отримання оксиду графену використовують окислення шматочків графіту в водному середовищі сильних кислот (наприклад, концентрованої сірчаної кислоти) в присутності високоактивних окислювачів. Існує велика кількість їх різновидів. Винахідники прагнуть отримати стабільну якість, мінімізацію відбраковування і здешевлення виробництва [85].

Так в 2014 році було запропоновано двохстадійний метод отримання оксиду графену без використання сильних окислювачів - шляхом анодного окислення графіту в сірчаної кислоти з мікрохвильовою активацією процесу [86].

Для екзотичних форм, наприклад помпонів, розробляються окремі технології.

Сировина для оксидів графену відносно дешева. Промислові апарати з корозійно-стійких сплавів хоча й коштовні, але не астрономічно. Інфраструктура виробництва очевидна, вона створюється на базі сучасних хімічних заводів. Проблема тільки в технологіях, які є предметом авторської таємниці.

Інтелектуальна власність вносить близько 90% в ринкову вартість сучасних товарів на основі оксидів графена і якщо така маржа зникне вартість оксидів графену наблизиться до вартості пінопласту та гіпсокартону.

Основними драйверами тут є: 1) швидке збільшення числа виробників графена і його похідних; 2) зростаюча адаптація графенових продуктів різними областями народного господарства; 3) все більш точне фокусування відповідних галузей промисловості в область сорбентів на основі оксидів графену.

Тут зауважимо, що оксид графена - це перший двовимірний матеріал, який досяг стадії промислово-комерційного втілення. А на порозі вже інші двовимірні матеріали, наприклад фосфорен (сітка фосфору), сіліцен (сітка кремнію), сілікатен (сітка діоксиду кремнію), германен (сітка германію), арсінен (сітка миш'яку), а також двовимірні полімери [87].

Оксиди графена, а також композити на їх основі - перспективні матеріали для контролю навколишнього середовища (в першу чергу це стосується промислових відходів). Їх можна розглядати як новітній унікальний матеріал для екстреного знезараження повітря і рідких відходів.

Функціональні групи на краях і в площині оксидів графена здатні як до нековалентних, так і до нековалентних взаємодій з різними молекулами.

Більш того, значна за величиною питома поверхня оксидів графена дозволяє поглинати істотні кількості іонів важких металів, радіонуклідів і органічних спецій. Завдяки особливостям приповерхностной хімії і різних типів архітектури конгломератів на основі оксидів графену, існують численні можливості для селективних каталітичних процесів розкладання шкідливих газів на безпечні похідні.

Так, зокрема, здатність графену адсорбувати з високою швидкістю радіоактивні матеріали з водних розчинів виявили можна використовувати при дезактивації водойм, забруднених радіацією, а також для удосконалення технологій з видобутку сланцевих вуглеводів та рідкоземельних елементів [88].

Виявилося, що мікроскопічні лусочки оксиду графену, товщиною в один атом, швидко зв'язують радіонукліди різного походження на ядрах адсорбції.

Ці лусочки оксиду графену легко розчиняються у воді і, витягнувши з неї радіоактивні речовини, збираються в грудки, які швидко осідають на дно. В подальшому такі донні відкладення легко вилучити із водойми та утилізувати (наприклад, спалити).

Вже здійснені випробовування дезактиваційних властивостей оксиду графену на кислотних розчинах ($\text{pH} < 2$), які перешкоджають абсорбції, та містять уран, плутоній, америцій тощо (Am(III) , Th(IV) , Pu(IV) , Np(V) , U(VI)) а також типові продукти радіоактивного розпаду стронцій, європій та технецій (Sr(II) , Eu(III) та Tc(VII)).

Виявилося, що оксид графену є набагато ефективнішим, ніж сорбенти, що зазвичай застосовуються для радіоактивного очищення, — бентонітові глини і гранульоване активоване вугілля [89] (див.Рис.4.4).

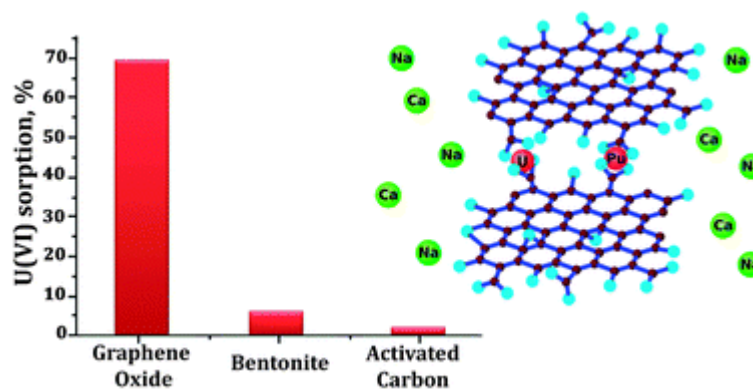


Рисунок 4.4 – Порівняльна сорбція урану оксидом графену, бентонітом та активованим вугіллям

При проведенні експерименту також виявилася феноменальна швидкість та ефективність очищення забрудненого радіоактивними речовинами водного розчину при застосуванні оксиду графену.

Це відкриття бачиться справжнім проривом в технологіях очищенні водойм, забруднених радіоактивними матеріалами.

Було встановлено, що адсорбційна ємність оксиду графену для Cd (II) Co (II) при жорсткості води рН 6.0 та температури 300 К досягає 0,95 або 1,16 мМоль/грам. Для Eu (III), відповідно, 0,76 і 0,12 мМоль/грам, при рН 5.0 .

Адсорбційні властивості можуть бути істотно покращені шляхом взаємодії оксиду графену з органічними з'єднаннями або полімерами. наприклад із застосуванням поліаніліну (див.Рис.4.5).

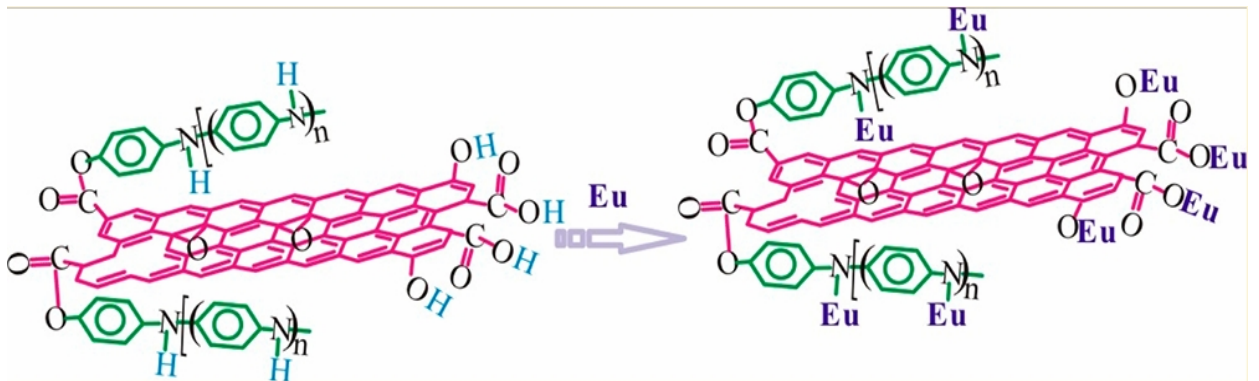


Рисунок 4.5 – Схематичне зображення комплексів поліамід-оксид графену [89].

Водночас поліанілін має високу стійкість до впливу важких металів завдяки наявності великої кількості аміно- та іміно-функціональних груп.

Було доведено, що поліанілін може бути прищеплений на поверхню нано-пластівців оксиду графену за допомогою хімічного методу.

Такі композити демонструють універсальне та високоефективне поглинання радіонуклідів у широкому діапазоні кислотно-лужних умов.

Сорбція радіонуклідів на композитах поліанілін-оксид графену відбувається шляхом утворення комплексів з функціональними групами, що містять азот і кисень, а хімічна спорідненість радіонуклідів для функціональних груп, які містять азот сильніше, ніж для функціональних групи, які містять кисень.

Матеріали, які містять оксид-графену та його окремі сполуки є перспективними матеріалами для концентрації та видалення радіонуклідів

при очищенні навколишнього середовища та утилізації ядерних відходів, особливо при низьких значеннях рН у водних розчинах.

Суто дезактивація - це один з видів знезараження, являє собою видалення радіоактивних речовин з зараженої території, з поверхні будівель, споруд, техніки, одягу, засобів індивідуального захисту, води, продовольства.

Дезактивація може проводитися двома способами - механічним і фізико-хімічним, які один одного доповнюють. Механічний спосіб передбачає видалення радіоактивних речовин із заражених поверхонь змиванням щітками і підручними засобами, витрушуванням, вибиванням одягу, обмиванням струменем води, здуванням (наприклад за допомогою авіаційних двигунів). Зменшити поверхневий натяг води можна підвищенням температури і застосуванням поверхнево-активних речовин (мила, пральних порошоків і т. д.). Механічний спосіб найбільш простий і доступний і, як правило, використовується для дезактивації техніки, автотранспорту, одягу, засобів індивідуального захисту відразу ж після виходу із зараженої території.

Однак внаслідок тісного контакту радіоактивних речовин з поверхнею багатьох матеріалів та їх глибокого проникнення всередину поверхні, механічний спосіб дезактивації може не дати необхідного ефекту. Тому поряд з ним використовують фізико-хімічний спосіб, який передбачає застосування розчинів спеціальних препаратів, що значно підвищують ефективність видалення (змивання) радіоактивних речовин з поверхні, у тому числі використання піни з наступною дезактивацією використаної піни за допомогою препаратів оксиду графену.

Існують і інші методи дезактивації поверхонь - електрохімічна дезактивація (коли деталь яка дезактивується поміщається в розчин електроліту, а на оброблювану поверхню подається негативний або позитивний потенціал), лазерна дезактивація (за механізмом схожа з системами лазерної очищення поверхонь від фарби, іржі та т.п.,

використовуваними, наприклад, у реставрації металевих виробів), дезактивація з використанням ультразвуку.

При дезактивації залежно від обстановки і об'єкта дезактивації використовуються різні методи. Ділянки території, що мають тверде покриття дезактивуються за допомогою змивання радіоактивних речовин (пилу) під великим тиском за допомогою поливальних і пожежних машин. На територіях, де тверде покриття відсутній, дезактивація може проводитися шляхом зрізання та вивезення верхнього шару ґрунту або снігу, засипки чистим ґрунтом, засіву полів рослинами, які добре акумулюють радіонукліди, пристрій настилів і т.п.

На АЕС дезактивація обладнання та приміщень - стандартна процедура, що застосовується як до, так і після ремонту обладнання реакторного відділення; проводиться вручну персоналом цеху дезактивації із застосуванням хімічних засобів, або за допомогою спеціального обладнання та ємностей (сильно активовані деталі обладнання) .

Дезактивація забруднених земель в наслідок аварії на Фукусімі здійснюється за допомогою піни і відповідних реагентів. 11 квітня 2018 року в японській префектурі Фукусіма проведено демонстраційне випробування нової технології дезактивації ґрунту [90].

Один з основних фізико-хімічних процесів, розроблених в рамках проекту, полягає у використанні піни для видалення твердих радіоактивних частинок. Забруднений ґрунт змішується з водою, потім в цю суміш під тиском подається повітря, в результаті чого утворюються піна. Ці бульбашки піни захоплюють частинки ґрунту, забруднені радіоактивним цезієм, в той час як незабруднені частки опускаються на дно колони.

Цей процес був вперше протестований в 2016 році. В ході цих випробувань були зібрані експериментальні дані про деталі перебігу процесу.

За підсумками використання цієї технології радіоактивність забрудненого ґрунту була знижена до 33-50% від початкового рівня.

Проте, залишається відкритим питання, щодо утилізації відпрацьованої піни, яка містить велику кількість радіоактивних частинок.

На нашу думку, з урахуванням вищевисвітленого, перспективним буде дослідження дезактивації відпрацьованої піни шляхом додавання водного розчину композиту поліамід-оксид графену. Така технологія дозволить вивести з відпрацьованої піни радіоактивні забруднювачі, які випадуть в осад, сконцентрувати їх і, в подальшому, переробити, чи утилізувати [91].

ВИСНОВКИ

1) Фракційна динаміка

Теоретична модель двічі фракційного процесу хвильової дифузії запропонована для опису хвильового транспорту у гіпернеоднорідних середовищах із маніпулюємими зовні внутрішніми параметрами. Точний розв'язок відповідної задачі на власні значення для оператора Рімана-Ліувілля дозволяє наочно описати динаміку процесу та здійснити його параметризацію. Досліджені переходи у границях, які відповідають евклідовським сценаріям хвильового транспорту у неоднорідних системах. Отримані результати запропоновані до застосування в задачах опису дифузії домішок у пористих середовищах та у новітніх комунікаційних мережах передачі енергії [2,3,92,93].

2) Хвильова динаміка

Для слабо неоднорідного (вертикального) герцівського ланцюжку знайдено розв'язки лінеаризованого континуального рівняння, у вигляді лінійної комбінації циліндричних хвиль (згортки), які показують полюсну поведінку (резонансна мода). Запропоновано інтерпретацію отриманих розв'язків, на підґрунті концепції параметричного резонансу. [16]

Запропоновано метод квазічастинки для дослідження утворення, розповсюдження та взаємодії солітоноподібних збуджень у герцівському ланцюжку. Для нелінійного ланцюжку із герцівськими контактами описані характеристики розсіяння солітоноподібного збудження на важкому ізотопічному дефекті. Отримані теоретичні дані добре узгоджуються із експериментальними спостереженнями. [17]

Для солітонів типу Нестеренко запропоновано критерій їх утворення, який безпосередньо пов'язує параметр збудження із граничними умовами, та матеріальними константами, та із нелінійністю, і визначає порівняльну роль нелінійності системи.

Отримані декілька класів керуючих рівнянь, які у довгохвильовому (суцільному) наближенні описують перенос механічного імпульсу (збудження), та враховують наявність нелінійних взаємодій. Для всіх визначених рівнянь знайдені аналітичні розв'язки, загальною рисою яких є солітонний розв'язок Нестеренко в якості бази.

У довгохвильовому наближенні отримані аналітичні розв'язки для перекриття частинок та їх зміщень, які супроводжують перенос імпульсу в ланцюжку. Спеціальна увага була спрямована до розгляду рівнянь руху збудження в термінах взаємних деформацій частинок ланцюжка (зокрема встановлене перетворення типу зсуву, яке поєднує різні типи рівнянь).

Показано, що розв'язок неоднорідної задачі вже у лінійному наближенні має мультимодовий характер та містить як згасаючі фрагменти, так і хвилі, які розповсюджуються (які, наприклад, даються лінійними комбінаціями Бесселівських функцій та навіть ізоморфні ударним, які у свою чергу можуть формуватися за рахунок накладання хвиль розтягнення та стиснення [15]).

Застосування ВКБ підходу до опису хвильового транспорту у неоднорідних середовищах дозволило встановити специфічні динамічні явища у вигляді квазі-нелінійних режимів, в яких внаслідок інтерференції спостерігаються явища типу Фано-резонансів. Отримані аналітичні розв'язки керуючих рівнянь у випадку неоднорідних герцівських ланцюжків, як показано, здібні шляхом накладання циліндричних хвиль (дисперсійних мод) породжувати хвильові пакети, які мають ознаки Фано-резонансів (асиметрія, центрованість на зонах перетину гранул ланцюжку, тощо). Отримані результати вперше виявляють особливості у фізиці хвильового транспорту герцівських ланцюжків, та встановлюють її фізичну причину.

Отримані результати є практичним теоретичним інструментарієм елементів хвильової схемотехніки (хвильові діод та дросель, вентиль, модовий фільтр, та інш.), який може сприяти створенню кіберфізичних систем, у тому числі і в задачах із створення технологій захисту довкілля.

3) Бінарні суміші

На підставі аналізу експериментальних даних з вивчення динаміки бінарних гранульованих систем, які полягають у вимірах їх ущільнення і компактизації та впливу на ці процеси співвідношення розмірів компонентів та парціальних параметрів, зроблені висновки про принципову можливість підвищення ступеня та швидкості їх впакування, що є важливим елементом їх практичного використання. З метою теоретичного опису та обґрунтування емпіричних даних у повному інтервалі значень об'ємної (чи молярної) фракції використовується апарат теорії Кірквуда-Баффа у поєднанні з моделями типу твердих сфер Карнахана-Старлінга-Мансорі а також відповідними феноменологічними даними. Теоретичні результати гарно збігаються із експериментальними.

Отримані дані можуть бути використані для урахування впливу мультидисперсності і побудови інноваційних підходів до оптимізації маніпуляційної динаміки ущільнення (компактизації) дискретних мікро-механічних матеріалів тобто, на керування можливістю гранульованої суміші змінювати локальну структуру, ступінь та швидкість впакування, а також деякі інші параметри, що є суттєвим для їх практичного використання у відповідних захисних технологіях.

4) Елементи розвитку технологічних застосувань

Запропонована оригінальна модель утилізаційного контейнеру для зберігання радіоактивних відходів з новітніми конструктивними елементами, які використовують гранульовані матеріали в якості мобільного захисного модуля із маніпулюємими властивостями [37].

Запропонована діелектрофоретична теорія маніпулюємих струмів діелектричної конденсованої речовини у зовнішніх неоднорідних електричних полях [75-77]. Встановлені масштабно інваріантні особливості струмів (скейлінг). Здійснений порівняльний аналіз струмів, які складаються із конгломерацій крапель діелектричних рідин та твердих гранул.

Проаналізовані ефективні механізми формування поверхневого натягу та в'язкості у мезомасштабах.

Проаналізована гібридна левітаційно-електрофоретична модель (тобто, процес левітації схрещений та гібридизований з процесом електрофорезу), у якості теоретичної основи технології тонкої пилоочистки. Пропонуєма технологія має базуватися на стимулюванні на першому етапі левітаційного спливання та виділення пилових частинок з матриці включення (міст залігання), із наступним (на другому етапі) створенням умов електрофоретичного руху (електрофорезу).

Дослідження перспектив застосування оксиду графена для очищення від шкідливих домішок вказує на гарні перспективи його застосування у задачах очищення від небажаних домішок (наприклад радіонуклідів), та на необхідність розвитку зазначених технологій.

Головні результати:

Фракційна динаміка

- теоретична модель двічі фракційного процесу хвильової дифузії запропонована для опису хвильового транспорту у гіпернеоднорідних середовищах із маніпулюємими зовні внутрішніми параметрами.

Хвильова динаміка

- для слабо неоднорідного (вертикального) герцівського ланцюжку знайдено розв'язки лінеаризованого континуального рівняння, у вигляді лінійної комбінації циліндричних хвиль (згортки), які показують полюсну поведінку (резонансна мода).
- отримані декілька класів керуючих рівнянь, які у довгохвильовому (суцільному) наближенні описують перенос механічного імпульсу (збудження), та враховують наявність нелінійних взаємодій. Для всіх визначених рівнянь знайдені аналітичні розв'язки, загальною рисою яких є солітонний розв'язок Нестеренко в якості бази.

Бінарні суміші

- для теоретичного опису та обґрунтування емпіричних даних у повному інтервалі значень об'ємної (чи молярної) фракції використовується апарат теорії Кірквуда-Баффа у поєднанні з моделями типу твердих сфер Карнахана-Старлінга, а також відповідними феноменологічними даними. Теоретичні результати гарно збігаються із експериментальними.

Елементи розвитку технологічних застосувань

- запропонована оригінальна модель утилізаційного контейнеру для зберігання радіоактивних відходів з новітніми конструктивними елементами, які використовують гранульовані матеріали в якості мобільного захисного модуля із маніпулюємими властивостями.
- проаналізована гібридна левітаційно-електрофоретична модель (тобто, процес левітації схрещений та гібридизований з процесом електрофорезу), у якості теоретичної основи технології тонкої пилоочистки. Пропонуєма технологія має базуватися на стимулюванні на першому етапі левітаційного спливання та виділення пилових частинок з матриці включення (міст залігання), із наступним (на другому етапі) створенням умов електрофоретичного руху (електрофорезу).
- довідження перспектив застосування оксиду графена для очищення від шкідливих домішок вказує на гарні перспективи його застосування у задачах очищення від небажаних домішок, та на необхідність розвитку зазначених технологій.

Результати НДР використані при написанні монографій [75, 76, 94-96] (у тому числі у престижних зарубіжних виданнях Wiley, Scrivener), підручників [97, 98] та навчальних посібників [99-101], статей до журналів: Доповіді НАН України [17], Український фізичний журнал [16], Вісник ОДЕКУ [102-103], IEEE (TCSET'2016) [104], E3S Web of Conferences

(ICIES'2020) [105], Наука та інновації [106], The Journal of Chemical Physics [107], Scientific Reports [108], Фізика аеродисперсних систем [109, 110]; пройшли апробацію на конференціях (як вітчизняних так і міжнародних та закордонних) [111-157], а також включені до матеріалів кандидатської та докторської дисертації, які виконуються на кафедрі.

У 2016 році на базі кафедри було проведено Міжнародну наукову конференцію «PhysIST-2016». Професор Герасимов О.І. очолював оргкомітет конференції в якій співробітники кафедри прийняли активну участь [94].

Результати НДР впроваджено у Інституті теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України (м. Київ); у приватному підприємстві «АЛЬФА-КОМ» (м. Одеса, з економічним ефектом); у ТОВ «АЛГОРИТМ-Х» (м. Київ, з економічним ефектом); їх також використано у навчальному процесі (підтверджено 5 актами впровадження) в спецкурсах, при написанні курсових, дипломних та магістерських робіт, які виконуються на кафедрі.

Тема НДР належить до традиційного для кафедри напрямку досліджень «Фізика складних динамічних дисипативних систем» (у різні роки вже було виконано 6 НДР [158-163]), тому наразі плануються подальші дослідження за подібним напрямком.

ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ

1. Metzler R., Klafter J. The random walk's guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach // *Physics Reports*. 2000. No.339. P.1-77.
2. Andrianova I.S. Fractional dynamics in porous media: application to some environmental processes // Abstract of International multimedia (WEB) Conference “*Physics for Interdisciplinary Science and Teaching*” (*PhysIST-2016*), 2-5 May 2016; Odesa State Environmental University. P.6.
3. Andrianova I.S. Fractional dynamics in porous media: application to some environmental processes // Proceedings of International multimedia (WEB) Conference “*Physics for Interdisciplinary Science and Teaching*” (*PhysIST-2016*), 2-5 May 2016; Odesa State Environmental University. Odesa: TES, 2016. P.16-20.
4. Nesterenko V.F. Propagation of nonlinear compression pulses in granular media // *J. Appl. Mech. Tech. Phys.* 1984. Vol. 24, No. 1. P. 733-743; Translated from : *Zh. Prikl. Mekh. Tekh. Fiz.* 1983. No.5. P. 136-148. [Russian]; Нестеренко В.Ф. Распространение нелинейных импульсов сжатия в зернистых средах // *Журн. прикл. мех. техн. физ.* 1983. № 5. С. 136-148.
5. Coste C., Falcon E., Fauve S. Solitary waves in a chain of beads under Hertz contact // *Phys. Rev. E*. 1997. Vol. 56, No. 5. P. 6104-6117.
6. Hascoet E., Herrmann H.J., Loreto V. Shock propagation in a granular chain // *Physical Review E*. 1999. Vol. 59, No. 3. P. 3202-3206.
7. Hascoet E., Herrmann H.J. Shocks in non-loaded bead chains with impurities // *The European Physical Journal B*. 2000. Vol. 14, No. 1. P. 183-190.
8. Daraio C., Nesterenko V.F., Herbold E.B., Jin S. Tunability of solitary wave properties in one-dimensional strongly nonlinear photonic crystals // *Phys. Rev. E*. 2006. Vol. 73. P.026610-1-026610-10.

9. Sen S., Hong J., Bang J., Avalos E., Doney R. Solitary waves in the granular chain // *Physics Reports*. 2008. Vol. 462, No. 2. P. 21-66.
10. Stefanov A., Kevrekidis P. On the Existence of Solitary Traveling Waves for Generalized Hertzian Chains // *Journal of Nonlinear Science*. 2012. Vol. 22, No. 3. P. 327-349.
11. Герасимов О.І., Вандевалле Н. Щодо точних розв'язків задачі про перенесення імпульсу у неоднорідному гранульованому ланцюжку // *Доповіді Національної академії наук України*. 2012. №. 8. С. 67-72.
Gerasymov O.I., Vandewalle N. On the exact solutions of the problem of impulsive propagation in an inhomogeneous granular chain // *Dopov. Nac. acad. nauk. Ukr.* 2012. No.8. P. 67-72 [Ukrainian]
12. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya. Performing of the momentum dynamics in 1D models of granular systems // *Proc. I-st Belgian-Ukrainian mini-Symposium – Selected Topics of Soft Matter Physics: Granular Matter* Odessa, Ukraine, 2012. P. 34-40.
13. Lumay G., Dorbolo S., Gerasymov O., Vandewalle N. Experimental study of a vertical column of grains submitted to a series of impulses // *European Physical Journal E: Soft Matter*. 2013. Vol. 36, No. 2. P.16-1-16-6.
14. Герасимов О.І. *Фізика гранульованих матеріалів*. Одеса: ТЕС, 2016. 264 с.; Gerasymov O.I. *Physics of granular materials*. Odesa: TES, 2015. [Ukrainian]
15. Yasuda H., Chong C., Yang J., Kevrekidis P.G. Emergence of dispersive shocks and rarefaction waves in power-law contact models // *Physical Review E*. 2017. Vol. 95, No. 6. P. 062216-1–062216-5.
16. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya. On the wave transmission in a gently perturbed weakly inhomogeneous non-linear force chain // *Український фізичний журнал*. 2020. Т. 65, № 11. С. 1002-1010. ISSN 0372-400X (*Edition in Ukrainian*);
Gerasymov O.I., Spivak A.Ya. On the wave transmission in a gently perturbed weakly inhomogeneous non-linear force chain // *Ukrainian*

- Journal of Physics*. 2020. Vol. 65, No. 11. P. 1008-1016.
<https://doi.org/10.15407/ujpe65.11.1008> ISSN 2071-0186 (*Edition in English*), 2071-0194 (*in electronic form*)
17. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya. Soliton in a one-dimensional force chain with Hertz contacts // *Dopov. Nac. acad. nauk Ukr.* 2020. No.3. P. 36-46. [Ukrainian]; Герасимов О.І., Співак А.Я. Солітон в одновимірному силовому ланцюжку з герцівськими контактами // *Доповіди Національної академії наук України*. 2020. № 3. С. 36-46.
<https://doi.org/10.15407/dopovidi2020.03.036>
18. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya. Mechanical impulse transmission through 1D nonlinear chains // VIII Conference of Young Scientists “*Problems of Theoretical Physics*” (December 12 – 14, 2017), Bogolyubov Institute for Theoretical Physics (BITP) of the National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, Ukraine, P.12.
19. Зайцев В.Ф., Полянин А.Д. *Справочник по дифференциальным уравнениям с частными производными: точ. решения*. Москва: Междунар. программа образования, 1996, 495 с.
20. Двайт Г. Б. *Таблицы интегралов и другие математические формулы* / перевод с англ. Н.В. Леви под ред. К.А. Семендяева, 2-е изд., испр. Москва: Наука, 1966. 228 с.
21. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya. Multiscaled analysis of impulse/energy transport in 1D nonhomogeneous Herzian chain // Solvay Workshop - “*Bridging the gaps at the PCB interface*” *Multiscale Modelling in Physics, Chemistry and Biology* (19-21 April, 2016), International Solvay Institutes, ULB, Brussels, Belgium.
22. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya. Multiscaled analysis of impulse transmission in nonhomogeneous low-dimensional systems // Bogolyubov Conference “*Problems of Theoretical Physics*”, dedicated to the 50th anniversary of the Bogolyubov Institute for Theoretical Physics of the NAS of Ukraine (May 24-26, 2016); BITP, Kyiv, Ukraine. P.14.

23. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya. and Vandewalle N. Multiscaled analysis of impulse/energy transport in 1D nonhomogeneous Herizian chain // Int.Conf.: *PhysIST-2016* (Odesa, 2-5 May, 2016), OSENU. P.4.
24. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya. and Vandewalle N. Multiscaled analysis of impulse/energy transport in 1D nonhomogeneous Herizian chain // Proc. Int. Conf. *PhysIST-2016* (2-5 May); OSENU. Odesa: TES, 2016. P.11-13.
25. Рыжик И.М., Градштейн И.С. *Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений* /3-е изд., перераб. Москва/Ленинград: Гостехиздат, 1951. 464 с.
26. Polyanin A.D., Zaitsev V.F. *Handbook of exact solutions for ordinary differential equations*. 2nd ed. Boca Raton: Chapman & Hall, CRC Press, 2003. 787 p.
27. Fermi E., Pasta J., Ulam S. Studies of non linear problems // *Los Alamos Sc.Lab.Rep.* 1955. Vol. LA-1940. P. 978-988.
28. Hertz H. On the contact of solid elastic bodies and on hardness // *Journal of math.* 1881. Vol. 92. P. 156-171.
29. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. *Теоретическая физика : учебное пособие в 10т. Том 7. Теория упругости* / 4-е изд., испр. Москва: Наука, 1987. 248 с.
30. Hong J., Ji J.-Y., Kim H. Power laws in nonlinear granular chain under gravity // *Physical Review Letters*. 1999. Vol. 82, No.15. P. 3058-3061.
31. Carretero-González R., Khatri D., Porter M.A., Kevrekidis P.G., Daraio C. Dissipative solitary waves in granular crystals // *Physical review letters*. 2009. Vol. 102, No. 2, 024102.
32. Kadanoff L. Built upon sand: theoretical ideas inspired by granular flows // *Rev.Mod.Phys.* 1999. Vol. 71. P.435-447.
33. Gerasymov O.I., Khudyntsev N.N., Klymenkov O.A., Spivak A.Ya. The kinetics of processes occurring in granular materials in the field of vibroaccelerations // *Ukrainian Journal of Physics*. 2005. Vol.50, No.6. P.623-631.

34. Gerasymov O.I., Vandewalle N., Spivak A.Ya., Khudyntsev N.N., Lumay G., Dorbolo S., Klymenkov O.A. Stationary states in a 1D system of inelastic particles // *Ukrainian Journal of Physics*. 2008. Vol.53, No.11. P.1128-1135.
35. Uchida T., Kawahara Y., Hayashi Y., Tateishi A. Eulerian Deposition Model for Sediment Mixture in Gravel-Bed Rivers with Broad Particle Size Distributions // *Journal of Hydraulic Engineering*. 2020. Vol. 146, No. 10, 04020071.
36. Нотт Дж.Ф. *Основы механики разрушения*. Москва: Металлургия, 1978. 256 с.
37. Герасимов О.І., Худинцев М.М., Андріанова І.С., Співак А.Я. Гранульовані матеріали в технологіях утилізації радіаційно шкідливих речовин // Матеріали Національного форуму «Поводження з відходами в Україні: законодавство, економіка, технології». Проблеми та перспективи формування Стратегії поводження з небезпечними відходами в Україні (22-23 лист. 2016, м. Київ). С.40-42.
38. Герасимов О.І., Сомов М.М. Статистичний опис надлишкових властивостей бікомпонентних систем // *Український фізичний журнал*. 2015. Т. 60. № 4. С. 326-330.
39. Герасимов О.І., Загородній А.Г., Сомов М.М. Щодо аналізу структури гранульованих матеріалів // *Український фізичний журнал*. 2013. Т. 58. № 1. С. 32-39.
40. Pillitteri S., Lumay G., Opsomer E., Vandewalle N. From jamming to fast compaction dynamics in granular binary mixtures // *Scientific Reports*. 2019. Vol. 9, No. 1, 7281.
41. Jaeger H.M., Nagel S.R. Physics of the granular state // *Science*. 1992. Vol. 255, No. 5051. P. 1523-1531.
42. Aste T., Weaire D. *The Pursuit of Perfect Packing*. Bristol: IOP, 2000. 136 p.

43. Weitz D.A. Packing in the spheres // *Science*, 2004. Vol. 303, No. 5660. P. 968-969.
44. Torquato S. Perspective: Basic understanding of condensed phases of matter via packing models // *The Journal of chemical physics*. 2018. Vol. 149, No. 2, 020901.
45. Torquato S., Stillinger F.H. Jammed hard-particle packings: From Kepler to Bernal and beyond // *Reviews of modern physics*. 2010. Vol. 82, No. 3. P. 2633-2672.
46. Berryman J.G. Random close packing of hard spheres and disks // *Physical Review A*. 1983. Vol. 27, No. 2. P. 1053-1061.
47. Onoda G.Y., Liniger E.G. Random loose packings of uniform spheres and the dilatancy onset // *Physical review letters*. 1990. Vol. 64, No. 22. P.2727-2730.
48. Song C., Wang P., Makse H.A. A phase diagram for jammed matter // *Nature*. 2008. Vol. 453, No. 7195. P. 629-632.
49. Noirhomme M., Ludewig F., Vandewalle N., Opsomer E. Cluster growth in driven granular gases // *Physical Review E*. 2017. Vol. 95, No. 2, 022905.
50. Lumay G., Vandewalle N. Experimental study of granular compaction dynamics at different scales: grain mobility, hexagonal domains, and packing fraction // *Physical review letters*. 2005. Vol. 95, No. 2, 028002.
51. Carvente O., Ruiz-Suarez J. Crystallization of confined non-brownian spheres by vibrational annealing // *Physical review letters*. 2005. Vol. 95, No. 1, 018001.
52. Panaitescu A., Reddy K.A., Kudrolli A. Nucleation and crystal growth in sheared granular sphere packings // *Physical review letters*. 2012. Vol. 108, No. 10, 108001.
53. Knight J.B., Fandrich C.G., Lau C.N., Jaeger H.M., Nagel S.R. Density relaxation in a vibrated granular material // *Physical Review E*. 1995. Vol. 51, No. 5. P. 3957-3963.

54. de Richter S.K., Hanotin C., Marchal P., Leclerc S., Demeurie F., Louvet N. Vibration-induced compaction of granular suspensions // *The European Physical Journal E*. 2015. Vol. 38, No. 7, 74.
55. Nicolas M., Duru P., Pouliquen O. Compaction of a granular material under cyclic shear // *The European Physical Journal E*. 2000. Vol. 3, No. 4. P. 309-314.
56. Roquier G. The 4-parameter compressible packing model (cpm) including a new theory about wall effect and loosening effect for spheres // *Powder Technology*. 2016. Vol. 302. P. 247-253.
57. Farr R.S., Groot R.D. Close packing density of polydisperse hard spheres // *The Journal of chemical physics*. 2009. Vol. 131, No. 24, 244104.
58. Danisch M., Jin Y., Makse H.A. Model of random packings of different size balls // *Physical Review E*. 2010. Vol. 81, No. 5, 051303.
59. Chen D., Torquato S. Confined disordered strictly jammed binary sphere packings // *Physical Review E*. 2015. Vol. 92, No. 6, 062207.
60. Hopkins A.B., Jiao Y., Stillinger F.H., Torquato S. Phase diagram and structural diversity of the densest binary sphere packings // *Physical Review Letters*. 2011. Vol. 107, No. 12, 125501.
61. Behringer R.P., Chakraborty B. The physics of jamming for granular materials: a review // *Reports on Progress in Physics*. 2018. Vol. 82, No. 1, 012601.
62. Boutreux T., de Gennes P.G. Compaction of granular mixtures: a free volume model // *Physica A*. 1997. Vol. 244, No. 1-4. P. 59-67.
63. Kirkwood J.G., Buff F.P. The statistical mechanical theory of solutions. I. // *The Journal of chemical physics*. 1951. Vol. 19, No. 6. P. 774-777.
64. Carnahan N.F., Starling K.E. Equation of state for nonattracting rigid spheres // *The Journal of chemical physics*. 1969. Vol. 51, No. 2. P. 635-636.

65. Mansoori G.A., Carnahan N.F., Starling K.E., Leland Jr. T.W. Equilibrium Thermodynamic Properties of the Mixture of Hard Spheres // *The Journal of Chemical Physics*. 1971. Vol. 54, No. 4. P. 1523-1525.
66. Pillitteri S., Opsomer E., Lumay G., Vandewalle N. How size ratio and segregation affect the packing of binary granular mixtures // *Soft Matter*. 2020. Vol. 16, No. 39. P. 9094-9100.
67. Vandewalle N., Lumay G., Gerasimov O., Ludewig F. The influence of grain shape, friction and cohesion on granular compaction dynamics // *The European Physical Journal E*. 2007. Vol. 22, No. 3. P. 241-248.
68. Aliotta F., Gapiński J., Pochylski M., Ponterio R.C., Saija F., Salvato G. Excess compressibility in binary liquid mixtures // *The Journal of chemical physics*. 2007. Vol. 126, No. 22. 224508.
69. Tatom F.B., Srepel V., Johnson R.D., Contaxes N.A., Adams J.G., Seaman H., Cline B.L. Lunar Dust Degradation Effects and Removal/Prevention Concepts // *NASA Technical Report*. 1967. No. TR-792-7-207A. P.3-1.
70. Masuda S., Matsumoto Y. Motion of a microcharge particle within electrohydrodynamic field // *Electrical Engineering in Japan*. 1974. Vol.94, No.6. P.20-26.
71. Masuda S., Washizu M., Kawabata I. Movement of Blood Cells in Liquid by Nonuniform Traveling Field // *IEEE Transactions on Industrial Applications*. 1988. Vol.24, No.2. P.217-222.
72. Calle C.I. et al. Dust Particle Removal by Electrostatic and Dielectrophoretic Forces with Applications to NASA Exploration Missions // *Proc. ESA Annual Meeting on Electrostatics*, 2008, Minneapolis, Paper O1.
73. Jones T.B. *Electromechanics of Particles*. New York: Cambridge University Press, 1995. 265p.
74. Pohl H.A. *Dielectrophoresis*. Cambridge: Cambridge University Press, 1978. 720p.

75. Aliotta F., Gerasymov O.I., Calandra P. Electrospray Jet Emission: An Alternative Interpretation Invoking Dielectrophoretic Forces // ch.3 (pp.51-90) In: *Intelligent nanomaterials. Adv. Mater. Ser.* 2-nd ed. (Eds. A. Tiwari et al).: Wiley, Scrivener, USA, 2016. Print ISBN: 9781119242482
76. Aliotta F., Gerasymov O.I., Calandra P. Electrospray Jet Emission: An Alternative Interpretation Invoking Dielectrophoretic Forces // ch.3 (pp.51-90) In: *Intelligent nanomaterials. Adv. Mater. Ser.* 2-nd ed. (Eds. A. Tiwari et al).: Wiley, Scrivener, USA, 2017. Online ISBN: 9781119242628 DOI: <http://doi.org/10.1002/9781119242628.ch3>
77. Gerasymov O.I., Aliotta F., Vasi C., Chernilevska I.A. Universal micro-particle dynamics in non-uniform electric fields (from liquid to granular jet) // 6th International Conference "Nanotechnologies and Nanomaterials" (NANO-2018), 27-30 August 2018, Institute of Physics, Kyiv, Ukraine. P.514.
78. Novoselov K. S. et al. Electric field effect in atomically thin carbon films // *Science*. 2004. Vol. 306. No. 5696. P. 666-669.
79. Novoselov K. S. et al. Two-dimensional atomic crystals // *Proceedings of the National Academy of Sciences*. 2005. Vol. 102. No. 30. P. 10451-10453.
80. Weller T. E. et al. Superconductivity in the intercalated graphite compounds C_6Yb and C_6Ca // *Nature Physics*. 2005. Vol. 1. No. 1. P. 39-41.
81. De Heer W. A. et al. Epitaxial graphene // *Solid State Communications*. 2007. Vol. 143. No. 1-2. P. 92-100.
82. Brar V. W. et al. Scanning tunneling spectroscopy of inhomogeneous electronic structure in monolayer and bilayer graphene on SiC // *Applied Physics Letters*. 2007. Vol. 91. No. 12. P. 122102.
83. McCann E., Fal'ko V. I. Landau-level degeneracy and quantum Hall effect in a graphite bilayer // *Physical Review Letters*. 2006. Vol. 96. No. 8. P. 086805.
84. Brey L., Fertig H. A. Electronic states of graphene nanoribbons studied with the Dirac equation // *Physical Review B*. 2006. Vol. 73. No. 23. P. 235411.

85. Geim A. K., Novoselov K. S. The rise of graphene // *Nature Materials*. 2007. Vol. 6. No. 3. P. 183–191.
86. Лозовик Ю.Е., Меркулова С.П., Соколик А.А. Коллективные электронные явления в графене // *Успехи физических наук*. 2008. Т. 178. № 7. С. 757-776.
87. Neto A.H.C. et al. The electronic properties of graphene // *Reviews of modern physics*. 2009. Vol. 81. No. 1. P. 109-162;
88. Geim A.K. Graphene: status and prospects // *Science*. 2009. Vol. 324. No. 5934. P. 1530-1534.
89. Sun Y. et al. Highly efficient enrichment of radionuclides on graphene oxide-supported polyaniline // *Environmental science & technology*. 2013. Vol. 47. No. 17. P. 9904-9910.
90. В Фукусиме применена французская технология дезактивации загрязненной почвы. 17 квітня 2018. [Електронний ресурс]. Режим доступу: <http://www.atomic-energy.ru/news/2018/04/17/85040> Назва з екрана.
91. Герасимов О.І., Кільян А.М., Андріанова І.С., Курятников В.В., Співак А.Я. Технології дезактивації радіаційних забруднень за допомогою новітніх матеріалів: адсорбція у графенових матрицях. // Матеріали НАЦІОНАЛЬНОГО ФОРУМУ «Поводження з відходами в Україні: законодавство, економіка, технології» (22-23 листопада 2018, м. Київ). С. 189-194.
92. Khudyntsev M.M. Beginning of “photonics” in meso- and macro-scales: beginning of granular photonics. // Int. Conf.: *PhysIST-2016* (Odesa, 2-5 May, 2016), OSENU. P.7.
93. Khudyntsev M.M. Beginning of “photonics” in meso- and macro-scales: beginning of granular photonics. // Proc. Int. Conf. *PhysIST-2016* (2-5 May); OSENU. Odesa: TES, 2016. P.21-24.
94. Gerasymov O.I. (Ed.) *Proceedings of International multimedia (WEB) Conference “Physics for Interdisciplinary Science and Teaching” (PhysIST-*

- 2016), 2-5 May 2016; Odesa State Environmental University. Odesa: TES, 2016. 76 p.
95. Gerasymov O.I. *Structure and photonics of discrete meso-scaled anisotropic systems* : Monography / Gerasymov O.I.; Odesa State Environmental University. Odesa: TES, 2018. 242 p.
96. Герасимов О.І., Співак А.Я. *Окремі задачі фізики м'якої матерії : монографія* / Одеськ. держ. еколог. ун-т. Одеса: Видавничий дім "Гельветика", 2020. 200 с.
97. Герасимов О.І. *Технології захисту навколишнього середовища* : підручник / Одеськ. держ. еколог. ун-т. Одеса: ТЕС, 2019. 268 с.
98. Герасимов О.І., Андріанова І.С. *Фізика в задачах* : підручник / Одеськ. держ. екологіч. ун-т. Харків: ФОП Панов А.М., 2017. 564 с.
99. Gerasymov O.I.; *Environmental safety technologies. Handbook* / Odesa State Environmental University. Odessa, Publishing house "Helvetica", 2020. 220p.
100. Герасимов О.І. *Теоретичні основи технологій захисту навколишнього середовища* : навчальний посіб. / Одеськ. держ. екол. ун-т. Одеса: ТЕС, 2018. 228 с.
101. Герасимов О.І., Андріанова І.С., Настасюк В.А. *Методи теоретичної і математичної фізики в задачах забезпечення довкілля* : навч. посібник / Одеськ. держ. еколог. ун-т. Одеса: Видавничий дім "Гельветика", 2020. 160с.
102. Gerasymov O.I. One exactly solvable model of chemically reactive system on 1D partially filled lattice // *Вісник Одеського державного екологічного університету*. 2017. №21. С.86-92.
103. Gerasymov O.I. Entropy analysis for local structure of granular matter // *Вісник Одеського державного екологічного університету*. 2017. №22. С.102-106.
104. Koval V.V., Kalian D.O., Tepluk V.M., Shkliarevskii I.I., Khudyntsev M.M. Multichannel clock signal monitoring system for

- infocommunication networks // 13th International Conference on *Modern Problems of Radio Engineering, Telecommunications and Computer Science (TCSET)*, 23-26 Feb. 2016. IEEE, 2016. P.618-620; <https://doi.org/10.1109/TCSET.2016.7452132>
105. Gerasymov O., Spivak A., Andrianova I., Sidletska L., Kuryatnikov V., & Kilian A. Micro-mechanical (granular) mixtures for environmental safety technologies // Proceedings of 9th International Conference on "Innovation and Modern Applied Science in Environmental Studies" (ICIES'2020), 25-27 December 2020, Kenitra, Morocco. ID: #ICI20KM428 – accepted & will be published in *E3S Web of Conferences* (eISSN: 2267-1242).
106. Герасимов О.І., Андріанова І.С., Курятников В.В., Співак А.Я., Кільян А.М., Сідлецька Л.М. Ущільнення (компактизація) впакування у бі-компонентній мікро-механічній (гранульованій) суміші // *Наука та інновації* – Надіслано до редакції
107. Aliotta F., Vasi C., Gerasymov O., Spivak A. Towards definition of isothermal compressibility of binary liquid mixtures. // *The Journal of Chemical Physics* – Готується до засилання у редакцію
108. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya., Fratalocci A. Multimode Wave Dynamics of Non-homogeneous Hertz Chain // *Scientific Reports* – Готується до засилання у редакцію
109. Андріанова І.С., Герасимов О.І., Курятников В.В., Співак А.Я. Концептуальні питання освітньо-професійної підготовки фахівців з спеціальності «Технології захисту навколишнього середовища» // *Фізика аеродисперсних систем* – Надіслано до редакції
110. Герасимов О.І., Андріанова І.С., Курятников В.В., Співак А.Я., Кільян А.М., Сідлецька Л.М. Технології радіаційного захисту з використанням гранульованих матеріалів // *Фізика аеродисперсних систем* – Надіслано до редакції

111. Gerasymov O.I., Aliotta F. and Vasi C. Semiempirical Kirkwood-Buff interpretation for isothermal compressibility excess of liquid binary mixtures // Proceedings of International multimedia (WEB) Conference “*Physics for Interdisciplinary Science and Teaching*” (PhysIST-2016), 2-5 May 2016; Odesa State Environmental University. Odesa: TES, 2016. P.14-15.
112. Калмикова О.О., Співак А.Я. Моделювання структури методом молекулярної динаміки // Збірник статей за матеріалами студентської наукової конференції ОДЕКУ (6-15 квітня, 2016). С.172-174.
113. Gerasymov O.I. Theoretical physics methods for environmental sciences // Міжнародний семінар: Neapolis University Pafos (Cyprus) 10-12 серпня 2017.
114. O.I. Gerasymov, A.Ya. Spivak, M.M. Khudyntsev, O.O. Kalmykova, O.V. Popkova, Meso-scaled photonics meet ecological monitoring of harmful impurities // VI Всеукраїнський з'їзд екологів з міжнародною участю (*Екологія/Ecology-2017*), м. Вінниця, 20-22 вересня, 2017 : збірник наукових праць. Вінниця : ВНТУ, 2017. С.172.
115. O.I. Gerasymov, A.Ya. Spivak, M.M. Khudyntsev, V.V. Kravchuk, A.V. Horyslavets, Toward the telecommunication impact onto environment. // VI Всеукраїнський з'їзд екологів з міжнародною участю (*Екологія/Ecology-2017*), м. Вінниця, 20-22 вересня, 2017 : збірник наукових праць. Вінниця : ВНТУ, 2017. С.173.
116. Попкова О.В., Герасимов О.І. Розповсюдження випромінювань у неоднорідних та гіпернеоднорідних системах // Матеріали XVI наукової конференції молодих вчених ОДЕКУ (10 травня, 2017). С.141-142.
117. Науменко В.І., Герасимов О.І., Кудашкина Л. С. Вплив структурованих конгломерацій на взаємодію озонового шару з гамма-випромінюванням // Матеріали XVI наукової конференції молодих вчених ОДЕКУ (10 травня, 2017). С.140-141.

118. Калмикова О.О., Герасимов О.І. Моніторинг шкідливих домішок та забезпечення довкілля за допомогою нелінійної хвильової динаміки // Матеріали XVI наукової конференції молодих вчених ОДЕКУ (10 травня, 2017). С.140.
119. Гориславець А.В., Герасимов О.І. Фізичне забруднення довкілля з боку телекомунікаційних мереж // Матеріали XVI наукової конференції молодих вчених ОДЕКУ (10 травня, 2017). С.139-140.
120. Кравчук В.В., Герасимов О.І., Худинцев М.М. Технології захисту елементів навколишнього середовища від фізичних забруднень, які створюються комунікаційними мережами // Матеріали XVI наукової конференції молодих вчених ОДЕКУ (10 травня, 2017). С.138.
121. Поляков О.П., Андріанова І.С. Використання гідродинамічних методів обробки з метою очистки мікромеханічних систем // Матеріали XVI наукової конференції молодих вчених ОДЕКУ (10 травня, 2017). С.142.
122. Швець М.М., Андріанова І.С. Фракційно-кінетичний сценарій еволюції систем зі складною морфологією // Матеріали XVI наукової конференції молодих вчених ОДЕКУ (10 травня, 2017). С.143-144.
123. Мунтян І.О., Герасимов О.І. Динаміка збурених гранульованих конгломерацій // Збірник тез за матеріалами студентської наукової конференції ОДЕКУ (12 квітня 2017); ОДЕКУ, Одеса, 2017
124. Gerasymov O.I., Chernilevska I.A. Levitation and jet-stream of micromechanical conglomerations in electric field // VIII Conference of Young Scientists Problems of Theoretical Physics (December 12 – 14, 2017); ВІТР, Kyiv, Ukraine. P.17.
125. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya. Landau-Ginsburg kinetics of granular fluid compaction // Abstracts of 8th International Conference “*Physics of Liquid Matter: Modern Problems*” (PLMMP-2018), 18-22 May 2018, Kyiv, Ukraine. P. 150.

126. Gerasymov O., Aliota F., Vasi C., Chernilevska I. Liquid and granular streams, manipulated by external inhomogeneous electric field // Abstracts of 8th International Conference “*Physics of Liquid Matter: Modern Problems*” (PLMMP-2018), 18-22 May 2018, Kyiv, Ukraine. P. 103.
127. Gerasymov O.I., Kudashkina L.S. The density of matter from micro-mechanical (granular) to macro-mechanical (Universe) systems // Abstracts of 18-th Odessa International Astronomical Gamow Conference-School *Astronomy and beyond: Astrophysics, Cosmology, Cosmomicrophysics, Astroparticle physics, Radioastronomy and Astrobiology* (August 12-18, 2018, Odessa, Ukraine). P. 10.
128. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya. Towards the problem of the Nesterenko’s soliton waves propagation in nonlinear inhomogeneous Hertzian chains // IX Young Scientists Conference “Problems of Theoretical Physics” dedicated to the 100-th anniversary of the National Academy of Sciences of Ukraine (December 4-5, 2018 Kyiv, Ukraine). P.2.
129. Головка О.В., Герасимов О.І. Контрольно-вимірювальний стенд для дослідження фізичних властивостей гранульованих матеріалів // Збірник статей за матер. студ. наук. конф. ОДЕКУ (15-18 квітня 2019р). С.130-134.
130. Юрковська А.І., Герасимов О.І., Співак А.Я. Чисельне моделювання складних процесів за допомогою спеціальних функцій // Збірник статей за матер. студ. наук. конф. ОДЕКУ (15-18 квітня 2019р). С.134-138.
131. Бурлака Д.Ю., Андріанова І.С. Кондуктометричний метод контролю чистоти поверхні полімерів при механічному рециклінгу // Збірник статей за матер. студ. наук. конф. ОДЕКУ (15-18 квітня 2019р). С.138-142.
132. Чувальська М.Г., Співак А.Я. Контроль якості продуктів харчування: системний підхід // Збірник статей за матер. студ. наук. конф. ОДЕКУ (15-18 квітня 2019р). С.143-147.

133. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya. Wave Dynamics of Impulse Perturbations in 1D Force-Chains // Bogolyubov Kyiv Conference “*Problems of Theoretical and Mathematical Physics*” (24-26 September 2019), Kyiv, BITP. P.39.
134. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya., Golovko O.V. Parameterization of the Local Structure of Micro-Mechanical Systems (Granular Materials) // Bogolyubov Kyiv Conference “*Problems of Theoretical and Mathematical Physics*” (24-26 September 2019) , Kyiv, BITP. P.73.
135. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya. Towards understanding of condensed matter via study granular systems // X Young Scientists Conference “*Problems of Theoretical Physics*” dedicated to the 110-th anniversary of the M.M. Bogolyubov (1909-1992), BITP, December 23-24, 2019, Kyiv, Ukraine. P.16-17.
136. Герасимов О.І., Карабіненко Ю.О., Андріанова І.С., Співак А.Я., Івашковська Ю.О. Модель дії гранульованого модуля радіаційного захисту // *VII-й Всеукраїнський з'їзд екологів з міжнародною участю* (25-27 вересня 2019), Вінниця, ВНТУ. С.28.
137. Gerasymov O., Aliotta F., Vasi C., Chernilevska I. Electrophoretic levitation model of thin cleaning technology // *VII-th All-Ukrainian congress of ecologists with international participation* (25-27 September 2019), Vinnytsia, VNTU. P.29.
138. Герасимов О.І., Худинцев М.М., Дондук І.А. Навколишнє середовище і електромагнітне опромінення // *VII-й Всеукраїнський з'їзд екологів з міжнародною участю* (25-27 вересня 2019), Вінниця, ВНТУ. С.30.
139. Герасимов О.І., Андріанова І.С., Кільян А.М. Новітні матеріали в задачах дезактивації: графен у топологічних фазах // *VII-й Всеукраїнський з'їзд екологів з міжнародною участю* (25-27 вересня 2019), Вінниця, ВНТУ. С.31.

140. Герасимов О.І., Співак А.Я., Чувальська М.Г. Радіаційне забруднення морських водоймищ та його наслідки // *VII-й Всеукраїнський з'їзд екологів з міжнародною участю (25-27 вересня 2019)*, Вінниця, ВНТУ. С.76.
141. Ivashkovska Yu.O., Spivak A.Ya. Investigation of background gamma-ray spectrums as depending on supply voltage of PMT // *VII-th All-Ukrainian congress of ecologists with international participation (25-27 September 2019)*, Vinnytsia, VNTU. P.97.
142. Герасимов О.І., Курятников В.В., Співак А.Я., Кільян А.М. Моделювання спектрів гамма-випромінювання з використанням віртуальної гамма-лабораторії GAMMALAB // *VII-й Всеукраїнський з'їзд екологів з міжнародною участю (25-27 вересня 2019)*, Вінниця, ВНТУ. С.98.
143. Spivak A., Gerasymov O. Towards understanding of condensed matter via study granular systems // *Proceedings in Book of Abstracts X Conference of Young Scientists "Problems of Theoretical Physics"*, 23-24 December 2019, ВІТР, P.16-17.
144. Sidletska L., Gerasymov O., Spivak A. Compressibility excess and structurization of binary granular mixture // *Proceedings in Book of Abstract X Conference of Young Scientists "Problems of Theoretical Physics"*, 23-24 December 2019, ВІТР, P.19.
145. Чернілевська І.А., Герасимов О.І. Левітаційно-електрофоретична технологія тонкої пило очистки // *Матеріали XIX наукової конференції молодих вчених ОДЕКУ (25-29 травня)*. Одеса: ОДЕКУ, 2020. С.189.
146. Сідлецька Л.М., Герасимов О.І. Фізичні властивості бі-компонентних статистичних систем: феноменологічна теорія // *Матеріали XIX наукової конференції молодих вчених ОДЕКУ (25-29 травня)*. Одеса: ОДЕКУ, 2020. С.190-191.
147. Турчин В.С., Герасимов О.І. Моделювання фізико-технічних параметрів гранульованих радіаційних захисних екранів // *Матеріали*

- XIX наукової конференції молодих вчених ОДЕКУ (25-29 травня). Одеса: ОДЕКУ, 2020. С.192-193.
148. Кібьяков В.І., Герасимов О.І., Кільян А.М. Топологічні фази графену в задачах радіаційної дезактивації // Матеріали XIX наукової конференції молодих вчених ОДЕКУ (25-29 травня). Одеса: ОДЕКУ, 2020. С.194-195.
149. Шалоумов Ю.М., Герасимов О.І. Актуальні проблеми впровадження сталого розвитку // Матеріали XIX наукової конференції молодих вчених ОДЕКУ (25-29 травня). Одеса: ОДЕКУ, 2020. С.196-197.
150. Блищик І.А., Курятников В.В. Знешкодження і переробка промислових відходів // Матеріали XIX наукової конференції молодих вчених ОДЕКУ (25-29 травня). Одеса: ОДЕКУ, 2020. С.198.
151. Цушко В.Є., Співак А.Я. Технології транспортування і зберігання сипких матеріалів // Матеріали XIX наукової конференції молодих вчених ОДЕКУ (25-29 травня). Одеса: ОДЕКУ, 2020. С.199-200.
152. Сідлецька Л.М., Герасимов О.І., Шотова-Ніколенко А.В Granular materials in technology of protection against radiation waste // Матеріали XIX наукової конференції молодих вчених ОДЕКУ (25-29 травня). Одеса: ОДЕКУ, 2020. С.209.
153. Чернілевська І.А., Герасимов О.І. Левітаційно-електрофоретична технологія тонкого пилоочищення (теоретична концепція) // Збірник матеріалів Всеукраїнської науково-практичної заочної конференції студентів, аспірантів та молодих учених *«Екологія, природокористування та охорона навколишнього середовища: прикладні аспекти»*, 2020/5/29, Маріуполь: МДУ, 2020. С.41-43.
154. Шалоумов Ю.М. Проблеми енергетики при впровадженні сталого розвитку // Збірник матеріалів Всеукраїнської науково-практичної заочної конференції студентів, аспірантів та молодих учених *«Екологія,*

- природокористування та охорона навколишнього середовища: прикладні аспекти», 2020/5/29, Маріуполь: МДУ, 2020. С.43-44.*
155. Сідлецька Л.М. Гранульовані матеріали в технологіях радіаційного захисту та утилізації радіаційно-шкідливих речовин // Збірник матеріалів Всеукраїнської науково-практичної заочної конференції студентів, аспірантів та молодих учених «*Екологія, природокористування та охорона навколишнього середовища: прикладні аспекти*», 2020/5/29, Маріуполь: МДУ, 2020. С.136-138.
156. Сідлецька Л.М. Утилізація радіоактивних відходів на АЕС України за допомогою радіаційного захисного екрану на основі гранульованих матеріалів // Матеріали *IV-го Всеукраїнського пленера з питань природничих наук* (19 червня), ОДЕКУ; Одеса: ТЕС, 2020. С.80.
157. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya., Sidletskaya L. Compressibility and compactivity of bi-dispersive many-particle conglomerations (liquid and granular mixtures) // XI Conference of Young Scientists "Problems of Theoretical Physics" (December 21-23, 2020 Kyiv, Ukraine), abstract ID 11.
158. Герасимов О.І., та ін. Дослідження структури і динамічних властивостей складних статистичних систем: колоїдних розчинів та сухих гранульованих матеріалів // Звіт НДР №ДР0201U003438. Одеса, 2000. 40 с.
159. Герасимов О.І., та ін. Фізика складних систем: динамічні дисипативні матеріали у гранульованих фазах // Звіт НДР ПНДЛ ФССФПД, №62, №ДР0203U008730. Одеса, 2003. 89 с.
160. Герасимов О.І., та ін. Статистична фізика складних систем // Звіт НДР, №ДР0206U004865. Одеса, 2005. 114 с.
161. Герасимов О.І., та ін. Дослідження структурних та динамічних властивостей гранульованих матеріалів // Звіт НДР ДФФД, №Ф25/604-2007, №ДР0207U010167. Одеса, 2007. 46 с.

162. Герасимов О.І., та ін. Фізика складних систем з дисипативними взаємодіями // Звіт НДР, №ДР0212U004023. Одеса, 2010. 107 с.
163. Герасимов О.І., та ін. Структура та динаміка мультімасштабних механічних систем //Звіт НДР, №ДР0216U002209. Одеса, 2015. 110 с.