

**О. І. ГЕРАСИМОВ
А. Я. СПИВАК
Л. М. СІДЛЕЦЬКА**

**ФІЗИЧНІ МЕХАНІЗМИ ПРОЦЕСІВ, НА ЯКИХ
БАЗУЮТЬСЯ ТЕХНОЛОГІЇ ОЧИСТКИ ТА
ДЕЗАКТИВАЦІЇ ЗАБРУДНЕНИХ СИСТЕМ**

Монографія

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ОДЕСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ ЕКОЛОГІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

О.І. ГЕРАСИМОВ, А.Я СПИВАК., Л.М. СІДЛЕЦЬКА

**ФІЗИЧНІ МЕХАНІЗМИ ПРОЦЕСІВ, НА ЯКИХ
БАЗУЮТЬСЯ ТЕХНОЛОГІЇ ОЧИСТКИ ТА
ДЕЗАКТИВАЦІЇ ЗАБРУДНЕНИХ СИСТЕМ**

Монографія

Одеса
Одеський державний екологічний університет
2024

УДК 53
Г 37

Герасимов О.І., Співак А.Я., Сідлецька Л.М.

Г 37 Фізичні механізми процесів, на яких базуються технології очистки та дезактивації забруднених систем: монографія. Одеса : Одеський державний екологічний університет, 2024. 98 с.

На теперішній час технології захисту різноманітних елементів навколишнього середовища є достатньо розвинутою міждисциплінарною галуззю науки, яка оперує сегментами багатьох фундаментальних наук, серед яких фізика займає, безперечно, особливе місце. Створення та функціонування будь-якої технології, або підходу до організації захисту того чи іншого компонента навколишнього середовища від шкідливих впливів так чи інакше використовує знання фізичних законів та закономірностей, які лежать в основі їхньої роботи.

Монографія розрахована на широке коло науковців, викладачів, аспірантів і студентів вищих навчальних закладів, які займаються фізико-технічними, міждисциплінарними (включаючи екологічно безпечні технології) та суміжними напрямками дослідження систем і процесів, як технологічних, так і існуючих і відбуваються в середовищі.

ISBN 978-966-186-287-5

Gerasymov O.I., Spivak A.Ya., Sidletska L.M.

Physical mechanisms of the processes on which technologies for cleaning and decontamination of contaminated systems are based: monograph. Odesa : Odessa State Environmental University, 2024. 98 p.

Currently, technologies for the protection of various elements of the environment are a sufficiently developed interdisciplinary branch of science, which operates in the segments of many fundamental sciences, among which physics occupies, undoubtedly, a special place. The creation and operation of any technology or approach to the organization of protection of this or that component of the environment from harmful effects in one way or another uses knowledge of physical laws and regularities that underlie their work.

The monograph is intended for a wide range of scientists, teachers, graduate students and students of higher education institutions working in physical and technical, interdisciplinary (including environmental safety technologies), and related areas of research systems and processes, both technological and existing and occur in the environment.

УДК 53

Р е ц е н з е н т и :

д-р техн. н., проф. **Софронков О.Н.**; д-р фіз.-мат. н., проф. **Калінчак В.В.**;
д-р техн. н., проф. **Скалозубов В.В.**

Рекомендовано до друку рішенням вченої ради Одеського державного екологічного університету Міністерства освіти і науки України (протокол № 3 від 25.04.2024 р.)

ISBN 978-966-186-287-5

© Герасимов О.І., Співак А.Я., Сідлецька Л.М. 2024
© Одеський державний екологічний університет, 2024

ЗМІСТ

Вступ.....	5
РОЗДІЛ 1 Кінетика структуроутворень	8
1.1 Кінетична модель вільного об'єму.....	8
1.2 Кінетична дисперсійна модель ущільнення гранульованих матеріалів.....	11
1.2.1 Розв'язок кінетичного рівняння.....	11
1.2.2 Побудова фазової діаграми ущільнення.....	16
1.3 Застосування рівняння стану Карнахана-Старлінга для опису компактизації у гранульованій системі.....	18
1.3.1 Вільна енергія для монодисперсної системи за рівнянням стану Карнахана-Старлінга.....	19
1.3.2 Побудова кінетичного рівняння за сценарієм Ландау-Гінзбурга та його розв'язок у лінійному наближенні	21
1.3.3 Загальні риси релаксації параметру компактизації	21
1.4 Бідисперсна гранульована система.....	25
1.5 Висновок.....	32
РОЗДІЛ 2 Взаємодія іонізуючого випромінювання з речовиною.....	33
2.1 Проходження випромінювання крізь речовину.....	33
2.2 Взаємодія важких частинок із речовиною.....	37
2.3 Взаємодія електронів із речовиною.....	42
2.4 Взаємодія гамма-випромінювання з речовиною.....	46
РОЗДІЛ 3 Фізичне моделювання в технологіях водоочищення.....	54
3.1 Класифікація води та забруднюючих її домішок.....	54
3.2 Аналіз впливу температурних змін сезонного або кліматичного походження на кінетичну стійкість гравітаційних осаджувальних систем.....	55
3.3 Розрахунки відстійників.....	62
3.4 Коагуляція, флокуляція і флоціяція у змуленій воді.....	63
3.5 Зворотний осмос і ультрафільтрація в розчинах стічних вод.....	64
3.6 Електричні методи очищення забрудненої води.....	65
РОЗДІЛ 4 Гідростатичний тиск в гранульованому середовищі.....	68
4.1 Гідростатичний тиск в гранульованих системах.....	69
4.2 Впакування гранульованих матеріалів.....	71
4.3 Вільна енергія, ентропія і профіль густини в ґратковому газі у гравітаційному полі.....	73
4.4 Вертикальний гідростатичний тиск в системах з фермі-профілем густини.....	74
РОЗДІЛ 5 Модель розсіювання вхідного гамма-випромінювання а гранульованій матриці.....	77
5.1 Фізичні властивості гранульованих матеріалів.....	77
5.2 Деякі специфічні властивості гранульованих матеріалів.....	78

5.3 Модель захисного радіаційного екрану на базі уявлень про багат шарову структуру.....	80
5.3.1 Модель кінетичних процесів в гранульованій матриці...	82
5.3.2 Природні та штучні гранульовані матеріали.....	86
5.4 Міграція домішок (радіонуклідів) у пористому середовищі.....	88
Висновок.....	90
Перелік джерел посилань.....	91

ВСТУП

Сьогодні технології захисту різних елементів довкілля є добре розвиненою, міждисциплінарною галуззю науки в багатьох фундаментальних науках, серед яких фізика посідає особливе місце. Створення та функціонування всіх технологій і підходів до захисту конкретних компонентів довкілля від шкідливого впливу використовує знання фізичних законів і закономірностей, які лежать в основі їх функціонування.

Методи і підходи до захисту повинні бути диверсифікованими і адаптованими, з урахуванням специфічних характеристик систем, що підлягають захисту, наприклад, колективних умов, в яких вони знаходяться. Вони також повинні бути спрямовані на захист від конкретних типів зовнішніх впливів. Саме виконання вищезазначеного набору вимог визначає захисну технологію, призначену для виконання конкретної, суто технічної функції. Звичайно, будь-яка технологія має багато функцій, що базуються на декількох галузях і одній або декількох науках. Наприклад, фізика і хімія, фізика і біологія тощо. Ця міждисциплінарність, так би мовити, ускладнює чітку класифікацію технологій відповідно до точного переліку наук, які вони пропонують.

Тим не менш, ми спробуємо хоча б частково класифікувати деякі важливі елементи, такі як фізика. Тут зроблено посилання на окремі категорії, які несуть технологічне навантаження або забезпечують чи мають відношення до ефективності технології в природоохоронній діяльності. Відповідно, буде представлено основну частину положень і законів фізики, які відіграють важливу роль у розробці та впровадженні вищезгаданих технологій.

- Очищення повітря від забруднень за допомогою інерційних газових фільтрів - механіка.
- Шкідливий вплив важкої техніки на біосферу родючих шарів ґрунту - механіка.
- Авіація та гідроенергетика Екологічні проблеми використання енергії річок.
- Екологічні переваги та недоліки вітрових турбін - механіка.
- Фізичні процеси, пов'язані з роботою реактивних двигунів і забрудненням навколишнього середовища (викиди газів, нагрівання, шум і т.д.) Порівняння теплових двигунів з точки зору їх впливу на навколишнє середовище. Заміна теплових двигунів на транспорті електродинамікою.
- Молекулярна кінетика (МКТ) і термодинаміка. Електрика і магнетизм.

Єдиний світовий повітряний і водний океани. Міграція забруднень повітрям і водою. Зміни складу атмосфери під впливом антропогенних

факторів. Особливості розсіювання циклонів і антициклонів. Зрошувальні та осушувальні системи, вплив на мікроклімат.

-Динаміка МКТ і термодинаміка.

Температура як основний екологічний фактор. Вплив змін температури і вологості на метаболічний баланс організмів. Вплив забруднення повітря на конденсацію водяної пари.

-МКТ і термодинаміка.

Випаровування рідкого палива з поверхні відкритих сховищ. Утворення кислотних дощів. Небезпека для життя на Землі внаслідок накопичення в атмосфері фреонів та аміаку.

-МКТ і термодинаміка.

Вплив статичної електрики на біологічні об'єкти. Електрична стимуляція насінневого та рослинного життя. Заходи з електрифікації житлових приміщень. Очищення повітря електрофільтрами.

-Електрика і магнетизм.

Необхідність обережного поводження з гальванічними елементами та батареями. Питання утилізації. Екологічні аспекти електролітичних виробництв. Очищення води від забруднень під час електролізу (методом електрофлотації).

Методи визначення мінералізації за електропровідністю ґрунту та ґрунтових вод. Принципи роботи електрофільтраційних очисних споруд.

-Електрика і магнетизм.

Екологічні перетворювачі теплової та оптичної енергії в електричну (напівпровідникові прилади). Застосування фотоелектричних елементів і термопар, сонячних батарей і термоелектричних генераторів. Використання сонячної енергії.

-Електрика і магнетизм.

Вплив магнітних полів на живі організми. Поняття в магнітній біології

- Магнетизм.

Зміни прозорості атмосфери під впливом антропогенних факторів та їх екологічні наслідки. Відмінності у відбивній здатності різних поверхонь з екологічної точки зору.

- Оптика.

Застосування спектрального аналізу в екологічному моніторингу.

- Оптика.

Біологічна дія ультрафіолетового, інфрачервоного та рентгенівського випромінювання та їх захист. Вплив забруднення повітря на зміну спектрального складу навколосемного сонячного світла. Парниковий ефект

-Оптика.

МКТ і термодинаміка

Біологічна дія звукових хвиль. Шум і боротьба з ним. Звуковий резонанс і біоритми.

-Механічні коливання та хвилі.

Екологічний вплив електромагнітних хвиль (радіо, телебачення, телефони) на організм людини. Біологічні ефекти та захист від електромагнітних хвиль дуже високої частоти.

-Електромагнітні коливання та електромагнітні хвилі.

Природний радіоактивний фон та його вплив на живу природу. Циркуляція чотирьох радіоактивних елементів у природі та їх вплив на біологічні системи. Вплив радіоактивного забруднення на здоров'я людини та навколишнє середовище.

-Квантова механіка Ядерна фізика.

Виробництво ядерної енергії. Проблеми захоронення радіоактивних відходів на атомних електростанціях. Небезпеки аварій на реакторах та заходи щодо їх запобігання. Порушення конвекції у випадку ядерної війни та "ядерної зими".

-МКТ, термодинаміка та ядерна фізика.

Для того, щоб продемонструвати обґрунтованість і практичність наведених вище класифікацій станів, розглядаються подальші практичні проблеми, що формують екологічне матеріалознавство на практиці, закладаючи основи теорії радіаційного захисту на основі сучасних дискретних мікромеханічних матеріалів.

РОЗДІЛ 1 КІНЕТИКА СТРУКТУРОУТВОРЕНЬ

Серед найбільш характерних властивостей гранульованих матеріалів особливе місце займає вплив стиснення під дією зовнішніх впливів [1-4]; в роботах [5-7] детально проаналізовано модель середнього поля, що застосовується для опису динаміки вільного об'єму.

1.1 Кінетична модель вільного об'єму

Розглянемо найпростішу кінетичну модель компактизації, яка базується на теорії вільного об'єму. Якщо ρ - густина гранул, а ω - об'єм кожної окремої гранули, тоді об'ємна фракція (параметр компактизації) h , яку займають гранули, надається у такому вигляді

$$h = \rho \omega. \quad (1.1)$$

Внаслідок компактизації гранульована система ущільнюється. При цьому повний об'єм системи зменшується, і відповідно зростають значення густини ρ та параметра компактизації h . Можна очікувати, що система досягне стану максимально можливого ущільнення, з відповідною густиною ρ_m і частиною зайнятого об'єму h_m (параметром компактизації), яку позначимо таким чином

$$h_m = \rho_m \omega. \quad (1.2)$$

У випадку твердих сферичних частинок, розподілених у тривимірному просторі, максимально можливе значення параметра компактизації h_m може бути розраховане точно і дорівнює 0.74 [8].

Система, яка характеризується параметром компактизації h_m має найменше значення середнього вільного об'єму v , у розрахунку на одну гранулу

$$v = \frac{1}{\rho} - \frac{1}{\rho_m} = \frac{\omega}{h} - \frac{\omega}{h_m} = \omega \frac{h_m - h}{h h_m}. \quad (1.3)$$

Постулюємо, що імовірність для окремої частинки проковзнути крізь отвір між сусідніми частинками (W) задовольняє експоненційному розподілу $P(W)$

$$P(W) = \frac{1}{v} \exp\left\{-\frac{W}{v}\right\}, \quad (1.4)$$

де W - розмір отвору між сусідніми частинками.

Функція розподілу f у цьому випадку має вигляд

$$f = f(W = \omega) = \exp\left\{-\frac{\omega}{v}\right\} = \exp\left\{-\frac{h h_m}{h_m - h}\right\}. \quad (1.5)$$

Сформулюємо найпростіше кінетичне рівняння процесу у такому вигляді

$$\frac{dh}{dt} = k \exp\left(-\frac{h}{h_m}\right) \frac{h}{h_m} \ddot{\phi} \quad (1.6)$$

де k - кінетичний коефіцієнт. Зауважимо, що час ми фактично асоціюємо із кількістю струшувань (циклів струсу), які збурюють систему.

Інтегруючи (1.6), отримуємо функціонал

$$e^{h_m kt} = \int_{h_1}^h \exp\left(-\frac{h}{h_m}\right) \frac{h}{h_m} \ddot{\phi} dh \quad (1.7)$$

де h_1 - початковий параметр компактизації системи у момент часу $t = 0$. Зрозуміло, що верхня межа інтегрування (h) може набувати значення у наступному проміжку

$$h_1 < h < h_m. \quad (1.8)$$

Виконуючі заміну

$$\frac{1}{h_m - h} = x, \quad (1.9)$$

після підстановок (3.9) в (3.7) та елементарних перетворень отримуємо

$$e^{h_m kt} = - \left. \frac{e^{h_m^2 x}}{x} \right|_{x_1} + h_m^2 [E_1(-h_m^2 x_1) - E_1(-h_m^2 x)], \quad (1.10)$$

де $E_1(y)$ - інтегральна експонента [9].

У першому наближенні приблизний розв'язок (1.7) можна надати у наступному вигляді [5]:

$$h \gg h_m \ln \left(1 + \frac{h_m G}{1 + G \ln \left(1 + \frac{t}{t_0} \right)} \right) \ddot{\phi} \quad (1.11)$$

де t_0 і G , відповідно, характерний час процесу і константа, які визначаються наступним чином

$$t_0 = \frac{1}{k} \frac{h_m - h_1}{h_m} \exp\left(-\frac{h_m}{h_m - h_1}\right), \quad G = \frac{h_m - h_1}{h_m^2}. \quad (1.12)$$

Як описано в [10,11], фізичні експерименти та чисельне моделювання ущільнення гранул показують, що такі процеси мають виключно логарифмічний (або близький до нього) характер.

Підкреслимо, що розроблена кінетична модель безпосередньо підтверджує результати фізичних та чисельних експериментів. Формально слід зазначити, що модель не враховує дисипативні процеси в гранульованих відкритих системах. Зрозуміло, що застосування формулювання моделі до дисипативних систем можливе лише поблизу

стаціонарного стану дисипативної системи. Тому дисипативні процеси ефективно пояснюються, так би мовити, в рамках припущення про існування самого стаціонарного стану в нерівноважній системі.

Розроблена модель дозволяє краще зрозуміти структуру і динаміку перетворень у гранульованих матеріалах шляхом побудови відповідної фазової діаграми. Такі діаграми ґрунтуються на базовому уявленні про ущільнення в гранульованих матеріалах, зокрема, як показано на рис. 1.1.

Ущільнення відбувається по будь-якому контуру діаграми, що відповідає співіснуванню в будь-який момент часу конгломератної фази (великі частинки і дисперговані між ними дрібні частинки) і пудінгової фази (дрібнодисперсна суміш з вкрапленнями великих частинок). Розшарування відбувається вздовж фазових траєкторій, обумовлених ОА, які розділяють вищезгадані стани. Описана якісна фазова діаграма, за визначенням, значно асиметрична.

Взагалі кажучи, застосування кінетичної теорії вільного об'єму до багатокомпонентних сумішей може бути здійснене без істотних змін, як і у випадку однокомпонентних систем. Останнє є наслідком того, що однокомпонентна модель вільного об'єму фактично є двокомпонентною моделлю [8].

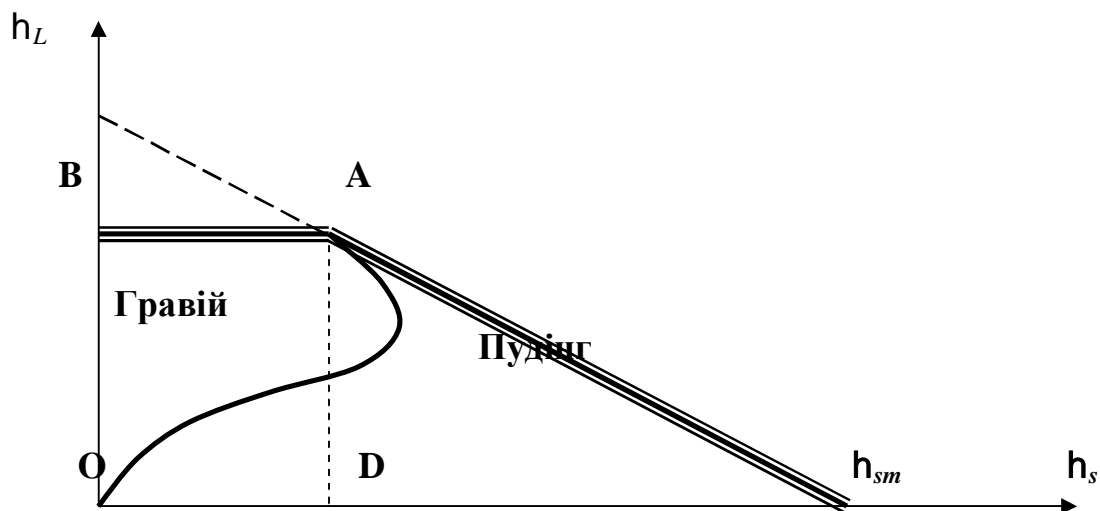


Рисунок 1.1 - Фазова діаграма суміші гранул [7]

1.2 Кінетична дисперсійна модель ущільнення гранульованих матеріалів

У попередньому підрозділі 1.1 ми припустили, що система заповнена частинками, і виявили, що стиснення відбувається логарифмічно з часом у пуассонівському наближенні функції розподілу вакансій. Узагальнимо модель динаміки вільного об'єму на випадок квазібінарних систем. Ця модель може бути використана для опису полідисперсних і багатокомпонентних систем, а також систем, що складаються зі змішаних доменів з різними симетріями стиснення.

Запропонований підхід [12] базується на парадигмі, в якій система розбивається на два типи доменів з різним максимальним ущільненням вакансій, що заповнюються. Таким чином, модель штучно розбиває систему на набір доменів з різним рівнем ущільнення.

Уявімо, що система складається з суміші двох типів доменів (що характеризуються асимптотичними границями h_{m1} та h_{m2} , де $h_{m1} < h_{m2}$,) з різними рівнями локального ущільнення. Тоді рівняння руху, що описують стиснення, можна записати наступним чином.

$$\frac{dh}{dt} = ce^{-\frac{h_{m1}h}{h_{m1}-h}} + (1-c)e^{-\frac{h_{m2}h}{h_{m2}-h}}, \quad (1.13)$$

де h_1 - початкова компактизація всієї системи; c - об'ємна фракція доменів з ущільненням гранул до значення h_{m1} (відіграє роль одного з кінетичних коефіцієнтів).

Таким чином, модель на основі рівняння (1.13) є узагальненням монодисперсної моделі кінетики вільного об'єму на випадок найпростішої (двокомпонентної) полідисперсної системи.

1.2.1 Розв'язок кінетичного рівняння

Формальний розв'язок рівняння (1.13) породжує функціональну форму

$$t = \int_{h_1}^h \frac{dh}{ce^{-\frac{h_{m1}h}{h_{m1}-h}} + (1-c)e^{-\frac{h_{m2}h}{h_{m2}-h}}} = \int_{h_1}^h f(h)dh, \quad (1.14)$$

яка визначає залежність $h = h(t)$.

Дослідимо розв'язок інтеграла для різних інтервалів змін значень h . Для цього домножимо підінтегральну функцію $f(h)$ на фактор F , якій

топологічно впорядковує інтервали змін значень h і конструюється за допомогою q - функцій Хевісайда таким чином (див. рис. 1.2):

$$F = q(h_{m1} - h) + q(h_{m2} - h)q(h - h_{m1}). \quad (1.15)$$

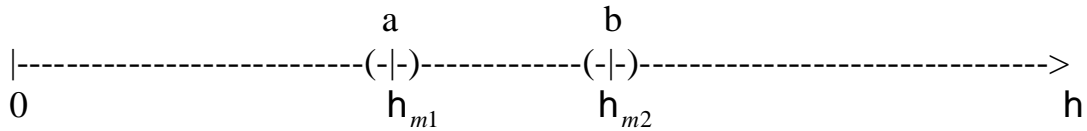


Рисунок 1.2 - Розподіл інтервалів значень h відносно точок h_{m1} та h_{m2}

З урахуванням (1.15) інтеграл (1.14) має такий вигляд

$$t = \int_{h_1}^h [q(h_{m1} - h) \times f(h) + q(h_{m2} - h)q(h - h_{m1}) \times f(h)] dh. \quad (1.16)$$

Розглянемо розв'язки кінетичного рівняння дійсні у різних інтервалах значень h відносно h_{m1} та h_{m2} , які були визначені вище.

а) В інтервалі $0 < h < h_{m1}$, для якого виконується умова $\frac{h}{h_{m1}} < 1$ та

$\frac{h}{h_{m2}} < 1$, інтеграл (3.16) спрощується до

$$t \gg \int_{h_1}^h q(h_{m1} - h) \times \frac{e^h dh}{ce^{-\frac{h^2}{h_{m1}}} + (1-c)e^{-\frac{h^2}{h_{m2}}}}, \quad (1.17)$$

точний розв'язок якого є

$$t \gg - \frac{G}{2} \left[e^{G \text{Ei}(-G+h)} - e^{-G \text{Ei}(G+h)} \right]_{h_1}^h, \quad (1.18)$$

де $G = \frac{c}{c} \frac{1}{h_{m1}} + (1-c) \frac{1}{h_{m2}}$.

Враховуючи властивості інтегральної експоненти [9], за умови $\frac{h}{G} < 1$, знаходимо

$$h \gg G \sqrt{\ln(t + t_0)} - \frac{1}{2} G^2, \quad (1.19)$$

де $t_0 = e^{\frac{h_1 + c \frac{h_1^2}{G}}{c} - \frac{1}{2} G^2}$ - стала величина, яка залежить від початкових умов (h_1).

b) В інтервалі $h_{m1} < h < h_{m2}$ ($\frac{h_{m1}}{h} < 1$; $\frac{h}{h_{m2}} < 1$), інтеграл (1.16) може бути апроксимовано формою

$$t \gg \int_{h_1}^h q(h_{m2} - h)q(h - h_{m1}) \times \frac{dh}{ce^{h_{m1}(\frac{h_{m1}}{h} + \frac{h_{m1}}{h_{m2}})} + (1-c)e^{-h_{m1}(\frac{h}{h_{m2}} + \frac{h}{h_{m1}})}}. \quad (1.20)$$

Розв'язок (1.20) знаходимо у такому вигляді

$$ce^{h_{m1}t} \gg \int_{h_1}^h \left[h e^{-\frac{h_{m1}^2}{h}} + h_{m1}^2 E_1\left(\frac{h_{m1}^2}{h}\right) \right] dh. \quad (1.21)$$

Користуючись (1.21), знаходимо

$$h = \frac{h_{m1}^2}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{h_{m1}^4 + 4(h_{m1}^2 ce^{h_{m1}t} + h_{m1}^2 - h_{m1}^2 h_1)}. \quad (1.22)$$

c) У випадку, коли $c \ll 0$, з (1.20), отримуємо

$$t \gg \int_{h_1}^h q(h_{m2} - h)q(h - h_{m1}) \times \frac{dh}{(1-c)e^{-h_{m1}(\frac{h}{h_{m2}} + \frac{h}{h_{m1}})}}. \quad (1.23)$$

Розв'язок (1.23) має вигляд

$$(1-c)e^{\frac{h_{m2}}{4}t} \gg \frac{\sqrt{ph_{m2}}}{2} \operatorname{erfi}\left(\frac{1}{\sqrt{h_{m2}}}\right) e^{\frac{h_{m2}}{2}t} + \frac{h_{m2}}{2} \int_{h_1}^h \frac{dh}{h}. \quad (1.24)$$

Користуючись асимптотичним виразом для erfi [9] і розв'язком (1.24), маємо

$$h \gg h_1 + (1-c)e^{\frac{h_{m2}}{4}t}. \quad (1.25)$$

d) У випадках, коли $h \ll h_{m1}$ ($h < h_{m1}$) та $h \ll h_{m2}$ ($h_{m1} < h < h_{m2}$), інтеграл (1.16) може бути переписано у такому вигляді

$$t \gg \int_{h_1}^h \frac{1}{(1-c)} e^{\frac{h_{m2}h}{h_{m2}-h}} dh, \quad h \ll h_{m1}; \quad (1.26)$$

$$\int_{h_1}^h \frac{1}{c} e^{\frac{h_{m1}h}{h_{m1}-h}} dh, \quad h \ll h_{m2}.$$

Розв'язки інтегралів (1.26) були отримані у [5-7]

$$e^{h_m kt} = - (h_m - h) \exp\left(\frac{h_m^2}{h_m - h} t\right) - h_m^2 E_1\left(\frac{h_m^2}{h_m - h} t\right). \quad (1.27)$$

У границі $h \rightarrow h_{m1}$ з (1.27) отримуємо

$$h = h_{m2} \frac{1}{c} - \frac{h_{m2} g_2}{1 + g_2 \ln(1 + t/t_{02})} \quad (1.28)$$

де $k = \frac{1}{1-c}$; $t_{02} = \frac{1}{k} \frac{h_{m2} - h_1}{h_{m2}} \exp\left(\frac{h_{m2} h_1}{h_{m2} - h_1}\right)$; $g_{02} = \frac{h_{m2} - h_1}{h_{m2}^2}$.

Відповідно у границі $h \rightarrow h_{m2}$ маємо

$$h = h_{m1} \frac{1}{c} - \frac{h_{m1} g_1}{1 + g_1 \ln(1 + t/t_{01})} \quad (1.29)$$

де $k = \frac{1}{c}$; $t_{01} = \frac{1}{k} \frac{h_{m1} - h_1}{h_{m1}} \exp\left(\frac{h_{m1} h_1}{h_{m1} - h_1}\right)$; $g_{01} = \frac{h_{m1} - h_1}{h_{m1}^2}$.

Проаналізуємо поведінку h у інтервалі $h_{m1} < h < h_{m2}$, поблизу h_{m1} та h_{m2} більш детально.

У першому інтегралі (1.26), який реалізується за умови $h \rightarrow h_{m1}$ ($h < h_{m1}$), перейдемо до нової змінної $e = h_{m1} - h > 0$. Тоді отримуємо

$$-(1-c)t = \int_{h_1}^h \frac{1 - \frac{e}{h_{m1}}}{1 + \frac{e}{h_{m2} - h_{m1}}} \exp\left(\frac{h_{m2} h_{m1}}{h_{m2} - h_{m1}} \times \frac{1 - \frac{e}{h_{m1}}}{1 + \frac{e}{h_{m2} - h_{m1}}}\right) de, \quad (1.30)$$

де e - малий параметр. З урахуванням умови $e \ll h_{m2} - h_{m1}$, розв'язок (1.30) припускає очевидне спрощення

$$(1-c)e^{-\frac{h_{m2} h_{m1}}{h_{m2} - h_{m1}}} \frac{h_{m2}^2}{(h_{m2} - h_{m1})^2} t = e^{-\frac{h_{m2}^2}{(h_{m2} - h_{m1})^2} (h_{m1} - h)} \Big|_{h_1}^h. \quad (1.31)$$

З (1.31) знаходимо

$$h = h_1 + \frac{h_{m1}}{c} - \frac{h_{m1}}{h_{m2}} \ln\left(1 + (1-c)e^{\frac{h_{m2} h_{m1}^2 - h_{m2}^2 h_1}{(h_{m2} - h_{m1})^2}} \frac{h_{m2}^2}{(h_{m2} - h_{m1})^2}\right) \quad (1.32)$$

З (1.32) випливає, що на малих часах поведінка $h(t)$ апроксимується таким наближенням

$$h = h_1 + (1-c)e^{\frac{h_{m1} h_{m1} - h_1}{h_{m2}}} \frac{h_{m1}}{h_{m2}} t. \quad (1.33)$$

Асимптотично розв'язок (1.32) набуває вигляду

$$h = \frac{h_{m1}^2}{h_{m2}} + \frac{h_{m1}}{c} - \frac{h_{m1}}{h_{m2}} \ln\left(\frac{1}{1-c}\right) \frac{h_{m2}^2}{(h_{m2} - h_{m1})^2} t. \quad (1.34)$$

У (1.34) відсутня η_1 , яка несе у собі інформацію про початковий стан компактизації. Таким чином, на великих часах, у певному інтервалі значень η , система може втратити «пам'ять» про початковий стан. Така поведінка характерна для метастабільних станів.

Якщо у другому інтегралі (1.26) перейти до інтегрування за малою величиною $\varepsilon = \eta - \eta_{m1} > 0$, знаходимо вираз для η

$$\eta = \eta_{m1} - \frac{\eta_{m1}^2}{\ln \left(c \frac{e^{\eta_{m1}}}{\eta_{m1}^2} \cdot t + \left(\frac{\eta_1 - \eta_{m1}}{\eta_{m1}^2} \right)^2 e^{-\frac{\eta_{m1}}{\eta_1 - \eta_{m1}}} \right)}. \quad (1.35)$$

Якщо у другому інтегралі (1.26) при $\eta \rightarrow \eta_{m2}$, перейти до нової змінної $\varepsilon = \eta_{m2} - \eta > 0$, тоді після розв'язку отримуємо вираз для η у вигляді

$$\eta \approx \eta_{m2} + \frac{(\eta_{m2} - \eta_{m1})^2}{\eta_{m1}^2} \cdot \ln \left(e^{\frac{\eta_{m1}^2}{(\eta_{m2} - \eta_{m1})^2} (\eta_{m2} - \eta_1)} + \frac{\eta_{m1}^2}{(\eta_{m2} - \eta_{m1})^2} c e^{\frac{\eta_{m1} \eta_{m2}}{\eta_{m2} - \eta_{m1}}} \cdot t \right). \quad (1.36)$$

Таким чином, нами отримані точні розв'язки модельного кінетичного рівняння (1.13), які діють в інтервалах змін η і дозволяють побудувати фазову діаграму, яка описує ущільнення гранульованих матеріалів.

Результати розв'язків, які були описані вище, зібрані у табл. 1.1.

Таблиця 1.1 – Точні розв'язки кінетичного рівняння для дисперсійної моделі [12]

№	Умова існування розв'язку	Тип релаксації	Розв'язок кінетичного рівняння
1	$0 < \eta < \eta_{m1}$ ($\frac{\eta}{\eta_{m1}} < 1$ та $\frac{\eta}{\eta_{m2}} < 1$)	$\sim \sqrt{\ln t}$	$\eta \approx \Gamma \sqrt{\ln(t+t_0)} - \frac{1}{2} \Gamma^2$
2	$\eta_{m1} < \eta < \eta_{m2}$ ($\frac{\eta_{m1}}{\eta} < 1$; $\frac{\eta}{\eta_{m2}} < 1$)	$\sim \sqrt{t}$	$\eta \approx \frac{\eta_{m1}^2}{2} + C_2 \sqrt{1+t/t_{20}}$
3	$\eta_{m1} < \eta < \eta_{m2}$ ($\frac{\eta_{m1}}{\eta} < 1$; $\frac{\eta}{\eta_{m2}} < 1$), $c \rightarrow 0$	$\sim t$	$\eta \approx \eta_1 + (1-c) e^{\frac{\eta_{m2}}{4}} \cdot t$
4	$\eta \rightarrow \eta_{m1}$	$\sim 1/\ln t$	$\eta = \eta_{m2} \left(1 - \frac{\eta_{m2} \gamma_2}{1 + \gamma_2 \ln(1+t/t_{02})} \right)$
5	$\eta \rightarrow \eta_{m2}$	$\sim 1/\ln t$	$\eta = \eta_{m1} \left(1 - \frac{\eta_{m1} \gamma_1}{1 + \gamma_1 \ln(1+t/t_{01})} \right)$

Продовження таблиці 1.1

№	Умова існування розв'язку	Тип релаксації	Розв'язок кінетичного рівняння
6	$\eta \rightarrow \eta_{m1} (\eta < \eta_{m1}), \varepsilon = \eta_{m1} - \eta > 0$	$\sim \ln t$	$\eta \approx \eta_{m1} + \Delta\eta_2^2 (C_6 + \ln(1 + t/t_{06}))$
7	$\eta \rightarrow \eta_{m1}, (\eta > \eta_{m1}), \varepsilon = \eta - \eta_{m1} > 0$	$\sim 1/\ln t$	$\eta \approx \eta_{m1} - \eta_{m1}^2 / (C_7 + \ln(1 + t/t_{07}))$
8	$\eta \rightarrow \eta_{m2}, (\eta < \eta_{m2}), \varepsilon = \eta_{m2} - \eta > 0$	$\sim \ln t$	$\eta \approx \eta_{m2} + \Delta\eta_1^2 (C_8 + \ln(1 + t/t_{08}))$

де $\Delta\eta_1$ та $\Delta\eta_2$ - прикомпресія нормована на η_{m1} та η_{m2} відповідно;
 $t_0, t_{20}, t_{02}, t_{01}, t_{06}, t_{07}, t_{08}$ - характерні часи релаксації;
 $\Gamma, C_2, C_6, C_7, C_8, \gamma_1, \gamma_2$ - сталі.

1.2.2 Побудова фазової діаграми ущільнення

Отримані розв'язки (див. п.1.2.1) вказують на дисперсійний характер кінетики ущільнення гранульованих матеріалів. Наприклад, якщо $c \neq 0$, ущільнення (за умови $\eta < \eta_{m1}$) відбувається за законом $\sim \sqrt{\ln t}$ (див. (1.19)). У випадку коли η змінюється в інтервалі $\eta_{m1} < \eta < \eta_{m2}$, компактизація протікає більш швидко, а саме, за законом $\sim \sqrt{t}$ (див. (1.22)). Якщо $c \rightarrow 0$, згідно із (1.25) η змінюється пропорційно часу. Розв'язки (1.28) та (1.29) виявляють логарифмічно повільний закон релаксації η та дозволяють зшити розв'язки (1.19) та (1.22) (і (1.25)) у безпосередньому наближенні до η_{m1} та η_{m2} . З (1.32) зокрема впливає, що поблизу $\eta = \eta_{m1}$ можливі як лінійний (див. (1.33)), так і логарифмічний (див. (1.34)) сценарії релаксації, які діють відповідно на малих та асимптотично великих часах.

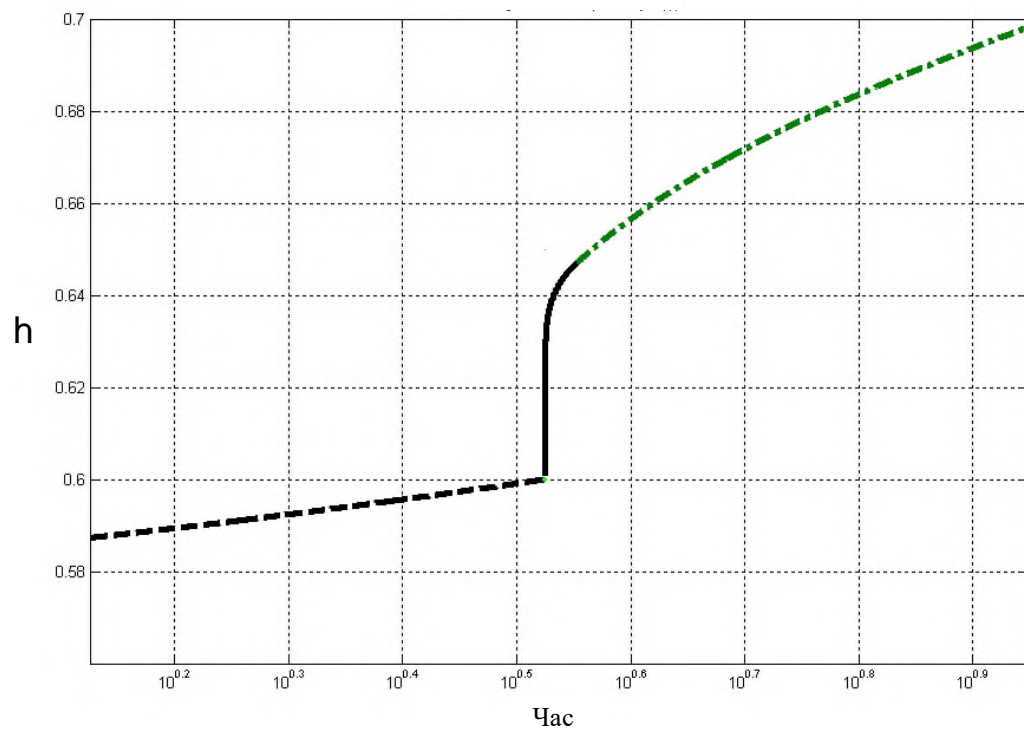
Фазова діаграма, побудована за результатами детальних розв'язків поблизу η_{m1} та η_{m2} , які було здійснено у п.1.2.1, представлена на рис. 1.3. Для визначеності при побудові фазової діаграми було покладено: $\eta_{m1} = 0.6$, $\eta_{m2} = 0.7$, $c = 0.3$.

Перш за все (окрім, дисперсійного характеру кінетики ущільнення, на який вже вказувалось) звернемо увагу на різку зміну характеру кінетики поблизу $\eta = \eta_{m1}$. Така поведінка нагадує фазову діаграму параметра впорядкування, яка відповідає фазовому переходу [13].

Кінетичні фазові діаграми, побудовані для різних значень об'ємної фракції c кластерів з впорядкуванням першого типу, вказують на те, що характерні часи релаксації ущільнення поблизу η_{m2} можуть бути різними. Зокрема, із зменшенням c характерний час релаксації починає зростати. Вище визначена поведінка добре узгоджується з чисельними експериментальними даними, які свідчать про суттєве уповільнення

процесу ущільнення поблизу стану системи, який характеризується максимальним ущільненням.

Якщо такий сценарій стиснення розглядати як критичне сповільнення релаксації параметра впорядкування, тобто "застрягання" системи в гетерофазному стані, що повільно релаксує, то встановлена дисперсія релаксації є суттєвим доповненням до кінетики фазових перетворень у конденсованій речовині [13-15].



пунктир $\sim t$ (1.2.26), суцільна лінія $\sim 1/\ln t$ (1.2.29), крапка-тире $\sim \ln t$ (1.2.30)

Рисунок 1.3 - Фазова діаграма ущільнення у гранульованому матеріалі
($h_{m1} = 0.6$, $h_{m2} = 0.7$, $c = 0.3$) [12]

З вищесказаного можна зробити наступні висновки:

- Запропоновано модель середнього поля для опису динаміки полідисперсних зернистих матеріалів, збурених зовнішніми полями;
- Аналітично описано дисперсійні характеристики кінетики стискання гранульованих матеріалів під впливом зовнішніх збурень. Експериментальні та теоретичні дослідження підтвердили існування стаціонарних станів в околі, де застосовується модель [6, 16];

- Описано ущільнення в моделі та відповідний процес в термінах властивостей моделі (рівень ущільнення гранул в різних типах доменів, їх об'ємна частка в системі, початкове ущільнення системи та ущільнення (нормована різниця ущільнення гранул в домені)) Для параметризації була побудована фазова діаграма.

1.3 Застосування рівняння стану Карнахана-Старлінга для опису компактизації у гранульованій системі

Ущільнення гранульованих матеріалів під впливом зовнішніх впливів детально вивчалось в ряді робіт, що мають безпосереднє і ефективне практичне застосування (див., наприклад, [5-7, 12, 17-20]). Експериментально показано, що кінетична фазова діаграма, яка описує процес ущільнення, демонструє асимптотичне насичення аж до квазірівноважного стану, що відповідає максимальній (або близькій до неї) щільності упаковки. У загальному випадку найпростіших систем (твердих сфер) закон релаксації з достатньою точністю відтворює відомий однорідний сценарій Колмогорова-Фогеля-Фульчера [6, 19]. Теоретичний підхід до опису кінетики пакування є достатнім для визначення кінетичної моделі вільного об'єму [5-7, 12, 17, 18], яка може задовільно описувати асимптотичну поведінку відповідних параметрів впорядкування в загальному випадку. Водночас бракує підходів до параметризації експериментальних даних, які б враховували фізичні властивості досліджуваної системи та матеріальні зв'язки, релевантні для її конструкції. Ми зосередимося на дослідженні деяких аспектів, пов'язаних з останньою проблемою.

Як показано в роботі [20], при описі структури систем зі складною внутрішньою морфологією (у випадку гранульованих матеріалів) навіть у мінімальній деталізації рівняння стану формулюється у вигляді диференціального рівняння Абеля.

Тут ми розглядаємо систему твердих сфер, що задовольняють рівняння стану Карнахана-Старлінга [21]. Прості рівняння руху для відповідно визначених параметрів впорядкування аналізуються за допомогою підходу Ландау [13, 22]. Запропонований підхід аналізує вплив параметрів, що визначають стан системи та її динаміку (зокрема, ущільнення), на характерний час релаксації системи до асимптотичного квазістаціонарного стану [5, 16]. На цьому шляху наближення до квазістаціонарного стану відбувається за допомогою сегментарно

неперервного однорідного релаксаційного циклу, який задовольняє весь інтервал коефіцієнта заповнення.

1.3.1 Вільна енергія для монодисперсної системи за рівнянням стану Карнахана-Старлінга

Рівняння стану Карнахана-Старлінга для твердих сфер має вигляд [21]

$$PV = NkT \frac{1+h+h^2-h^3}{(1-h)^3}, \quad (1.37)$$

де P – тиск; V - об'єм; N - кількість частинок; kT - добуток який, покладемо, нехай визначає масштаб енергії частинок; $h = \frac{1}{6} \rho s^3 \frac{N}{V}$ – параметр компактизації; s - діаметр частинок.

Користуючись співвідношенням для визначення тиску $P = -\frac{\partial F}{\partial V}$, енергію F , яка відповідає (1.37), в термінах параметра h отримуємо у наступному вигляді

$$F = NkT \left[\frac{3-2h}{(1-h)^2} - \frac{3-2h_1}{(1-h_1)^2} + \ln \frac{h}{h_1} \right] \quad (1.38)$$

де h , h_1 - відповідно, поточне та початкове значення параметру компактизації.

У граничному випадку, коли розміри частинок прямують до нуля, із (1.38) випливає відоме співвідношення для енергії ідеального газу

$$F = NkT \ln \frac{V}{V_1}.$$

Згідно з експериментальними спостереженнями [6], система асимптотично насичується (пакуванням) до певного граничного квазістаціонарного стану (див. рис. 1.4). Для дослідження процесу релаксації системи поблизу насиченого стану вводяться параметри впорядкування згідно з наступними правилами [23, 24, 25].

$$f(t) = \frac{h_{\infty} - h(t)}{h_{\infty} - h_1}, \quad (1.39)$$

де $f(0) = 1$ - відповідає початковому; $f(\infty) = 0$ - відповідає асимптотичному квазістаціонарному станам системи.

Надане вище визначення параметру впорядкування дозволяє у подальшому скористатися підходом Ландау [22] у описі релаксації поля впорядкування у околі асимптотичного стаціонарного стану.

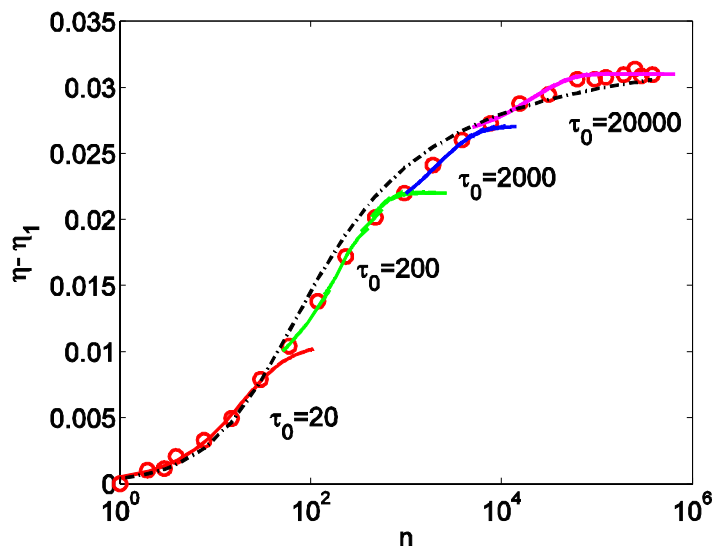


Рисунок 1.4 - Експериментальна [6] залежність (червоні кола) впакування $(h - h_1)$ у гранульованій системі, де n - кількість струсів; апроксимація експериментальних даних за законом оберненого логарифма (крапка-тире), яка відповідає (1.11) та кусково-безперервна [23] (суцільні лінії) з використанням отриманого тут простого експоненціального закону релаксації (1.48). Дані експерименту [6]: $h_1=0.56$, $h_{\text{ф}}=0.591$

Вільну енергію F яка дається співвідношенням (1.38) (і не враховує флуктуаційні ефекти), як функцію параметра f перепишемо у наступному вигляді

$$\frac{F(f)}{NkT} = \frac{3 - 2h_{\text{ф}} + 2(h_{\text{ф}} - h_1)f}{(1 - h_{\text{ф}} + (h_{\text{ф}} - h_1)f)^2} - \frac{3 - 2h_1}{(1 - h_1)^2} + \ln \frac{h_{\text{ф}} - (h_{\text{ф}} - h_1)f}{h_1}. \quad (1.40)$$

Розкладаючи $F(f)$ у степеневий ряд:

$$\frac{F(f)}{NkT} = A_0 + Af + Bf^2 + Cf^3 + Df^4 + \dots, \quad (1.41)$$

і користуючись (3.40), (3.41) отримуємо рівняння

$$\frac{F(f)}{NkT} = A_0 + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{f^k (h_{\text{ф}} - h_1)^k}{(1 - h_{\text{ф}})^{k+2}} \left(\frac{3+k}{1 - h_{\text{ф}}} - 2 \right) (-1)^k - \frac{1}{kh_{\text{ф}}^k} \frac{\dot{u}}{\hat{u}}, \quad (1.42)$$

$$\text{де } A_0 = \ln \frac{h_{\text{ф}}}{h_1} + \frac{3 - 2h_{\text{ф}}}{(1 - h_{\text{ф}})^2} - \frac{3 - 2h_1}{(1 - h_1)^2}.$$

Можна показати, що сума у виразі (1.42) безпосередньо не залежить від початкового значення впакування h_1 твердих сфер. Вище сказане свідчить про можливість переходу системи, шляхом впакування до одного і того ж асимптотичного квазістаціонарного стану починаючи з різних початкових станів.

1.3.2 Побудова кінетичного рівняння за сценарієм Ландау-Гінзбурга та його розв'язок у лінійному наближенні

Запишемо кінетичне рівняння для параметра впорядкування f у такому вигляді:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -G \frac{dF}{df}, \quad (1.43)$$

де G - кінетичний коефіцієнт.

Аналіз отриманого для F виразу показує, що функції, отримані обмеженням ряду (1.42) з урахуванням внесків до квадратичного степеня включно, мають у фізичній області значень параметру впакування h один екстремум (а саме мінімум). У околі таких станів можна очікувати сповільнення процесів релаксації модельної системи. Розглянемо у якості прикладу рівняння (1.43) з урахуванням ряду (1.42), обмеженого врахуванням до квадратичного внеску включно.

Відповідне кінетичне рівняння у вище визначеному наближенні набуває вигляду

$$\frac{\partial f}{\partial t} = a - bf, \quad (1.44)$$

де $a = -A$; $b = 2B$; $t = t_0 > (GNkT)$.

Рівняння (1.44) має тривіальний розв'язок

$$f = \frac{a}{b} + \frac{a_0}{b} e^{-bt}. \quad (1.45)$$

Підстановка (1.39) до (1.45) дає

$$h(t) = h_1 + (h_c - h_1) \left(1 - e^{-t/t_0}\right), \quad (1.46)$$

де $t_0 = b^{-1}$ - характерний час релаксації;

$$h_c = h_{\neq} - (h_{\neq} - h_1) \frac{a}{b}. \quad (1.47)$$

Звернемо увагу на самоузгоджене (в рамках моделі) визначення величини h_c .

Рівняння (1.46) показує, що характер релаксації, який описує вище побудована спрощена модель, задовольняє однорідному сценарію Колмогорова-Фогеля-Фулчера [6].

1.3.3 Загальні риси релаксації параметру компактизації

Як витікає з визначення t_0 (див. (1.44) та (1.46)), із урахуванням виразів (1.44), (1.41) та (1.42), витікає: $t_0 \sim (h_{\neq} - h_1)^{-2}$, що також узгоджується з оцінками t_0 у подібних роботах [26, 27]. Тобто, із

збільшенням початкового впакування системи ($h_1 \text{ @ } h_{\text{ф}}$), характерний час релаксації t_0 зростає, помітно уповільнюючи процес ущільнення.

Із співвідношення (1.46) можна бачити, що параметр впакування $h(t)$ асимптотично прямує до визначеного значення h_c , величина якого складає 0.647. Відхилення значення h_c від $h_{\text{ф}}=0.74$ пов'язане з обмеженнями при завданні функції F за рахунок обривання степеневого ряду на квадратичному доданку.

Врахування у F внесків до 4-го ступеня включно, веде до формулювання нелінійного рівняння, розв'язок якого, у першому наближенні також, як і у випадку лінійного рівняння, показує асимптотичне наближення до впакування h_c , величина якого складає 0.62. Врахування у (1.43) доданків до третього порядку включно, дозволяє сформулювати кінетичне диференціальне рівняння з квадратичною нелінійністю.

Вище визначені нелінійні рівняння можуть бути розв'язані у лінійному наближенні. Остання процедура веде до появи поправок (уточнень) в виразах для a , b , h_c .

Отримані результати показують що в рамках запропонованої моделі впакування відбувається за немонотонним сценарієм. Використання у кінетичному рівнянні (1.43) поліномів з парними степенями, показують що існують певні значення впакування h_c , поблизу яких система наближується до асимптотичного квазістаціонарного стану.

При використанні поліномів непарного степеня в рівнянні руху (1.43) розв'язок з насиченням заповнення системи до асимптотичного стану не отримується і добре апроксимується лінійною функцією.

Останнє пов'язане з тим, що у фізичній області (заповнення твердої сфери) мінімум існує для поліномів парного степеня, а не для поліномів непарного степеня. Розташування мінімумів в залежності від степеня полінома наведено в таблиці 1.2.

Таблиця 1.2 – Положення мінімумів в залежності від рангу полінома $F(h)$ [23]

N	2	4	6	8	10	12	ф
h_c	0.647	0.620	0.602	0.589	0.579	0.570	0.48

Значення $h_c=0.647$, яке було розраховано за формулою (1.47) з використанням у якості максимально можливого впакування величини $h_m=0.74$, знаходиться у межах відомого для твердих сфер значення h_{RCP} (random close packing) від 0.63 до 0.65. Слід зазначити, що рівняння стану Карнахана-Старлінга, використане для отримання цього результату, не враховує деякі фактори, присутні в реальних гранульованих системах, такі як дисипація енергії, відхилення частинок від сферичності та стан їх

поверхні, дисперсія розмірів, сила і тип збурення системи та наявність зовнішніх полів (таких як гравітація). Нижче наведено деякі з найважливіших факторів, які необхідно враховувати. Зауважимо, що в багатьох експериментах асимптотичні значення гранульованого заповнення мають різні значення [28, 6, 10, 29-32].

Таким чином, наближено для використання отриманого результату (1.46) з метою параметризації експериментальних даних, можна замінити розраховане критичне значення впакування h_c на асимптотичне h_∞ , яке наприклад спостерігається експериментально. З урахуванням вище зроблених зауважень, простий експоненційний закон релаксації може бути надано у наступному вигляді [1]:

$$h(t) = h_1 + (h_\infty - h_1)(1 - e^{-t/t_0}), \quad (1.48)$$

Як можна бачити з рис. 1.4, кусково-безперервна апроксимація експериментальних даних експоненційними законами релаксації параметра впакування (h) з характерними часами (t_0), що відрізняються один від одного майже на порядок при переході між сусідніми ділянками кінетичної функції впакування, задовільно дозволяє описати експеримент за допомогою характерних ділянок [33]. Останній результат свідчить про немонотонний (нелінійний) характер релаксації. Серед розв'язків нелінійних кінетичних рівнянь які описують релаксацію параметра впакування можна вказати, наприклад, так званий стретч-експоненційний розв'язок [6]

$$h(t) = h_1 + (h_\infty - h_1)(1 - e^{-[t/t_0]^a}), \quad (1.49)$$

та обернений логарифм [1]

$$h(t) = h_\infty - \frac{h_\infty - h_1}{1 + B \ln(1 + t/t_0)}, \quad (1.50)$$

(див. рис. 1.4), які, як правило, використовуються для параметризації відповідних експериментів. Одним з адекватних методів є застосування моделі фракційної кінетики до опису процесу релаксації до асимптотичного квазі-стаціонарного стану. Результат розв'язку відповідного кінетичного рівняння для поля впакування, в такому підході, має наступний вигляд [32]:

$$h(t) = h_\infty - Dh \times E_a \left(\frac{t}{t_0} \right)^a, \quad (1.51)$$

де $Dh = h_\infty - h_1$; E_a - функція Мітгаг-Леффлера порядку a , $0 < a < 1$; h_∞ та h_1 , відповідно, параметр впакування у асимптотичному квазістаціонарному стані (поблизу якого відбувалося розкладання функціоналу вільної енергії) та параметр впакування у початковому стані; $t = kG$; G - параметр збудження; k - матеріальна стала.

Асимптотично, коли $(a \gg 1)$, розв'язок (1.51) перетворюється на простий експоненційний закон релаксації (1.48):

$$a \gg 1; \quad E_a \approx \frac{\sigma}{\epsilon} \exp\left(-\frac{t}{t_0}\right), \quad (1.26)$$

Це відповідає кінетичному сценарію релаксації Ландау-Гінзбурга в лінійному наближенні, описаному вище. З наближенням експоненти до нуля асимптота функції Міттага-Леффлера змінюється на логарифмічну, що описує, як уже зазначалося, закон повільної релаксації стиснення, який спостерігається в експериментах із заповнення гранульованих матеріалів [1]. Отримані результати показують, що характеристики наповнення та міграції гранульованих (пористих) матеріалів відповідають сценарію дробової (фракційної) кінетики, а сам процес є неоднорідним і сильно залежить від інтервалу значень швидкості наповнення, при яких він здійснюється.

Отримані результати показують можливість формального застосування методів статистичної фізики до опису деяких явищ поблизу асимптотичного квазістаціонарного стану в мікромеханічних багаточастинкових системах (зокрема, стиснення гранульованих матеріалів, які є суто динамічними дисипативними системами).

Також проаналізовано можливість використання моделей дробової кінетики для опису релаксації більш загальних параметрів стиснення, коли розподіл густини неоднорідний.

Для моделі твердої сфери, що задовольняє рівнянню стану Карнахана-Старлінга, сформульовано просте рівняння руху, яке описує релаксацію коефіцієнта ущільнення до асимптотичного квазістаціонарного стану. Використовуючи підхід Ландау, знайдено аналітичний розв'язок моделі, який описує однорідну релаксацію певного параметра впорядкування в кусково-неперервному інтервалі послідовних значень параметра пакування. Характерні часи релаксації впорядкованостей визначаються параметрами моделі. Результати показують, що модель дробової динаміки може відтворювати відомий асимптотичний закон релаксації у відповідних межах і задовільно описувати ущільнення. Отримані результати добре узгоджуються з експериментальними даними, отриманими з прямих вимірювань ущільнення гранульованих матеріалів під впливом зовнішніх збурень.

1.4 Бідисперсна гранульована система

Опис, параметризація та прогнозування властивостей сумішей, які залежать від параметрів компонентів, що утворюють суміш, є одним з найактуальніших напрямків досліджень у статистичній фізиці. Ця доповідь буде присвячена проблемі досягнення максимального ущільнення в гранульованих системах, що складаються з двох компонентів.

Дослідження фізичних властивостей простих бінарних сумішей методами статистичної механіки є однією з традиційно актуальних і водночас складних для розв'язання задач статистичної фізики. Відомим теоретичним підходом у цій галузі є підхід Кірквуда-Баффа (КБ) [34], який дозволяє описати основні термодинамічні величини в термінах кореляційних інтегралів.

Добре відомо, що гранульовані суміші (наприклад, двокомпонентні суміші) мають різні стани упаковки в залежності від асиметрії (відношення мольних часток до розмірів компонентів). У той час як гранична фракція заповнення може бути параметризована лише геометричними конструкціями (Вороного-Делона), динаміка гранул в агломератах, що піддаються невеликим зовнішнім ударам, є багатопараметричним процесом, який значно складніше описати. Метод геометричних побудов Вороного може описувати структуру досить широкого класу систем завдяки своїй суто геометричній природі. Щоб побудувати його для заданого набору точок, необхідно виділити навколо кожної точки системи простір, який містить всі точки, найближчі до цієї точки, і ця умова поширюється на решту точок системи. Таким чином, кожній точці (координати якої визначаються положенням центру мас частинки-гранули) відповідає власний характерний об'єм (або площа). Крім того, об'єми фігур є адитивними і повністю покривають об'єм системи. Це є важливою особливістю для застосування цього підходу у випадку гранульованих сумішей. Важливо відзначити, що характер взаємодії між частинками безпосередньо не впливає на процедуру розділення [35]. Експериментальні дослідження гранульованих сумішей дають інформацію про розподіл центрів частинок у певний момент часу і, отже, дозволяють параметризувати структуру за допомогою методу Вороного. Дослідження структури з використанням геометрії Вороного базується на аналітичному аналізі розподілу площ всіх частинок в системі. Очевидно, що такий підхід дає інформацію не тільки про впорядкованість (симетрію) та невпорядкованість системи, але й про розподіл вільного об'єму та його зміну під дією зовнішніх збурень. Вільний об'єм є основним параметром, що контролює поведінку гранульованих сумішей. Експериментально встановлено, що при наближенні співвідношення розмірів частинок і компонентів до певного критичного значення характерний час ущільнення розходиться. В цьому випадку рухливість гранул в пакеті є найнижчою

поблизу порогу просочення (коли дрібні частинки можуть проходити через порожнечі, що залишилися між великими частинками). Також повідомлялося, що коли співвідношення розмірів компонентів досить велике, динаміка ущільнення прискорюється [36].

З огляду на дані, які показують, що гранульовані суміші набагато щільніше ущільнюються, ніж монодисперсні (що складаються, в найпростішому випадку, з однакових сферичних гранул), питання про те, чи залежать параметри такого процесу від складу і розміру частинок, стає дуже важливим. У цьому напрямку проводилися як прямі фізичні [37], так і чисельні [38-40] дослідження. Наприклад, в роботі [41] чисельно досліджено зернисту суміш, що складається із зерен різного розміру. Автори дійшли висновку, що співвідношення розмірів зерен і молярна концентрація компонентів суміші є основними параметрами, що визначають формування поточної і критичної швидкостей заповнення (максимально досяжна швидкість заповнення). Крім того, враховуючи, що осциляція популяції частинок є властивістю, яка може бути надійно параметризована тільки за допомогою чисельного моделювання, вона є фактором, який перешкоджає фактичному спостереженню за зміною параметрів суміші. Іноді (див. [42]) такі труднощі не обговорюються авторами публікацій, що справді залишає роль вищезгаданих факторів незрозумілою.

Як показано в [43], для бінарних сумішей, що складаються з малих і великих сфер, можливі два граничні випадки. У першому випадку частка великих (за розміром) частинок є високою, утворюючи систему, в якій малі частинки займають порожнечі, залишені великими частинками. Якщо співвідношення розмірів частинок досить велике, дрібні частинки можуть проникати через порожнечі навколо великих частинок. І навпаки, якщо співвідношення дрібних частинок збільшується, великі частинки стають ізольованими, оточеними меншими частинками. У першому випадку система стає умовно "гравієм", у другому - "пудингом". Зрозуміло, що обидва крайні випадки призводять до різних значень ущільнення. Однак теоретичні пояснення цих екстремальних випадків, як правило, відокремлені одне від одного. Поки що не існує єдиного підходу, який би включав обидва згадані вище екстремальні випадки. Цей розділ присвячено розробці такого підходу. Цей підхід пропонує використання співвідношень статистичної фізики, незважаючи на те, що досліджувані системи є дисипативними за своєю природою. Практично всі системи мають деякі квазістаціонарні стани, які майже задовольняють критеріям визначення їхніх макроскопічних властивостей за допомогою апарату статистичної механіки [5, 16].

Класична формула Кірквуда–Баффа для бі-компонентної суміші має вигляд [44]:

$$\mathbf{b}_T^{(12)} = \frac{1}{k_B T} \times \frac{1 + n_1 G_{11} + n_2 G_{22} + n_1 n_2 (G_{11} G_{22} - G_{12}^2)}{n_1 + n_2 + n_1 n_2 (G_{11} + G_{22} - 2G_{12})}, \quad (1.53)$$

де $\mathbf{b}_T^{(12)}$ - ізотермічна стисливість суміші, компоненти якої нумеруються як 1 і 2; $n_1 = \frac{N_1}{V}$ та $n_2 = \frac{N_2}{V}$ - парціальні щільності кількості частинок, відповідно; G_{11} , G_{22} та G_{12} - так звані кореляційні інтеграли; $k_B T$ - масштаб енергії.

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

$$S_{ab}(0) = x_a \mathbf{d}_{ab} + x_a x_b n_{12} G_{ab}, \quad (1.54)$$

де x_a , x_b - мольні частки компонент суміші; \mathbf{d}_{ab} - дельта символ Кронекера; $n_{12} = \frac{N}{V} = \frac{N_1 + N_2}{V} = n_1 + n_2$ - щільність кількості частинок для суміші.

Користуючись формулою (1.54) отримуємо:

$$S_{11}(0) = (1 - x) + (1 - x)^2 n_{12} G_{11}, \quad (1.55)$$

$$S_{22}(0) = x + x^2 n_{12} G_{22}, \quad (1.56)$$

$$S_{12}(0) = x(1 - x) n_{12} G_{12}, \quad (1.57)$$

де x - мольна частка 2-ї компоненти суміші.

Підставляючи співвідношення (1.55)-(1.57) до формули Кірквуда-Баффа (1.53), знаходимо зв'язок проміж ізотермічною стисливістю бі-компонентної суміші та парціальними структурними факторами у наступному вигляді:

$$\mathbf{b}_T^{(12)} = \frac{1}{n_{12} k_B T} \times \frac{S_{11}(0) S_{22}(0) - S_{12}^2(0)}{x^2 S_{11}(0) - 2x(1 - x) S_{12}(0) + (1 - x)^2 S_{22}(0)}. \quad (1.58)$$

Зважаючи на те що структурний фактор монодисперсної системи визначається як:

$$S(0) = 1 + nG = n k_B T \mathbf{b}_T, \quad (1.59)$$

та враховуючи (1.55) та (1.56), знаходимо, вирази для парціальних структурних факторів монодисперсних фаз $S_{11}(0)$ та $S_{22}(0)$ із парціальними ізотермічними стисливостями $\mathbf{b}_T^{(1)}$ та $\mathbf{b}_T^{(2)}$:

$$S_{11}(0) = (1 - x) \times n_1 k_B T \mathbf{b}_T^{(1)}, \quad (1.60)$$

$$S_{22}(0) = x \times n_2 k_B T \mathbf{b}_T^{(2)}. \quad (1.61)$$

Парціальні ізотермічні стисливості $\mathbf{b}_T^{(1)}$ та $\mathbf{b}_T^{(2)}$ можуть бути визначені, із використанням модельних рівнянь стану. Наприклад,

користуючись рівнянням стану Карнахана-Старлінга [21] для системи твердих сфер, може бути знайдений наступний вираз для стисливості:

$$b_T^{(i)} = \frac{1}{n_i k_B T} \times \frac{(1 - h_i)^4}{1 + 4h_i + 4h_i^2 - 4h_i^3 + h_i^4}, \quad i = 1; 2, \quad (1.62)$$

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

Використовуючи дані про ізотермічну стисливість суміші $b_T^{(12)}$, отримані із альтернативних джерел, наприклад, з експерименту, або шляхом чисельного моделювання, розв'язуючи (1.58) відносно структурного фактора $S_{12}(0)$ отримуємо:

$$S_{12}(0) = x(1-x)f_{12} \pm \sqrt{x^2(1-x)^2 f_{12}^2 + S_{11}S_{22} - f_{12} \{x^2 S_{11} + (1-x)^2 S_{22}\}}, \quad (1.63)$$

де $f_{12} = n_{12} k_B T b_T^{(12)}$ - величина, яка у свою чергу, може бути визначена за допомогою рівняння стану бінарної суміші сферичних частинок [45], за формулою:

$$b_T^{(12)} = \frac{1}{n_{12} k_B T} \times \frac{(1-h)^4}{1 + ah + bh^2 + ch^3 + dh^4}, \quad (1.64)$$

де a, b, c, d - залежать (відомим чином) від x (або $f = h_2/h$), та від $a = s_1/s_2$ (де s_1 та s_2 - діаметри 1-ї та 2-ї компонент суміші, відповідно). Наведемо також корисні співвідношення:

$$f = \frac{x}{a^3 - (a^3 - 1)x}, \quad x = \frac{a^3 \times f}{1 + (a^3 - 1) \times f}. \quad (1.65)$$

В роботі [36] отримані експериментальні данні для компактизації бінарної суміші сферичних частинок із різною ступінню розбіжності у розмірах $a = 2, 35$. Параметризація отриманих даних фактично відбувається на двох характерних границях (станах) суміші, на одній з яких переважає вміст великих частинок (гравій), а на іншій - дрібних (пудинг). [46], експериментальні дані отримані у всіх проміжних станах, Була зроблена спроба описати їх за допомогою вагової функції, яка відіграє роль параметра підбору i , строго кажучи, спрямована до одного і того ж екстремального стану. Незважаючи на ці попередні результати, теоретичний опис макроскопічних властивостей бінарних сумішей (зокрема, ущільнення) в рамках єдиної теорії залишається актуальним завданням.

У цій роботі ми розвиваємо єдиний підхід до опису компактизації сумішей з використанням елементів статистичної теорії сумішей та модельного рівняння стану [47, 48]. Отримані результати порівнюються з даними прямих експериментальних вимірювань, проведених в роботі [36].

А саме, розглянуто рівняння (1.55)-(1.56), (1.60)-(1.62) та (1.64) і вперше отримано (рівняння (1.63)). На рис. 1.5 наведено результати відповідних чисельних розрахунків з використанням експериментальних даних, отриманих в роботі [36].

У випадку сумішей [43] визначити якісну конфігурацію локальної структури практично неможливо, тому значення встановлюються для параметрів, визначених шляхом порівняння теоретично отриманих рівнянь з експериментальними спостереженнями. Таким чином, використовуючи рівняння Кірквуда-Баффа (1.53) та враховуючи рівняння (1.62) і (1.64), отримані на основі рівняння стану Карнахана-Старлінга, можна отримати алгебраїчне рівняння 12-го порядку для параметрів пакування. (h). На рис.1.6 представлені дані чисельних розв'язків такого рівняння у порівнянні із відповідними експериментальними даними.

Як впливає з рис.1.6, 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 [36], встановлена можливість аномального зростання. Враховуючи, що впакування гранульованої речовини описується відомим логарифмічним законом, отриманим в [10], начебто, ця обставина знаходиться у відповідності до оцінок для характерного часу впакування $t \sim \exp\left[\frac{h h_{\infty}}{h_{\infty} - h_p}\right]$ (де h_{∞} – відповідає асимптотичному впакуванню), які впливають із моделі вільного об'єму [5] за умов $h \ll h_{\infty}$. Однак, треба звернути увагу на те що формула для оцінки t встановлена для монодисперсної системи, і строго кажучи, її застосування для гранульованої суміші потребує більш змістовного обґрунтування, яке на теперішній час поки що відсутнє.

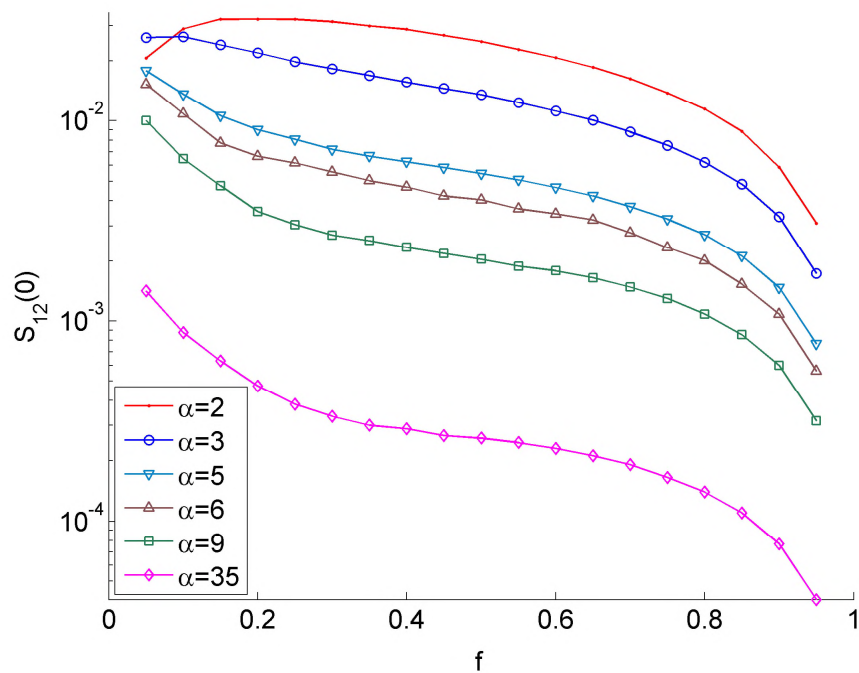


Рисунок 1.5 - Величина парціального структурного фактора $S_{12}(0)$ бінарної суміші, в залежності від об'ємної частки дрібної компоненти (f), розрахованого за формулою (1.63) із використанням експериментальних даних отриманих в [36]. Розбіжність у розмірах частинок компонентів суміші параметрично змінюється у межах $\alpha = 2, 35$

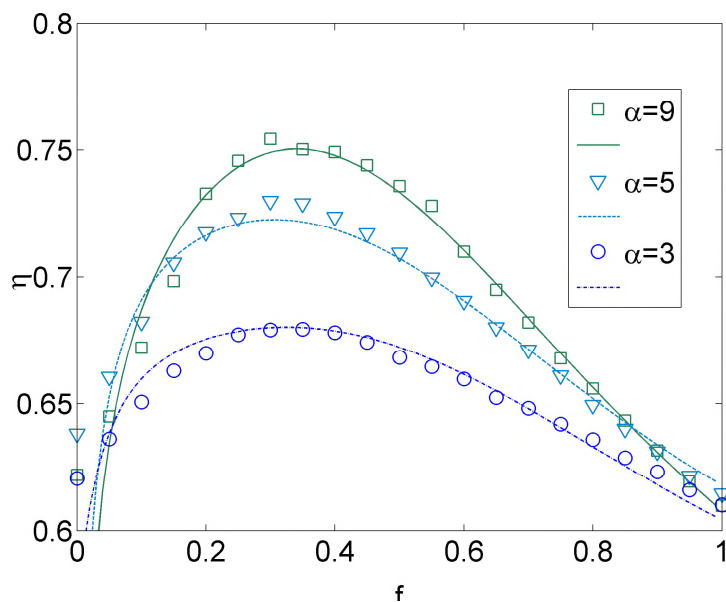


Рисунок 1.6 - Параметр впакування (h) для суміші, як функція (f): суцільна лінія – теоретична апроксимація в рамках побудованого теоретичного підходу; кружечки, трикутники та квадрати – експериментальні дані [36]

Використана модель базується на уявленні про частинки-гранули у вигляді суцільних сфер, хоча і різного діаметру, що, безумовно, є ідеалізацією для реальних систем. Вплив морфології частинок на структурну когезію досліджено в роботі [6]. Зокрема, було виявлено, що морфологія гранул має значний вплив на динаміку стиснення. Анізотропні частинки призводять до двох різних режимів стиснення, розділених "сплеском" коефіцієнта заповнення. Наявність тертя також змінює порядок розташування зерен в купі. Ці спостереження були підтверджені чисельним моделюванням. Поява когезії між зернами може пригнічувати ущільнення і зменшувати коефіцієнт заповнення.

Розроблений підхід може бути використаний для деяких рідких сумішей, де ефекти упаковки (ущільнення) відіграють важливу роль [34, 49]. Наприклад, використовуючи модель Карнахана-Старлінга та експериментальні дані [49], можна показати, що залежність молярної (або об'ємної) частки коефіцієнта надлишкової стисливості та однієї складової коефіцієнта стисливості від молярної (або об'ємної) частки описується немонотонним законом і що існують екстремальні значення (див. рис. 1.7).

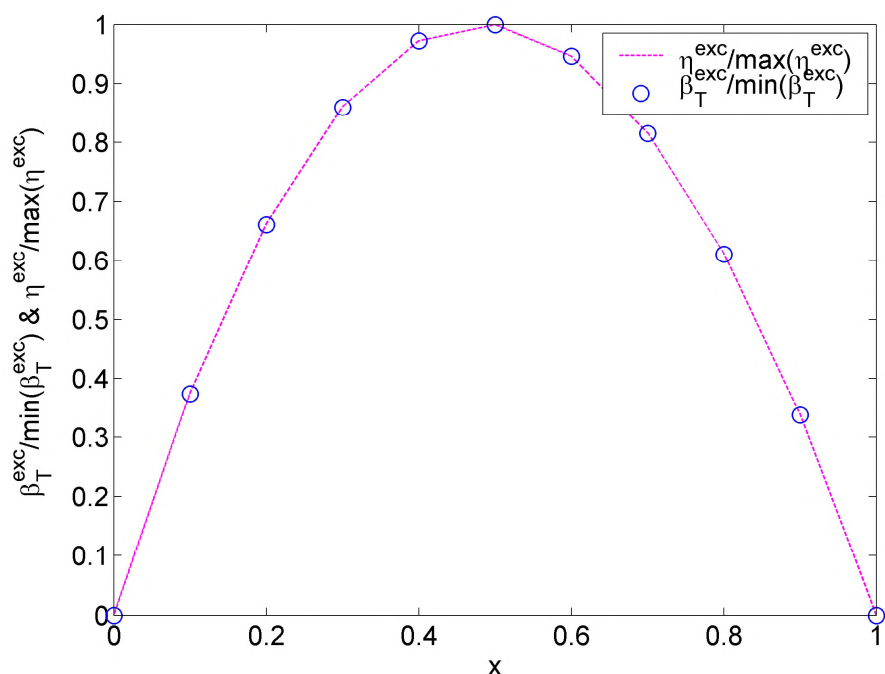


Рисунок 1.7 - Надлишкові фактори компактизації $h^{exc} = h - h^{id}$ та стисливості $b_T^{exc} = b_T - b_T^{id}$ для рідкої суміші $CCl_4 + CHCl_3$ від мольної фракції x хлороформу [50]

Зауважимо, що фактори $h^{exc} = h - h^{id}$ та стисливості $b_T^{exc} = b_T - b_T^{id}$ було пронормовано на відповідні значення в екстремумах, та розраховувалися для рідкої суміші $CCl_4 + CHCl_3$ від мольної фракції x другого компонента, за допомогою розвиненого в нашій роботі підхода.

Значення функцій h^{id} та b_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 , h^{id} та b_T^{id} описують значення функцій h та b_T для монодисперсних (reference data) станів суміші (тобто чистих компонент).

Встановлені закономірності дозволяють системам з кардинально різними фізичними властивостями, як мікромеханічним [51-52], так і рідинним (з кардинально різним характером взаємодії частинок), формувати властивості, які прогнозуються відповідно до потреб та умов використання в технологічних процесах (особливо з метою захисту навколишнього середовища), а запропонований відкриває можливість застосування цього підходу.

1.5 Висновок

У моделі динаміки вільного об'єму виявлено логарифмічний характер стиснення з часом функції розподілу вакансій введеної системи, що підтверджується експериментом.

Модель динаміки вільного об'єму узагальнено на випадок квазідвокомпонентних систем і може бути використана для опису полідисперсних і багатоконпонентних систем, а також систем, що складаються з доменів змішаного порядку з різними симетріями ущільнення. Побудовано фазові діаграми, які показують, що процес пакування є немонотонним і містить особливості, притаманні фазовим переходам у конденсованих середовищах.

Запропоновано та досліджено кінетичну модель збуреного гранульованого ущільнення з використанням підходу Гінзбурга-Ландау. Встановлено експоненціальний закон релаксації для параметрів заповнення, який застосовано для параметризації експериментальних вимірювань, що дозволило запропонувати дробовий підхід до опису заповнення.

Для бінарних гранульованих сумішей був розроблений підхід, що описує стисливість і ущільнюваність, з використанням комбінації теорії Кірквуда-Баффа і моделі твердої сфери Карнахана-Стірлінга, що дозволило встановити фазову діаграму наповнення у всьому діапазоні об'ємних часток (або мольних часток). Теоретичні результати добре узгоджуються з експериментальними.

РОЗДІЛ 2 ВЗАЄМОДІЯ ІОНІЗУЮЧОГО ВИПРОМІНЮВАННЯ З РЕЧОВИНОЮ

Проблему взаємодії ядерного випромінювання з речовиною вивчають радіаційна фізика, радіаційна хімія та радіологія (в тому числі радіобіологія та радіомедицина). Деякі з радіаційних взаємодій використовуються в таких інженерних дисциплінах, як радіометрія, ядерна медицина, радіаційна екологія, екологічна радіаційна хімія та радіаційна геохімія. Особливості поглинання, розсіювання та відбивання α -частинок, нейтронів, електронів, рентгенівських променів та рентгенівського випромінювання твердими тілами розглядаються тут [53].

2.1 Проходження випромінювання крізь речовину

Соматичне та електромагнітне випромінювання, що випускається ядрами атомів, можна виявити лише через їхню взаємодію з речовиною. Ці випромінювання в основному взаємодіють з електронами атомів. В результаті атоми збуджуються та іонізуються. Взаємодія випромінювання з атомними ядрами використовується для виявлення незаряджених нейтронів, які не мають іонізуючого ефекту. Це відбувається тому, що при пружних зіткненнях нейтронів з ядрами водню утворюються протони віддачі, які легко виявити.

При взаємодії іонізуючого випромінювання з речовиною випромінювання дорівнює різниці між сумою енергії всіх заряджених і незаряджених частинок, що падають на об'єм речовини (за винятком енергії спокою), і сумою енергії всіх частинок, що вилітають з цього об'єму, плюс залишкова маса частинок, що зазнали перетворення в цьому об'ємі. Передаємо енергію. Ось як це працює.

Ймовірність взаємодії характеризується поперечним перерізом віртуальної сфери, умовно приписаної бомбардованій частинці (атому, електрону або ядру), а бомбардована частинка, проходячи через цю сферу, бере участь у певній реакції або процесі взаємодії з бомбардованою частинкою. Цей переріз взаємодії називається частковим перерізом. Повний переріз взаємодії дорівнює сумі повних перерізів взаємодії окремих іонізованих частинок, що відповідають різним процесам або реакціям $S = \sum_i S_i = E_i \sigma_i$ [см²].

Перетину взаємодії s , віднесені до одного атома, електрону або ядру атома, називають мікроскопічними, а віднесені до всіх атомів (електронів, ядра атомів), що знаходяться в одиниці обсягу речовини (тобто до концентрації C частинок-мішеней), - макроскопічними: $\hat{s}_i = S_i$.

Наприклад, якщо мікроскопічний переріз взаємодії для одного

електрона s_e , або одного атома s , то макроскопічні перерізи взаємодії $\hat{a}_i \text{ см}^{-1}$: $\hat{a}_i = s_e r Z_2 (N_A/A)$; $\hat{a}_i = s r C (N_A/A)$, где p – густина речовини; $N_A = 6,022 \cdot 10^{23}$ — постійна Авогадро (число молекул у молі речовини); Z_2 - атомний номер елемента, що становить речовину, з якою взаємодіє електрон; A - атомна маса речовини [54-55].

Лінійний коефіцієнт ослаблення випромінювання є повним макроскопічним перерізом взаємодії опосередковано іонізуючих частинок

$$m = n s = s r \frac{N_A}{A} \quad (2.1)$$

де n - концентрація атомів поглиначів в одиниці об'єму, s - повний ефективний переріз ослаблення випромінювання.

Лінійний коефіцієнт ослаблення показує відносне зменшення інтенсивності вузького випромінювання при проходженні через поглинаючий шар одиничної товщини.

Розмірність $[\text{см}^{-1}]$

Масовий коефіцієнт ослаблення характеризує зменшення інтенсивності \mathcal{G} -випромінювання в одиниці маси речовини:

$$m_f = m r \quad (2.2)$$

Розмірність $[\text{см}^2 \text{т}^{-1}]$.



Рисунок 2.1 - Поглинання різних видів іонізуючих випромінювань різними матеріалами

Введення коефіцієнта маси є корисним, оскільки він залежить від агрегаційного стану речовини. Наприклад, m_f однакові для води, водяної пари і льоду. Також немає необхідності визначати коефіцієнти ослаблення випромінювання для всіх відомих на даний момент речовин. Це пов'язано з тим, що поглинання і розсіювання здійснюються в основному внутрішніми електронами атомів і їх стан не залежить від складу речовини, що містить атоми певного елемента.

З цієї причини довідкові таблиці зазвичай містять значення масових коефіцієнтів загасання m_f змінюється для атомів різних елементів і для

різних енергій випромінювання. Коли іонізуюче випромінювання з великими енергіями проходить через речовину, структура речовини змінюється [56].

При проходженні через речовину частинки взаємодіють з атомами, що входять до її складу, в тому числі з електронами і ядрами (або нуклонами). Характер взаємодії випромінювання з речовиною залежить не тільки від його типу, енергії та густини потоку, але й від фізико-хімічних властивостей самої речовини. При взаємодії з нейтронним випромінюванням ядерні реакції з речовиною протікають активно. Ймовірність протікання значної ядерної реакції в ядрі атома речовини з'являється при значному потоці α - і β - частинок, γ - У присутності ядер з великим перерізом при певних ядерних реакціях у речовині (наприклад, фотоядерних реакціях) утворюються кванти високої енергії ($>1,02$ MeV). У більшості випадків енергія іонізуючого випромінювання витрачається на взаємодію з електронними оболонками всіх атомів у речовині.

Існує два типи взаємодії іонізуючого випромінювання з речовиною:

- Пружне розсіювання частинок (в результаті зіткнення частинок змінюється лише імпульс частинки, внутрішній стан частинки не змінюється);
- Непружне розсіювання частинок (зіткнення частинок призводить до зміни внутрішнього стану частинок, що може призвести до їх міграції на інші частинки або появи нових частинок).

При непружній взаємодії іонізуючого випромінювання у вигляді α - і β - частинок з електронними оболонками атомів середовища його енергія витрачається іонізацію і порушення атомів середовища, тобто. випромінювання надає пряму іонізуючу дію на речовину, в якій поширюється. Взаємодія γ випромінювання з електронними оболонками атомів речовини називають непрямоіонізуючим випромінюванням.

Кількісно іонізуючу дію випромінювання характеризують питомою іонізацією. Питома іонізація, створювана γ -випромінюванням, в $5 \cdot 10^4$ разів менше питомої іонізації α -частинками і в 50 разів менше питомої іонізації β - має таку ж енергію, як і деталь. Для кількісної оцінки енергії іонізуючого випромінювання, поглиненої одиницею маси опроміненого матеріалу, вводиться величина, яка називається поглинутою дозою іонізуючого випромінювання. Структура речовини змінюється пропорційно до цієї дози. Проникаюча здатність іонізуючого випромінювання залежить від характеру взаємодії між іонізуючим випромінюванням і конкретним матеріалом. Ця величина важлива для прогнозування радіаційної стійкості конструкційних матеріалів, розрахунку захисту від іонізуючого випромінювання та реєстрації радіації. Основними ефектами опромінення матеріалу є іонізація та збудження [57-62].

Під час іонізації з електрично нейтральних атомів і молекул утворюються позитивні і негативні іони та вільні електрони. Термін "іонізація" відноситься до сукупності елементарних актів іонізації атомів і молекул, а також до численних актів іонізації газів і рідин. Позитивні іони також можуть бути іонізовані, в цьому випадку кратність зарядів збільшується. Енергія, необхідна для відриву електрона, називається енергією іонізації. Іонізація може бути спричинена поглинанням електромагнітного випромінювання, нагріванням газів, накладанням електричного поля або зіткненням частинок з електронами, іонами чи атомами.

У деяких випадках нейтральні атоми і молекули можуть з'єднуватися з електронами, утворюючи негативні іони. Ще одним наслідком взаємодії іонізуючого випромінювання з речовиною є поява збуджених станів. Збуджені стани - це енергетичні стани атомів і молекул, що характеризуються надлишком енергії порівняно з основним станом. Відомо, що атоми і молекули стабільні лише в ряді стійких станів, що відповідають певним значенням енергії. Найнижчий енергетичний стан називається основним, тоді як інші стани називаються збудженими. Зміна енергії при переході атома з одного стабільного стану в інший пов'язана зі зміною структури електронної оболонки атома.

Енергія випромінювання, що проходить через речовину, втрачається в основному при зіткненнях з електронами. Електрони в атомі рухаються на певну відстань від ядра під дією двох рівних, але протилежних сил: сили притягання між негативно зарядженими електронами і позитивно зарядженим ядром та відцентрової сили, що виникає внаслідок їхнього руху навколо ядра [63].

Якщо електрон значно прискорюється в результаті зіткнення з радіаційною частинкою, він може подолати силу тяжіння ядра і покинути атом або молекулу. В результаті молекула перетворюється на позитивний іон. Якщо прискорення недостатнє, щоб викликати іонізацію, зіткнення змінює "орбіту" такого електрона, збільшуючи його відстань від ядра, тобто потенційну енергію електрона, і атом або молекула "збуджується". Цей процес спричиняє іонізуюче випромінювання, а також оптичне випромінювання.

При своєму русі речовиною, випромінювання залишають своєму шляху іони, вибиті електрони і збуджені молекули. Результат дії випромінювання на окрему молекулу можна подати у вигляді:

$M \rightarrow M^+ + e$, $M \rightarrow M^*$, где M — молекула, електрон якої видалений внаслідок зіткнення з часткою випромінювання; M^+ — іон, що вийшов при цьому, який називають молекулярним, а M^* — збуджена молекула. Час життя цих первинних продуктів дії випромінювання на речовину дуже мало: 10^{-12} , 10^{-6} с.

Діелектрики (повітря, скло, пластмаси) є провідними в радіаційному полі, оскільки утворюються заряджені частинки (іони, електрони); чим більше заряджених частинок, тим сильніше випромінювання. Коли опромінення припиняється, провідність швидко зменшується.

2.2 Взаємодія важких частинок із речовиною

Коли випромінювання потрапляє на матеріал, частина його відбивається назад у матеріал (альbedo), а частина розсіюється в матеріалі. Взаємодія частинок (протонів, дейтронів, α -частинок і нейтронів) з речовиною залежить від їхнього типу, заряду, маси та енергії. Заряджені частинки іонізують атоми речовини, взаємодіючи з електронами атомів. Високоенергетичні частинки стабілізуються в речовині і передають їй свою енергію, викликаючи іонізацію.

Взаємодія частинок залежить від таких властивостей, як густина, атомний номер і середній потенціал іонізації речовини. В результаті частинки втрачають енергію і їхні орбіти змінюються. Коли вузький пучок прискорених заряджених частинок проходить через шар матеріалу, енергія частинок зменшується при проходженні через матеріал, що призводить до більшої енергетичної дисперсії.

Пучок збільшується за рахунок багаторазового розсіювання. Швидко заряджені важкі частинки з масами, що в сотні разів перевищують масу електрона, взаємодіють з електронними оболонками атомів і ядер у матеріалі. Зіткнення (пружні або непружні) між такими частинками і ядрами можуть відбуватися, але дуже рідко через відносно малий об'єм, який ядра займають в атомі. Тому вони мало впливають на придушення важких частинок речовиною.

В результаті взаємодії зі швидкими зарядженими частинками електрони отримують додаткову енергію і або переходять на один з енергетичних рівнів далі від ядра, або взагалі залишають атом. У першому випадку відбувається збудження, у другому - іонізація атома. При проходженні поблизу ядра швидкі частинки сповільнюються його електричним полем. Уповільнення заряджених частинок супроводжується випромінюванням кванта гальмівного рентгенівського випромінювання.

У процесі взаємодії енергійної важкої зарядженої частинки з електронами атомної оболонки втрата енергії пропорційна квадрату заряду частинки, що налітає, і не залежить від маси частинки, що налітає. Мінімальні непружні втрати обмежені енергією збудження електронів в атомі. Частинка може передати частину своєї енергії електрону, який переведе її на один із збуджених рівнів атома. В результаті, починаючи з певної енергії, частинка взаємодіє вже не з одним електроном, а з усім атомом. Тут відбувається пружне зіткнення частинки (її порядковий номер Z_1) з атомом (його порядковий номер Z_2). Ймовірність збудження або

іонізації атома залежить від числа Z_2 елементів, що входять до складу опромінюваного матеріалу, тобто від рівня електронного зв'язку в атомі. Коли енергія падаючої частинки висока, втрати на іонізацію домінують [64].

Втрати енергії внаслідок непружних (збудження та іонізація) та пружних зіткнень між зарядженими частинками та атомами називають іонізаційними втратами. Вони дорівнюють кількості іонних пар (електронів та іонів), що утворюються на одиниці шляху частинки. Щоб створити пару іонів в одному й тому ж матеріалі, всі заряджені частинки споживають однакову енергію. Половина цієї енергії витрачається на іонізацію, а друга половина - на збудження та пружні зіткнення з молекулами.

Наприклад, для α -частинки енергія утворення однієї пари іонів у повітрі становить 34 еВ. З цієї енергії на іонізацію молекули витрачається 15 еВ, інші 19 еВ витрачаються на збудження і пружні зіткнення. При проходженні α -частинкою з енергією $E_a=4,2$ МэВ (^{238}U) до її поглинання утворюється 105 пар іонів. Наприкінці шляху α -частинки, де вона має меншу енергію, питома іонізація істотно вище (7000 пар іонів на 1 мм шляху), ніж на початку шляху (3000 пар іонів).

Питомі втрати енергії на іонізацію - це співвідношення між енергією зарядженої частинки, яка витрачається внаслідок іонізації середовища при проходженні нею певної відстані, і довжиною цієї ділянки шляху. Питомі втрати енергії зростають зі зменшенням енергії частинки, особливо перед проходженням через речовину (під Брегга).

Якщо енергія частинки, що проходить крізь речовину, більша за енергію зв'язку електронів атомів, то втрати енергії іонізації важкої зарядженої частинки виражаються рівнянням Бете-Блоха.

$$-\frac{dE}{dx} = \frac{4\pi n_e Z_1^2 e^4}{m_e v^2} \frac{1}{\beta} \left[\ln \frac{2m_e c^2 \beta^2}{I(1-\beta^2)} - \beta^2 \right] - d - U \quad (2.3)$$

де E - кінетична енергія частки, m_e - маса електрона ($m_e c^2 = 511$ кэВ - енергія спокою електрона); e - заряд електрона; c - швидкість світла; v - швидкість частки; $\beta = v/c$; Z_1 - заряд частинки; n_e - щільність електронів у речовині; $I = (13,5 Z_1) \cdot 1,6 \cdot 10^{-12}$ - іонізаційний потенціал атомів речовини середовища, через яке проходить частка (ерг); Z_2 - заряд ядер речовини середовища; d та U - члени, які враховують ефект щільності та сили зв'язку K та L - електронів із ядром.

Формула Бете-Блоха показує, що питомі втрати енергії зарядженої частинки не залежать від маси частинки, залежать від концентрації електронів у середовищі, є квадратичними від заряду частинки і є функцією швидкості частинки:

$$j(v) \gg \bar{v}^2 : \frac{dE}{dx} \gg Z_1^2 n_e(v) \quad (2.4)$$

Універсальна для всіх частинок функція dE/dx в області малих швидкостей змінюється як $1/b^2$, тобто у міру уповільнення нерелятивістської частки її гальмування різко посилюється. Зі зростанням величини параметра в функція досягає мінімуму. Тому помірно релятивістську частинку називають «мінімально іонізуючою». При подальшому зростанні параметра втрати повільно ростуть [65-66].

Залежність dE/dx від властивостей середовища визначається ставленням Z_2/A , близьким до $1/2$ для більшості речовин. Вплив середнього потенціалу іонізації I , стоїть «під логарифмом», мало. Для однозарядної мінімально іонізуючої частки втрати становлять від 1 до 2 МеВ·см²/г.

Питомі втрати енергії прямо пропорційні числу електронів речовини і квадрату заряду частки втрачає енергію на іонізацію і обернено пропорційні квадрату швидкості важкої частки. Вони не залежать від маси m проходить через речовину частки (за умови $m \gg m_e$), але суттєво залежать від швидкості частки. Питомі втрати енергії лінійно залежать від густини атомних електронів n . Іонізаційні питомі втрати енергії у двох речовинах відносяться один до одного як порядкові номери цих речовин:

$$\frac{dE}{dx} \Big|_{Z_1} : \frac{dE}{dx} \Big|_{Z_2} = Z_1^2 : Z_2^2 \quad (2.5)$$

Так, іонізаційні втрати протону у свинці ($Z_2=82$) у 16 разів більше, ніж у вуглеці ($Z_2=6$).

Якщо частка рухається в речовині, що складається з декількох сортів атомів, то питомі втрати енергії характеризують ефективним порядковим номером $Z_e \phi$. Він дорівнює порядковому номеру однорідної речовини, у якому питомі втрати такі самі, як і неоднорідному речовині. Ефективний порядковий номер може бути не рівним цілому числу, як у елементів. Так, повітря приписується $Z_e \phi = 7.64$.

Питомі іонізаційні втрати енергії в речовині зі складним хімічним складом можна підрахувати за формулою

$$\frac{dE}{dx} = \frac{1}{M} \sum_i N_i A_i \left(\frac{dE}{dx} \right)_i, \quad (2.6)$$

де M - молекулярна вага з'єднання, N_i - кількість атомів сорту i з атомною вагою A_i в молекулі, $(dE/dx)_i$ - питомі втрати для цієї простої речовини.

Втрати енергії зменшують швидкість частинок. Варіації втрат енергії окремих частинок через випадковий характер процесу призводять до

збільшення розсіювання. Статистична природа процесу іонізації призводить до великих варіацій іонізаційних втрат.

Основна частина іонізації відбувається у дві стадії. На першій стадії падаюча частка безпосередньо вибиває з атомів електрони - первинна іонізація. Спектр кінетичної енергії первинних електронів швидко падає: $dN/dT \sim 1/T^2$. Досить енергійні їх, звані d - електронами, своєю чергою виробляють вторинну іонізацію. У міру іонізаційного гальмування електрони відчують також дуже значне кутове розсіювання. Тому для характеристики товщини речовини, на яку ефективно проникають електрони і яка суттєво менша за повний пробіг, використовується практичний пробіг R_p , слабо залежить від геометрії поглинача та його складу. Повне число іон-електронних пар, вироблене в результаті первинної та вторинної іонізації, пропорційно іонізаційним втратам і змінюється в широких межах для різних речовин. Так, на утворення однієї пари в газоподібному аргоні потрібно 26 еВ, а в напівпровіднику всього ~3 еВ.

Таблиця 2.1 - Пробіги α - частинок у повітрі, біологічної тканини, алюмінію

Енергія α -	4	6	8	1
Повітря, см	2	4.	7.	1
Біологічна	3	5	96	1
Алюміній,	1	3	48	6

Заряджена частинка проходить певну відстань у речовині, перш ніж втрачає всю свою кінетичну енергію. Пробіг важкої частинки - це довжина траєкторії (треку), яку пройшла частинка в матеріалі з моменту її входження в матеріал до повної стабілізації. Величина пробігу R визначається питомою втратою енергії.

Чим вища густина атомних електронів і вищий заряд частинки, тим більші ці втрати і тим менша відстань, яку проходить частинка в матеріалі. Високзаряджені частинки, які в основному взаємодіють з атомними електронами, майже не відхиляються від початкового напрямку руху, а їхні траєкторії є лінійними. Тому відстань, яку проходить важка частинка, вимірюється відстанню від джерела частинки до точки її зупинки [67].

Відстань, яку проходить частинка, залежить від її заряду, маси, початкової енергії та властивостей середовища, через яке вона проходить. Відстань зростає зі збільшенням початкової енергії, причому частинки з більшою масою мають меншу швидкість, ніж легші частинки. Частинки, що рухаються повільніше, ефективніше взаємодіють з атомами і швидше витрачають енергію.

Розгляньмо докладніше біг частинок у мові.

Пробіг α - частинок зазвичай малий. Наприклад, у α - частинки з енергією 4 МеВ довжина пробігу в повітрі 2,5 см, а у воді або м'яких

тканинах тварин і людини - соті частки міліметра.

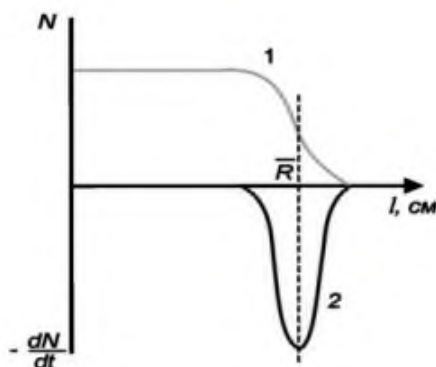


Рисунок 2.2 - Залежність числа a - частинок від відстані до джерела. 1 - число a - частинок на відстані l ; 2 - $-dA/dl$ - число a - частинок з пробігом l ; R - середній пробіг a - частинок

Розподіл числа a -часток за товщиною шару поглинаючого газу представлено на рис. 2.2. В результаті неоднорідності речовини, що поглинає енергію a - частинок, не всі a - частинки з рівною початковою енергією мають однаковий пробіг, тому більш точне визначення величини пробігу a - частинок проводиться диференціюванням кривої 1, що показує розподіл числа стабілізувалися a - частинок по довжині колії.

Положення максимуму на абсцисі диференціальної кривої 2 дає значення середнього пробігу a - частинок у речовині. Параметр зіткнення a -частинок з електронами має імовірний характер, тому пробіги a -частинок у речовині мають деякий розкид. Внаслідок статистичного характеру процесу іонізації наприкінці шляху a -часток спостерігається невеликий розкид у значеннях пробігу. Вимірюючи пробіг a - частинок в речовині, наприклад у повітрі, можна визначити її енергію. Середній пробіг R_a моноенергетичних a - частинок зазвичай розраховують за емпіричними формулами. У повітрі за нормальних умов:

$$R_{a,нов} = K_a \times E_b^a, \quad (2.7)$$

де R_a - пробіг в см; E_a - кінетична енергія a - частинок в МеВ, b - показник ступені, K_a — константа, яка залежить від енергії a - частинки.

Для a - частинки, що випускаються природними a - випромінювачами ($4 < E_a < 9$ МеВ), $E_a = 0.318$, $b = 1.5$, для a - частинки з вищими енергіями $E_a < 200$ (МеВ) $K_a = 0.148$, $b = 1.8$. Так, a - частинки з енергіями $E_a = 5$ МеВ пробігають у повітрі відстань 3.51 см, а з енергією $E_a = 30$ МеВ - 68 см. Відношення лінійних пробігів двох типів частинок, що починають рух у повітрі з однаковими швидкостями, пропорційно відношенню питомих втрат енергії частинок:

$$\frac{R_1}{R_2} = \frac{m_1}{m_2} * \frac{Z_1}{Z_2} \frac{A_1}{A_2} \quad (2.8)$$

де m_1 и m_2 - масы частиц.

Знаючи пробіг a - частинки у повітрі, можна розрахувати її пробіг R_x у будь-якій іншій речовині:

$$\frac{R_x}{R_{нов}} = \frac{r_{нов}}{r_x} \sqrt{\frac{A_x}{A_{нов}}}, \quad (2.9)$$

де r - густина; A - масова кількість речовини.

Часто замість лінійного пробігу використовують масовий пробіг зарядженої частки R_m , виражається у грамах на квадратний сантиметр ($г/см^2$). Чисельно він дорівнює масі речовини, укладеного в циліндрі, висота якого дорівнює лінійному пробігу частинки R в сантиметрах, а 2 площа поперечного перерізу – 1 см.

$$R_m = rR, \quad (2.10)$$

де r - щільність речовини в $г/см^3$.

Масовий пробіг зарядженої частинки зручний тим, що він мало залежить від складу речовини. Питома втрата енергії пропорційна щільності атомних електронів $n_e = NZ$ (N - щільність атомів). Тому лінійний

пробіг пропорційний NZ $N = \frac{r}{m} N_A$. Масовий пробіг $R_m = rR \gg \frac{NA}{NZ} = \frac{A}{Z}$.

Так як відношення A/Z багатьом речовин змінюється мало, те й масовий пробіг цих речовин майже постійний.

2.3 Взаємодія електронів із речовиною

Порівняно з a - випромінюванням, іонізуюча дія b - частинок на одиницю довжини пройденого шляху в речовині (питома іонізація) менша, а їхня проникаюча здатність більша (втім, вона не дуже велика, наприклад, від потоку b - частинок, максимальна енергія яких 2 МеВ, повністю захищає шар алюмінію завтовшки 3,5 мм). Проходження електронів і позитронів через речовину відрізняється від проходження важких заряджених частинок [68-69].

Основною причиною цього є те, що маси спокою електронів і позитронів малі. Це призводить до відносно великої зміни імпульсу і помітної зміни напрямку руху електронів при кожному зіткненні, що призводить до випромінювання електронами електромагнітних хвиль. Втрати енергії внаслідок руху електронів у речовині можна розділити на втрати на іонізацію та втрати на випромінювання.

Зі збільшенням енергії електронів втрати на іонізацію спочатку зменшуються (до кінетичної енергії, еквівалентної подвоєній енергії спокою електрона), а потім поступово зростають. Радіаційні втрати спостерігаються, коли частинки вільного заряду рухаються з прискоренням в електричному полі ядра. У цьому випадку втрати енергії на випромінювання пропорційні квадрату енергії та кількості елементів. В області низьких енергій домінують втрати на іонізацію електронів. Зі збільшенням кінетичної енергії внесок іонізаційних втрат у загальну втрату енергії зменшується.

Відношення питомих радіаційних втрат енергії до іонізаційних залежить від енергії електрона E_e та заряду ядер середовища Z :

$$K = \left(\frac{dE}{dx}\right)_{рад} \left(\frac{dE}{dx}\right)_{іон} = \frac{ZEe}{600}, \quad (2.11)$$

де E_e виражається в МеВ, Z - середній заряд ядер атомів середовища.

Енергія електронів $E_{крит}$, коли він величина питомих радіаційних втрат дорівнює величині питомих іонізаційних втрат ($A=1$) - називається критичної. Критична енергія для заліза ($Z = 26$) дорівнює 31 МеВ, а свинцю ($Z=82$) - 9.8 МеВ.

Коли енергія електрона перевищує критичну, втрати на випромінювання перевищують втрати на іонізацію. Наприклад, для електронів з енергією 100 МеВ радіаційні втрати заліза і свинцю перевищують втрати на іонізацію в 3 і 10 разів відповідно. У діапазоні енергій, де домінують втрати на випромінювання, енергія електронів експоненціально зменшується при проходженні через матеріал:

$$E = E_0 \exp(x/L_r), \quad (2.12)$$

де E_0 - початкова енергія електрона, E - енергія електрона після проходження довжини x , L_r — радіаційна довжина.

Проходження позитронів у речовині описується тим самим співвідношенням, що й для електронів. Однак у цьому випадку необхідно враховувати ефект анігіляції між падаючим позитроном і електронами в речовині. Переріз анігіляції обернено пропорційний до швидкості позитрона:

$$s_{аніг} \gg \frac{1}{v} \quad (2.13)$$

тому позитрони анігілюють, втративши всю свою енергію. Формула Бете-Блоха для розрахунку іонізаційних втрат електронів має вигляд:

$$\left(-\frac{dE_e}{dx}\right)_{\text{іон}} = \frac{2\rho e^4 n_e}{m_e v^2} \left[\ln \frac{m_e v^2 E_e}{2I^2(1-b^2)} - \ln 2(2\sqrt{1-b^2} - 1 + b^2) \right] + 1 - b^2 + \frac{1}{8}(1 - \sqrt{1-b^2})^2 - d \quad (2.14)$$

де E_e - релятивістська кінетична енергія електрона.

Ця різниця пояснюється тим, що при розгляді елементарних процесів взаємодії двох електронів необхідно враховувати відхилення обох частинок, а також квантово-механічні ефекти обміну, зумовлені ідентичністю двох частинок. Для електронів високих енергій необхідно враховувати ефект електронної густини, який призводить до зменшення іонізаційних втрат. При дуже високих енергіях електрони фактично починають втрачати енергію через зростаючу роль гальмування випромінюванням (bremsstrahlung). Коли енергія електрона перевищує критичну енергію, ці втрати переважають над іонізаційними втратами [69]. Питома втрата енергії електрона з кінетичною енергією E складається з суми втрат на іонізацію та випромінювання. Маса електрона значно менша за масу важкої частинки, що впливає на характер його руху в речовині.

Взаємодія електронів з речовиною набагато слабша, ніж взаємодія α - частинок. Питома іонізація повітря для електрона становить 4, 8 пар іонів на 1 мм шляху. Відповідно до цього, пробіг b - частинок набагато більше пробігу a - частинок з тією ж енергією. Так як маси частинок, що співпадають, можна вважати однаковими, то b -частинки при зіткненні значно відхиляються від початкового напрямку руху і рухаються по звивистій траєкторії.

Лінійний пробіг електронів дорівнює товщині речовини, необхідної для повного поглинання електронів. Ефективні масові пробіги R_{me} моноенергетичних електронів знаходять за емпіричними формулами. Наприклад, для алюмінію ефективні пробіги (в г/см^2) електронів з енергією E (MeV) в алюмінії можна оцінити за формулами:

$$R_{me} = 0,407 E_e^{1,38} \text{ для } E_e < 0,8 \text{ МэВ}, \quad (2.15a)$$

$$R_{me} = 0,542 E_e - 0,133 \text{ для } E_e < 0,8 \text{ МэВ}, \quad (2.15b)$$

Максимальний пробіг R_{max} відповідає пробігу в даному речі b - частинок максимальної енергії E_{max} в даному спектрі b - випромінювання.

Сумарний процес поглинання та розсіювання Р-випромінювання речовиною характеризується величиною ослаблення потоку Р-випромінювання.

Для порівняння на рис. 2.3 наведено криву ослаблення моноенергетичних електронів.

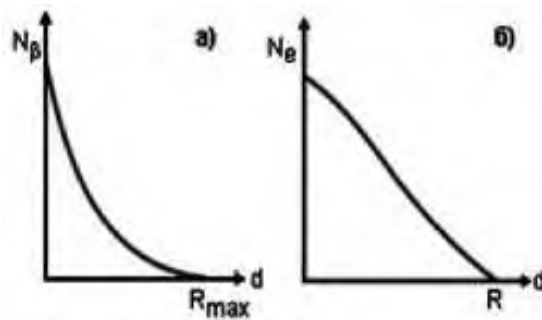


Рисунок 2.3 - Ослаблення пучка 0-часток (а) та моноенергетичних електронів (б) при проходженні через речовину

Ослаблення 0-випромінювання з безперервним енергетичним спектром описується складним законом, що є суперпозицією, яка виникає при енергетичних електронах з всілякими енергіями від нульової до максимальної енергії E_{max} даного спектра 0-випромінювання. Однак початкова ділянка кривої поглинання (при товщинах менше 0,3 R_{max}) досить добре описується експоненційною залежністю:

$$J = J_0 e^{-m d}, \quad (2.16)$$

де J і J_0 - інтенсивності в присутності поглиначу з товщиною d і відсутності його, ρ - лінійний коефіцієнт ослаблення випромінювання.

Лінійний коефіцієнт ослаблення m залежить від максимальної енергії випромінювання E_{max} та властивостей речовини - поглиначу (у першу чергу від числа електронів в одиниці об'єму речовини - поглиначу):

$$m = K N_A \rho Z/A, \quad (2.17)$$

де K - коефіцієнт пропорційності, Z - середній заряд ядер атомів середовища.

Оскільки відношення Z/A для різних речовин - поглиначів змінюються в досить вузьких межах (0,5 - 0,4), практичніше користуватися замість лінійного коефіцієнта ослаблення ц масовим коефіцієнтом ослаблення $m_m = m \rho$ ($\text{см}^2/\text{г}$). Чисельні значення масового коефіцієнта m_m для даного b -випромінювання мало змінюються, відрізняючись під час переходу від легкого поглиначу до важкого лише на 25%.

Шар половинного ослаблення b -випромінювання:

$$D_{1/2} = \lg 2 \backslash m = 0.693 \backslash m. \quad (2.18)$$

Для b -випромінювання з E_{max} більше 0,8 МеВ максимальний пробіг R_{max} дорівнює $7,2 A^{1/2}$.

Для 0-випромінювання з E_{max} до 0,8 МэВ максимальний пробіг R_{max} дорівнює $7,2 A^{1/2}$.

У реальних умовах вимірювань експоненційна залежність для ослаблення b -випромінювання навіть при малих порівняно з пробігом товщинах поглиначів виконується з точністю в 10-15%. При експериментальному визначенні пробігу b -частинок будують криву ослаблення в напівлогарифмічних координатах, причому пробігу R_{max} відповідає така товщина поглиначя, починаючи з якої подальше збільшення товщини поглиначя не призводить до спаду реєструється активності. Зазвичай як поглиначя використовують алюміній. Знаючи максимальний пробіг b -випромінювання в алюмінії $(R_{max})_{Al}$, можна розрахувати максимальний пробіг в будь-якому іншому поглиначі F з відомими параметрами A і Z [69-70].

$$(R_{max})_F = (R_{max})_{Al} \frac{(Z/A)_{Al}}{(Z/A)} . \quad (2.19)$$

Більш точно енергію b -частинок та електронів конверсії визначають за допомогою магнітного спектрометра. Електрони високих енергій ($E > 100$ MeV.) утворюють в результаті послідовних актів випромінювання g -квантів (які потім призводять до утворення електрон-позитронних пар) каскадні зливи. Каскадна злива може бути ініційована і g -квантом високої енергії. Залежно від товщини шару речовини кількість електронів у зливці спочатку швидко зростає. З розвитком каскаду середня енергія, що припадає на електрон, зменшується. Після того, як вона зменшиться настільки, що фотони не зможуть народжувати електрон-позитронні пари, злива припиняється [71].

2.4 Взаємодія гамма-випромінювання з речовиною

Взаємодія g -квантів з речовиною суттєво відрізняється від взаємодії α - та β -частинок. У той час як заряджені частинки передають свою енергію електронам атомів при багаторазових процесах зіткнення, g -кванти віддають всю або, принаймні, більшу частину своєї енергії при одноразовій взаємодії. Однак це взаємодія мало, так що g -кванти мають більшу проникаючу здатність, ніж заряджені частинки. При проходженні через речовину g -кванти взаємодіють з електронами та ядрами, в результаті їх інтенсивність зменшується. До втрат енергії g -випромінювання наводять процеси, пов'язані з фотоефектом, комптонівським розсіюванням електронів у речовині та утворенням електрон-позитронних пар. Вклад кожного процесу в ослаблення g -випромінювання залежить від енергії g -квантів ядерного випромінювання і параметра Z речовини-поглиначя [72].

Імовірність втрати енергії в процесі фотоефекту та комптонівського розсіювання знижується зі зростанням енергії γ -випромінювання, а ймовірність утворення електрон-позитронних пар зростає (починаючи з енергії 1,02 MeV) з підвищенням енергії γ -кванта. Імовірність втрати енергії у квантів зі зростанням параметра Z пропорційна Z - для комптонівського розсіювання, Z^2 - для процесів утворення електрон-позитронних пар і Z^4 - для процесів фотоефекту. Зі зростанням параметра Z і енергії γ -випромінювання ймовірність процесів збільшується в ряду: фотоефект - комптонівське розсіювання - виникнення електрон-позитронних пар. утворення електрон-позитронних пар [73].

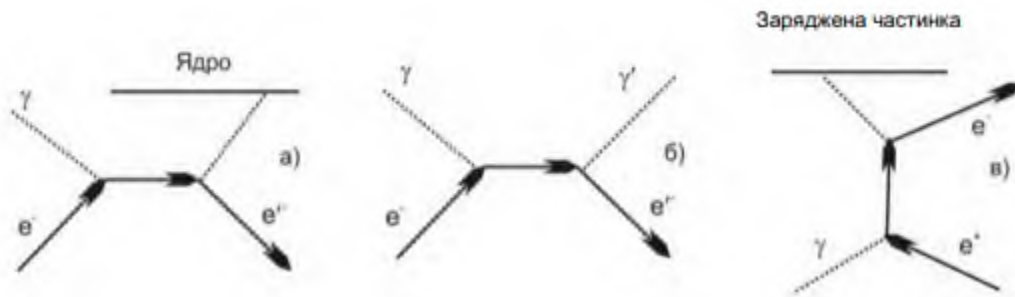


Рисунок 2.4 – Виникнення електрон-позитронних пар. утворення електрон-позитронних пар

При енергії γ -квантів більше 10 MeV перевищується поріг фотоядерних реакцій і внаслідок взаємодії фотонів з ядрами стають можливі реакції типу (γ, p) , (γ, n) , (γ, α) . Перетини фотоядерних реакцій в області енергій до 100 MeV складають 1% повного перерізу взаємодії γ -квантів з атомом. Фотоядерні реакції доводиться враховувати у процесах перетворення фотонного випромінювання в речовині, оскільки вторинні заряджені частинки, такі як протони і частинки, можуть створювати високу щільність іонізації. При опроміненні речовини γ -випромінюванням фотоефектом називається така взаємодія γ -кванта з атомом, при якому γ -квант поглинається (зникає), а з атома виривається електрон. Одна частина енергії γ -кванта E_γ витрачається на розрив зв'язку електрона з ядром ϕ , інша частина перетворюється на кінетичну енергію електрона E_e :

$$E_\gamma = E_e + \phi \quad (2.20)$$

Таким чином, під час фотоефекту частина енергії первинного кванта γ перетворюється в електронну енергію (фотоелектрони та оже-електрони), а частина випромінюється у вигляді характеристичного випромінювання. Після того, як фотоелектрони залишають атомну оболонку, в ній утворюються вакансії. Коли менш зв'язаний електрон переходить на рівень вакансії, вивільняється енергія, яка може бути передана одному з

електронів у верхній оболонці атома, і він залишає атом (ефект Оже) [74-75].

Фотоефект відбувається тільки тоді, коли енергія у-кванта більша за енергію зв'язку електрона в оболонці атома. Фотоелектрон рухається майже перпендикулярно до напрямку поширення поглиненого g -кванта. Фотоелектричне поглинання g -квантів збільшується зі зростанням зв'язаності електронів в атомі. Фотоефект практично не спостерігається на слабо пов'язаних електронах атома. При енергії g -кванта електрони вважатимуться вільними.

Такий електрон не може поглинати уквант. Це впливає із законів збереження енергії та імпульсу

$$E_g = \frac{m_e v^2}{2}, \quad (2.21)$$

$$m_e v^2 = \frac{E_g}{c} = \frac{m_e v^2}{2c}. \quad (2.22)$$

З другого рівняння випливає, що вільний електрон, який поглинає Y -квант, повинен рухатися зі швидкістю, вдвічі більшою за швидкість світла, що неможливо. Фотоефект виникає переважно в К- і L-оболонках атома. Лінійний коефіцієнт ослаблення фотоефекту швидко зменшується зі збільшенням енергії, і при енергіях вище 10 МеВ фотоелектрони в свинці практично не утворюються.

На слабо пов'язаних атомних електронах відбувається розсіювання g -квантів, яке називається комптон-ефектом. Взаємодія g -кванта з електроном у комптон-ефекті представляється як зіткнення двох пружних кульок з масами $m_g = \frac{E_g}{c^2} m_e$.

Ефект Комптона являє собою пружне розсіювання рентгенівського та у-випромінювання на вільних електронах, що супроводжується збільшенням довжини хвилі L .

Цей ефект суперечить класичній теорії, згідно з якою при такому розсіянні L не повинна змінюватися. Ефект Комптона можна як пружне зіткнення двох частинок: фотона і електрона, у якому фотон передає електрону частину своєї енергії (і імпульсу), унаслідок чого його частота зменшується, а L збільшується. У разі ефекту Комптона частина енергії g -кванта перетворюється на кінетичну енергію електронів віддачі, а частина енергії забирає фотон. Імовірність розсіювання g -квантів у разі ефекту Комптона залежить від щільності атомних електронів $n_e \sim Z$. Розсіювання g -квантів відбувається головним чином на слабозв'язаних електронах зовнішніх оболонок атомів.

При цьому лінійний коефіцієнт ослаблення комптон ефекту пропорційний відношенню Z/E_g . Тому зі збільшенням енергії частка розсіяних g -квантів зменшується. Комптонівське розсіювання можна описати законами класичної фізики. Енергія g -кванта

$$E_g = E_g \frac{1}{1 + qE_g}, \quad (2.23)$$

$$\text{де } q = \frac{1 - \cos q}{m_0 c^2}.$$

Оскільки кут розсіювання може набувати різних значень, енергія, що передається електронам, також відрізняється. Електрони, вибиті в процесі ефекту Комптона, мають безперервний енергетичний спектр [76].

У разі важких ядер комптон ефект починає переважати над фотоефектом в області енергій $E_g > 2, 3$ МеВ (у свинці комптон ефект переважає над фотоефектом при енергіях вище 0,5 МеВ). Комптон-ефект слабше залежить від енергії E_g порівняно з фотоефектом. Тому їм можна знехтувати лише в галузі енергій $E_g > 10$ МеВ, де стає суттєвим ефект утворення електрон-позитронних пар (при енергіях вище 50 МеВ комптон-ефектом завжди можна знехтувати).

Гамма-квант у полі ядра може утворити пару частинок: електрон та позитрон. Вся енергія g -кванта перетворюється на енергію спокою електрона і позитрона $2m_e c^2$ та його кінетичні енергії E_{e^-} і E_{e^+} .

Для появи пари частинок закон збереження енергії вимагає, щоб енергія, витрачена в цьому процесі, перевищувала подвоєну масу частки: $E_p = 2m_e c^2$. Мінімальна енергія E_p , необхідна народження пари цього типу, називається порогом народження пар. Крім того, для утворення пар необхідні й інші закони збереження. Наприклад, закон збереження імпульсу забороняє генерування електрон-позитронних пар одним фотоном у вакуумі. Це пояснюється тим, що імпульс одного фотона скінченний у будь-якій системі відліку, а імпульс електрон-позитронної пари в центрі мас дорівнює нулю.

У полі ядра імпульс та енергія g -кванта розподіляються між електроном, позитроном та ядром без порушень законів збереження енергії та імпульсу. Маса ядра незрівнянно більша за масу електрона і позитрону, тому воно отримує зневажливо малу частку енергії. Причому вся енергія g -кванту передається електрону та позитрону. У разі утворення електрон-позитронних пар баланс енергії має такий вигляд (закон збереження енергії):

$$E_g = 2m_e c^2 + E_{e^-} + E_{e^+}, \quad (2.24)$$

де E_{e^-} и E_{e^+} кінетичні енергії електрона та позитрону. Лінійний коефіцієнт ослаблення випромінювання за механізмом утворення пар пропорційний $Z^2/\ln E g$. Цей ефект помітний у тяжких речовинах при великих енергіях. Коефіцієнт стає відмінним від нуля при граничній енергії $E_g = 1.02$ МэВ. В області енергій 10 МеВ основну роль в ослабленні пучка g -квантів відіграє ефект утворення пар, при цьому основне поглинання g -квантів відбувається в полі ядра [76].

У всіх трьох процесах, за допомогою яких первинні фотони взаємодіють з речовиною, частина енергії перетворюється на кінетичну енергію електронів і позитронів, а частина - на променисту енергію вторинних фотонів.

Розглянемо ослаблення паралельного моноенергетичного пучка g -квантів у плоскій мішені. Нехай поверхню мішені перпендикулярно до неї падає потік g -квантів J_0 . Ослаблення пучка радіації в речовині викликається поглинанням та розсіюванням g -квантів. Розсіяний g -квант втрачає частину своєї енергії при зіткненні з електронами та змінює напрямок свого поширення. На відстані від зовнішньої поверхні потік g -квантів послаблюється до величини $J(x)$. У тонкому шарі мішені товщиною dx із потоку уводиться dJ g -квантів. Величина dJ пропорційна потоку $J(x)$ на поверхні шару та товщині шару dx :

$$dJ = - m J dx . \quad (2.25)$$

Знак мінус у правій частині рівняння показує, що у шарі потік зменшується на dJ g -квантів. Перепишемо рівняння у вигляді:

$$m = - \frac{dJ}{J dx} . \quad (2.26)$$

Коефіцієнт пропорційності m називають повним лінійним коефіцієнтом ослаблення випромінювання. Він має розмірність см^{-1} і чисельно дорівнює частці моноенергетичних g -квантів, що вибувають з паралельного пучка на одиниці шляху випромінювання в речовині.

Лінійний коефіцієнт передачі енергії випромінювання визначає частку енергії випромінювання, передану електронам та позитронам у шарі речовини.

Масовий коефіцієнт передачі енергії $\rho \tau_r, m$ виражається через лінійний: $m_{trm} = m_{tr}/\rho$, де ρ - щільність речовини.

Лінійний коефіцієнт поглинання енергії m_{en} - добуток лінійного коефіцієнта передачі енергії m_{tr} , на різницю між одиницею і часткою g енергії вторинних заряджених частинок, що переходить у гальмівне випромінювання в даній речовині:

$$m_{en} = m_{tr} (1 - g) . \quad (2.27)$$

Лінійний коефіцієнт передачі енергії m_{tr} - відношення частки енергії

dW/W побічно іонізуючого випромінювання (виключаючи енергію спокою частинок), перетворена на кінетичну енергію заряджених частинок при проходженні шляху dl в речовині до довжини цього шляху:

$$m_r = (1/w)(dw/dl). \quad (2.28)$$

Масовий коефіцієнт поглинання енергії m_{enm} виражається через лінійний коефіцієнт:

$$m_{en.m} = m_{en} / r = m_{tr.m}(1 - g).$$

Поглинання g -квантів так само, як b - частинок, відбувається за експоненціальним законом:

$$J(x) = J_0 e^{-mx} \quad (2.29)$$

проте для поглинання g -квантів цей закон дотримується суворіше.

У цьому рівнянні $m = t + e + c$, t - Лінійний коефіцієнт ослаблення у разі фотоэффекту, e - лінійний коефіцієнт ослаблення для комптон-ефекту, c - лінійний коефіцієнт ослаблення у разі ефекту утворення пар.

Лінійний коефіцієнт фотопоглинання має вигляд:

$$t = t_e + t_s, \quad (2.30)$$

де t_e - характеризує частину коефіцієнта поглинання, що призводить до перетворення первинної енергії фотона на кінетичну енергію електрона. t_s - характеризує перетворення енергії первинних фотонів в енергію характеристичного випромінювання [72-76].

Лінійний коефіцієнт фотоелектричного поглинання пропорційний відношенню:

$$t = Z^5 / E_g^{3.5}. \quad (2.31)$$

Величина t різко зменшується зі зростанням енергії та при $E_g > 10$ МеВ фотоелектрони практично не утворюються. У разі ефекту Комптона частина енергії g -кванта перетворюється на кінетичну енергію електронів віддачі, а частина енергії забирає розсіяний фотон. Лінійний коефіцієнт комптонівської взаємодії вія можна уявити у вигляді:

$$e = e_e + e_s, \quad (2.32)$$

де e_e та e_s має такий самий сенс, що t_e і t_s у разі фотоэффекту.

Лінійний коефіцієнт ефекту утворення пар $c = Z^2 \ln E_g$.

У сфері енергій $E_g > 10$ МеВ головну роль у ослабленні пучка g -квантів грає ефект утворення пар.

Таким чином, у всіх трьох процесах взаємодії первинних фотонів з речовиною частина енергії перетворюється на кінетичну енергію електронів і позитронів, а частина - на енергію випромінювання вторинних фотонів.

Речовини з однаковим ефективним числом мають однаковий коефіцієнт масового ослаблення. Наприклад, коефіцієнти масового ослаблення води, кисню, азоту, повітря, вуглецю і біологічних тканин майже ідентичні один одному через їхні близькі ефективні порядки [71].

Відстань, що проходить фотоном у речовині до взаємодії з ним, називається середньою довжиною вільного пробігу і дорівнює $1/m$. Проникаюча здатність променів характеризується товщиною шару поглинача (в $\text{г}/\text{см}^2$), при якій інтенсивність випромінювання зменшується в два рази. Цю величину називають товщиною шару напівпоглинання, $A_{1/2} = \ln 2 / m$. Довжина релаксації - товщина d_e шару речовини, що послаблює пучок моноспрямованого випромінювання в e раз (e - основа натуральних логарифмів).

Повний лінійний коефіцієнт ослаблення залежить від густини, порядкового номера речовини, і навіть від енергії g -квантів:

$$m = n(r Z E_g). \quad (2.33)$$

Вклад кожного з трьох процесів (фотоэффект, комптон-ефект та утворення пар) у загальний процес поглинання випромінювання речовиною висить від енергії g -квантів і порядкового номера поглинача.

У точках лівої кривої комптон-ефект дорівнює фотоэффекту, у точках правої кривої комптон-ефект дорівнює ефекту утворення пар. Фотоелектричне поглинання - основний процес зменшення інтенсивності g -випромінювання у важких елементах при малій енергії g -квантів [73].

У свинці повний лінійний коефіцієнт ослаблення зі збільшенням енергії спочатку зменшується, приймаючи мінімальне значення за енергії 3 МеВ, та був збільшується. Такий перебіг кривої пояснюється тим, що з низьких енергіях ($<0,5$ МеВ) залежність $m(E_g)$ обумовлюється фотоэффектом, при середніх енергіях - комптон-ефектом. При енергіях більше 3 МеВ коефіцієнт m основний внесок вносить ефект утворення пар. Свинець є найкращим поглиначем g -квантів у всіх сферах енергії. При цьому він найбільш прозорий для g -квантів з енергією ~ 3 МеВ. Взаємодія випромінювання з речовиною закінчується в одних випадках поглинанням g -квантів (фотоэффект, утворення пар), в інших - розсіюванням (комптон-ефект)

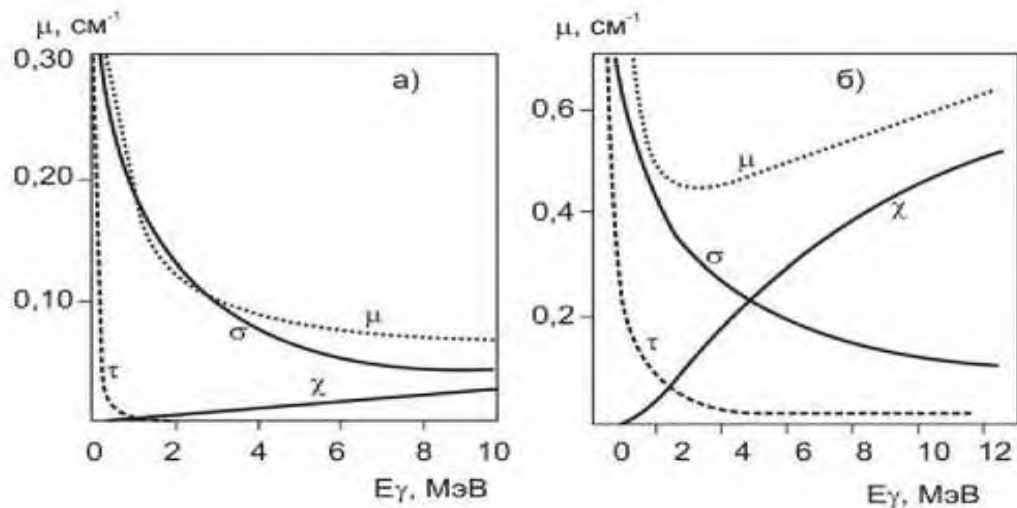


Рисунок 2.5 - Залежність коефіцієнта ослаблення μ – випромінювання для алюмінію (а) та свинцю (б) від енергії γ – променів

Повний лінійний коефіцієнт ослаблення γ -випромінювання часто поділяють на дві складові:

$$m = m_\ell + m_\zeta. \quad (2.34)$$

Коефіцієнт m_ℓ називають коефіцієнтом істинного поглинання чи коефіцієнтом електронного перетворення. Він визначає частку енергії γ -випромінювання, передану електронам та позитронам у шарі речовини. Лінійний коефіцієнт розсіювання, m_ζ , визначає частку енергії γ -випромінювання, перетворену на енергію вторинного γ -випромінювання. Лінійний коефіцієнт поглинання дозволяє розрахувати енергію випромінювання E , поглинену в одиниці об'єму речовини [74].

3 ФІЗИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ В ТЕХНОЛОГІЯХ ВОДООЧИЩЕННЯ

Очищення води - це технологія підвищення безпеки водоспоживання та поліпшення якості води в таких процесах, як освітлення, пом'якшення, опріснення та знезараження. Технологія водопідготовки передбачає підготовку води до споживання з використанням фізичних, фізико-хімічних та інших методів очищення [75-76]. Важливість цієї теми не викликає сумнівів. З розвитком промисловості відбувається забруднення навколишнього середовища і, як наслідок, забруднення води. Якість питної води повинна відповідати вимогам національних стандартів та санітарного законодавства щодо якості та безпечності. У 2017 році в Україні було введено в дію Державні санітарні правила та норми "Санітарні вимоги до води питної, призначеної для споживання людиною" [79] відповідно до Закону "Про забезпечення санітарного та епідемічного благополуччя населення" та Закону "Про питну воду та питне водопостачання" [78].

Метою цього розділу є демонстрація можливості використання методів фізичного моделювання розподілених систем в технології очищення стічних вод та прогнозування критичних режимів (зниження якості очищення), спричинених можливими змінами зовнішніх умов (особливо температури), на основі розглянутих моделей. В даній роботі розглядаються наступні питання:

- Використання фізики аерозольних систем в технологіях водопідготовки;
- Вплив температурних змін (наприклад, сезонних і кліматичних) на розрахунок параметрів кінетичних процесів у гравітаційних відстійниках, зокрема гідромеханічних відстійниках стічних вод;
- визначення параметрів процесів водопідготовки Висновки та практичне значення роботи полягають у розробці рекомендацій щодо вдосконалення технологічних процесів управління якістю води та водопідготовки.

3.1 Класифікація води та її забруднювачів

Вода класифікується як питна та промислова [75-76,80]. У більшості випадків забруднення води пов'язане з наявністю в ній фаз, в яких дисперговані різні речовини. Залежно від фізичного стану фаз у воді

утворюються такі дисперсні системи, як суспензії, емульсії та піни. Дисперсні фази складаються з частинок різного розміру. Стічні води є полідисперсною, гетерогенною, агресивною і нестабільною системою [75-76,80].

Класифікація домішок за фазово-дисперсним станом: а) Гетерогенні системи: I - розмір частинок 0,1 мкм - 1 мкм (суспензії, емульсії, мікроорганізми, планктон); II - колоїдні розчини, розмір частинок 0,1 мкм - 0,01 мкм (золи, розчини полімерних сполук); III - молекулярні розчини, розмір частинок 0,01 - 0,001 мкм (розчинні гази та органічні речовини); IV - іонні розчини з розміром частинок 0,001 мкм (солі, кислоти, луги).

Перші етапи традиційної технології очищення води пов'язані з гідромеханічними методами і не забезпечують необхідної якості. Шкідливі речовини залишаються. На наступному етапі використовуються більш сучасні методи, такі як фільтри зворотного осмосу, і більш сучасні види методів і технологій нейтралізації забруднювачів. Ці типи забруднень характеризуються ультрадисперсними частинками дисперсної фази розміром до 0,01 мікрона і можуть бути органічними макромолекулярними речовинами, в тому числі вірусами і бактеріями.

Майже всі типи забрудненої води потребують використання фізичних методів дисперсних систем, зокрема електрофорезу, але їх доцільність залежить від природи забруднення.

Необхідно уточнити, що якість води залежить від багатьох факторів забруднення та умов очищення, в тому числі від зміни клімату. Саме ці залежності визначають сучасні технології водоочищення і є предметом спеціальних наукових і практичних міркувань.

3.2 Аналіз впливу сезонних або кліматичних змін температури на кінетичну стійкість гравітаційних осаджувальних систем

На початкових етапах очищення води від забруднюючих речовин для видалення з води частинок різного вмісту зазвичай використовують гідромеханічні методи (фільтрування, відстоювання під дією сили тяжіння або відцентрових сил) [80, 81].

Завислі в рідині частинки певної маси поступово осідають у гравітаційному полі Землі (якщо їхня густина більша за густину рідини) і спливають, якщо їхня густина менша за густину рідини. Швидкість руху

частинок залежить від їхньої маси та в'язкості рідини, яка змінюється залежно від температури.

Седиментації (або суспензії) перешкоджає броунівський рух, який порушує стоксівський механізм седиментації і намагається рівномірно розподілити частинки по всьому об'єму. Це означає, що необхідний мінімальний розмір частинок d , близький до середньої довжини вільного пробігу молекул води. Нижче цього розміру має відбуватися хаотичний броунівський рух частинок, що відхиляється від закону Стокса.

Якщо дисперсна фаза опускається на дно або спливає на поверхню за відносно короткий час, система є кінетично нестійкою.

Якщо частинки дисперсної фази досить малі і їх седиментації повністю перешкоджає броунівський рух, система кінетично стійка.

В результаті броунівського руху в полідисперсних системах повинен встановлюватися розподіл частинок по висоті вздовж сили тяжіння.

Щоб проаналізувати вплив сезонних або кліматичних змін температури на кінематичну стійкість гравітаційних систем, розглянемо осадження твердих сферичних частинок у воді. Прикладами таких систем є суспензії піску у воді та емульсії частинок нафти у воді.

Розглянемо температурну залежність в'язкості води та коефіцієнта дифузії броунівських частинок у воді. В'язкість води визначено за літературними даними [82].

Середній зсув Δx броунівських частинок і коефіцієнт дифузії розраховано згідно з класичною теорією Смолуховського [80, 83], яка описує тепловий хаотичний рух дисперсних частинок у рідині або газі:

$$\Delta x^2 = \frac{2RTt}{6ph N_A \eta r}, \quad (3.1)$$

де Δx – середнє зміщення частинки за час t ; η – коефіцієнт в'язкості середовища; r – радіус частинки; T – температура в К; N_0 – число Авогадро ($N_A = 6.02 \cdot 10^{23}$ моль⁻¹); R – універсальна газова стала.

За формулою Ейнштейна для теплового руху броунівських частинок

$$\Delta x = \sqrt{Dt}, \quad (3.2)$$

де D – коефіцієнт дифузії частинок, які перебувають у броунівському русі, t – час, за який відраховується зміщення Δx .

З порівняння формул (3.1) та (3.2) може бути знайдено коефіцієнт дифузії

$$D = \frac{RT}{3ph N_A \eta d}, \quad (3.3)$$

де $d = 2r$ – діаметр частинок.

Розглянемо стоксівський гравітаційний механізм осадження (спливання) дисперсних частинок.

На завислу у воді частинку діаметра d_c діють сила тяжіння, яка спрямована вертикально донизу:

$$G = m_c g = \rho \frac{d_c^3}{6} r_c g, \quad (3.4)$$

та виштовхувальна (архімедова) сила, що дорівнює вазі рідини в об'ємі частинки і спрямована, відповідно, вертикально вгору,

$$A = \rho \frac{d_c^3}{6} r_0 g, \quad (3.5)$$

де ρ_0 – густина води.

Рівнодіюча цих двох сил дорівнює

$$G - A = \rho \frac{d^3}{6} g (r_c - r_0), \quad (3.6)$$

де ρ_c – густина речовини частинки.

Швидкість осадження v_S визначається із умови рівності цієї рівнодіючої сили та сили опору водного середовища. В якості сили опору виберемо відому силу Стокса F_c :

$$F_c = 6\pi h r v. \quad (3.7)$$

Відповідну швидкість стоксівської седиментації v_S знаходимо за формулою:

$$v_S = \frac{gd^2}{18h} (r_c - r_0). \quad (3.8)$$

З (3.8) видно, як швидкість осадження частинки зростає із збільшенням її діаметра та зменшенням в'язкості води.

Якщо в рамках розглянутої моделі вважати, що частинка рухається рівномірно, то зміщення x за одну секунду прямо пропорційно квадрату діаметра частинки і обернено пропорційне в'язкості води.

Якщо покласти, що швидкість осадження v_S (3.8) постійна

$$x = v_S t, \quad (3.9)$$

то гравітаційне осадження частинки може бути параметризовано за формулою

$$x = \frac{gd^2}{18h} r^* t, \quad (3.10)$$

де

$$r^* = r_c - r_0. \quad (3.11)$$

В табл. 3.1 приведені дані розрахунків швидкостей осідання частинок пригравітаційному осадженні і броунівській дифузії в термінах зміщень частинок x і Δx за 1 с. В табл. 3.1: X – гравітаційне осадження, а Δx

– броунівське зміщення за 1 с сферичних частинок суспензії. З таблиці видно, що швидкість стоксівського осідання у температурному інтервалі T від 273 К до 323 К зростає більш, ніж в 3 рази. Також помітно зростає швидкість дифузійного осідання, але у меншій ступені.

Таблиця 3.1 – Гравітаційне осадження x (в мкм) та броунівське зміщення Δx (в мкм) за 1с сферичних частинок суспензії діаметром d і густиною $\rho = 2000 \text{ кг/м}^3$ у воді (в'язкість η в 10^{-3} Па) при різних температурах T (в К)

T	η	$d=60 \text{ мкм}$		$d=20 \text{ мкм}$		$d=5 \text{ мкм}$		$d=2 \text{ мкм}$		$d=1 \text{ мкм}$		$d=0.5 \text{ мкм}$		$d=0.1 \text{ мкм}$	
		x	Δx	x	Δx	x	Δx	x	Δx	x	Δx	x	Δx	x	Δx
273	1.7865	1100	0.22	120	0.39	8.0	0.78	1.3	1.2	0.31	1.7	0.08	2.5	0.002	5.5
278	1.5138	1300	0.23	150	0.40	9.0	0.81	1.5	1.3	0.37	1.8	0.09	2.6	0.003	5.7
283	1.3037	1500	0.25	170	0.44	11	0.88	1.7	1.4	0.43	2.0	0.11	2.8	0.004	6.2
288	1.1369	1800	0.27	190	0.47	12	0.94	2.0	1.5	0.49	2.1	0.12	3.0	0.005	6.7
293	1.0019	2000	0.29	220	0.51	14	1.02	2.2	1.6	0.56	2.3	0.14	3.2	0.006	7.2
298	0.8909	2200	0.31	250	0.54	16	1.09	2.5	1.7	0.62	2.4	0.16	3.4	0.007	7.7
303	0.7982	2500	0.33	280	0.58	17	1.16	2.8	1.8	0.69	2.6	0.17	3.7	0.008	8.2
313	0.6540	3100	0.38	340	0.65	21	1.30	3.4	2.1	0.86	2.9	0.21	4.1	0.009	9.3
323	0.5477	3600	0.40	390	0.71	25	1.41	4.0	2.2	1.01	3.2	0.25	4.5	0.01	10

Порівнюючи дані для середнього зміщення Δx частинок у процесі теплового руху (табл. 3.1) зі значеннями шляху x у процесі стоксівського осадження в той самий час (фактично $t = 1$ с), можна вважати зону осадження кінетично нестійкою, оскільки для частинок діаметром більше кількох мікрон тепловий рух не є важливим, і частинки осідають. При цьому швидкість осадження в досліджуваному діапазоні температур зростає втричі з підвищенням температури, тоді як інші параметри залишаються постійними.

Слід зазначити, що частинки розміром менше 1 мкм рухаються переважно хаотично. В цьому випадку процес очищення відбувається за рахунок броунівської дифузії.

Модель процесу очищення в кінетично нестійкому режимі осадження Стокса може бути представлена як рівномірний рух очищеної води зверху (у випадку суспензій важких частинок) або знизу (у випадку емульсій легких матеріалів) на межі розділу між очищеною водою і забрудненою водою зі швидкістю vS .

У випадку важких суспензій вода обробляється з верхнього шару, а межа розділу фаз рухається вниз; у випадку легких емульсій спочатку обробляється нижній шар води, а межа розділу фаз рухається вгору.

Якщо поверхня розділу складає половину висоти стовпа очищеної і неочищеної води, ефективність очищення води вважається рівною 50%.

При цьому час очищення дорівнює $t = \frac{h}{v_s}$, де h – товщина шару очищеної води.

У випадку ламінарного руху стічних вод у каналі очисних споруд потік повинен пройти половину довжини каналу за вказаний вище час, за який очищується 50% води. Зауважимо, що прозорість поверхні розділу фаз залежить від того, наскільки система є немонодисперсною.

Перехід системи з одного режиму в інший (від стоксівського осадження до хаотичного броунівського руху) характеризується певним критичним розміром (критичним діаметром). Це розмір частинок, який розділяє межу між гравітаційним механізмом осадження і механізмом броунівської дифузії.

Моделювання процесів переносу дрібнодисперсних сумішей у потоці є добре вивченою проблемою. Наприклад, в [75] розвинуто статистичну теорію, кінцевим результатом якої є гаусівський закон розподілу суміші в потоці; в [84] розроблено так звану модель камерної дифузії, яка пов'язана з розв'язанням диференціальних рівнянь переносу типу (3.12).

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial (u_i C)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} (D_i \frac{\partial C}{\partial x_i}) + \sum_j \dot{a} R_j, \quad (3.12)$$

де C – концентрація частинок, X_i – координата, u_i – швидкість конвективної складової уздовж X_i , D_i – коефіцієнт дифузії, R_j – потужність джерел скиду.

Рівняння конвективної дифузії в формі (3.12) має цілу низку часткових розв'язків, які відповідають власним початковим умовам [85]. Фундаментальний розв'язок рівняння (3.12) за умов відсутності дії зовнішніх джерел $\sum_j \dot{a} R_j = 0$, має вигляд

$$C(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\rho Dt}} \exp\left[-\frac{(x - ut)^2}{4Dt}\right] \quad (3.13)$$

Користуючись отриманим розв'язком, можна ввести розмірний параметр $u^2/4D$, який у асимптотичній границі (характерний час дифузії набагато більше характерного часу конвекції) розділяє конвективний і дифузійний режими переносу (осадження). Позначимо його $b/2$, де

$$b = \frac{v_s^2}{2D}, \quad c^{-1} \quad (3.14)$$

і показує у скільки разів за час $t = 1$ с квадрат зміщення x^2 дисперсних частинок при стоксівському осадженні більше за квадрат середнього зміщення частинок Δx^2 при їх броунівському русі. Дані його розрахунків приведені в таблиці 3.2, звідки видно, що із збільшенням температури

параметр b збільшується у 3 рази в температурному інтервалі, що досліджується, а це значить, що час осадження скорочується у 3 рази.

Підставляючи у рівність (3.14) формули (3.3) і (3.8), отримуємо вираз, який зв'язує діаметр сферичних частинок d і температуру при завданих значеннях параметра b :

$$d_{кр}^5 = \frac{18 \cdot 12 \cdot RTh}{\rho g^2 N_A r^{*2}} \cdot b. \quad (3.15)$$

Таблиця 3.2 – Розрахунки параметра осадження $b = \frac{v_s^2}{2D}$ твердих сферичних частинок діаметром d і густиною $\rho = 2000 \text{ кг/м}^3$ у воді (в'язкість η в 10^{-3} Па) при різних температурах T (в К)

T	η	$d=60 \text{ мкм}$ $b, 10^4$	$d=20 \text{ мкм}$ $b, 10^4$	$d=5 \text{ мкм}$ b	$d=2 \text{ мкм}$ b	$d=1 \text{ мкм}$ b	$d=0.5 \text{ мкм}$ $b, 10^{-4}$	$d=0.1 \text{ мкм}$ $b, 10^{-6}$
273	1.7865	2480	9.0	100.0	1.20	0.032	9.0	0.31
278	1.5138	3238	14.4	123.2	1.32	0.040	12.2	0.42
283	1.3037	3540	15.2	156.2	1.53	0.048	15.2	0.48
288	1.1369	4096	16.0	163.8	1.72	0.053	16.0	0.53
293	1.0019	4624	19.4	187.7	1.88	0.058	19.4	0.61
298	0.8909	5127	21.2	213.2	2.10	0.068	21.2	0.64
303	0.7982	5595	25.0	216.1	2.31	0.073	22.1	0.79
313	0.6540	6708	28.1	272.2	2.76	0.084	27.0	0.85
323	0.5477	8172	30.2	324.0	3.28	0.102	31.4	1.00

Вважаючи параметр b рівним 1 с^{-1} , отримаємо вираз для критичного діаметру $d_{кр}$ сферичних частинок

$$d_{кр}^5 = \frac{18 \cdot 12 \cdot RTh}{\rho g^2 N_A r^{*2}} \cdot 1 \text{ с}^{-1}. \quad (3.16)$$

За допомогою (3.15) проведені чисельні розрахунки діаметру d частинок в дифузійному режимі броунівського їх руху ($b = 10^{-5}, \text{ с}^{-1}$). За допомогою (3.16) проведені розрахунки критичного діаметру $d_{кр}$ частинок. Тобто розрахунки проведені для двох значень параметра b . Відповідні результати представлені в таблиці 3.3 і на рис. 3.1.

Таблиця 3.3 – Розрахунки критичного діаметра $d_{кр}$ (в мкм) сферичних частинок у воді при $b=1$ і густині ρ^*

Темпе- ратура T , К	ρ^* , в кг/м^3					
	200	500	1000	$\sqrt{2} \cdot 1000$	2000	3000
273	2.60	1.8	1.36	1.18	1.03	0.89
278	2.55	1.75	1.32	1.15	1.00	0.85
283	2.45	1.70	1.28	1.12	0.97	0.83
288	2.39	1.65	1.23	1.09	0.94	0.81
293	2.34	1.62	1.22	1.07	0.93	0.80
298	2.30	1.61	1.20	1.04	0.91	0.77
303	2.25	1.56	1.18	1.03	0.89	0.75
313	2.18	1.51	1.14	1.02	0.86	0.73
323	2.11	1.47	1.11	1.00	0.85	0.71

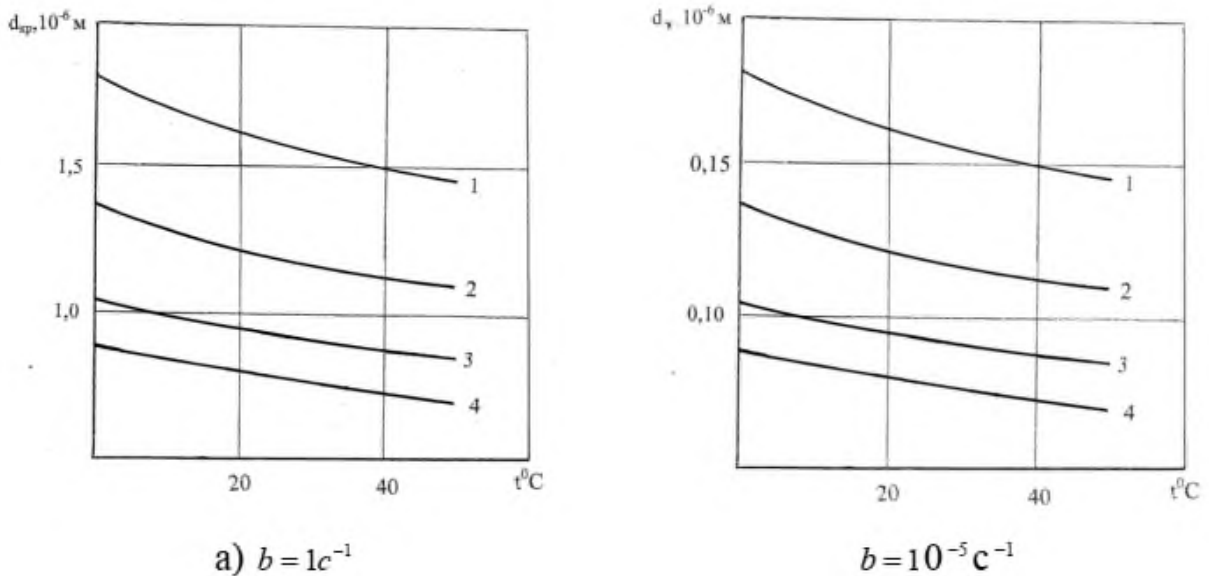


Рисунок 3.1 – Залежності від температури критичного діаметра частинок (а) і діаметра частинок у дифузійному режимі осадження (б) у воді при густині ρ^* : 1 – 500 кг/м³ ; 2 – 1000 кг/м³ ; 3 – 2000 кг/м³ ; 4 – 3000 кг/м³

Розрахунки показують, що діаметр частинок d та критичний діаметр частинок $d_{кр}$ суттєво залежать від густини речовини частинок і температури, і у розглянутому температурному інтервалі зменшуються з температурою на 20 – 30%. Тобто критичний діаметр частинок з підвищенням температури зміщується у бік менших значень (рис.3.1а), а частинки з розміром 0.1 мкм (параметр $b = 10^{-5} \text{ c}^{-1}$) рухаються за законом броунівської дифузії, що можна було очікувати.

Обговорюючи доцільність прийняття параметра осадження b у якості критерію кінетичної стійкості системи, відмітимо, що такий підхід дозволяє, поперше, виявити залежність процесу осадження від температури, а по-друге – отримати у розрахунках цілком реальні значення фізичних величин, зокрема, критичний діаметр завислих у воді частинок, нижче якого змінюється ефективність механізмів фізичних процесів очищення.

Так як швидкість осадження прямо пропорційна квадрату діаметра частинок, то час їх осадження при підвищенні температури на 50° скорочується майже у 3 рази.

Швидкість осадження частинок має залежити від форми частинок. Вона зазвичай менше швидкості осадження сферичних частинок. Тоді для несферичних частинок у розрахункових формулах використовують еквівалентний діаметр d_e , який визначають за об'ємом $V_{ч}$ або площею перерізу частинки S .

3.3 Розрахунки відстійників

Стічні води відстоюються у відстійнику. Відстійник - це прямокутний резервуар, схожий на звичайний басейн. Вода рухається від одного кінця резервуара до іншого. Глибина відстійника зазвичай становить 1,5-4 м, довжина - 12-48 м, а ширина каналу - 3-6 м [81, 83].

На основі дисперсних частинок зі швидкостями осадження, наведеними в таблицях 3.1-3.2, можна розрахувати параметри відстійника для очищення стічних вод. Для очищення стічних вод час перебування в апараті повинен бути більшим за час осідання частинок критичного діаметру d_c або в межах часу, необхідного для осадження з заданої висоти до дна апарату. Іншими словами, модель осадження Стокса використовується для розрахунку осадження частинок з діаметром, більшим за критичний. Припускаючи висоту шару освітленої води $H = 2$ м, визначено час осідання частинок діаметром 5 мкм і густиною $\rho^* = 1000$ кг/м³ при температурах 273 К і 323 К. $t = \frac{H \cdot 1c}{x}$.

При температурі $T = 273$ К час осідання $\tau_{273} = 250 \cdot 10^3$ с = 69 годин, а при $T = 323$ К час осідання $\tau_{323} = 40 \cdot 10^3$ с = 22 години, тобто у 3 рази менше.

Знайдемо швидкість потоку стічної води уздовж апарату, якщо відомо, що довжина каналу $L = 48$ м. Швидкість потоку стічної води уздовж апарату дорівнюватиме $v_{273} = \frac{L}{t_{273}} = \frac{48}{69} = 0.7$ м/год, а

$$v_{273} = \frac{L}{t_{273}} = 22 = 2.2 \text{ м/год.}$$

Розрахунки показують, що сезонні або кліматичні температурні зміни помітно впливають на режим роботи відстійників, швидкість якої має змінюватися у 3 рази.

Продуктивність відстійника по очищеній воді $Q_{осв}$ виразимо рівнянням

$$Q_{осв} = v_n \cdot B \cdot H, \quad (3.17)$$

де v_n – швидкість потоку стічної води уздовж апарату; B – ширина відстійника, м; H – висота шару освітленої води; h – глибина відстійника, м.

Кількість стічної води, яка потрапляє у відстійник: $Q = v_n \cdot B \cdot H$

Продуктивність відстійника по освітленій воді $Q_{осв}$ за 1 с дорівнює

$$Q_{осв} = \frac{15000}{3600 \times 24} = 0.17 \text{ м}^3/\text{с}. \quad (3.18)$$

Ефективність очищення води дорівнює $Q_{осв} / Q = H / h$.

Якщо глибина відстійника дорівнює 4 м, а висота шару освітленої води H дорівнює 2 м, то ефективність відстоювання буде досягати 50%.

Сезонні та кліматичні зміни температури впливають на процес гравітаційного відстоювання, тому необхідно підтримувати оптимальні умови відстоювання в очисній системі. Для цього можна використовувати автоматичну систему управління, яка повинна бути налаштована на отримання певних сигналів від датчика або датчиків, які контролюють ступінь очищення, наприклад, прозорість стічних вод.

Якщо система частинок полідисперсна, в осад потрапляють лише частинки, розмір яких перевищує критичний розмір частинок. Очищення води не є повним. Однак очищення може продовжуватися, але з різною швидкістю і може відрізнятись в кілька разів [75-76,83], оскільки дрібні частинки з діаметром, меншим за критичний розмір частинок, об'єднуються в агрегат.

Методи розрахунку гравітаційного відстоювання та очищення також можуть бути використані для промислових вод, що містять масла, смоли та жири, тобто емульсії, в яких дисперсна фаза має меншу густину, ніж вода.

Аналіз показав, що вплив сезонних або кліматичних змін температури на кінетичну стабільність водних систем (суспензій або емульсій) присутній і досить значний. Так, ефективність роботи гравітаційних осаджувальних установок може зростати втричі (або знижуватися внаслідок охолодження), що свідчить про необхідність врахування температурних коливань в процесі гравітаційного осадження частинок на очисних спорудах.

3.4 Коагуляція, флокуляція і флотація у змуленій воді

Ці процеси слід використовувати для очищення води від дрібних частинок, діаметр яких менший за критичний. До забрудненої води додають коагулянт. Під час коагуляції дрібні частинки злипаються, утворюючи великі агломерати (пластівці, флокули), які швидко осідають під дією сили тяжіння.

Зближення колоїдних частинок, необхідне для флокуляції, відбувається в результаті броунівського руху. Колоїдні частинки мають слабкий негативний заряд, а пластівці коагулянту - слабкий позитивний, що призводить до взаємного притягання між ними [76, 83].

В теорії коагуляції Смолуховського кінетика процесу визначається парними зіткненнями колоїдних частинок. Швидкість коагуляції залежить від концентрації електроліту та дорівнює $k(n_0 - n_x)^2$. Кількість частинок в одиниці об'єму води за час τ для швидкої коагуляції $n\tau$ визначається за формулами

$$n_t = n_0 / (1 + t / T_{1/2}), \quad \text{або} \quad \frac{n_0}{2} = \frac{n_0}{1 + kn_0 \times T_{1/2}}, \quad (3.19)$$

а для повільної коагуляції

$$n_t = n_0 / [1 + \psi (t / T_{1/2})], \quad (3.20)$$

де k – константа коагуляції, n_0 – початкова концентрація частинок; $T_{1/2}$ – час коагуляції, за який кількість частинок в одиниці об'єму води зменшується удвічі; ψ – коефіцієнт ефективності зіткнень частинок, що являє собою деяку функцію в теорії коагуляції Смолуховського. При $\psi = 1$ настає швидка коагуляція, при якій всі зіткнення частинок закінчуються утворенням агрегатів, при $\psi = 0$ зіткнення не ведуть до утворення агрегатів. Електрична зарядженість частинок суттєво впливає на їх агрегацію. Оскільки великі частинки при осіданні захоплюють за собою більш дрібні, в полідисперсних колоїдних системах коагуляція відбувається швидше, ніж в монодисперсних.

Флокуляція і флотація також широко використовуються для очищення води.

Флокуляція - це процес, при якому зважені частинки спливають у вигляді флокул при додаванні до стічних вод полімерної сполуки (флокулянта). Під час флокуляції флокуляція відбувається не тільки в результаті безпосереднього контакту частинок, але і в результаті взаємодії молекул, адсорбованих на частинках флокулянта [75, 76, 80]. В основі механізму дії флокулянтів лежать явища адсорбції молекул реагенту на поверхні колоїдних частинок, утворення тривимірних структур молекул реагенту та злипання колоїдних частинок під дією ван-дер-ваальсових сил.

Флотація як процес молекулярної адгезії дисперсних частинок до поверхні розділу між бульбашками і рідиною використовується для видалення з води нерозчинних дисперсних домішок і поверхнево-активних речовин, а також для очищення стічних вод целюлозно-паперової, шкіряної та нафтопереробної промисловості [75, 76, 80].

3.5 Зворотний осмос і ультрафільтрація в розчинах стічних вод

Системи зворотного осмосу призначені для очищення води шляхом пропускання її через спеціальну мембрану зворотного осмосу під високим тиском. Напівпроникна мембрана вибірково пропускає розчинник під тиском, що перевищує осмотичний тиск, утримуючи молекули розчиненої речовини повністю або частково. Метод заснований на явищі осмосу, в якому розчинник (вода) безладно мігрує в розчин через напівпроникну мембрану. Розчинник проходить через мембрану завдяки осмотичному тиску π в розчині. Коли до розчину прикладається тиск p_1 , що дорівнює осмотичному тиску, осмотичний тиск припиняється і досягається стан рівноваги. Якщо до розчину прикласти тиск p_2 , який перевищує осмотичний тиск π на Δp , розчинена речовина рухається у зворотному

напрямку і процес стає зворотним осмосом [75]. Значення осмотичного тиску π розчину можна визначити за допомогою рівняння Вант-Гоффа:

$$\rho = b \times R \times T \frac{C}{M}, \quad (3.21)$$

де $\beta = (1+\alpha)$ – коефіцієнт Вант-Гоффа; α – ступінь дисоціації розчиненої речовини; R – газова стала; T – абсолютна температура розчину; C – концентрація розчиненої речовини; M – молекулярна маса розчиненої речовини.

Механізм дії пористих мембран полягає в тому, що їх пори досить великі, щоб пропускати молекули розчинника, але занадто малі, щоб пропускати розчинені речовини. При зворотному осмосі мембрана затримує більшу частину високомолекулярних і низькомолекулярних речовин, а через пори мембрани проходить лише майже чистий розчинник [75, 76, 83].

Як видно з рівняння (3.21), значення осмотичного тиску зростає з температурою, тому значення додаткового тиску P_2 у верхній частині розчину, якою є забруднена вода, також має зростати. Врахування цього температурного ефекту є ще одним способом оптимізації та підвищення ефективності проектів водопідготовки.

3.6 Електричні методи очищення забрудненої води

Електричні методи очищення забрудненої води включають електроліз, електрокоагуляцію, електрофлокуляцію, електрофлотацію, електрофорез, електродіаліз, анодне окислення і катодне відновлення. Для повного очищення води від субмікронних частинок ці методи слід використовувати в комбінації з описаними вище методами. Фізичні механізми запропонованих методів дозволяють це зробити. Процеси цих методів зазвичай протікають паралельно. Ці процеси відбуваються на електродах, коли через стічну воду протікає постійний струм [75, 76, 80].

У процесі електролізу під дією струму через воду проходять катіони металів, які зустрічаються з гідроксильними групами, утворюючи пластівчасті гідроксиди металів, і відбувається інтенсивна флокуляція. Під час електролізу води на аноді утворюються бульбашки кисню, а на катоді відновлюється водень. Це і є процес електрофлотації.

Вплив температурного фактору в цих технологічних процесах демонструють довідкові дані про електропровідність води, дистильованої у вакуумі [86].

$$\text{від } 1.47 \cdot 10^{-8} \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{см}^{-1} \text{ до } 18.9 \cdot 10^{-8} \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$$

при зростанні температури від 271 К до 323 К, тобто у досліджуваному нами інтервалі. За даними [8], наприклад постійна іонізації води у такому ж температурному інтервалі зростає майже на 2 порядки (від $0.114 \cdot 10^{-}$

¹⁴ моль² кг⁻² при $T = 273$ К до $9.61 \cdot 10^{-14}$ моль² кг⁻² при $T = 333$ К). При цьому відомими є дані, наприклад [88] про вплив іонізації та інших електрофізичних факторів на ефективність бактерицидної обробки води, її знезараження та мікробіологічні показники.

Ефективність електричних методів очищення забрудненої води та її знезараження [86] залежать від струмових параметрів і втрат електроенергії на одиницю об'єму знезараженої води. Уведений [87] комплекс, від якого залежить бактерицидний ефект знезараження води, дорівнює q/P , де q – витрати води, P – електрична потужність, яка прямо пропорційна електропровідності. При цьому бактерицидний ефект за їх експериментальними даними змінюється від 0 до 90% майже лінійно при зміні бактерицидного комплексу q/P від 0 до 50 м³/Дж. Користуючись цими даними, можна стверджувати, що температурні коливання в очищувальній воді суттєво змінять ефект знезараження води в досліджуваному інтервалі температур завдяки існуванню температурної залежності електропровідності води.

Електрофорез, в якому заряджені мікронні та ультрамікронні частинки рухаються під впливом неоднорідного зовнішнього електричного поля [88], створює перспективну технологію очищення води. Дослідження в цій галузі ще не є достатніми для використання в якості надійної технології водопідготовки.

Практично всі види очищення вимагають використання певних методів фізики дисперсних систем. Сучасними та ефективними є системи, що використовують зворотний осмос - метод і технологію, які здатні нейтралізувати забруднення з частинками дисперсної фази ультрамікроскопічного розміру до 0,01 мкм.

Таким чином, можна зробити наступні висновки:

1) Доведено, що вплив температурних коливань у водних системах, таких як суспензії та емульсії, є значним. Сезонні або кліматичні коливання температури можуть змінювати швидкість осідання дисперсних частинок у гравітаційних седиментаційних системах у два-три рази. Тому ефективність гравітаційної седиментаційної установки може збільшуватися (або зменшуватися при охолодженні). Це вказує на необхідність врахування температурних коливань при проектуванні параметрів очисних споруд, заснованих на механізмі гравітаційного осадження.

2) Запропонований параметр седиментації b при розв'язанні конвекційно-дифузійної задачі дозволив уточнити його фізичні характеристики та знайти температурну залежність деяких параметрів фізичного процесу, що розглядається. Це свідчить про його перспективність для використання в розрахунках гравітаційних систем водопідготовки.

3) Проаналізовано можливість удосконалення існуючих методів і технологій водопідготовки шляхом врахування впливу температури та досягнення оптимального режиму роботи осаджувальних систем, необхідність поєднання цих методів в таких процесах, як флокуляція, флоотація тощо, а також стадійні та комбіновані процеси очищення.

4) На різних етапах технології очищення можуть застосовуватися інші методи очищення, наприклад, використання флокулянтів для переведення забруднень у дисперсну систему або електрофорезу, з метою підвищення якості та зменшення негативного впливу підвищення температури. Технології очищення з використанням цих методів також повинні враховувати вплив температурних факторів.

РОЗДІЛ 4 ГІДРОСТАТИЧНИЙ ТИСК В ГРАНУЛЬОВАНОМУ СЕРЕДОВИЩІ

Гранульовані матеріали (ГМ) використовуються майже в такому ж глобальному масштабі, як і рідини в промисловості, в різних технічних галузях і в побуті. Прикладом такого матеріалу є звичайний пісок, який має безліч практичних застосувань. Незважаючи на таке широке використання, дивно, що властивості (фізичні, механічні та структурні) гранульованих матеріалів до недавнього часу систематично не вивчалися. Однак близько 20-30 років тому фізики "раптом" зрозуміли, що звичайний пісок є абсолютно несподіваним матеріалом з точки зору його особливих властивостей. А саме, за певних умов пісок може поводитися як тверда речовина, рідина і газ [89-93]. Причому, умовно кажучи, кожна "фаза" має свої унікальні властивості, які значною мірою відрізняють гранульовані матеріали від відомих когезійних станів. Припустимо, що контейнер з піском збуджується зовнішнім полем, наприклад, вібраційним прискоренням малої амплітуди. Енергія цього руху передається окремим частинкам (зернам) через межі контейнера. В результаті, при досягненні певного рівня збудження, вся маса гранульованого матеріалу починає рухатися і розвиває власну динаміку. Якщо гранульований матеріал розмістити на похилій площині, то при певному куті нахилу матеріал починає текти, проявляючи, так би мовити, властивості рідини. У цьому випадку взаємодія між гранулами повністю відрізняється від взаємодії з рідиною. Між гранулами взагалі відсутнє притягання, а сили відштовхування, які виникають тільки при контакті частинок, в основному є непружними (дисипативними, фрикційними, нелінійними за своєю природою).

Серед багатьох специфічних властивостей, які демонструють гранульовані матеріали, розподіл тиску всередині гранульованого матеріалу є важливим. Це питання відіграє особливо важливу роль в технології конічних бункерів для зберігання і подачі (завантаження і розвантаження) ГМ, так званих силосів, які широко використовуються в технічній промисловості. При проектуванні цих різних типів обладнання необхідно знати як розподіл тиску вздовж їх стінок (горизонтальний тиск), так і в напрямку виходу (вертикальний тиск); для того, щоб розробити відповідні технічні засоби для роботи з ГМ і технологію його використання, важливо мати аналітичний розв'язок цієї задачі разом з чисельним методом розв'язання.

На сьогоднішній день проблема полягає в тому, що досі не існує всеохоплюючої теорії ГМ, яка б дозволяла проводити відповідні розрахунки з перших принципів та оцінювати відповідні параметри гранульованого (сипучого) середовища. Тому аналітична модель формування тиску в таких системах залишається актуальним питанням.

Наразі загальноживаною моделлю розподілу тиску в сипких середовищах вважається відома модель Янсена [89]. Детальний аналіз цього підходу базується на феноменологічному визначенні вертикального та горизонтального тисків і припущенні про їхню пропорційність, як, наприклад, у роботі [90]. У цій роботі основна увага приділяється визначенню вертикального тиску в мікроскопічних динамічних системах з профілями поля густини Непоцмана. Для цього відповідні профілі поля густини отримано аналітично з використанням моделі ґратчастого газу в гравітаційному полі.

4.1 Гідростатичний тиск в гранульованих системах

Сипучим матеріалом називають речовину, що складається з великих агрегатів дискретних частинок різного розміру і форми, які взаємодіють за допомогою сил електромагнітного, сухого і в'язкого тертя зі стінками ємності, в якій вони знаходяться, а також зі стінками контейнера, що їх містить. Якщо електромагнітні та в'язкі сили тертя відсутні, а присутні лише сили сухого тертя, такий стан речовини називається ідеальним станом гранульованої речовини.

Розглянемо насип ідеального гранульованого матеріалу, деякою висоти H , що знаходиться в циліндричній ємності, як показано на рис. 4.1

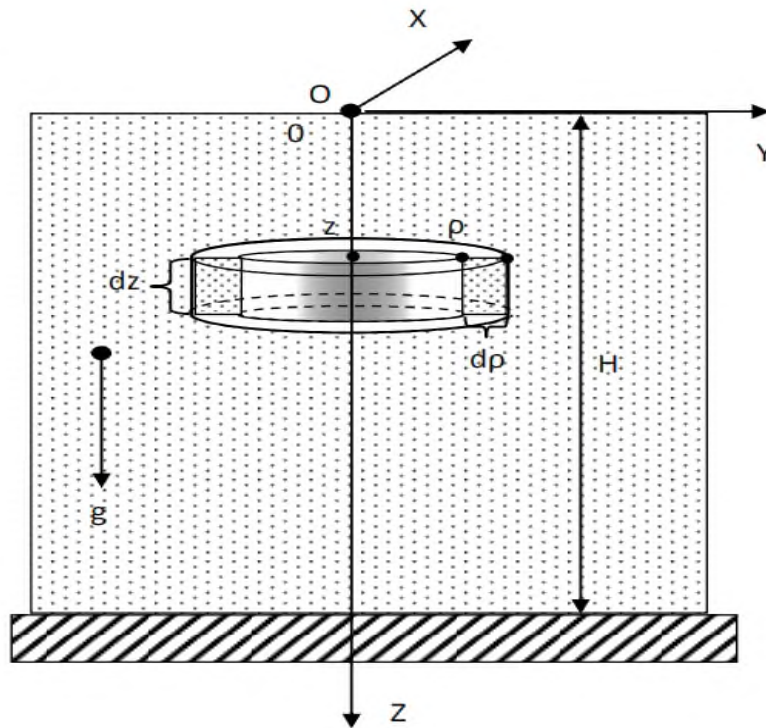


Рисунок 4.1 - Скетч - схема визначення параметрів задачі

У цьому випадку можна умовно виділити два характерні напрямки. Це вертикальний напрямок, який збігається з напрямком сили тяжіння, і горизонтальний напрямок, який перпендикулярний до сили тяжіння. Рівноважний стан зернистого тіла визначається як стан, в якому всі частини зернистого тіла знаходяться в рівновазі і в стані спокою (нульовий імпульс будь-якого елемента). Стійкий стан - це стан, в якому всі частини знаходяться в рівновазі з навколишнім середовищем і рухаються з постійною швидкістю (імпульс окремих частин не залежить від часу).

Згідно із конструкцією задачі, в масі гранульованого матеріалу існує розподіл тиску на вертикальну і горизонтальну компоненти P_z і P_p , які у випадку гранульованого матеріалу априорі не дорівнюють один одному, як у випадку ідеальної рідини (закон Паскаля). Ми сфокусуємося нижче на розгляді компонент тиску, які залежать від координат z і, не залежать від координати j .

Більше століття тому в була запропонована елегантна модель для опису розподілу тиску у вертикальному контейнері, заповненому гранульованим матеріалом, який знаходиться у стані спокою. Скорочено опишемо модель, запропоновану в [89]. Знову розглянемо вертикальний циліндр радіусом R , заповнений частинками-гранулами у стані спокою (див. рис. 4.1). Метою є визначення тиску всередині матеріалу, спричиненого силою тяжіння, як функції глибини (вісь - вертикальна вісь циліндра, спрямована вниз). Слід зазначити, що визначення "тиску" всередині гранульованого

середовища саме по собі є складним завданням (див., наприклад, [90]). Розподіл сил всередині стисненого об'єму гранульованого матеріалу можна спостерігати за допомогою методу двопротенезаломлення. Оскільки при використанні цього методу розподіл тиску виявився дуже складним і суттєво нерівномірним, в роботі [89] було запропоновано ввести модель, що оперує двома характерними тисками, які діють у вертикальному і горизонтальному напрямках (між двома горизонтальними і вертикальними областями відповідно). Для спрощення задачі ці два тиски вважалися пропорційними один одному. Основна увага тут зосереджена на визначенні тиску між двома горизонтальними областями. Для цього достатньо розглянути баланс сил, що діють на тонкий матеріал товщиною x , який перебуває у стані спокою. При визначенні таких сил густина системи зазвичай вважається сталою. До речі, у випадку гранульованих середовищ ця умова явно порушується, про що йшлося вище.

Покладемо, що вертикальна компонента тиску P_z , і відповідно градієнт цієї компоненти у вздовж осі OZ , залежать від радіуса. Отже, на сусідні елементарні кільця (зображеного на рис. 4.1) по вертикалі будуть діяти різні сили. Це призведе до того, що, наприклад, сусіднє до визначеного зовнішнє елементарне кільце, буде зміщуватися вниз, а сусіднє внутрішнє кільце буде зміщуватися (щодо розглянутого елементарного кільця) вгору.

Тому сили сухого тертя, що діють на внутрішню і зовнішню бічну поверхню розглянутого елементарного кільця, будуть спрямовані в різні боки і результуюча сила буде визначатися градієнтом компоненти тиску P . На підставі вищенаведених нехай і якісних міркувань можна зробити висновок, про те, що в сипучих(гранульованих) матеріалах, зокрема, не виконується закон Паскаля, який є типовим для звичайних рідин.

4.2 Впакування гранульованих матеріалів

Зокрема, багато специфічних властивостей ГМ можуть бути продемонстровані його здатністю зменшувати об'єм, займаний зовнішніми збуреннями. Стиснення гранульованих систем, спричинене різними зовнішніми впливами, надійно спостерігається як у чисельних експериментах, так і в теоретичних дослідженнях [91,92]. Збурення гранульованих систем впливають не тільки на стиснення, тобто зменшення об'єму, який займає система, але й на симетрію розподілу частинок у системі. Приклад такої симетрії показано на рисунку 4.2 (за [90]).

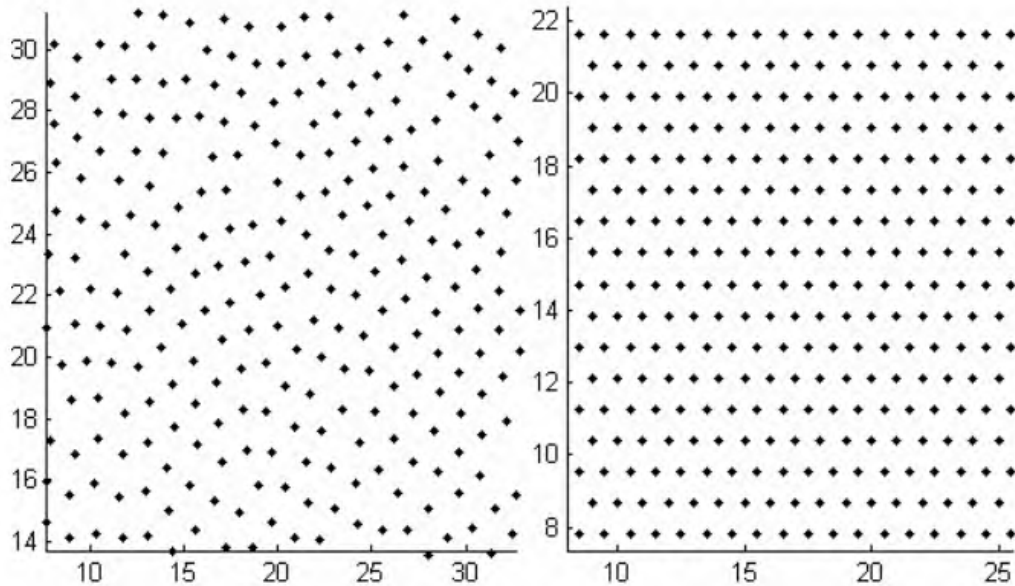


Рисунок 4.2 – Структуризація у двовимірних системах твердих дисків під впливом зовнішніх збурень (точками показані центри дисків). Ліворуч – невпорядкована структура; праворуч – структура із характерними ознаками симетризації та ущільнення [90]

На рис. 4.3 представлені структури, які зображені на рис.4.2 парметризовані в термінах так званих побудов Вороного (див.[91]). Метод Вороного, як бачимо, також дозволяє окрім оцінки ступеня ущільнення наочно спостерігати симетризацію у розподілі частинок, як про це свідчать дані, наведені на рис.3.

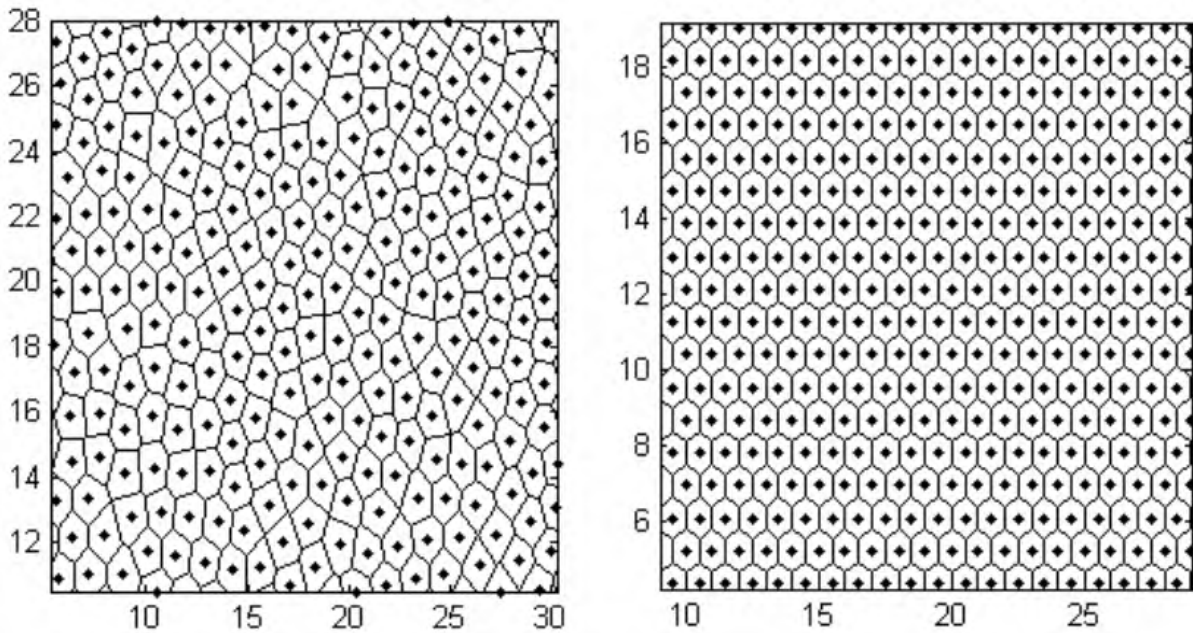


Рисунок 4.3 - Побудови Вороного для структур, які спостерігаються у гранульованих системах під впливом зовнішніх збурень. Ліворуч –

початковий неупорядкований стан; праворуч – кінцевий симетризований стан сформований в околі максимального впакування

Наведені на рис.4.2 і рис.4.3 дані наводять на думку про можливість використання ґраткових моделей для вивчення, зокрема, поля густини(тиску) у гранульованих матеріалах. Теоретичний аналіз таких моделей та визначення шляхів їх застосування до параметризації феноменологічних даних про розподіл статичного тиску в природно анізотропних мікро-механічних (гранульованих) матеріалах складає, як вже згадувалося вище, нашу задачу.

4.3 Вільна енергія, ентропія і профіль густини в ґратковому газі у гравітаційному полі

В рамках квазістатистичного підходу (див. [91]) запишемо загальний вираз для вільної енергії системи, яка буде об'єктом розгляду у вигляді функціоналу:

$$F(p) = E(p) - b^{-1}S(p), \quad (4.1)$$

де енергія системи в гравітаційному полі $E(p)$ дається виразом:

$$E(p) = mg \int_{(V)} \delta z p(r) dr \quad (4.2)$$

тут z - вертикальна координата, b^{-1} – зворотній масштаб енергії, p - густина, S - ентропія системи. В якості виразу для $S(p)$ скористаємося відомим співвідношенням для ентропії ґраткового газу ([4]):

$$S(p) = - \int_{(V)} \delta dr \left[\frac{p}{p_0} \ln \frac{p}{p_0} + \left(1 - \frac{p}{p_0}\right) \ln \left(1 - \frac{p}{p_0}\right) \right] \frac{\ddot{y}}{\beta} \quad (4.3)$$

тут p_0 - максимальна густина системи.

Розрахунок варіаційної похідної $\frac{dF(p)}{d\phi}$ з (4.1)-(4.3) породжує рівноважний профіль густини у формі розподілу, який описується функцією Фермі:

$$p(z) = \frac{p_0}{1 + e^{\mathcal{G}}}, \quad \mathcal{G} = \frac{mgp_0}{b} \quad (4.4)$$

де b - визначає масштаб енергії в системі.

Нижче, ми проаналізуємо вертикальний тиск, який здійснює стовпчик гранульованої речовини густина якої, описується отриманим співвідношенням (4.4) для моделі ґраткового газу у гравітаційному полі.

4.4 Вертикальний гідростатичний тиск в системах з фермі-профілем густини

Вертикальний тиск P в системі з фермі-профілем густини $p(z)$, який описується рівнянням (4.4), таким чином, описується виразом:

$$p = \frac{p_0 mgz}{1 + e^{\mathcal{G}}} \quad (4.5)$$

Рівняння (4.5) визначає вертикальний тиск, який створюється над стовпчиком гранульованої речовини висотою z із Фермі-розподілом густини.

Таким чином в розглянутій моделі тиск асимптотично зменшується із збільшенням вертикальної координати z за законом:

$$\sim p_0 mgze^{-\mathcal{G}} \quad (4.6)$$

який вочевидь є відмінним від відомого барометричного закону:

$$p = p_0 mge^{-\mathcal{G}} \quad (4.7)$$

Зауважимо, що розподіл (5) містить типову для фермі-систем деталь, а саме, мілко-масштабну стадію зростання тиску(густини) для $z < z_0$, де z_0 трансцендентного рівняння

$$-\log(\mathcal{G}_0 - 1) = \mathcal{G}_0 \quad (4.8)$$

Експериментальні дослідження розподілів тиску в гранульованих середовищах (див. огляд [93]) надійно зафіксували відхилення розподілів тиску від класичних законів броунівського руху, особливо (в розріджених станах).

Як уже згадувалося, гранульовані середовища (ГС), збуджені, наприклад, вібрацією, виявляють низку цікавих фізичних властивостей [91,92]. Крім того, в таких нерівноважних системах досягається стаціонарний стан, оскільки до системи постійно додається енергія удару [91,92], а в роботі [93] досліджено спектральні властивості вібраційно збуджених ГМ під дією гравітації. Було показано, що в слабкозбудженому режимі динаміка гранул частинок не може бути описана як простий рух броунівських частинок у достатньо розрідженому стані. На основі останнього автори дійшли висновку, що для опису послідовної дисипативної динаміки гранульованих агломератів необхідно розробити інший підхід, наприклад, з використанням узагальненої концепції частинок Ланжевена.

В експерименті [93] вертикальний розподіл стабілізованої 2-міліметрової сфери оксиду цирконію вивчали за допомогою лазерного пристрою в гравітаційному полі. Відповідні вертикальні переміщення

вимірювали з верхньої частини посудини, регулюючи вимірювальне вікно в напрямку сили тяжіння.

Було встановлено, що відповідна статистика (параметризована в термінах функції конфігураційного розподілу N частинок – j) підкоряється закону Фермі (див рис.4.4 з [93]).

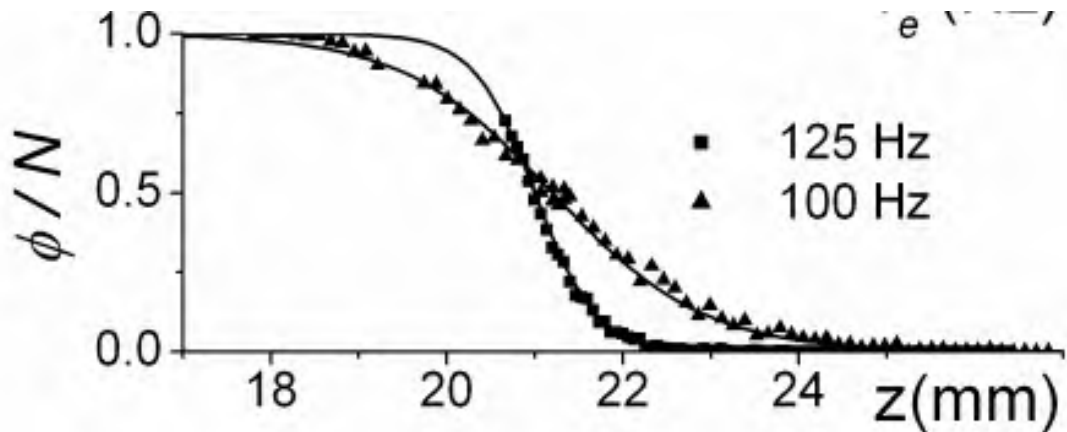


Рисунок 4.4 - Результат експериментального дослідження розподілу за вертикальними положеннями частинок гранульованої конгломерації вистою $h = 21$ mm і інтенсивністю збудження $\Gamma = 10$

Дані, наведені на рис. 4.4, наочно демонструють фермі-характеристики вертикального розподілу зернистих частинок у розбавлених системах, а отже, і порушення закону броунівського руху.

Ентропійний аналіз решітчастої моделі гранульованої системи, описаної вище, показує, що розподіл Фермі характерний і для щільно упакованих гранульованих агрегатів, що також порушує відомі закони гідростатики (наприклад, закон Паскаля).

Таким чином, розроблений вище теоретичний підхід є основою для подальшого детального вивчення розподілів тиску і встановлення подібності законів гідростатики в гранульованих середовищах.

Шляхом аналізу вільної енергії та ентропії у квазістатичному наближенні для моделі ґратчастого газу в гравітаційному полі, що імітує просту мікродинамічну систему, знайдено вертикальне поле густини Фермі, відмінне від відомого поля густини Больцмана.

Отримані рівняння поля густини використано для розрахунку вертикального гідростатичного тиску, який відрізняється від класичного закону Паскаля у фізиці конденсованих середовищ.

Отримані результати дозволяють враховувати вищезазначені ефекти при проектуванні резервуарів для зберігання та нагнітання сипучих матеріалів

та в методах топографічного моніторингу мікромеханічних (гранульованих) середовищ [93-94].

Порівнюючи отримані результати з експериментальними даними з дослідження вертикального розподілу частинок у зріджених зернистих агломератах [93], можна зробити попередні висновки про універсальний характер вертикального розподілу густини (тиску) у вигляді розподілу Фермі для різних ступенів наповнення в дискретних мікромеханічних системах.

РОЗДІЛ 5 МОДЕЛЬ РОЗСПЮВАННЯ ВХІДНОГО ГАММА-ВИПРОМІНЮВАННЯ В ГРАНУЛЬОВАНІЙ МАТРИЦІ

У зв'язку зі стрімким розвитком атомної промисловості виникли очевидні проблеми зі зберіганням, переробкою та захороненням радіоактивних відходів. Абсолютного вирішення цієї проблеми поки що не знайдено [94].

В даній главі проаналізовано моделі та концепції радіаційного захисту для зберігання, переробки, захоронення та екранування радіоактивних елементів (ядерних відходів). Запропонована технологія є доцільною і своєчасною, враховуючи, що ці матеріали відносно дешеві в порівнянні з монолітними конструкціями, які традиційно використовуються, параметрами поглинання можна легко маніпулювати, а також полегшити транспортування, заміну і евакуацію [94].

5.1 Фізичні властивості гранульованих матеріалів

Вивчення структури та фізичних властивостей гранульованих матеріалів є дуже важливою частиною зусиль фізиків-теоретиків і фізиків-експериментаторів. Причиною такого інтересу, як правило, є те, що гранульовані матеріали демонструють особливі властивості і стани по відношенню до типових когезійних станів. Наприклад, псевдозрідження сухих гранульованих матеріалів під дією зовнішніх полів (осипання похилих насипів), насичення тиску у вертикальних посудинах з ГМ (ефект арки), сегрегація (розподіл сухої суміші, наприклад, ефект "бразильського горіха") та деякі інші явища, які, як було підтверджено на практиці, проявляються тільки в гранульованих матеріалах. Інтерес до вивчення властивостей гранульованих матеріалів зумовлений також важливістю розуміння їх фізичних властивостей для раціонального використання у промисловому виробництві та технології захисних екранів, а також можливістю створення на їх основі принципово нових високотехнологічних технологій. Гранульовані матеріали зараз широко присутні в нашому оточенні і використовуються в будівництві (порошки, пісок, цемент, графіт, вугілля, зерно, сипучі порошки і суміші в будівельній і хімічній промисловості, металургії, ґрунті і навіть космосі), але це далеко не повний перелік таких об'єктів. [95]

За деякими оцінками, понад 70% світового промислового виробництва базується або частково залежить від гранульованих матеріалів у різних станах дисперсності (від мікропорошків з розміром частинок у кілька мікрон до геологічних структур з окремими кам'яними монолітами розміром у кілька метрів і більше). Нарешті, з деякими застереженнями, космос також можна класифікувати як приклад розрідженої гранульованої системи, наприклад, гранульований газ або пісок.

Багато унікальних властивостей і можливостей гранульованої матерії людство спостерігає вже давно. У зв'язку з цим достатньо згадати спостереження нелінійних хвиль на поверхні шару піску, поміщеного в коливальне прискорювальне поле, зроблені Ньютоном і Фарадеєм близько 160 років тому. Речовини, з якими ми стикаємося в повсякденному житті, зазвичай класифікуються як гази, рідини або тверді речовини відповідно до їхнього стану конденсації. Будь-який з цих конденсованих станів речовини можна віднести до гранульованого середовища. Це середовище може "стікати" з похилої поверхні, як у лавині, або мати форму контейнера чи посудини, в яку його поміщають (наливають), як у рідині. Окремі зерна гранульованого матеріалу (наприклад, піску) дійсно є твердими речовинами. Однак агрегати зерен вже проявляють властивості, які є абсолютно нетиповими і незвичними для нормального стану агрегатів (особливо твердих тіл). [95]

5.2 Деякі особливі фізичні властивості зернистих матеріалів

Поведінка сипучих матеріалів при маніпулюванні з ними дійсно своєрідна. Наприклад, коли пісок повільно насипають на підкладку, пагорб росте, зберігаючи свою конічну форму, поки кут при основі розчину не досягне певного критичного значення. При досягненні цього критичного значення верхні шари насипу починають руйнуватися і стають схожими на лавину. Лавиноподібний рух захоплює лише частинки, що належать до шару певної товщини - біля поверхні конічної дамби - тоді як решта маси залишається нерухомою. Багато матеріалів, які оточують нас у повсякденному житті та складають основу різних галузей промисловості (будівництво, хімія, фармацевтика, харчова промисловість), є гранульованими. Загалом, більшість матеріалів, що споживаються і

використовуються людством на будь-якому етапі виробництва, переробки або споживання, є або рідкими, або гранульованими.

Ще більш дивно, що фізичні властивості багатьох процесів, що відбуваються в гранульованих матеріалах, досі не зрозумілі або зрозумілі лише частково. Така ситуація навіть призводить до того, що деякі галузі, які використовують гранульовані матеріали, стикаються з явищами, які можна пояснити, лише визнавши наявність специфічних властивостей гранульованих матеріалів, таких як непружний колапс і сферичність, які розвиваються під впливом зовнішніх збурень. Наприклад, з власного досвіду легко зрозуміти, що пісок, змочений водою, зберігає форму структури (згадаймо, як приємно будувати замки з піску на пляжі). Та сама вода, але в більшій кількості, розмиває споруди з сирого піску, роблячи їх менш стійкими. Під час землетрусів вологий ґрунт, як відомо, плаває, як рідина.

Таким чином, окрім технологічних перспектив подальшого використання унікальних властивостей гранульованих матеріалів, сьогодні дуже актуальною є розробка фундаментальної теорії, яка дозволить зрозуміти і передбачити особливості поведінки гранульованих матеріалів. [96]

Велике значення в поведінці гранульованих матеріалів мають факти, які визначають дисипативну природу цих матеріальних систем, що призводить до специфічної поведінки, яка залежить від природи, форми та розміру частинок і середовища, в якому знаходяться гранульовані матеріали. Всі властивості і поведінка гранульованих матеріалів часто нагадують, так би мовити, статистичні, але гранульовані матеріали за своєю природою є динамічними системами, які лише зовні демонструють колективну поведінку і є ізоморфними, що, як вважається, пов'язано з їх нелінійністю. Саме цю "колективну природу" поведінки гранульованих матеріалів фахівці мають на увазі, коли використовують термін "статистична механіка" гранульованих матеріалів. Колективна поведінка" гранульованих матеріалів є невід'ємною рисою всіх їх властивостей і параметрів.

За певних умов спостерігається явище, коли фрагменти зернистого шару спливають у певних місцях зернистого матеріалу, що використовується для захисту його від шкідливого випромінювання. Це явище має свої власні фізичні властивості, які повністю незалежні від класичного прототипу. Характерний шар товстого гранульованого

матеріалу на горизонтальній підкладці, підданий вертикальному одновісному збудженню, покривається решіткою комірок (візерунків) з певною симетрією, наприклад гексагональною або гептагональною, яка залежить від умов збудження, товщини шару і типу гранульованого матеріалу. Це явище подібне до того, що спостерігається під час тектонічних подій на поверхні ґрунту, де "рідка" гранульована фаза матеріалу співіснує з "твердою" фазою. Характеристики цієї змішаної фази дозволяють забезпечити спеціальний захист від постійного випромінювання ізоморфно по відношенню до явищ радіаційного формування і конвекції. Ця властивість якісно відрізняється від існуючих засобів захисту від випромінювання відпрацьованого ядерного палива на основі залізобетонних конструкцій, де явища екранування не відбуваються ізоморфно. В таких бетонних конструкціях під впливом вологи, температури та радіації зміни відбуваються нерівномірно, що призводить до деформації та руйнування конструкції. Явище ізоморфізму сил і властивостей, що поширюються в напрямку гранульованих матеріалів, дозволяє покращити властивості та ефективність захисних екранів, створених для захисту від шкідливого гамма-випромінювання. Всі ці явища і приклади детально демонструють, що гранульовані матеріали мають особливі цінності і характерні властивості, відмінні від властивостей раніше використовуваних матеріалів. Гранульовані матеріали дозволяють проектувати і будувати впорядковані структури в мезо- і макромасштабах, що є одним з найбільш важливих і критичних завдань в області захисту від шкідливого випромінювання [95].

5.3 Моделі протирадіаційних екранів на основі концепції багат шарових структур

Особливо в операціях, пов'язаних з захороненням радіоактивних відходів, для завантаження радіоактивних відходів в контейнери використовуються інженерні модулі захисту. При цьому між стінкою контейнера і модулем утворюється порожнеча, яка нібито послаблює якісні параметри системи захисту. Щоб уникнути цього недоліку, поширеною практикою є заповнення пустот. В якості наповнювачів використовують цементуючі матеріали. Цей матеріал зазвичай заливається в модуль у рідкому вигляді для заповнення пустот. З часом цементуючий матеріал твердне і утворює монолітну фракцію [96].

Затверділі цементуючі матеріали, які більше не містять пустот, теоретично є надійними конструкціями для захисту від радіаційного впливу. Однак на практиці їх використання пов'язане з певними факторами, які роблять всю систему потенційно і до певної міри не ідеальною. Зокрема, з часом постійний контакт з радіоактивними матеріалами призводить до накопичення дефектів у радіаційній структурі. Асимптотично радіаційний вплив призводить до крихкості монолітних захисних матеріалів. За певних умов навколишнього середовища (наприклад, сейсмічна активність) можуть виникати пошкодження у вигляді тріщин або інших дефектів.

Складність експлуатації захисних екранів полягає в тому, що після затвердіння жодні відходи не можуть бути додані або видалені із захисного модуля. [94]

В даній главі, опираючись на концепції та ідеї, які були сформовані в [94], пропонується використовувати в захисних модулях замість цементної заливки гранульовані матеріали. В якості прикладу таких матеріалів можуть бути запропоновані полідисперсні багатокомпонентні матеріали, наприклад пісок змішаний з бентонітом та гравій.

Щоб якісно уявити собі ефект послаблення випромінювання захисними спорудами у загальному сенсі скористаємося законом Бугера:

$$I = I_0 e^{-\mu L}, \quad (5.1)$$

де I — вхідна інтенсивність поглинального шару заданої товщини; I_0 — початкова інтенсивність випромінювання; μ — коефіцієнт послаблення; L — товщина шару поглинання.

Закон Бугера показує зменшення інтенсивності випромінювання, яке пройшло через шар поглинання певної, завданої товщини. В законі Бугера фігурують: початкова інтенсивність падаючого пучка, коефіцієнт послаблення та товщина шару поглинання.

Якщо в якості захисного матеріалу використовується бетон, то ми, можемо його (наближено) розглядати, як однорідне середовище, таким чином, користуватися звичайною формою (5.1).

У тому випадку, коли в якості захисного матеріалу має, використовуватися гранульований матеріал, закон Бугера не є повністю адекватним для здійснення оцінок поглинальної здібності такого матеріалу. Априорі якщо змодельовати пошарові структури, кожний елемент яких має власні індивідуальні поглинаючі властивості, формально закон Бугера може бути сформульований наступним чином:

$$I = I_0 e^{-\mu_1 d_1} \cdot e^{-\mu_2 d_2} \cdot e^{-\mu_3 d_3} \cdot \dots, \quad (5.2)$$

де: I_0 — інтенсивність падаючого випромінювання;
 μ_i — товщина та послідовність поглинальна здібність i -го з послідовності поглинальних шарів.

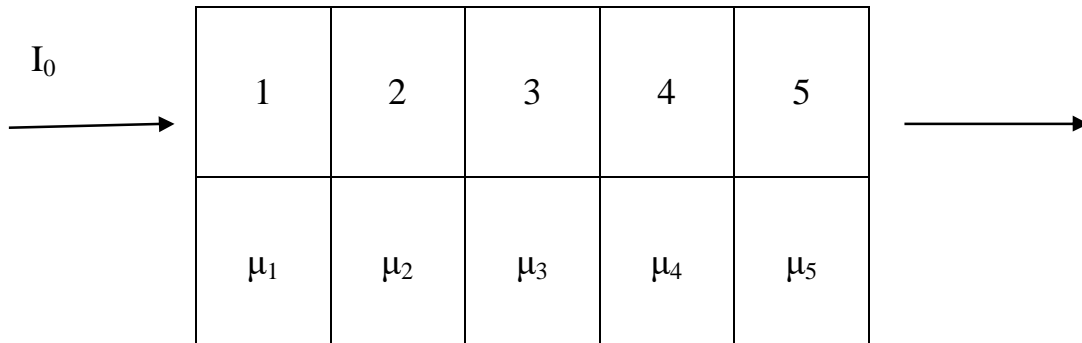


Рисунок 5.1 - Умовне зображення шарово-періодичної поглинаючої структури

Формальне співвідношення (5.2) може використовуватися, як для оцінок якості екранування, так і для розв'язків зворотної задачі при визначенні власних індивідуальних параметрів.

5.3.1 Модель кінетичних процесів в гранульованій матриці

Можливим інженерним підходом до вивчення проблеми кінетичного старіння захисних екранів під впливом опромінення є використання гранульованих матеріалів. Цей підхід базується на існуванні специфічних фізичних станів, пов'язаних з маніпулюванням гранульованими матеріалами.

Властивості таких станів можна визначити, наприклад, за допомогою функцій розподілу. Відповідні визначальні рівняння для опису функцій стану, пов'язаних з кінетичним старінням, можуть бути подібні до рівняння Больцмана в класичній кінетичній теорії. У випадку розріджених гранульованих систем з непружними взаємодіями, що описуються постійним непружним коефіцієнтом споживання енергії, такі рівняння та їх розв'язки можуть бути визначені дуже строго і точно [97].

Кінетична теорія гранульованих матеріалів, таким чином, може бути сформульована за допомогою ізоморфних рівнянь Больцмана (у модифікації Енскога) для функцій розподілу $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$, які завдають ймовірність знаходження частинок із швидкістю \vec{v} у точці \vec{r} , на момент часу t . У найпростішому випадку з газоподібним випромінюванням, яке складається з однакових частинок сферичної форми з радіусом r , за умов

відсутності тертя та сталого коефіцієнту непружних витрат ϵ , кінетичне рівняння має наступний вигляд:

$$(\partial_t + (v_1 - \nabla))f(v_1, r_1, t) = I[f], \quad (5.3)$$

де $I[f]$ – є так званий інтеграл зіткнень

$$I = d^2 \int dv_2 \int dn_{12} \theta(-v_{12} \cdot n_{12}) |v_{12} \cdot n_{12}| \times [\chi f(v'_1, r_1, t) f(v'_2, r_1 - dn_{12}, t) - f(v_1, r_1, t) f(v_2, r_1 + dn_{12}, t)] \quad (5.4)$$

$\chi = \frac{1}{\epsilon^2}, \theta$ – це тета-функція Хевісайда швидкості частинок перед зіткненням $v_{1,2}$, та після зіткнення $v'_{1,2}$, задовольняють співвідношення

$$v'_{1,2} = v_{1,2} \pm \frac{1+\epsilon}{2\epsilon} [n_{12}(v_1 - v_2)]n_{12}, \quad (5.5)$$

Рішення рівнянь типу $(\partial_t + (v_1 - \nabla))f(v_1, r_1, t) = I[f]$ формуються на підставі, так званої, концепції «молекулярного хаосу», яка базується на припущенні про відсутність будь-яких кореляцій проміж частинками, що зіткаються.

Безумовно, що у випадках густих станів гранульованої матерії (які є типовими у випадку так званих гранульованих рідин та кристалів), внаслідок кореляцій швидкостей частинок, обумовлених дисипативними зіткненнями, а також ефектів виключеного об'єму, застосування рівнянь типу $(\partial_t + (v_1 - \nabla))f(v_1, r_1, t) = I[f]$, є обмеженим, або навіть зовсім неприпустимим [96].

Рівняння так званого гідродинамічного підходу, можуть бути отримані за допомогою обрізання ієрархічної послідовності кінетичних рівнянь (5.3) для моментів функцій розподілу отриманих на основі відповідних рівнянь Больцмана, модифікованих у наближенні Чепмена-Енскога. Така процедура веде до формулювання послідовності рівнянь (ланцюжка), які визначають зміну моментів та флуктуацій кінетичної енергії (які у свою чергу визначають кінетичну температуру гранульованої речовини). Однак, на відміну від гідродинамики звичайних газів та рідин, як розділу механіки суцільних середовищ, застосування вищеприписаної «гранульованої» гідродинаміки дехто вважає недостатньо обґрунтованим внаслідок відсутності механізмів розділення масштабів мікроскопічного та макроскопічного рухів (зокрема, кластеризації) [97].

Рівняння «гідродинаміки» гранульованих середовищ формально можуть бути виписані в традиційному вигляді:

$$\mathbf{v} \frac{\partial u}{\partial t} = -\nabla \cdot \sigma + \nu g, \quad (5.6)$$

$$v \frac{\partial T}{\partial t} = -\sigma \div \gamma - \nabla \cdot g - \varepsilon, \quad (5.7)$$

де v – густина гранульованого середовища віднесена до густини матеріалу, з якого складаються гранули.

$\vec{u}(\vec{r})$ – поле швидкості;

T — кінетична «температура» гранульованого стану, яка може бути визначена за формулою:

$$T = \frac{\langle \vec{u}\vec{u} \rangle - \langle \vec{u} \rangle^2}{2}, \quad (5.8)$$

Субстанціональна похідна зв'язана з повною співвідношенням:

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + (\vec{u}\vec{\nabla}), \quad (5.9)$$

\vec{g} - прискорення вільного падіння;

\vec{q} - вектор потоку енергії.

Тензор «напруг» дається формулою:

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{\partial}{\partial \alpha} u_{\beta} + \frac{\partial}{\partial \beta} u_{\alpha}, \quad (5.10)$$

ε - коефіцієнт дисипації енергії.

Зовні, тобто структурно, вище наведенні рівняння подібні до відомих рівнянь Нав'є-Стокса за винятком останньої складової, яка виникає внаслідок урахування дисипативних процесів [98].

Система рівнянь 5.5-5.7 є незамкненою і має бути доповнена відповідними матеріальними співвідношеннями, зокрема для тензора напруг σ , потоку енергії \vec{q} та коефіцієнта дисипації енергії ε , які можуть визначатися, скажімо, феноменологічно, або у альтернативних підходах. Так, наприклад, у випадку розрідженої гранульованої речовини матеріальні співвідношення часто записують у лінійному наближенні:

$$\sigma_{\alpha\beta} = [p + (\mu - \lambda)Tr\gamma]\partial_{\alpha\beta} - \mu\gamma_{\alpha\beta}, \quad (5.11)$$

$$q = -k\nabla T, \quad (5.12)$$

У випадку двомірного гранульованого газу, який складається із твердих дисків та характеризується вельми слабкою дисипацією під час зіткнень проміж частинками, була запропонована процедура замкнення рівнянь за допомогою системи модельних матеріальних співвідношень, яка має наступний вигляд:

$$p = \frac{4vT}{\pi d^2} [1 + (1 + e)G(v)], \quad (5.13)$$

$$\mu = \frac{2T^{\frac{1}{2}}}{2\pi^{\frac{1}{2}}dG(v)} \left[1 + 2G(v) + \left(1 + \frac{8}{\pi} \right) G(v)^2 \right], \quad (5.14)$$

$$\lambda = \frac{8\nu GT^{\frac{1}{2}}}{\pi^{\frac{3}{2}}d}, \quad (5.15)$$

$$k = \frac{2\nu T^{\frac{1}{2}}}{\pi^{\frac{1}{2}}dG(\nu)} \left[1 + 3G(\nu) + \left(\frac{9}{4} + \frac{4}{\pi} \right) G\nu^2 \right], \quad (5.16)$$

$$\varepsilon = \frac{16\nu G(\nu) T^{\frac{1}{2}}}{\pi^{\frac{3}{2}}d^3} (1 - e^2), \quad (5.17)$$

де $\mu, \lambda, k, \varepsilon$ і $G(\nu)$ – відповідно, є зсувна та об'ємна в'язкості; коефіцієнти теплопровідності та непружних втрат відповідно, та $G(\nu)$ – значення радіальної функції розподілу в точці (ν) [97].

Скажімо, для двовимірного аналогу відомого співвідношення Карнахана – Старлінга у випадку системи пружних (твердих) сфер відповідна функція $G_{CS}(\nu)$ має вигляд

$$G_{CS}(\nu) = \frac{\nu(1-\frac{7\nu}{16})}{(1-\nu)^2}, \quad (5.18)$$

Співвідношення діють в межах значень компактизації середовища, що не перебільшують 0,7.

Для більших значень компактизації використовується модельний вираз для функції розподілу, який було розраховано за допомогою теорії вільного об'єму:

$$G_{FV} = \frac{1}{(1+e) \left[\left(\frac{\nu e}{\nu} \right)^{\frac{1}{2}} - 1 \right]}, \quad (5.18)$$

Інколи використовується, так званий, глобальний вираз для $G_T(\nu)$, який описує кросовер проміж різними режимами структуроутворення у гранульованих системах:

$$G_L = G_{CS} + (1 + \exp(-(v - v_0)/m_0)^{-1})(G_{FV} - G_{CS}), \quad (5.19)$$

де параметри $v_0 \approx 0,7$ та $m_0 \approx 10^{-2}$ визначаються емпірично.

Слід також зазначити, що наявні на сьогоднішній день методи замикання рівнянь гідродинамічного підходу не можуть описати такі режими в поведінці гранульованих матеріалів, як утворення ниткоподібних силових ланцюгів, в яких напруження витісняються по периферії ланцюга, зберігаючи стійкість навіть при наявності потоку. Сюди відносяться явища гістерезису при переході гранульованих матеріалів з рідкого стану в твердий [96].

Незважаючи на це, гідродинамічний підхід все ще залишається досить поширеним і визнаним фахівцями при вивченні колективної поведінки гранульованих матеріалів в потоці, особливо в інженерних дослідженнях. За допомогою підходу механіки суцільних середовищ були встановлені нестійкості в поведінці збурених зернистих матеріалів у

вигляді мікропотоків, такі як рухи, як зерниста конвекція, флуктуаційні кластери, витягнуті вали і структуроутворення під впливом осциляційного прискорення [95].

5.3.2 Природні та штучні зернисті матеріали

Пісок, бентоніт і гравій є природними матеріалами. Вони мають незначний природний радіаційний фон. Ці матеріали є сприятливими для України, оскільки вони знаходяться у великих родовищах на території України. Ці родовища є легкодоступними. Використання гранульованих матеріалів у захисних модулях, на мою думку, є практичним рішенням. З ними легко працювати і вони мають низьку собівартість. Більшість матеріалів цього типу готові до використання без додаткових маніпуляцій.

Пісок - природний дрібнозернистий матеріал. Він активно використовується людиною в будівництві. Практично всі види піску відносяться до першого класу радіоактивності згідно з ГОСТ 30108-94. Максимальна ефективна радіоактивність піску не перевищує 370 Бк/кг. Світові запаси піску дуже великі. Ринкові ціни відносно низькі, станом на 2018 рік комерційна собівартість видобутку однієї тонни піску становить приблизно 150 грн.

Бентоніт - природна глиниста речовина. Він має властивість набухати під впливом води. Під впливом вологи він перетворюється на в'язку речовину, яка є непроникною для води. Бентоніт не токсичний. Широко використовується в будівництві. Не радіоактивний, ціна станом на 2017 рік - 3000 грн/т.

Для більш ефективного радіаційного захисту використовують суміш піску та бентоніту. Така суміш є більш ефективною, ніж використання цих матеріалів окремо. Вміст бентоніту в суміші коливається від 20% до 85%, залежно від потреб користувача [97].

Гравій - це природна велика гірська порода. Являє собою уламки різних мінералів, що утворилися в результаті руйнування природних гірських порід. Практично весь видобутий гравій класифікується як радіоактивний згідно з ГОСТ 30108-94. Максимальна ефективна активність більшості видів гравію становить приблизно 370 Бк/кг. Це значення свідчить про радіаційну безпеку даного матеріалу. Запаси гравію в природі достатні, ціна станом на 2018 рік становить близько 220 грн/т.

Ще одним видом гранульованого матеріалу є будівельні відходи. Будівельні відходи складаються з матеріалів різного типу та походження. Цей вид відходів утворюється під час будівництва та ремонту житлових, промислових, виробничих та інших об'єктів. Рівень радіоактивності в таких матеріалах незначний, оскільки вони використовуються в повсякденному житті людини. Крім того, вартість таких матеріалів зводиться (за необхідності) до витрат на дроблення і транспортування. Крім того, використання таких будівельних відходів вирішує проблему їх накопичення.

Як зазначалося вище, гранульовані матеріали є оптимальною альтернативою цементному розчину в захисних оболонках. При взаємодії радіації з гранульованими матеріалами відбувається дуже специфічна реакція. Коли енергійні частинки взаємодіють з атомами матеріалу, атомам передається велика кількість кінетичної енергії (а). Ця частинка порушує ряд інших атомів в оточенні, створюючи каскад зіткнень, які накладаються на перервану межу (b). Після того, як каскад зіткнень зникає, в проміжках і пустотах з'являються точкові дефекти. Міжзеренні дефекти швидко дифундують у зернисту матрицю (в). При цьому пустоти залишаються в об'ємі, а міжзеренні дефекти залишаються замкненими в межах зернистої матриці (d). Міжкристалічні дефекти переміщуються з матеріалу в об'єм і заповнюють порожнечі. Цей процес відбувається за значно коротший час, ніж типовий час дифузійних процесів (e). Система переходить у квазістаціонарний стан (f) і модуль завершується (g). В ідеальному випадку система повертається до початкового стану (h).

Для ілюстрації ефекту опромінення гранульованими матеріалами наведено схематичну діаграму стану (рис. 5.2).

Звичайно, наведений сценарій відповідає лише примітивному уявленню про схему і характер взаємодії іонізуючого випромінювання з гранульованим матеріалом і не включає якісних або кількісних оцінок поглинальної здатності гранульованого матеріалу. Це питання обговорюється нижче.

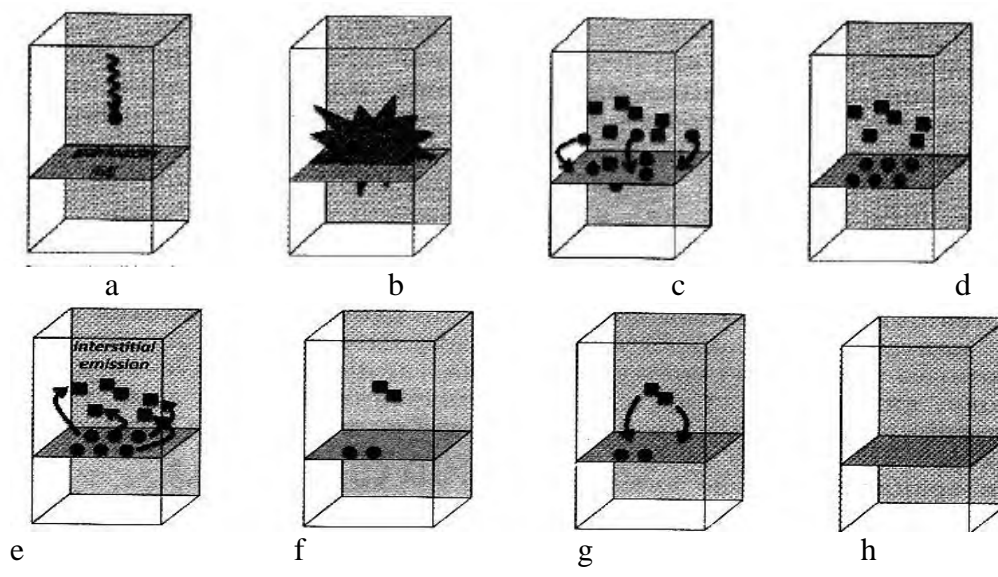


Рисунок 5.2. - Скетч-схема для умовної демонстрації взаємодії опромінення з гранульованим шаром речовин

5.4 Міграція домішок (радіонуклідів) у пористому середовищі

Дослідження процесів вертикальної міграції радіонуклідів дозволило встановити аналітичну закономірність у розподілі їх питомої активності α (вимірюється Бк/г), як задовільно описується в рамках складеної моделі:

$$\alpha(x,t) = \left(\frac{\alpha_1}{L}\right)e^{-\frac{x}{L}} + \frac{\alpha_2}{\beta\sqrt{Dt}}e^{-\frac{(x-v)^2}{4Dt}} \quad , \quad (5.20)$$

де x – глибина пористого прошарку; L – глибина міграції; D – коефіцієнт дифузії; β – нормувальний безрозмірний коефіцієнт, α_1, α_2 – параметри, які мають зміст частини питомої активності, яка реалізується у кожному з двох міграційних каналів.

Співвідношення (5.20) знайшло задовільну апробацію при дослідженні міграційних процесів на відповідних об'єктах у Чорнобильської зони [98].

Часова динаміка вертикальної міграції, яка характеризує заглиблення радіонуклідів, які описуються лінійною залежністю: $L(t) = p + q(t)$. Масштабні параметри p і q залежать від шарових характеристик і змінюються в межах $0,14 \div 0,77$ г/см² для p і $0,22 \div 0,41$ і г/см² для q .

Для початкових часових інтервалів лінійна залежність працює задовільно, але асимптотично більш адекватним є експоненціальний закон. Спрощена феноменологічна модель експоненціального заглиблення радіонуклідів у шаровій структурі базується на співвідношенні:

$$\alpha_i(x, t) = \alpha_{i0} \exp\left(-\frac{x}{L(t)}\right), \quad (5.21)$$

де x – глибина проникнення. Введемо параметр радіаційного фону потужність експозиційної дози (ПЕД) з урахуванням заглиблення радіонуклідів у шарі:

$$P_{yi} = k_L^{(i)} \varepsilon_{0i} \sigma_i, \quad (5.22)$$

де k_L коефіцієнт i – го радіонукліда при експоненціальному заглибленні з параметром $L(t)$, ε_{0i} – конверсійний чинник для безкінечного тонкого плоского джерела ($L = 0$), σ_i – щільність забруднення (Кі/км²).

Розрахунок ПЕД від складної суміші радіонуклідів описується формулою:

$$P_y = \sum_i k_L^i \varepsilon_{0i} \sigma_i = \left(\sum_i \varepsilon_{0i} \sigma_i \right) k_L(L), \quad (5.23)$$

Відповідне дозове навантаження на населення при цьому знаходиться за допомогою співвідношення:

$$D_y(t) = \int_0^t P_y(t) dt \quad (5.24)$$

ВИСНОВОК

Методи вивчення процесів, що відбуваються в навколишньому середовищі та лежать в основі різних технологій захисту довкілля, зазвичай включають спостереження та експерименти, вимірювання, класифікацію та моделювання. Ми зосередимося на останньому, тобто теоретичному моделюванні, де важливу роль відіграє фізичне обґрунтування достовірності застосованих моделей.

У цій монографії ми розглядаємо дві великі групи явищ, які складають дуже велику кількість законів і процесів, що лежать в основі низки технологій, у тому числі спрямованих на захист і збереження навколишнього середовища та його моніторинг. Обрано моделі фізичних процесів, які визначають кінетичні процеси та динаміку складних багаточастинкових, багатокомпонентних систем, а також проблему розсіювання зовнішнього випромінювання в таких системах, що є основою для екологічного моніторингу та діагностики.

Матеріал монографії відкриває перспективу побудови класифікаційної системи для теоретичного моделювання процесів в техніці з урахуванням типу взаємодії з навколишнім середовищем, фізики процесу і властивостей його складових, а також перехресної кореляції цих елементів.

ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАННЯ

1. Jaeger H.M., Nagel S.R., Behringer R.P. The physics of granular materials. // *Rev. Mod. Phys.* 1996. Vol. 68. P. 1259-1272.
2. Duran J. *Sands, Powders and Grains*. NY.: Springer-Verlag, 2000. 214 p.
3. Kadanoff L. Built upon sand: theoretical ideas inspired by granular flows. // *Rev. Mod. Phys.* 1999. Vol. 71. P. 435-447.
4. De Gennes P.G. Granular matter: a tentative view. // *Rev. Mod. Phys.* 1999. Vol. 71, No. 2. P. S374-S382.
5. 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.
6. Vandewalle N., Lumay G., Gerasimov O., Ludewig F. The influence of grain shape, friction and cohesion on granular compaction dynamics. // *Eur. Phys. J. E*. 2007. Vol. 22, No. 3. P. 241-248.
7. Герасимов О.І., Клименков О.А., Співак А.Я., Худинцев М.М. Кінетика гранульованих матеріалів у полі віброприскорювань. // *Вісник Одеського державного екологічного університету*. 2006. № 3. С. 247-252.
8. Гиршфельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р. *Молекулярная теория газов и жидкостей*: Москва: Иностранной литературы, 1961. 930 с.
9. Abramowitz M, Stegun I.A. *Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables*. Washington: US GPO, 10th, 1972. 1046 p.
10. Knight J.B., Fandrich C.G., Lau C.N., Jaeger H.M., Nagel S.R. Density relaxation in a vibrated granular materials. // *Phys. Rev. E*. 1995. Vol. 51, No.5. P. 3957-3963.
11. Villarruel F.X., Lauderdale B.E., Mueth D.M., Jaeger H.M. Compaction of rods: Relaxation and ordering in vibrated, anisotropic granular material. // *Phys. Rev. E*. 2000. Vol. 61, No. 6. P. 6914-6921.
12. Герасимов О.І., Співак А.Я. Кінетична дисперсійна модель середнього поля для ущільнення гранульованих матеріалів. // *Вісник Одеського державного екологічного університету*. 2010. № 9. С. 190-197.
13. Паташинский А.З., Покровский В.Л. *Флуктуационная теория фазовых переходов*. Москва: Наука, 1982. 381 с.
14. Gerasimov O.I., Fischer I.Z., Lisy V. The kinetic of phase transitions in systems with nonconservative order parameter. // *Czechoslovak Journal of Physics B*. 1982. Vol. 32, No. 7. P. 772-776.
15. Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. *Физическая кинетика*. Москва: Наука, 1979. 528 с.

16. Gerasymov O.I., Vandewalle N., Spivak A.Ya., Lumay G., Dorbolo S., Khudyntsev N.N., Klymenkov O.A. Stationary states in a 1D system of inelastic particles // *Ukrainian Journal of Physics*. 2008. Vol. 53, No. 11. P. 1128-1135.
17. Gerasymov O.I. Structure and dynamics of granular materials perturbed by external fields. // *Ukrainian Journal of Physics*. 2010. Vol. 55, No. 5. P. 560-567.
18. Герасимов О.І. Структура та динаміка гранульованих матеріалів. // *Доповіди НАН України*. 2010. № 11. С. 59-65.
19. Gerasimov O.I., Schram P.P.-J.M., Kitahara K. Kinetics of granular segregation. // *Ukrainian Journal of Physics*. 2003. Vol. 48, No. 8. P. 885-896.
20. Gerasimov O.I., Schram P.P.J.M. Differential equation of state of a model system with a singular measure: application to granular materials in steady states. // *Physica A*. 2002. Vol. 312. P. 172-180.
21. 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.
22. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. *Теоретическая физика*, Т.V. *Статистическая физика*. Часть 1. Москва: Наука, 1976. 584 с.
23. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya. Kinetic model of compaction in granular materials // *Ukrainian Journal of Physics*. 2015. Vol. 60, No. 3. P. 253-257.
24. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya. Landau-Ginzburg kinetics for granular materials. // Book of Abstracts. Bogolyubov Kyiv Conference “*Modern Problems of Theoretical and Mathematical Physics*”, September 15-18, 2009, Kyiv, Ukraine. P.156.
25. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya. Kinetics of compaction for granular materials. // Program & Abstracts. Young Scientists Conference “*Modern Problems of Theoretical Physics*”, December 22-24, 2010, Kyiv, Ukraine, P.55.
26. Герасимов О.І., Співак А.Я. Кінетична модель ущільнення у гранульованих матеріалах. // *Вісник Одеського державного екологічного університету*. 2010. №10. С.266-231.
27. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya. Landau-Ginsburg kinetics of granular fluid compaction. // Abstracts of the 8th International Conference, “*Physics of Liquid Matter: Modern Problems*” (PLMMP-2018), Kyiv, Ukraine, May 18-22, 2018. P.150.
28. Lumay G., Vandewalle N. Experimental study of granular compaction dynamics at different scales: grain mobility, hexagonal domains, and packing fraction // *Phys. Rev. Lett.* 2005. Vol. 95, No. 2. P. 028002.
29. Nicodemi M., Coniglio A., Herrmann H.J. Frustration and slow dynamics of granular packings. // *Phys. Rev. E*. 1997. Vol. 55, No. 4. P. 3962-3969.

30. Nowak E.R., Knight J.B., Ben-Naim E., Jaeger H.M., Nagel S.R. Density fluctuations in vibrated granular materials. // *Phys. Rev. E*. 1998. Vol. 57, No. 2. P. 1971-1982.
31. Philippe P., Bideau D. Compaction dynamics of a granular medium under vertical tapping. // *Europhysics Letters*. 2002. Vol. 60, No. 5. P. 677-683.
32. Arsenović D., Vrhovac S.B., Jakšić Z.M., Budinski-Petković L., Belić A. Simulation study of granular compaction dynamics under vertical tapping. // *Phys. Rev. E*. 2006. Vol. 74, No. 6. P. 061302.
33. Reis P.M., Ingale R.A., Shattuck M.D. Crystallization of a quasi-two-dimensional granular fluid. // *Phys. Rev. Lett.* 2006. Vol. 96, No. 25. P. 258001.
34. Gerasymov O.I., Somov M.M. Statistical description of excess properties of many-particle binary systems // *Ukrainian Journal of Physics*. 2015. Vol. 60. No. 4. C. 324-327.
35. Gerasymov O.I., Zagorodny A.G., Somov M.M. Toward the analysis of the structure of granular materials // *Ukrainian Journal of Physics*. 2013. Vol. 58, No. 1. P. 32-39.
36. 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.
37. 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.
38. Farr R.S., Groot R.D. Close packing density of polydisperse hard spheres. // *The Journal of chemical physics*. 2009. Vol. 131, No. 24. P. 244104.
39. Danisch M., Jin Y., Makse H.A. Model of random packings of different size balls. // *Physical Review E*. 2010. Vol. 81, No. 5. P. 051303.
40. Chen D., Torquato S. Confined disordered strictly jammed binary sphere packings. // *Physical Review E*. 2015. Vol. 92, No. 6. P. 062207.
41. 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. P. 125501.
42. Behringer R.P., Chakraborty B. The physics of jamming for granular materials: a review. // *Reports on Progress in Physics*. 2018. Vol. 82, No. 1. P. 012601.
43. Bouteux T., de Gennes P.G. Compaction of granular mixtures: a free volume model. // *Physica A*. 1997. Vol. 244, No.1-4, P. 59-67.
44. 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.
45. 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.

46. 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.
47. Gerasymov O.I., Spivak A.Ya., Sidletska 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, P.49.
48. Gerasymov O., Spivak A., Andrianova I., Sidletska L., Kuryatnikov V., Kilian A. Micro-mechanical (granular) mixtures for environmental safety technologies // *E3S Web of Conferences*. 2021. Vol. 234. P. 00075 (6 pages).
49. 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. P. 224508.
50. Gerasymov O.I., Spivak A.Y., Andrianova I.S., Sidletska, L.M., Kuryatnikov V.V., and Kilian A.M. Tightening (compaction) of bi-component micromechanical (granular) system. *Science and Innovation*. 2021. Vol. 17, No. 4. P. 79-88.
51. Герасимов О.І. *Фізика гранульованих матеріалів* : монографія. Одеса: ТЕС, 2015. 256с.
52. Герасимов О.І., Співак А.Я. *Окремі задачі фізики м'якої матерії* : моногр. / Одеськ. держ. еколог. ун-т. Одеса: Гельветика, 2020. 200 с.
53. Falkovich G., Gawedzki K., Vergassola M. Particles and fields in fluid turbulence. *Reviews of Modern Physics* .2001. 73. Pp. 913-975.
54. Freund L. B. *Dynamic Fracture Mechanics*. Cambridge: Cambridge University Press, 1998. 300 p.
55. Marder, M. , J. Fineberg . How things break. *Physics Today* .1996. 49. Pp.24-29. 4. Wu J. G., O. L. Loucks . From balance of nature to hierarchical patch dynamics: A paradigm shift in ecology. *Quarterly Review of Biology*.1995. 70. Pp.439-466.
56. Proulx S. R., D. E. L. Promislow, P. C. Phillips Network thinking in ecology and evolution. *Trends in Ecology and Evolution*. 2005. 20. Pp.343-353.
57. Falkovich G., Gawedzki K., Vergassola M. Particles and fields in fluid turbulence. *Reviews of Modern Physics*. 2001. 73. P. 913-975.
58. Freund L.B. *Dynamic Fracture Mechanics*. Cambridge: Cambridge University Press, 1998. 300 p.
59. Marder M., Fineberg J. How things break. *Physics Today*. 1996. Pp. 24- 29.
60. Proulx S.R., Phillips P.C. Network thinking in ecology and evolution. *Trends in Ecology and Evolution*. 2005. 20. P. 343-353.
61. Marcus P.S. Jupiter Great Red Spot And Other Vortices. *Annual Review Of Astronomy And Astrophysics*.2000. 31. Pp. 523-573.
62. Corwin E.I., Jaeger H.M., Nagel S.R. Structural signature of jamming in granular media. *Nature* . 2005. 435. P. 1075-1078.

63. McCauley J.L. Dynamics of Markets: Econophysics and Finance. Cambridge. UK: Cambridge University Press, 2004. P. 364 13. Wildfires, complexity and highly optimized tolerance / Moritz M. et al. Proceedings Of The National Academy of Sciences of The United States Of America . 2005. 102. Pp. 17912-17917.
64. Gaspard P. Out-of-equilibrium nanosystems. Progress Of Theoretical Physics Supplement. 2006. 165. P. 33-56.
65. Local ionic and electron heating in single-molecule junctions. Nature Nanotechnology / Huang Z.F. et al. 2007. 2. P. 698-703.
66. Murty B.S. Novel materials synthesis by mechanical alloying/milling. International Materials Reviews. 1998. 43. Pp.101-141.
67. Drying-mediated selfassembly of nanoparticles / Rabani E. et al. Nature . 2003. 426. Pp. 271-274.
68. Jaeger H.M., Nagel S.R., Behringer R.P. Granular solids, liquids, and gases. Reviews Of Modern Physics .1996. 68. Pp. 1259-1273.
69. de Gennes P.G. Granular matter: a tentative view. Reviews of Modern Physics. 1999. 71. Pp. 374-S382.
70. Kadanoff L.P. Built upon sand: Theoretical ideas inspired by granular flows. Reviews Of Modern Physic. 1999. 71. Pp. 435-444.
71. Герасимов О.І. Фізика гранульованих матеріалів. Одеса: ТЕС, 2015. 264 с.
72. Герасимов О.І., Співак А.Я. Окремі задачі фізики м'якої матерії. Гельветика, 2020. 200 с.
73. Tightening (Compaction) of Bi-Component Micromechanical (Granular) System / Gerasymov O.I., Andrianova I.S., Spivak A.Y., Sidletskaya L.M., Kuryatnikov V.V., Kilian A.M. Science and Innovation. 2021. Vol. 17, No. 4. Pp. 79-88.
74. Kinetically driven self assembly of highly ordered nanoparticle monolayers / Bigioni T.P. et al. Nature Materials. 2006. 5. Pp. 265-270.
75. Morozov A.N., van Saarloos W. An introductory essay on subcritical instabilities and the transition to turbulence in visco-elastic parallel shear flows. Physics ReportsReview Section Of Physics Letters. 2007. 447. Pp. 112-143.
76. Fisker J.L., Balsara D.S. The accretion and spreading of matter on white dwarfs. New Astronomy Reviews. 2006. 50. Pp. 509-515. 27. Jamming phase diagram for attractive particles / Trappe V. et al. Nature . 2001. 411. Pp. 772-775.
77. Герасимов О.І. Технології захисту навколишнього середовища: підручник / Одеськ. держ. еколог. ун-т. Одеса: ТЕС, 2019. - 268 с.
78. Герасимов О.І. Теоретичні основи технологій захисту навколишнього середовища. Навчальний посібник. Одеса: ТЕС, 2018. - 228с.

79. «Про забезпечення санітарного та епідемічного благополуччя населення» №4005-ХІІ від 24.02.94, ВВР, 1994, № 27, ст.219 "Про питну воду та питне водопостачання" № 2047-VIII від 18.05.2017
80. Державні санітарні норми та правила "Гігієнічні вимоги до води питної, призначеної для споживання людиною" (ДСанПіН 2.2.4-171-10).2017.
81. *Ветошкин А.Г. Таранцева К.Р.* Технологии защиты окружающей среды. (Теоретические основы) Учебное пособие. Пенза, 2004, - 249 с.
82. *Курятников В.В., Співак А.Я, Кільян А.М.* Конструювання та інженернофізичні принципи систем захисту довкілля: конспект лекцій/ Одеса: ОДЕКУ, 2019. 60 с.
83. *Дж. Кэй, Т.Лэби.* Таблицы физических и химических постоянных. Гос. Издательство физико-математической литературы. - М.: 1962, 247 с.
84. Основи технології захисту навколишнього середовища. Сайт кафедри загальної та теоретичної фізики ОДЕКУ. URL: <http://dpt12s.odeku.edu.ua/>
85. *Курятников В.В.* Моделювання міграції радіонуклідів у ґрунті та ґрунтовоекологічний радіаційний моніторинг. Матеріали доповідей Міжнародної заочної мультимедійної (інтернет) конференції «Роль фізики в розвитку міждисциплінарних напрямків», 2-5 травня, 2016, Одеса, ТЕС, 2016, с.35-38
86. *Полянин А.Д.* Справочник по дифференциальным уравнениям математической физики. - М.: ФМЛ, 2001. - 576 с.(с.64)
87. Справочник химика. т.1 Под ред. ак. *Б.П. Никольского.* Химия. Ленинградское отд., 1971, - 1072 с.
88. *Абдалиев У.К. и др.* Обеззараживание сточных вод с использованием электрического поля и эффекта кавитации. Збірник наукових праць Міжнародної конференції «Наука в епоху дисбалансів», Київ, 30 квітня 2014р.: Центр наукових публікацій, 2014, - 123 с.
89. *Aliotta F., Gerasymov O., Calandra P.* Electrospray Jet Emission: An Alternative Interpretation Invoking Dielectrophoretic Forces //Intelligent Nanomaterials: Second Edition. 2016. P. 51-90. <http://doi.org/10.1002/9781119242628.ch3>
90. *Герасимов О.І., Курятников В.В.* Фізичне моделювання в технологіях водоочищення // *Фізика аеродисперсних систем.* 2023. No. 61. С.17-31. <https://doi.org/10.18524/0367-1631.2023.61.290835>
91. Janssen H. A. (1895) Versuch über Getreidedruck in Silozellen, Zeitschrift des vereins Deutscher Ingenieure. V. 39, N. 35. P. 1045-1049
92. Boutreux, T. Raphaël E., and De Gennes P. G. (1997) Propagation of a pressure step in a granular material: The role of wall friction. *Physical Review E* vol. 55, N. 5 <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.55.5759>
93. Герасимов О.І. Фізика гранульованих матеріалів. Одеса: ТЕС, 2016. 264 с.

94. Герасимов О.І., Співак А.Я. Окремі задачі фізики м'якої матерії : монографія / Одеськ. держ. еколог. ун-т. Одеса: Видавничий дім "Гельветика", 2020. 200с.
95. Jorge E. Fiscina, Manuel O. Cáceres (2005) Fermi-like behavior of weakly vibrated granular matter. *Phys. Rev. Lett.* 95, 108003
96. Gerasymov O.I., A. Ya. Spivak Parameterization of the local structure of micro-mechanical systems (granular materials). In: The Bogolyubov Kyiv Conference "Problems of theoretical and mathematical physics" Kyiv, Ukraine, September 24-26, 2019 p.73
97. Герасимов О.І. Теоретичні основи технологій захисту навколишнього середовища: навчальний посіб. / Одеськ. держ. екол. ун-т. Одеса: ТЕС, 2018. 228 с. ;
98. Герасимов О.І. Фізика гранульованих матеріалів. Монографія/ Одеський державний екологічний університет. Одеса: ТЕС, 2015. 264 с.;

Наукове електронне видання

**ГЕРАСИМОВ Олег Іванович
СПІВАК Андрій Ярославович
СІДЛЕЦЬКА Людмила Михайловна**

**ФІЗИЧНІ МЕХАНІЗМИ ПРОЦЕСІВ, НА ЯКИХ БАЗУЮТЬСЯ ТЕХНОЛОГІЇ ОЧИСТКИ ТА
ДЕЗАКТИВАЦІЇ ЗАБРУДНЕНИХ СИСТЕМ**

Монографія

Видавець і виготовлювач

Одеський державний екологічний університет

вул. Львівська, 15, м. Одеса, 65016

тел./факс: (0482) 32-67-35

E-mail: info@odeku.edu.ua

Свідоцтво суб'єкта видавничої справи

ДК № 5242 від 08.11.2016