

УДК 538.9:539.215  
КП XXXXXX  
№ держреєстрації 0112U002243  
Інв. №

Міністерство освіти і науки України  
Одеський державний екологічний університет  
(ОДЕКУ)  
65016, м.Одеса, вул. Львівська, 15;  
тел. (0482) 63 62 09;

ЗАТВЕРДЖУЮ  
Проректор з НР ОДЕКУ  
д-р геогр. наук, проф.  
\_\_\_\_\_ **Ю.С. Тучковенко**

**ЗВІТ**  
**ПРО НАУКОВО-ДОСЛІДНУ РОБОТУ**  
**СТРУКТУРА ТА ДИНАМІКА МУЛЬТИМАСШТАБНИХ**  
**МЕХАНІЧНИХ СИСТЕМ**

**(заключний)**

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

О.І. Герасимов

2015

Рукопис закінчено 09 грудня 2015р.  
Результати цієї роботи розглянуто на Науково-технічній раді ОДЕКУ  
прот.№ \_\_\_\_ від \_\_\_\_ 2015р.

**СПИСОК АВТОРІВ**

Керівник НДР, зав. каф. загальної і теоретичної фізики, д-р фіз.-мат. наук, професор	О. Герасимов (вступ, розд.1-4, висновки)
Доцент, канд. фіз.-мат. наук,	М. Худинцев (розд.2-3)
Старший викладач	А. Співак (реферат, розд.2-3)
Доцент, канд. фіз.-мат. наук,	І. Андріанова (розд.1-2)
Доцент, канд. фіз.-мат. наук,	В. Курятников (розд.1)
Доцент, канд. фіз.-мат. наук,	С. Зеленін (розд.3)
Старший викладач	М. Сомов (розд.1 та 3)
Асистент	О. Сергунова (розд.1)
Асистент	Р. Романова (розд.1, список використаних джерел)
Асистент	А. Кільян (розд.1)
Нормоконтролер	С. Малацковська

## РЕФЕРАТ

Звіт про НДР: 110 с., 22 рис., 1 табл., кількість джерел – 134.

Об'єкт дослідження – мультимасштабні механічні системи, зокрема гранульовані матеріали (г.м.). Мета роботи – вивчення структури та динамічних властивостей г.м., впливу внутрішніх та зовнішніх параметрів на хід фізичних процесів, які в них відбуваються, розбудова та обґрунтування фізичних моделей явищ та процесів, та їх порівняльний аналіз. Метод дослідження – теоретичне і чисельне моделювання, фізичний експеримент.

Запропоновані методи динамічної теорії, функціонального аналізу, ймовірнісної стереології та нелінійного аналізу, дозволили здійснити адекватну параметризацію процесів структуроутворень та переносу енергії збуджень в моделях дискретних мікромеханічних систем з урахуванням їх внутрішньої морфології, розмірності, конфайменту. Отримані аналітичні розв'язки моделей та здійснено їх порівняльний аналіз із результатами чисельного та безпосереднього фізичного експериментів.

Результати НДР використані при написанні монографій (Герасимов О.І. Фізика гранульованих матеріалів: Монографія. – Одеса: ТЕС, 2015. – 264с.; Aliotta F., Gerasymov O., Calaandra P. Electrospray jet emission: theory invoking merely dielectrophoretic forces. //Series Advanced Materials Vol.2 Advances in electrospinning materials (Ed. A. Tiwari), WILEY-Scrivener Publisher, USA, 2015), статей до журналів (Eur.Phys.Journ. E, Доповіді НАН України, Український Фізичний Журнал, Український Гідрометеорологічний Журнал та Вісник ОДЕКУ), а також включені до курсових, дипломних та дисертаційних робіт.

**ДИНАМІЧНІ ДИСИПАТИВНІ СИСТЕМИ, ГРАНУЛЬОВАНІ МАТЕРІАЛИ, ХВИЛЬОВА МЕХАНІКА, ФОТОНІКА У МЕЗОМАСШТАБІ.**

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

## ЗМІСТ

	стор.
Вступ.....	6
1 ДОСЛІДЖЕННЯ СТРУКТУРОУТВОРЕНЬ В ГРАНУЛЬОВАНИХ МАТЕРІАЛАХ .....	11
1.1 Структура 2D гранульованих матеріалів та запорошеної плазми .....	13
1.2 Побудови Вороного та класична теорія моментів у застосуванні до параметризації структури гранульованих матеріалів .....	21
1.3 Трансляційний та орієнтаційний параметри впорядкування. Анізотропія гранульованих систем .....	27
2 ДИНАМІКА ЕНЕРГІЇ / ІМПУЛЬСУ В МОДЕЛЯХ НИЗЬКОВИМІРНИХ ДИСКРЕТНИХ МІКРОМЕХАНІЧНИХ СИСТЕМ .....	33
2.1 Точні розв'язки задачі про перенесення імпульсу у неоднорідному одновимірному гранульованому ланцюжку .....	33
2.2 Моделювання руху механічних збуджень у одновимірних неоднорідних гранульованих ланцюжках: вплив граничних умов ..	42
2.3 Перенесення збудження у гранульованих ланцюжках в умовах конфайнменту .....	50
3 МАТЕРІАЛЬНІ СПІВВІДНОШЕННЯ В ГРАНУЛЬОВАНИХ МАТЕРІАЛАХ .....	62
3.1 Статистичний опис надлишкових властивостей бікомпонентних систем .....	62
3.2 Кінетична модель компактизації гранульованих матеріалів .....	66
3.3 Модель ентропії ґраткового газу для опису щільності гранульованих матеріалів .....	77

4 СПЕКТРАЛЬНІ ВЛАСТИВОСТІ ГРАНУЛЬОВАНИХ МАТЕРІАЛІВ ТА УЗАГАЛЬНЕННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ ДОСЛІДЖЕННЯ ЗА ТЕМОЮ МОНОГРАФІЇ «ФІЗИКА ГРАНУЛЬОВАНИХ МАТЕРІАЛІВ» .....	81
4.1 Розповсюдження електромагнітних хвиль в моделі 1D гранульованої системи у наближенні віртуального впорядкування	81
4.2 Монографія «Фізика гранульованих матеріалів» .....	90
Висновки.....	92
Перелік посилань.....	96

## ВСТУП

Останні десятиріччя у фізиці конденсованого стану речовини характеризуються усе зростаючою цікавістю до дослідження систем структура яких організована у мезо- і навіть у макромасштабах (відносно атомно-молекулярного, мікромасштабу) [1]. Гранульовані матеріали, запорошена плазма, піна і інші колоїдні системи-далеко не повний перелік таких об'єктів. Можливості з одного боку їх порівняно нескладного синтезування, а з іншої - розвиток досить адекватних методів аналізу структури таких систем обумовлюють прогресуючі можливості цього напрямку. Вражаюче, але структури, які спостерігаються у вищезгаданих системах характеризуються ознаками рідкої і кристалічної фаз звичайних молекулярних систем. При цьому, спостережувані зміни в структурі їх впорядкованих станів, які відбуваються під дією зовнішніх полів можуть бути класифіковані як зміни кристалічної симетрії (зрозуміло структурні параметри таких станів лежать не в мікро- а в мезо-масштабі). Найважливішим питанням, що вимагає тут свого прояснення є зв'язок між локальною структурою і глобальними властивостями таких систем. Крім того вимагає вивчення питання про можливість використання для дослідження таких матеріалів методів структурного аналізу, розвинених у фізиці статистично заданих систем (у зв'язку із проявом ними властивостей ізоморфних статистичним об'єктам). Так, наприклад, гранульовані матеріали широко представлені в довкіллі і твердо займають другу позицію найбільш важливих компонентів, які використовуються у промисловості, після води. Їх застосування вражає як масштабом так і спектром: починаючи з фармацевтичної, харчової, будівельної промисловості, окремих циклів механічного синтезу в технологічних виробництвах і до геотектонічних і навіть космологічних процесів.

Гранульовані матеріали (такі, скажімо, як пудри або пісок) є конгломераціями великого числа дискретних частинок (гранул) з розмірами в сотні ангстрем і більше які взаємодіють між собою головним чином внаслідок міжчастинкових контактів. В більшості випадків, такі контактні взаємодії нелінійні (наприклад підкоряються закону Герца). До природи г.м. відноситься також та обставина, що контактні взаємодії між гранулами дисипативні і таким чином навіть у стані спокою, такі системи нерівноважні, і фактично знаходяться у метастабільних станах. Основним масштабom енергії в г.м. виступає їх енергія в зовнішньому (гравітаційному) полі, яке, разом з граничними умовами, зрештою визначає також і форму г.м.. При припиненні підведення енергії ззовні кінетична енергія гранул майже миттєво перетворюється на нуль і таким чином гранульовані матеріали є нетермодинамічними системами. Таким чином, незважаючи на візуальну простоту г.м. їх не можна віднести до простих механічних систем. Так, зокрема г.м., що збурюються зовнішніми різними полями віброприскорень показують складну поведінку. Такими, зокрема, є компактизація (впакування), кластеризація (сегрегація, ефект арки і бразильського горіха), флюїдизація ( конвективний рух поверхневих шарів г.м. на похилій площині і у полі вертикальних низькочастотних вібрацій), утворення патернів і метастабільних станів, кристалізація в макро і мезо-масштабах в двовимірних шарах, кросовер складають далеко неповний перелік специфічних, часом екстраординарних властивостей г.м. [2].

Можна сказати, що будучи дисипативною дискретною мікро-механічною динамічною системою при створенні спеціальних умов, г.м. проявляють властивості, як типові для агрегатних станів конденсованої матерії : газів, рідин і твердих тіл, так і принципово відмінні від них. Така багатоскладова поведінка г.м. робить завдання опису їх властивостей з точки зору послідовної теорії дуже складною, не дивлячись на окремі вдалі моделі, та далекою від свого остаточного розв'язку [3-5].

Протягом 2011-2015 років в рамках кафедральної НДР «Структура та динаміка мультимасштабних механічних систем» дослідження були зосереджені на виконанні наступних головних задач:

**1) Дослідження квазістатичної структури г.м.** Шляхом застосувань методів сучасної стереології, методу Вороного-Делоне та інваріантів Пуанкаре-Ейлера та методів неевклідовського аналізу здійснити параметризацію різних типів локальної структури, які спостерігаються у гранульованих матеріалах у різноманітних масштабах спостережень, здійснити оцінку флуктуацій виділених параметрів, які відбуваються внаслідок структуроутворень, провести порівняльний аналіз властивостей багатокомпонентних гранульованих сумішів із рідинними аналогами (у співробітництві із дослідницькою групою з університету м.Мессина, Італія).

**2) Дослідження кінетики компактизації (ущільнення), сегрегації, кластеризації, структуро утворень (впорядкування) у гранульованих матеріалах під впливом зовнішніх збурень.** Розробити наочні прості (починаючи із низько- вимірних ґраткових) кінетичні моделі ущільнення (компактизації) гранульованих матеріалів у зовнішніх полях, на їхній основі здійснити параметризацію кінетичних фазових діаграм, які описують вказані фізичні процеси та провести порівняльний аналіз розроблених підходів. Провести дослідження впливу локальної структури та початкових умов на типи динамічної поведінки. Провести аналіз мікро- та макрокінетичних закономірностей (інваріантів, законів збереження), які супроводжують еволюцію гранульованих систем.

**3) Дослідження та порівняльний аналіз впливу розмірності, не лінійності та неоднорідності, степенів свободи та непружних втрат енергії, а також зовнішніх факторів на динаміку (кінетику фізичних процесів) у гранульованих матеріалах.** Дослідити порівняльний вплив вказаних параметрів на хід динамічних процесів та спостерігаємих структуроутворень у гранульованих матеріалах. Сформулювати відповідні матеріальні співвідношення та критерії, які визначають типи відповідних станів та



переходи проміж ними у вигляді рівнянь стану та побудувати відповідні фазові діаграми для однокомпонентних та двокомпонентних гранульованих систем.

**4) Дослідження квазістаціонарних станів та флуктуаційно – дисипативних співвідношень, локальної, мезомасштабної та глобальної рівноваги у гранульованих системах.** Шляхом безпосереднього моделювання та обробки експериментальних даних (у співробітництві із дослідницькою групою із університету м.Льєж, Бельгія) встановити факт та критерії існування стаціонарних станів у відкритих гранульованих системах, провести дослідження їх стійкості по відношенню до збурень різної природи та сформулювати умови локальної та глобальної рівноваги. Встановити типи та різновиди флуктуаційно-дисипативних співвідношень для моделей. Які застосовуються та провести порівняння із експериментом з метою їхньої параметризації та оптимізації.

**5) Дослідження структури та динаміки гранульованих матеріалів за допомогою методу розсіяння зовнішніх випромінювань (рентгенівська томографія, террагерцева спектроскопія).** Розробити алгоритми застосування методів розсіяння зовнішніх випромінювань (поляризованих електромагнітних хвиль, звукових коливань та хвильових пакетів) для діагностики типів структури, дефектів та неоднорідності гранульованих матеріалів за допомогою низько- вимірних моделей. Провести модельний аналіз розповсюдження збурень різної природи у низько-вимірних дискретних механічних системах, розподілу енергії в них та характеристик транспортування в залежності від степені нелінійності, початкових та граничних умов, впливу зовнішніх факторів та дисипативних ефектів, а також дефектоутворення, та додаткових (магнітних) степенів свободи. Провести вивчення умов та параметрів відповідної зонної структури моделей та їхньої модифікації (гібридні резонанси, мінізони, тощо) та запропонувати на цій основі відповідні елементи схемотехніки. Яка базується на

властивостях мультимасштабних механічних систем та контролюється їхніми параметрами.

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

## 1 ДОСЛІДЖЕННЯ СТРУКТУРОУТВОРЕНЬ В ГРАНУЛЬОВАНИХ МАТЕРІАЛАХ

Гранульовані матеріали є конгломераціями великого числа дискретних частинок (гранул) з дисперсією у розмірах від декількох мікрометрів до декількох метрів, які взаємодіють між собою головним чином внаслідок міжчастинкових контактів. В більшості випадків, такі контактні взаємодії нелінійні. До природи г.м. відноситься також те, що контактні взаємодії між гранулами у загальному випадку дисипативні, тому навіть у стані спокою, такі системи є нерівноважними, і фактично знаходяться у метастабільних станах. Основним масштабом енергії в г.м. виступає їх енергія в зовнішньому (гравітаційному) полі, яке, разом з граничними умовами, зрештою визначає також і форму г.м. При припиненні підведення енергії ззовні кінетична енергія гранул майже миттєво перетворюється на нуль і таким чином гранульовані матеріали є нетермодинамічними системами.

Перебуваючи дисипативною дискретною мікро-механічною динамічною системою при створенні спеціальних умов, г.м. проявляють властивості, як типові для агрегатних станів конденсованої матерії : газів, рідин і твердих тіл, так і принципово відмінні від них. Така багатоскладова поведінка г.м. робить завдання опису їх властивостей з точки зору послідовної теорії дуже складною, і, не дивлячись на окремі вдалі моделі, далекою від свого остаточного розв'язку задачею [1-4].

Як наслідок, до сьогоднішнього дня промислове маніпулювання г.м. (а саме, його теоретичне обґрунтування) головним чином засноване на узагальненні емпіричних відомостей про їх поведінку в різних зовнішніх умовах.

Візьмемо, скажімо, відому наочну властивість г.м. - їх компактизацію, яка полягає в зменшенні об'єму, який займає система після обробки полем зовнішніх механічних збурень. Очевидно, що вже розуміння фізичної

природи однієї цієї властивості г.м. дозволило б якісно істотно поліпшити ефективність їх промислового застосування і зробити помітний крок в розвитку теорії. Треба зауважити, що дослідження деяких інших об'єктів м'якої матерії (до одної з форм якої і належать г.м.), скажімо, запорошеної плазми, яка принципово відрізняється від вищеописаних гранульованих матеріалів характером міжчастинкової взаємодії, дозволило встановити існування структурного впорядкування [5], ізоморфного тому, який спостерігається у гранульованих матеріалах.

Локальна структура конденсованої речовини суттєво впливає на її поведінку у макромасштабі, зокрема на структуроутворення, фазові перетворення та динаміку. Кінетика структурних перетворень зазвичай ефективно розвивається у т.з. мезо-масштабі. Мається на увазі масштаб, на якому починається формування або руйнація дефектів, доменів іншої фази і т.ін. Тому параметризація структури у мезомасштабі (у визначеному вище сенсі) є суттєвим елементом на шляху моделювання структури та динаміки об'єктів конденсованої речовини. У гранульованих матеріалах, ми маємо унікальну можливість спостерігати структурні зміни, які відбуваються під впливом зовнішніх збурень, майже неозброєним оком. Моделювання структури та переходів між різними типами структур вимагає мультимасштабного аналізу.

У експериментах із магнітними рідинами, які знаходяться під дією зовнішніх магнітного поля та поля віброструсів [6] спостерігається структуризація крапель із симетрією гексагонального типу. В [7] повідомляється про спостереження подібних впорядкованих структур, які складаються із крапель води, лівітуючих над підігрітою водною поверхнею, доведеною до температури кипіння. Виявлені схожі риси у структуроутворенні у мезомасштабі таких різних за фізичною природою систем може бути наслідком дії (за певних умов) ізоморфних механізмів (скажімо ефекту виключеного об'єму). Нижче ми проаналізуємо деякі

аналітичні методи параметризації структури та наслідки їх застосувань до 2D г.м. та запорошеної плазми.

### **1.1 Структура 2D гранульованих матеріалів та запорошеної плазми**

Дослідження 2D об'єктів м'якої матерії у мезо- та макромаштабах (гранул, порошинок, твердих дисків, крапель води та магнітної рідини) дозволили встановити наявність в їх структурі станів, з точки зору характеру розподілу частинок в них, як типових, так і відмінних від регулярних агрегатних станів: газів, рідин і твердих тіл.

Переходи між станами із різним (за симетрією) характером локального впорядкування здійснюються за різними сценаріями, які залежать від початкового стану (точніше, від початкової компактизації у випадку г.м.), розмірності, присутності (та інтенсивності) дисипативних втрат.

У ході проведеного експериментального дослідження мікромеханічна система, яка складалася з твердих дисків, розташованих на горизонтальній площині, збурювалася шляхом послідовних струсів у горизонтальній площині. Діаметр дисків складає 17 мм, прямокутна кювета, яка містила систему, має лінійні розміри  $16,5 \times 20$  см. Початковий розподіл дисків мав довільний характер. Після припинення підводу енергії ззовні система зупинялася і здійснювалося її фотографування. На рисунку 1.1 наведені дані, отримані у вищеписаних спостереженнях. На них ми вочевидь спостерігаємо формування кластерів із гексагональною симетрією у розташуванні гранул.

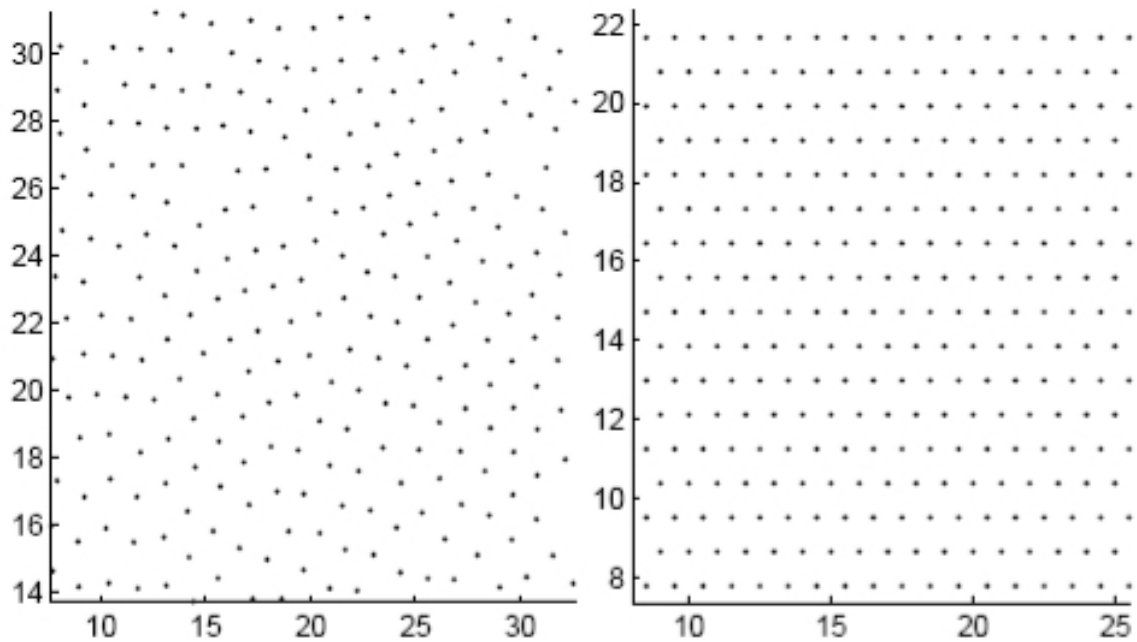


Рисунок 1.1 – структури, які спостерігалися у двовимірній системі твердих дисків, яка збурювалася шляхом зовнішніх горизонтальних струсів (оцифровані, довільно виділені, стробоскопічні знімки системи). Ліворуч - початковий невпорядкований стан. Праворуч - стан із гексагональним упорядкуванням.

Цікаво відмітити, що аналогічне структуроутворення спостерігалось у принципово відмінних від гранульованих матеріалів системах, зокрема - у запорошеній плазмі.

На рисунку 1.2 зображені аналогічні структури, які спостерігалися в експерименті по дослідженню структуроутворень системи, яка складається з порошків у запорошеній плазмі.

Аналіз формування різних типів локальної структури та її розвиток у мезо- та макромасштабах зручно здійснювати за допомогою методу Вороного. Побудова фігур Вороного полягає у виділенні простору навколо центру частинки, в якому знаходяться усі точки, що є найближчими до цього центру [8]. На рисунках 1.3 та 1.4 представлені фігури Вороного, які відповідають виділеним типам структур у 2D гранульованих матеріалах та запорошеній плазмі наведених на рисунку 1.1 та рисунку 1.2.

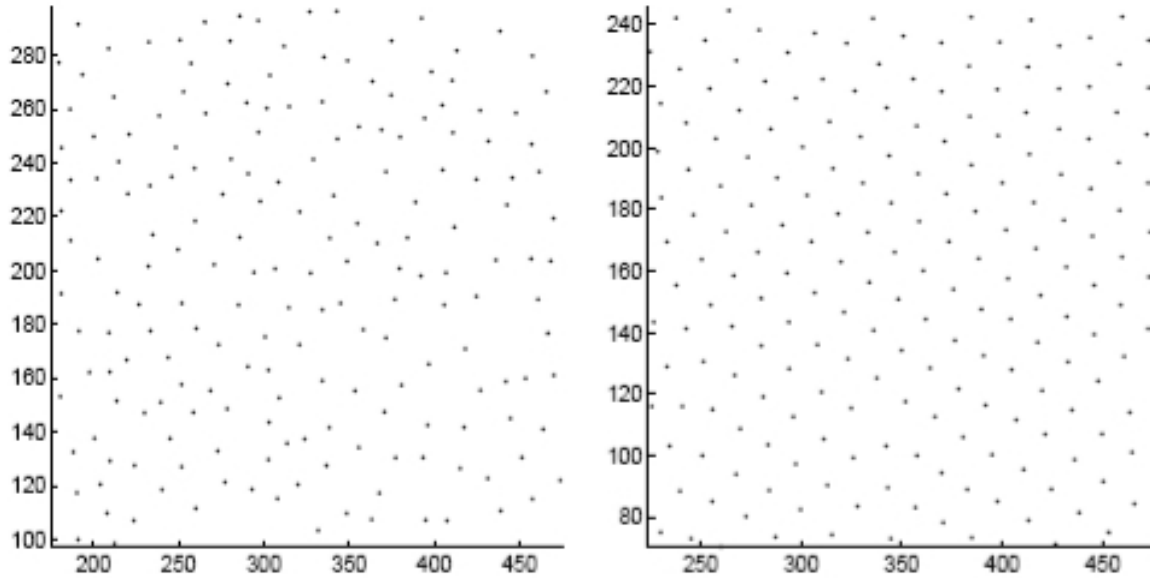


Рисунок 1.2 – Структури, які спостерігалися у 2D запыреної плазмі (за даними [5]). Ліворуч - початковий невпорядкований стан. Праворуч - структура, в якій переважають домени із гексагональною симетрією.

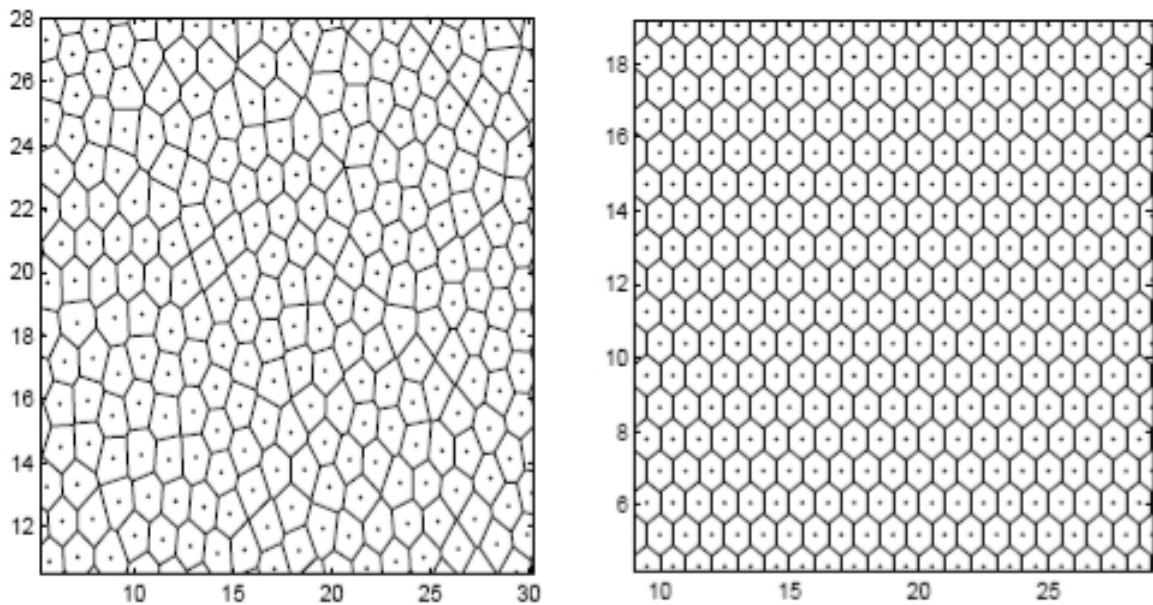


Рисунок 1.3 – Фігури Вороного для структур, які спостерігалися у двовимірній системі твердих дисків, яка збурювалася шляхом зовнішніх горизонтальних струсів. Ліворуч - початковий невпорядкований стан. Праворуч - діаграми, які відповідають структурі із гексагональною симетрією.

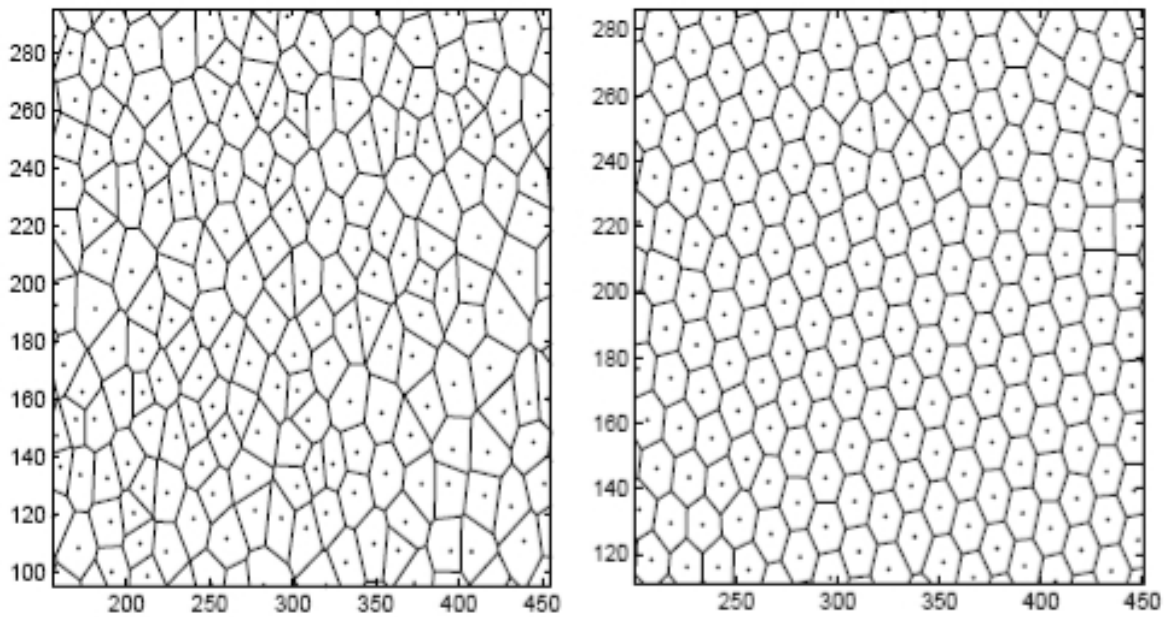


Рисунок 1.4 – Фігури Вороного для структур, які спостерігалися у 2D запоорошеній плазмі (за даними [5]). Ліворуч - початковий неупорядкований стан. Праворуч - структура, в якій переважають домени із гексагональною симетрією.

Аналіз даних, приведених на рисунках 1.1–1.4 свідчить про те, що в обох, різних по фізичній природі системах, структуроутворення в мезомасштабі має певні схожі риси. Так, скажімо, в обох випадках спостерігається можливість формування ближнього порядку в локальній структурі. При цьому, створенню більш симетричних структур відповідає вища симетрія фігур Вороного. Діаграми Вороного у разі кристалізації домішкових частинок в запоорошеній плазмі, а також частинок-гранул в гранульованій системі показують переважно гексагональну симетрію у мезомасштабі із кількісно різними периметричними параметрами.

Наочний опис структуризації може бути здійснено за допомогою розрахунків функції  $g(r)$  [9]. Для розглянутих систем розрахунок функції  $g(r)$  наведено на рисунку 1.5.



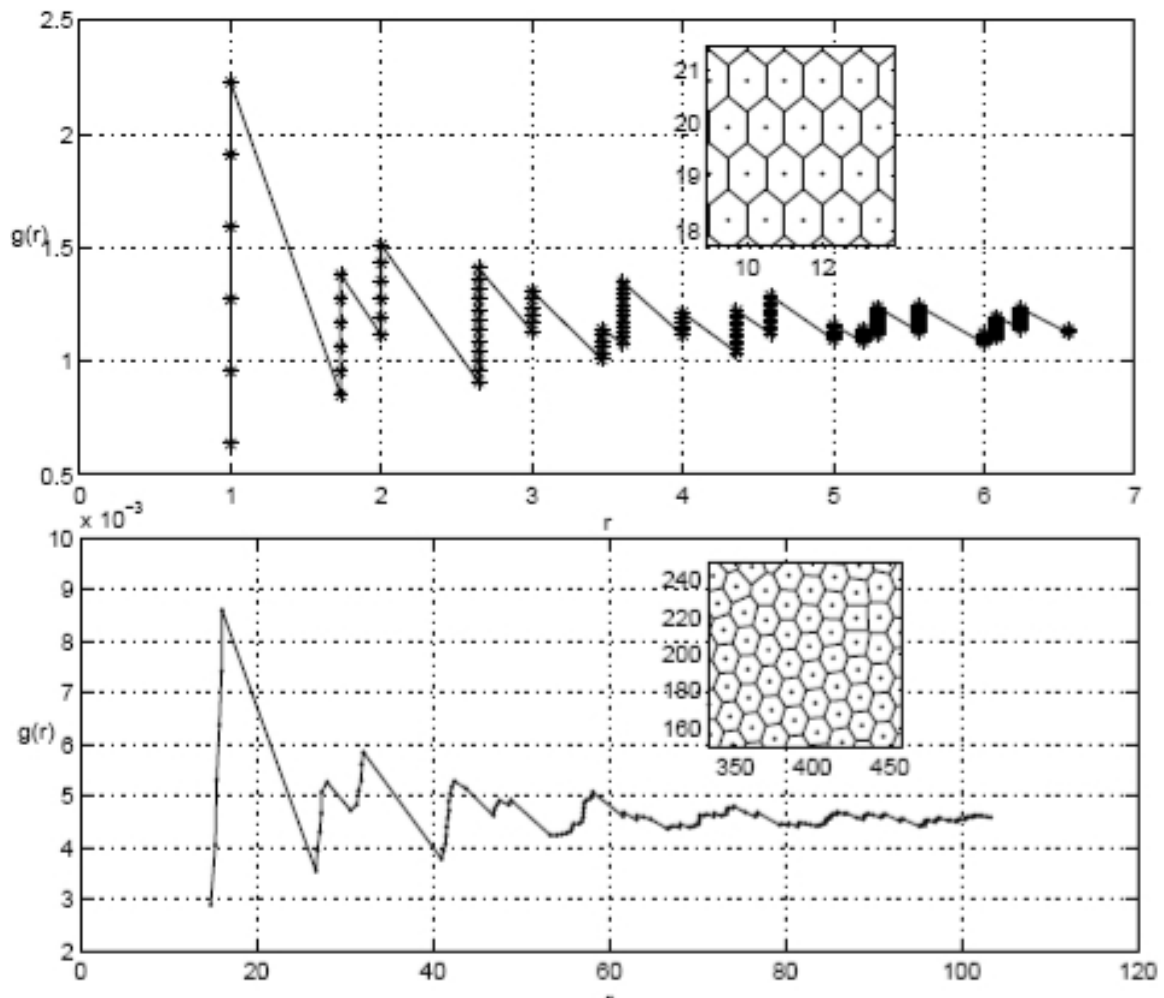


Рисунок 1.5 – Функція  $g(r)$  для гранульованих матеріалів (зверху) та запошеної плазми (знизу). На вставках приведені фігури Вороного для відповідних структур.

Аналіз даних приведених на рисунку 1.5 свідчить про те, що розподіл густини у досліджуваних системах відповідає формуванню в них оболонкової структури.

Розглянемо наприклад двовимірне впакування твердих дисків на площині (на рисунку 1.6 чорними точками показані положення центрів дисків). Виділимо частинку, яку будемо вважати за таку, що повністю заповнює умовну першу оболонку. Окреслимо навколо неї групу найближчих частинок-сусідів, які, будемо вважати, створюють другу структурну оболонку. На рисунку 1.6 зображенні стани, які спостерігаються у системі двохвимірних дисків у мезомасштабі.

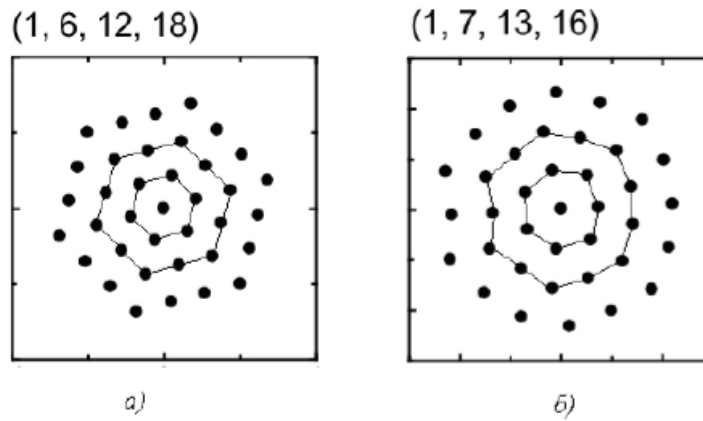


Рисунок 1.6 – Типи локальної структури, які спостерігаються у 2D системах твердих дисків.

Можна бачити, що у випадку наведеного на рисунку 1.6а типу впорядкованої структури навколо центральної частинки у найближчому околі знаходиться 6 частинок-сусідів, які можна інтерпретувати як другу оболонку. У наступній, 3-ій оболонці, знаходиться 12 частинок. На шляху такого оболонкового підходу, структура, яка зображена на рисунку 1.6а може бути класифікована як (1;6;12), а числа у дужках показують ступені заповнення відповідних оболонок. Зауважимо, що розглянута структура була кристалічно впорядкованою. Структура, зображена на рисунку 6б, відповідно, має бути класифікована, як (1;7;13). Таким чином структурні зміни типу впорядкування-розупорядкування та переходи між впорядкованими станами із різною симетрією у розташуванні частинок можна також описати в термінах моделі оболонок та притаманних їй флуктуацій чисел заповнення. При цьому повністю заповненим оболонкам відповідають найбільш симетризовані стани. Відповідна фазова діаграма, яка відповідає оболонковій моделі, може бути побудована у термінах параметру впорядкування  $\phi$  який, наприклад, визначається за допомогою чисел заповнення оболонок:

$$\phi = \frac{n_{id} - n_i}{n_{id} + n_i},$$

де  $n_{id}$  - кількість частинок у оболонці системи у симетризованому стані;

$n_i$  - кількість частинок у оболонці в поточному стані.

Кількісні зміни у розподілі площ фігур Вороного, які відбуваються внаслідок змін у структурі в мезомасштабі, можуть бути також описані за допомогою пробної функції  $N(s)$  наступного виду

$$N(s) = \frac{b^a}{\Gamma(a)} s^{a-1} \exp(-bs), \quad (1.1)$$

де  $s = \frac{S_V}{S_h}$  - нормоване значення площі фігури Вороного;

$S_V$  - площа фігури Вороного для конкретної частинки у спостережуваному стані;

$S_h$  - площа фігури Вороного у випадку системи із гексагональним впорядкуванням.

Параметризація даних спостережень за допомогою функції (1.1) зводиться до визначення відповідних параметрів  $a$  та  $b$ . Поведінка функції розподілу (1.1) у випадку систем із різним значенням впакувальної фракції відображено на рисунку 1.7.

Із приведених на рисунку 1.7 результатів випливає, що із зростанням впакувальної фракції  $\eta$  відбувається зменшення дисперсії відповідного розподілу (1.1). На рисунку 1.8 наведений графік дисперсії розподілу  $D$  в залежності від впакувальної фракції  $\eta$ .

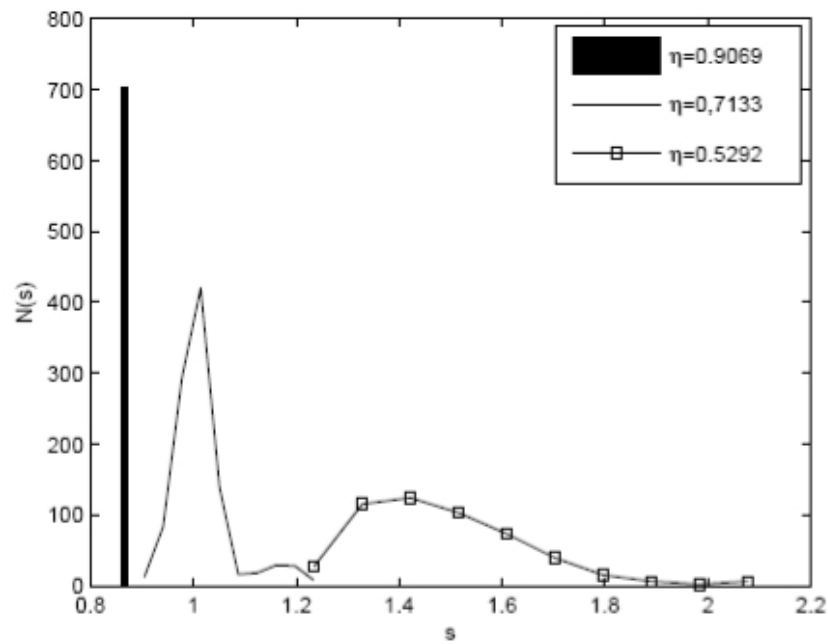


Рисунок 1.7 – Характеристична функція розподілу  $N(s)$  для 2D гранульованих матеріалів із різними значеннями впакувальної фракції.

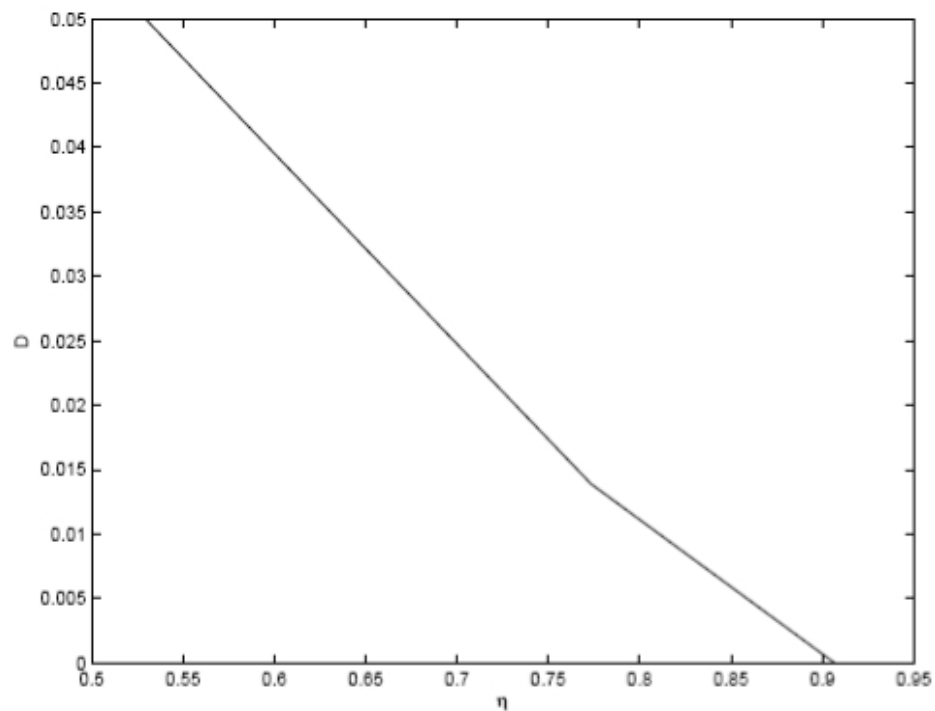


Рисунок 1.8 – Дисперсії розподілу  $N(s)$  в залежності від впакувальної фракції  $\eta$ .

Характерно, що вищеописані риси характеристичної функції, є загальними для околу станів, в яких відбувається перехід до впорядкованого стану для (суттєво різних за фізичною природою) досліджених систем.

## **1.2 Побудови Вороного та класична теорія моментів у застосуванні до параметризації структури гранульованих матеріалів**

Гранульовані матеріали (ГМ) являють собою ансамбль великої кількості макроскопічних дискретних твердих частинок із виключно відштовхувальною взаємодією. Вони дуже широко представлені як у природі так і у техносфері. На відміну від звичних агрегатних станів речовини, структуру ГМ (особливо у 2D просторі) можна спостерігати практично неозброєним оком. Тому їх можна вважати ідеальною лабораторією для дослідження широкого спектру явищ які відбуваються внаслідок впливу зовнішніх збурень, граничних умов та таке інше. Специфічність ефектів, які спостерігаються у ГМ з урахуванням їх широкої розповсюдженості дозволяє розглядати останні навіть як окремий стан речовини [1-4].

Прямий опис локальної структури та її перетворень – одне із ключових питань у фізиці ГМ. Інтерес до цього питання, головним чином викликаний завдяки багатому різноманіттю макроскопічних властивостей, які є наслідком саме специфічності локальної та мезоскопічної структури ГМ. Експериментальні та теоретичні дослідження свідчать про наявність у локальній структурі ГМ ефектів впорядкування (із навіть симетричною структурою!), як у бімодальних так і у моно компонентних системах [10-11]. Відмітимо до того ж, що локальне впорядкування грає визначальну роль при побудові фізичних моделей таких, скажімо явищ, як транспорт енергії та імпульсу, розсіяння випромінювання, та інші. Тому побудова адекватної до природи ГМ міри стану є фундаментальним кроком у їх теоретичному описі.

Зауважимо, що суттєвим ускладненням є неможливість використання методів статистичної механіки до ГМ (системи не є термодинамічними!). З огляду на вказану обставину, домінують роль у описі структури та динаміки ГМ мають відігравати методи, які враховують їх атермічність. Мова може вестись, скажімо, про геометричні (топологічні) та імовірнісні методи. Вони

не потребують використання таких параметрів, як температура та міжчастинковий потенціал, і, з цієї точки зору, є найбільш раціональними та послідовними у застосуванні до ГМ.

Опис структурних перетворень проводиться у просторі побудов Вороного. Задля апроксимації розподілів площ фігур Вороного у випадку експериментально безпосередньо спостережуваних станів використовується формула Неванлінни із функціонального аналізу, яка будується із урахуванням теорії ортогональних поліномів Чебишева та класичної теорії моментів.

Метод діаграм Вороного (ДВ) [12] завдяки своїй, суто геометричній природі, дозволяє описувати структуру досить широкого класу систем. Для побудови ДВ для даного набору точок необхідно навколо кожної точки системи виділити простір, в якому знаходяться усі точки, які є найближчими до неї, з урахуванням цієї умови для усіх інших точок системи. Таким чином кожна точка (центр частинки) асоціюється із власним характерним об'ємом (площею). Важливо зауважити, що характер взаємодії проміж частинками не впливає на процедуру розбиття. Більше того, об'єми фігур є адитивними і повністю покривають об'єм системи. Це є важливим у застосуванні до ГМ, перш за все, при розв'язку задач про покриття (мінімізації вільного об'єму).

Експериментальні дослідження ГМ дозволяють отримати інформацію про розподіл центрів частинок у певний момент часу і, таким чином, параметризувати структуру за допомогою методу Вороного. Дослідження структури за допомогою методу Вороного базується на аналітичному аналізі розподілів площ ДВ усіх частинок системи. Очевидно, такий підхід дозволяє отримати інформацію не лише про порядок (симетрію) чи безлад у системі, але й про розподіл вільного об'єму та його зміни завдяки зовнішнім збуренням. З огляду на природу системи, вільний об'єм виступає головним керуючим параметром у ГМ. Фото станів, які спостерігалися у експерименті [13] та відповідні до них побудови діаграм Вороного наведено на рисунках 1.9-1.10.

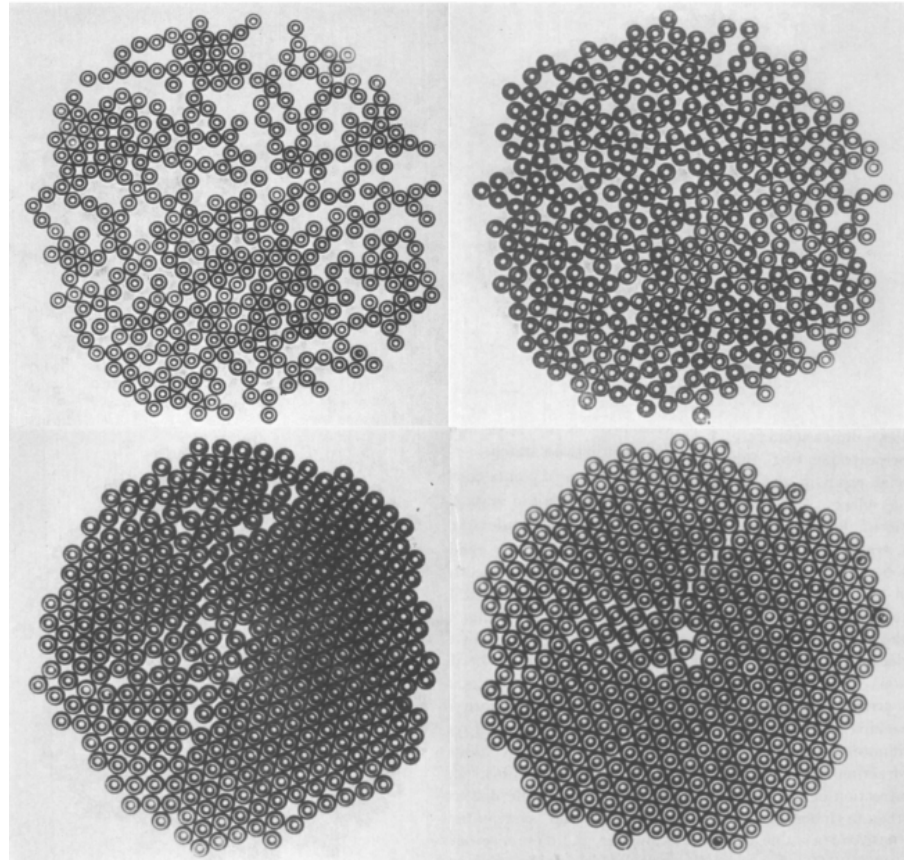


Рисунок 1.9 – Структури, які спостерігаються у гранульованих матеріалах під впливом зовнішніх збурень [13].

На рисунку 1.10 представлені відповідні побудови Вороного для структур приведених на рисунку 1.9. Метод Вороного дозволяє окрім оцінки ступеня ущільнення судити про симетризацію у розподілі частинок.

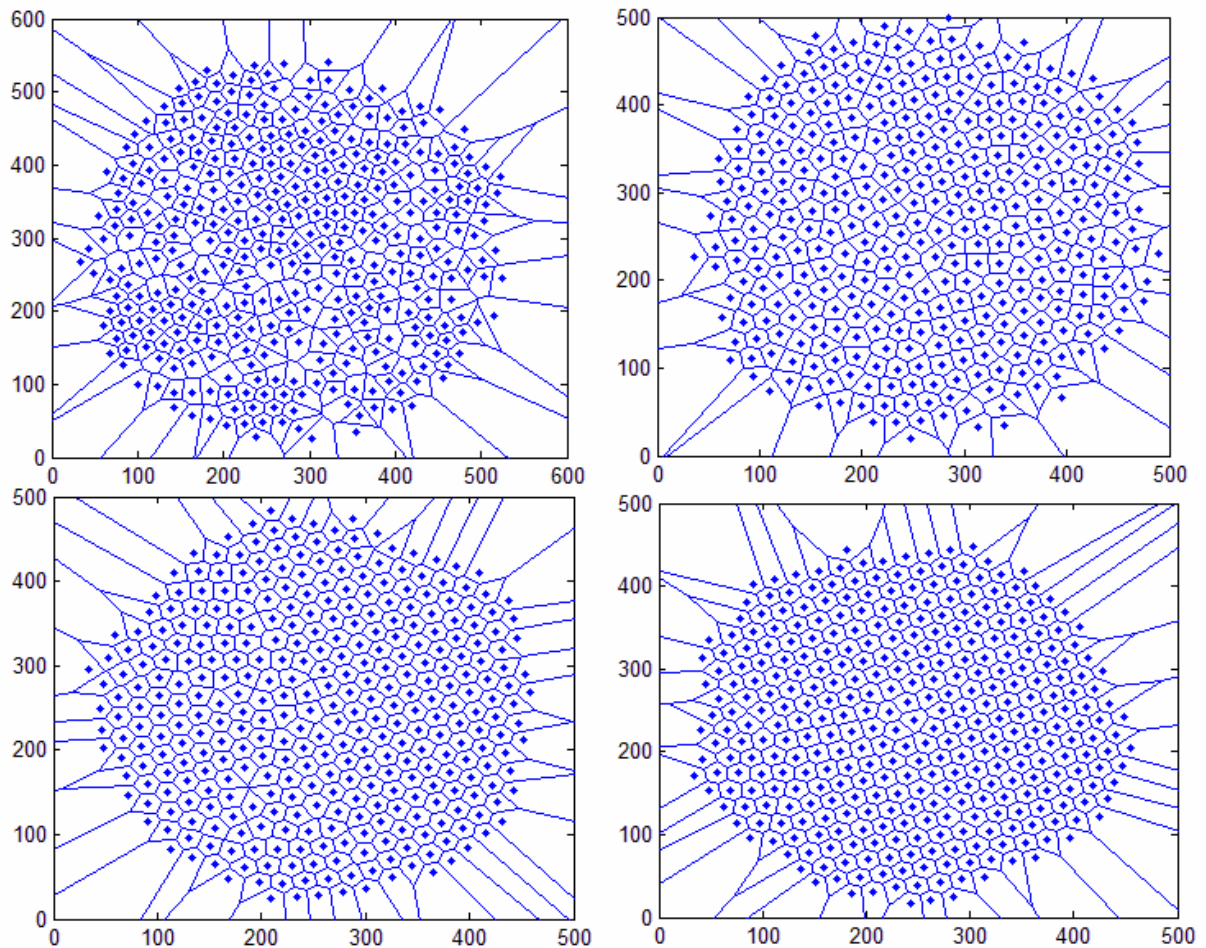


Рисунок 1.10 – Діаграми Вороного для структур які спостерігаються у гранульованих системах під впливом зовнішніх збурень.

Рисунок 1.10 наочно демонструє одну із фундаментальних властивостей ГМ - здатність впорядковуватися під впливом зовнішніх збурень. Лише з зовнішнього аналізу діаграм Вороного випливає, що під впливом збурень ГМ формують домени (патерни) із майже виключно гексагональною симетрією. На рисунку 1.11 наведені розподіли площ фігур Вороного для станів, які спостерігалися у експерименті [13]. Проаналізуємо тепер поведінку форми лінії розподілу величин площ фігур Вороного при зміні ступеня впорядкованості (симетризації) та зменшення величини вільного об'єму у системі. Ці процеси супроводжуються збільшенням пакувальної фракції  $\eta$ .



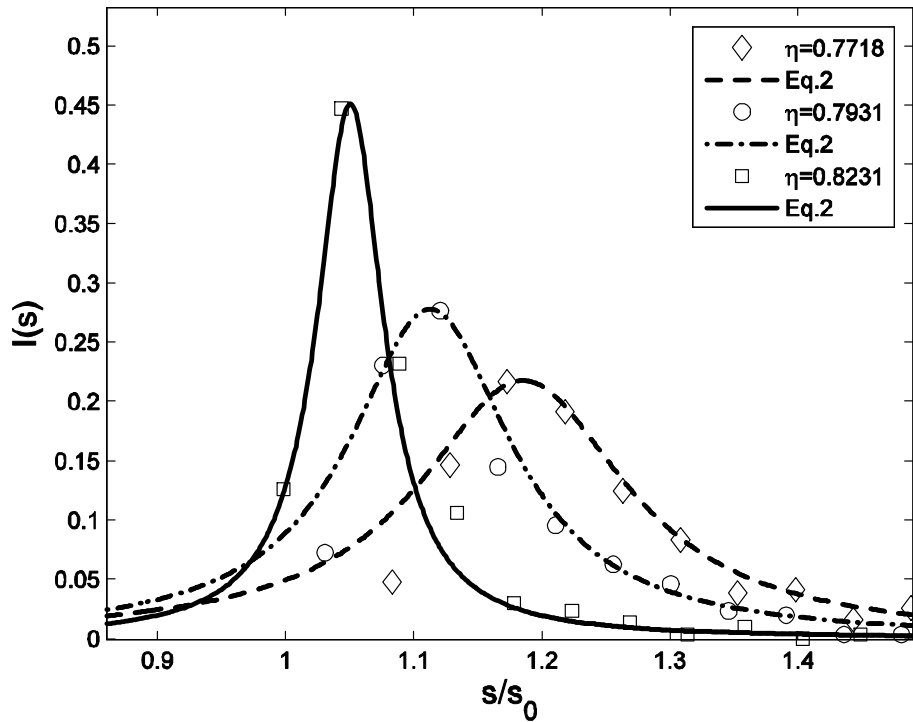


Рисунок 1.11 – Параметризація розподілів площ фігур Вороного для станів, які спостерігалися у експерименті. Суцільні криві – експериментальні дані [13] для системи твердих дисків на площині; пунктиром показані значення отримані за допомогою формули Неванліни (1.3).

Досліджуючи зміни у формі лінії розподілу із збільшенням пакувальної фракції бачимо, що:

- із збільшенням значень пакувальної фракції напівширина розподілу, тобто його дисперсія (другий момент) зростає;
- середнє значення нормованої площі фігури Вороного (перший момент розподілу) зсувається вбік характерного значення площі фігури Вороного для систем із гексагональним впорядкуванням (нормування усіх площ, які отримано при аналізі експериментальних даних, відбувалося на значення площі фігури Вороного  $s_0$  для систем із гексагональною симетрією у розташуванні дисків);
- із збільшенням пакувальної фракції амплітуда розподілу збільшується;

Загальноприйнятим підходом при дослідженні структури ГМ за допомогою фігур Вороного є використання аналітичного виразу для характеристичної функції розподілу у вигляді гама розподілу [14]. Цей підхід дозволяє ефективно описати експериментальні дані щодо спостережуваних структур в околі так званих «стиснутих» станів, але його використання потребує більш строгої аргументації, оскільки він базується на використанні принципів статистичної механіки [15], які, строго кажучи, не можуть бути застосовані до такого класу систем як ГМ. Ми пропонуємо для побудови апроксимуючого виразу використовувати методи теорії моментів. Їх застосування потребує знання лише феноменологічної інформації, яка є безпосередньо отримуваною.

Застосуємо методи класичної теорії моментів для опису експериментальних даних. По-перше, пронормуємо перші моменти експериментального розподілу на нульовий

$$m_j(s) = \frac{M_j(s)}{M_0(s)}, \quad (1.2)$$

де  $M_j(s) = \int s^j I(s) ds$  -  $j$ -ий момент розподілу величини  $s$  (у нашому випадку це нормована площа фігур Вороного).

Скористаємося відомим апроксимаційним співвідношенням Неванлінни [16] у термінах моментів експериментальних розподілів:

$$I(s) = \frac{M_0 E_2^4 \delta}{\pi} \left\{ \left[ E_2^2 s^2 + (E_2^2 + E_1^2) s E_1 - (E_2^2 + E_1^2)^2 + u(s + E_1) \right]^2 + q^2 (s + E_1)^2 \right\}^{-1}. \quad (1.3)$$

де  $E_1 = m_1$  та  $E_2 = \sqrt{m_2 - m_1^2}$  це перший та другий нормовані моменти експериментальних розподілів відповідно.

Результати застосування виразу (1.3) із відповідною процедурою нормування наведено на рисунку 1.11.

У параграфі для теоретичного опису структури гранульованих матеріалів у просторі фігур Вороного використовується формула Неванлінни із функціонального аналізу, яка отримана із урахуванням теорії ортогональних поліномів Чебишева та класичної теорії моментів. Запропонований підхід дозволяє теоретично описати дані безпосередніх спостережень структури ГМ у мікро-, мезо-, та макромасштабах із використанням лише перших двох моментів розподілу керуючих параметрів побудов Вороного (які визначаються безпосередньо з експериментальних даних). Порівняний аналіз із альтернативними підходами, зокрема із моделлю стретч-Гамма функції показує переваги запропонованого підходу, який не потребує використання додаткових припущень щодо застосування концепцій статистичної механіки для опису ГМ, які за своєю очевидною природою є мікромеханічними системами.

### **1.3 Трансляційний та орієнтаційний параметри впорядкування. Анізотропія гранульованих систем**

Окремий інтерес дослідження структури матеріалів, які нас цікавлять, складає їхня організація у глобальному (макро) масштабі. Так в роботі [17], структурний аналіз здійснюється за допомогою дискретної множини точок  $\{G_i\} \equiv \{\vec{r}^{(\alpha)}\}$  ( $\alpha = 0, 1, 2, \dots$ ) із координатами  $\vec{r}_\alpha$  (координати центрів частинок (гранул), що оточують центральну частинку, яка у свою чергу, знаходиться в початку обраної системи координат).

На цьому шляху геометричну структуру  $\{G_\alpha\}$  можна визначити порівнянням з альтернативною множиною точок  $\{\Gamma_\alpha\}$ . Множина  $\{\Gamma_\alpha\}$  має бути наперед детермінованою і являти собою зразок ідеальної

(впорядкованої) структури (скажімо, гранецентрованої кубічної, гексагональної щільної ґратки або ін.). Відомості про  $\{\Gamma_\alpha\}$  можна одержати з альтернативних джерел інформації про локальну будову обраних зразків.

Зауважимо, що, наприклад, у випадку типових рідин вибір  $\{\Gamma_\alpha\}$  є суттєво обмеженим внаслідок недостатньо повної інформації про їхню локальну структуру. Щодо г.м., їх структуру достатньо легко можна спостерігати навіть неозброєним оком.

У термінах запропонованого підходу, будь-яка частина системи може бути кількісно описана, як відхилення від обраної «ідеальної», впорядкованої, детермінованої множини  $\{\Gamma_\alpha\}$ . Іншими словами, ми можемо дивитися на локальну структуру, як на збуджений стан попередньо обраного «ідеального» впорядкованого зразка.

Формальний опис змін у локальній структурі можна здійснити шляхом введення відповідного локального параметра впорядкування та побудові фазових діаграм для нього.

Повертаючись до набору векторів  $\{\vec{r}_\alpha\}$ , які завдають конфігурації частинок у групі, обмежимо її розмір масштабом  $r_0$ . Роль  $r_0$  можуть відігравати, скажімо, радіуси координаційних сфер. Формально, множина  $\{\vec{r}_\alpha\}$  - це вже параметр, який описує структурне впорядкування. Для газів параметр  $\{\vec{r}_\alpha\}$  сильно флюктує. Навпаки, для кристалів він майже не змінюється.

Зазвичай вважають, що флюктуації  $\{\vec{r}_\alpha\}$ , які у випадку г.м. виникають внаслідок зовнішніх збурень, достатньо малі (мова тут іде, безумовно, про інші, у порівнянні до молекулярних, порядки величин малості). Додамо, що флюктуації є наслідком як зміни довжини, так і відносних кутів між векторами множини  $\{\vec{r}_\alpha\}$ .

Будемо розрізняти орієнтаційний та трансляційний параметри порядку. Орієнтаційний параметр порядку можна визначати так

$$g_2 = \frac{1}{N_n} \sum_1^{N_n} \exp(iN_n \varphi_n), \quad (1.4)$$

де  $N_n$  - кількість частинок у n-ій оболонці;

$\varphi_n$  - відносний кут між радіус-векторами, які завдають положення частинок виділеної оболонки і частинкою, навколо якої вона будується.

Трансляційний параметр порядку запишемо у наступному вигляді

$$u_2^2 = \frac{1}{N} \sum_i \left[ \langle |\vec{r}_i|^2 \rangle - \langle |\vec{r}_i| \rangle^2 \right], \quad (1.5)$$

де  $N$  - кількість частинок у оболонці;

$\langle |\vec{r}_i|^2 \rangle$  - середнє значення квадрату відстані проміж центральною частинкою та і-тим сусідом в оболонці;

$\langle |\vec{r}_i| \rangle^2$  - квадрат середньої відстані проміж центральною частинкою і частинками, які знаходяться у оболонці, для якої проводиться вимір.

Класифікація типів локального впорядкування в термінах параметрів (1.4) та (1.5) детально проведена у [17].

На рисунках 1.12-1.13 приведені результати розрахунків параметрів впорядкування за формулами (1.4) та (1.5) для гранульованих матеріалів та для запорошеної плазми, відповідно.

Підсумовуючи отримані результати, приходимо до висновку, що обидві системи, які досліджуються, перебувають у анізотропних станах з відмінними від нуля значеннями орієнтаційного параметру впорядкування. Саме анізотропний характер вищезгаданих систем та їх станів ускладнює їх опис з точки зору послідовного теоретичного підходу. Зауважимо, що пошук анізотропної фази у рідинах історично відбувався шляхом досить трудоємких досліджень [18]. У випадку гранульованих систем та закристалізованої запорошеної плазми, як бачимо, ми маємо справу із системами, які

перебувають у анізотропному стані вже у природних умовах. Остання обставина дозволяє прогнозувати перспективи їхнього застосування у задачах транспортування механічних збуджень, хвиль, енергії.

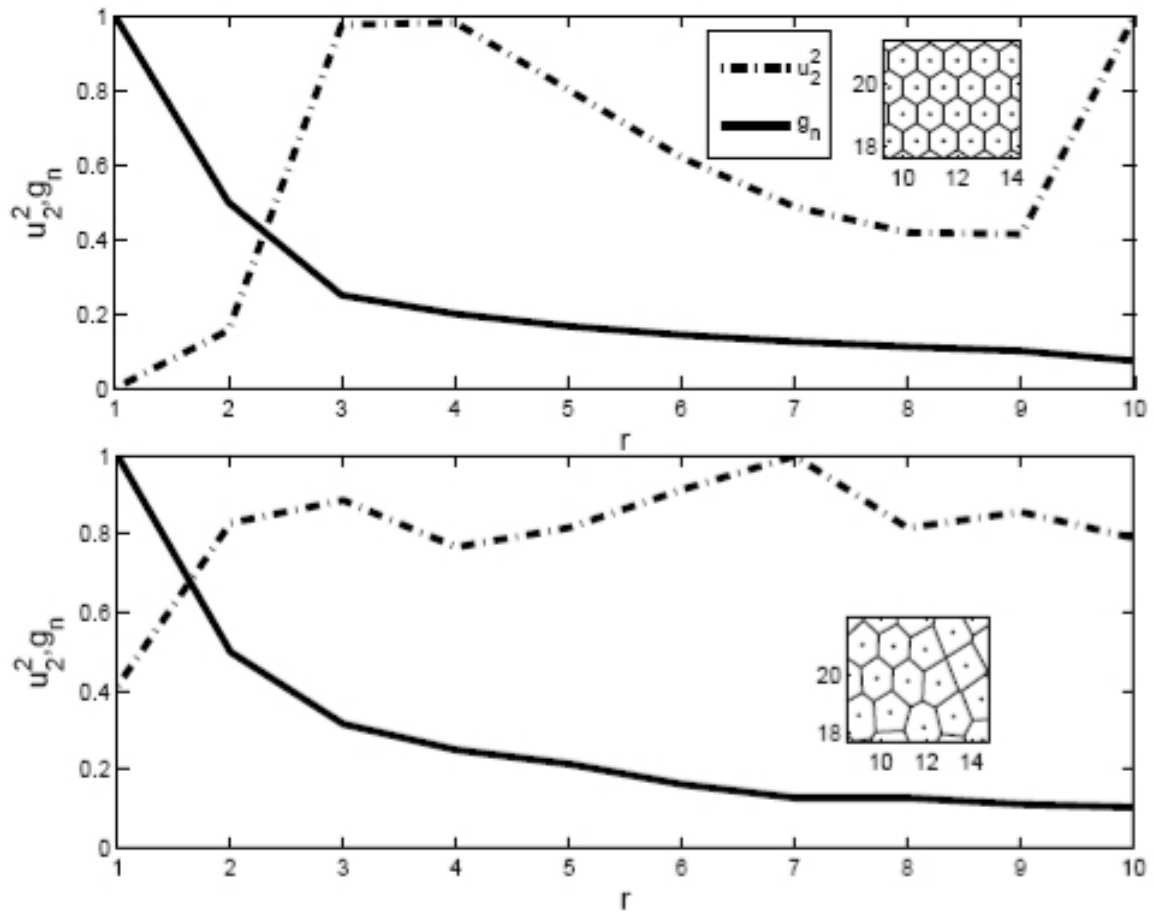


Рисунок 1.12 – Розрахунок параметрів впорядкування (1.4) та (1.5) для гранульованих матеріалів. Результати чисельної обробки даних наведених на рисунку 1.1.

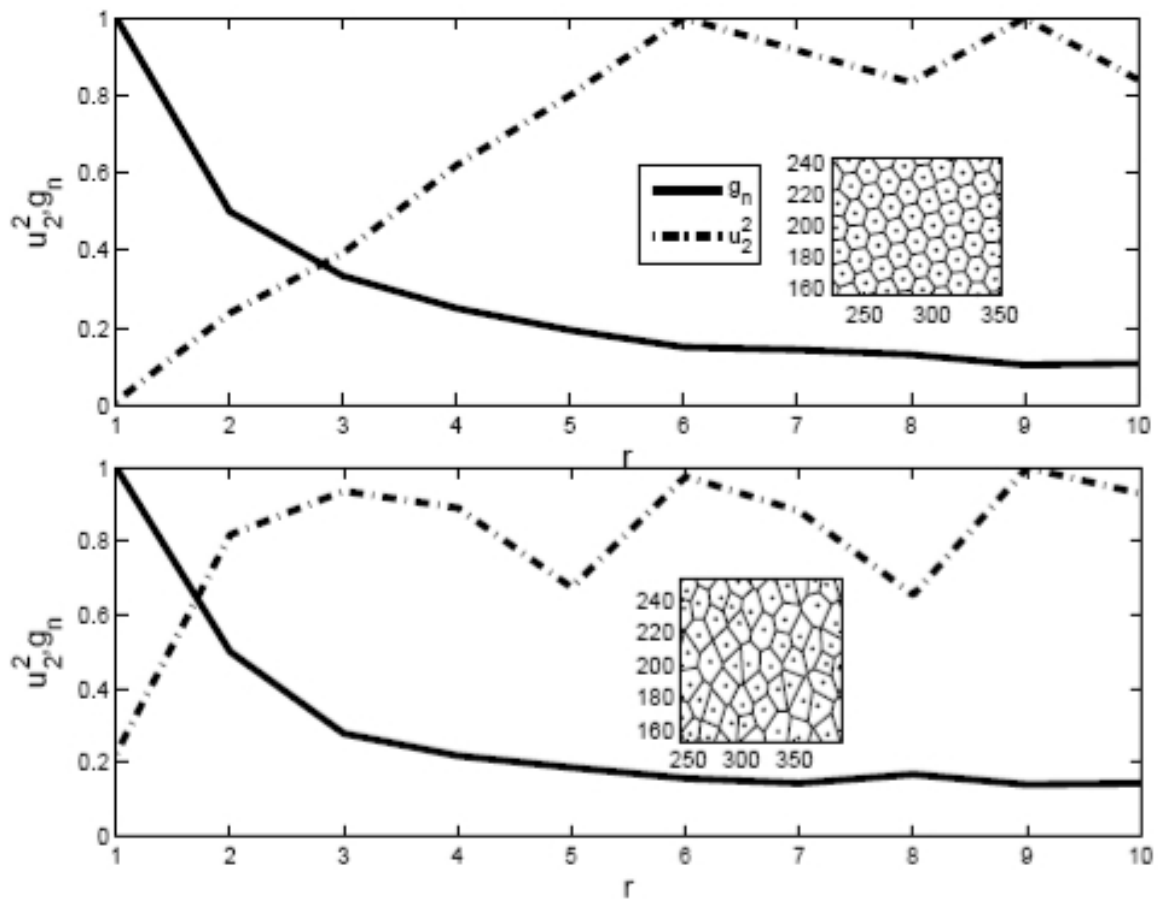


Рисунок 1.13 – Розрахунок параметрів впорядкування (1.4) та (1.5) для запорошеної плазми. Результати чисельної обробки даних наведених на рисунку 1.2.

На шляху вивчення локальної структури г.м. та запорошеної плазми у мезомасштабі, яка здійснюється за допомогою аналітичних методів її параметризації, показано, що у різних по фізичній природі об'єктах м'якої матерії, структуроутворення показує певні схожі риси. А саме, у всіх випадках спостерігається формування як ближнього, так і далекодійного впорядкування.

Оскільки формування симетричних структур в упаковках супроводжується симетризацією відповідних фігур Вороного, вказано на можливість вивчення структурних змін за допомогою модельних характеристичних функцій.

За допомогою вивчення поведінки трансляційного та орієнтаційного параметрів впорядкування показано, що гранульовані матеріали, запорошена плазма, а також деякі інші об'єкти м'якої матерії є прикладами систем, які природно перебувають у анізотропних станах.

Головні результати досліджень за темою Розділу 1 опубліковано у вигляді статей у фахових виданнях, за їхнім змістом зроблені доповіді на семінарах та конференціях, вони також частково увійшли до тематики та змісту курсових та конкурсних робіт студентів спеціалізації кафедри, а також до матеріалів двох кандидатських дисертацій, які виконані на кафедрі та готуються до завершення.



## 2 ДИНАМІКА ЕНЕРГІЇ / ІМПУЛЬСУ В МОДЕЛЯХ НИЗЬКОВИМІРНИХ ДИСКРЕТНИХ МІКРОМЕХАНІЧНИХ СИСТЕМ

### 2.1 Точні розв'язки задачі про перенесення імпульсу у неоднорідному одновимірному гранульованому ланцюжку

**Вступ** Розповсюдження хвиль в нелінійних системах вивчається протягом тривалого часу і результати досліджень детально висвітлені у чисельних літературних джерелах (див., наприклад, [19,20]). Останнім часом інтерес до дослідження руху хвиль в дискретних мікро-механічних системах поширився у зв'язку з новими результатами, отриманими в експериментах з гранульованими ланцюжками. У серії робіт рух імпульсу у таких системах вивчався експериментально, чисельно і теоретично [21-27]. Так, наприклад, у [23] методом чисельного моделювання показано, що динаміка хвильового руху імпульсу який рухається уздовж гранульованого ланцюжка з нелінійними контактами у зовнішньому гравітаційному полі описується розв'язками типу дисперсійних хвиль (нормальні моди). Існування розв'язків несолітонного типу з амплітудою, яка зменшується за ступеневим законом, суттєво доповнює відомі нелінійні хвильові механізми передачі енергії солітонного типу [23,28,29]. У нашій роботі у наближенні слабкої нелінійності знайдено нові (у порівнянні із раніше відомими) класи точних розв'язків рівняння руху механічного імпульсу у вертикальному гранульованому ланцюжку, які зокрема, визначаються в термінах функцій Бесселя першого роду, а також, у суцільній границі, функціями типу бігучої хвилі із амплітудами які зменшується за ступеневим законом. Знайдені типи розв'язків відкривають перспективи відповідних нових експериментів по оптимізації передачі енергії (імпульсу) в дискретних слабо-нелінійних, низьковимірних гранульованих системах.

### Функціонально-диференціальне рівняння руху і його розв'язок

Розглянемо рівняння руху для функції зміщення  $n$ -ої частинки  $z_n$  яке відповідає поширенню імпульсу у вертикальному гранульованому ланцюжку схематично зображеному на рисунку 2.1.

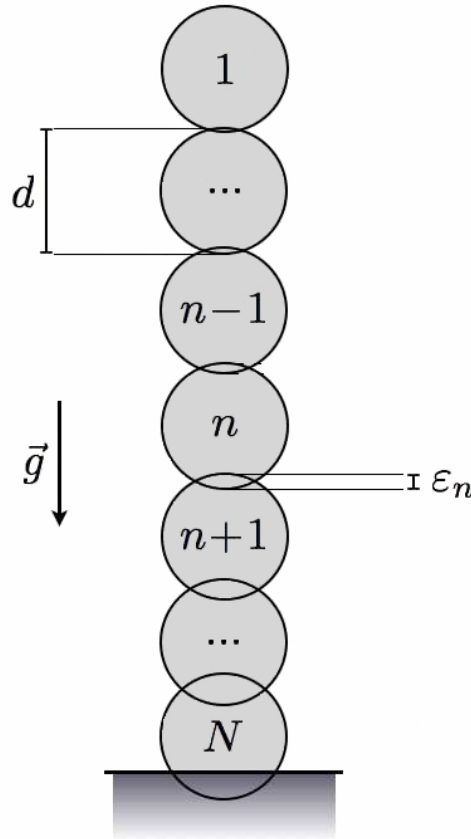


Рисунок 2.1 - Вертикальний гранульований ланцюжок у гравітаційному полі.

$$\frac{d^2 z_n}{dt^2} = \gamma \left\{ [d - (z_n - z_{n-1})]^\delta - [d - (z_{n+1} - z_n)]^\delta \right\} + g, \quad (2.1)$$

де  $\gamma = C/m$ ;

$m$  - маса окремої частинки-гранули;

$d$  - діаметр недеформованої частинки;

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

$E$  - модуль Юнга;

$\nu$  - константа Пуассона [30].

Параметр нелінійності контакту  $\delta$  може набувати різних значень. Наприклад, у випадку міжчастинкових контактів герцевського типу, він дорівнює  $3/2$ .

Нехтуючи роллю, яку відіграють дисипативні ефекти (вони можуть бути суттєвими при збільшенні інтенсивності збурень) зауважимо, що нелінійна взаємна деформація контактуючих частинок, для ланцюжка який розташовано горизонтально може вважатися однаковою для будь-якої пари сусідніх частинок. Навпаки, у разі вертикально розташованого ланцюжка (завдяки впливу гравітаційного поля) вона має залежати від положення (номера) контакту.

Формально, рівняння руху імпульсу (2.1) має розглядатися для частинок з номерами від  $n=1$  до  $n=N$ , з початковими умовами

$$\dot{z}_1(0) = v, \quad \dot{z}_n(0) = 0, \quad (2.2)$$

де  $n \geq 2$ .

Введемо нову змінну  $\varphi_n$  за наступним правилом

$$\varphi_n = z_n - \left[ nd - \sum_{k=1}^n \varepsilon_k \right], \quad (2.3)$$

де  $\varepsilon_k$  - геометричний фактор, який залежить від параметрів які характеризують перекриття пари сусідніх частинок.

Якщо вибрати умову рівноваги у найпростішому вигляді

$$gk = \gamma \varepsilon_k^\delta, \quad (2.4)$$

то враховуючи (2.3), (2.4) а також використовуючи припущення слабкої нелінійності контакту у вигляді

$$|\varphi_{k+1} - \varphi_k| < \varepsilon_k, \quad (2.5)$$

керуюче рівняння (2.1), можна записати в наступній формі

$$\frac{d^2 \varphi_n}{dt^2} = \frac{1}{\tau^2} \{ \kappa_{n+1} (\varphi_{n+1} - \varphi_n) - \kappa_n (\varphi_n - \varphi_{n-1}) \}, \quad (2.6)$$

де  $\kappa_n = n^{1-1/\delta}$  може бути інтерпретована, як перенормована силова стала, яка внаслідок гравітаційної прекомпресії ланцюжка залежить від номера контакту (частинки);

$\tau$  - характеристичний час, який визначається за допомогою наступного співвідношення

$$\tau^2 = \frac{1}{g\delta} \left( \frac{g}{\gamma} \right)^{1/\delta}. \quad (2.7)$$

Зауважимо, що зроблене припущення про слабку нелінійність системи (2.5) зводить природно неоднорідне (внаслідок присутності гравітації) рівняння руху до однорідної форми, яка є притаманною горизонтальній задачі, але із силовими сталими, які залежать від номера частинки (контакту). Після заміни

$$\psi_n = \kappa_n \varphi_n, \quad (2.8)$$

перепишемо рівняння (2.6) в наступній формі

$$\frac{d^2 \psi_n}{dT^2} = \psi_{n+1} - \left[ 1 + \frac{\kappa_{n+1}}{\kappa_n} \right] \psi_n + \frac{\kappa_n}{\kappa_{n-1}} \psi_{n-1}, \quad (2.9)$$

де  $T = t/\tau$ .

Звернемо увагу на те, що в рівнянні (2.9) коефіцієнти при  $\psi_n$  і  $\psi_{n-1}$ , вже для  $n \geq 3$  менш ніж на 10 відсотків відрізняються від двійки і одиниці, відповідно. Зважаючи на цю обставину і спрощуючи (2.9) з вищезгаданою мірою точності, отримуємо

$$\frac{d^2\psi_n}{dT^2} = \psi_{n+1} - 2\psi_n + \psi_{n-1}. \quad (2.10)$$

Функціонально-диференціальне рівняння (2.10) (яке є фактично кінетичним рівнянням із дискретним оператором дифузії) має точний розв'язок у вигляді ([31]):

$$\psi_n(T) = J_{2n}(2T), \quad (2.11)$$

де  $J_{2n}(2T)$  - функція Бесселя першого роду з цілими індексами; який є справедливим для будь-якої внутрішньої точки, окрім граничних, які обмежують систему.

Повертаючись до розмірних змінних, розв'язок (2.11) можна переписати в наступній формі

$$\psi_n(t) = J_{2n} \left( \sqrt{g\delta} \left( \frac{\gamma}{g} \right)^{1/2\delta} t \right). \quad (2.12)$$

Рівняння (2.12) дозволяє вивчати вплив параметрів системи на динаміку імпульсів (в межах зроблених припущень) і таким чином відіграє роль матеріального співвідношення.

Користуючись отриманими результатами, неважко також знайти рівняння для визначення швидкості

$$v_n = \kappa_n^{-1} \left[ J_{2n-1}(2T) - \frac{n}{T} J_{2n}(2T) \right]. \quad (2.13)$$

У асимптотичних границях розв'язок (2.11) поводитья у відповідності до наступних апроксимацій ([32]):

$$\psi_n(T) = \begin{cases} \frac{1}{(2n)!} (T)^{2n} & 0 < \sqrt{2}T < \sqrt{n+1/2} \\ \frac{1}{\sqrt{\pi T}} \cos(2T - \pi n - \pi/4) & 2T \gg 4n^2 - 1/4 \\ \frac{1}{2\sqrt{\pi n}} \left( \frac{eT}{2n} \right)^{2n} & n \gg T/\sqrt{2} \end{cases} \quad (2.14)$$

Розв'язок стаціонарної форми рівняння (2.10) має вигляд

$$\psi_{n+1} - 2\psi_n + \psi_{n-1} = 0 \quad (2.15)$$

і належить до класу періодичних функцій:

$$\psi_n = A \sin(\pi n). \quad (2.16)$$

Введемо відповідний потенціал  $U_n(\psi_n)$  як функцію  $\psi_n$ :

$$-\frac{\partial U_n}{\partial \psi_n} = \psi_{n+1} - 2\psi_n + \psi_{n-1}. \quad (2.17)$$

Користуючись співвідношеннями (2.11) та (2.17), знаходимо

$$U_n = 2\left(\frac{n}{T}\right)^2 J_{2n}^2(2T) - \frac{2}{T} J_{2n}(2T). \quad (2.18)$$

За допомогою (2.13), (2.18) отримуємо вираз для повної енергії імпульсу

$$E_n = \frac{1}{2} n^{-2\xi} \left[ J_{2n-1}(2T) - \frac{n}{T} J_{2n}(2T) \right]^2 + 2\left(\frac{n}{T}\right)^2 J_{2n}^2(2T) - \frac{2}{T} J_{2n}(2T). \quad (2.19)$$

Співвідношення типу (2.19) можуть бути корисними для інтерпретації фізичних експериментів по вивченню переносу енергії механічних збуджень в одновимірній гранульованій системі з параметрами, наближеними до умов розглянутої задачі.

**Рух імпульсу збурення у континуальній границі** У випадку достатньо ланцюжків достатньої довжини проходження імпульсу крізь систему може досить адекватно бути описано у континуальному наближенні. Повернемося до рівняння (2.10). Приймаючи:  $n \rightarrow h$ ;  $\kappa_n \rightarrow \kappa(h^{1-1/\delta})$ ;  $\kappa_{n+1} \rightarrow \kappa((h + \delta h)^{1-1/\delta})$ ;  $\varphi_n \rightarrow \varphi(h)$ ;  $\varphi_{n+1} \rightarrow \varphi(h + \delta h)$ , після нескладних маніпуляцій отримуємо континуальну форму керуючого рівняння

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial \tilde{t}^2} = \frac{\partial}{\partial h} \kappa(h) \frac{\partial \varphi}{\partial h}, \quad (20)$$

де  $h$  - глибина системи (аналог номера частинки);

$$\tilde{t} = aT.$$

Як відомо [33], лінійне рівняння (2.20) має розв'язок у вигляді дисперсійної хвилі, який детально проаналізовано у [23]. Звернемо також увагу на те, що функції

$$\varphi(\tilde{t}) = A\tilde{t} + B, \quad \varphi(h) = -\delta B + e^{A/\delta} |h|^{1/\delta}, \quad (21)$$

де  $A$  та  $B$  - константи;

є точними розв'язками рівняння (2.20), які залежать лише від  $\tilde{t}$  або лише від  $h$ . Вкажемо тепер, що рівняння (2.20) (окрім вище визначених) має і ще один точний розв'язок, який дається наступним співвідношенням ([33]):

$$\varphi(h, \tilde{t}) = \frac{c_1}{\xi} + e^{-c_2 \xi - \xi \ln \eta} (\tilde{t} + c_3)^{-\xi/\eta} \left[ k - k \left( \frac{2}{\eta} \right)^2 \frac{h^\eta}{(\tilde{t} + c_3)^2} \right]^{-\xi/2\eta}, \quad (2.22)$$

де  $c_1$ ,  $c_2$  та  $c_3$  - константи;

$$\xi = 1 - 1/\delta;$$

$$\eta = 1 + 1/\delta;$$

$$k = \pm 1.$$

Для випадку системи з герцевськими контактами, маємо  $\xi = 1/3$  та  $\eta = 5/3$ . Розв'язок (2.22) можна інтерпретувати як бігучу хвилю, амплітуда якої зменшується за ступеневим законом. Внаслідок того, що швидкість

$v = \frac{d\varphi}{d\tilde{t}}$ , співвідношення для швидкості за допомогою (2.22) може бути

знайдено тривіально. Формально, може бути визначений відповідний потенціал, який задовольняє співвідношенню  $-\frac{\partial U}{\partial \varphi} = \frac{\partial}{\partial h} \left[ \kappa(h) \frac{\partial \varphi}{\partial h} \right]$ . Аналіз

отриманих результатів, які визначають кінетичну ( $E_k = \frac{1}{2} \dot{\varphi}^2$ ), або повну

( $E = E_k + U$ ) енергію системи, показує, що вони обидві не задовольняють закону рівнорозподілу. Як наслідок, не відбувається внутрішньої термалізації системи.

На практиці існує інерційний зсув фаз який розділяє швидкість сигналу та швидкість гранул. Внаслідок того, що система не є термалізованою можна очікувати, що під час розповсюдження імпульсу вздовж системи одна або



декілька частинок можуть втрачати контакти з рештою системи та переходити до стану балістичного руху у проміжках між послідовними зіткненнями з гранулами. При наближенні до деяких спеціальних умов, нерівномірний розподіл енергії може призвести до розподілу системи на підсистеми, в яких гранули зокрема можуть перебувати у стані (навіть періодичного) балістичного руху у полі тяжіння. Саме такі стани спостерігалися у експериментах із гранульованими ланцюжками [25].

Асимптотично, вищенаведений сценарій термалізації у моделі з нерівномірним розподілом енергії може призвести до формування станів з мінімальним значенням повної енергії. Дослідження таких квазістаціонарних станів та поведінка системи у їх околі, є важливим напрямком як теоретичних так і експериментальних досліджень.

**Висновки** В параграфі знайдено клас точних розв'язків лінеаризованого рівняння руху для механічного імпульсу у вертикальному гранульованому ланцюжку. Керуюче рівняння, яке після лінеарізації приймає однорідну форму з перенормованими силовими сталими, які, у свою чергу, залежать від номера контакту, відноситься до класу функціонально-диференціальних і інтегрується точно. Відповідний розв'язок знайдено в класі циліндричних функцій Бесселя першого роду. Він є справедливим у будь-якій внутрішній точці системи. Довільним граничним умовам відповідає лінійна комбінація отриманих розв'язків.

В розглянутій системі спостерігається очевидний скейлінг. У континуальній границі розглянутої задачі також знайдено новий точний розв'язок у вигляді бігучої хвилі із амплітудою, яка спадає за степеневим законом. Отримані результати суттєво доповнюють клас відомих точних розв'язків у вигляді дисперсійних хвиль та солітонів. Після їх експериментальної перевірки, вони можуть сприяти розробці адекватних моделей для параметризації процесів переносу енергії (імпульсу) в низьковимірних, слабо нелінійних, дискретних механічних системах, прикладом яких зокрема виступають гранульовані ланцюжки.

## 2.2 Моделювання руху механічних збуджень у одновимірних неоднорідних гранульованих ланцюжках: вплив граничних умов

Проблема розповсюдження хвиль у дискретних низько вимірних системах є традиційним об'єктом досліджень у різних розділах хвильової механіки та теорії динамічних систем. Останнім часом вона набула актуальності у зв'язку із появою штучно синтезованих об'єктів – гранульованих ланцюжків, транспортні властивості яких відносно зовнішніх збурень є важливою задачею теорії із чисельними прикладними застосуваннями [19-25].

В роботі аналізуються аналітичні розв'язки задачі про передачу зовнішнього збурення уздовж одновимірної гранульованої ґратки, у границі, коли нелінійний (герцівський) ланцюжок моделюється неоднорідною ліанеризованою системою із силовими сталими, які залежать від положення контакту.

Точні розв'язки керуючого рівняння, яке має форму функціонально-диференціального, як показано у [34], мають форму циліндричних хвиль і описуються за допомогою функцій Беселя цілого порядку (I-го роду). В цьому параграфі показано, що для довільних граничних умов (які відповідають різним типам збуджень) розв'язок керуючого рівняння не можна представити у вигляді одиничної хвилі, а можна завдати їхньою лінійною комбінацією. Отриманий результат має сприяти більш адекватній параметризації даних з динаміки механічних збуджень у гранульованих ланцюжках, які складають важливий сегмент теорії мікро-механічних систем.

Рівняння для функції зміщення  $n$ -ої частинки  $z_n$ , яке відповідає переносу імпульсу у вертикальному гранульованому ланцюжку, який знаходиться у гравітаційному полі, як наведено у параграфі 2.1 записується у вигляді (див. (2.1)):

$$\frac{d^2 z_n}{dt^2} = \gamma \left\{ [d - (z_n - z_{n-1})]^\delta - [d - (z_{n+1} - z_n)]^\delta \right\} + g, \quad (2.23)$$

У подальшому покладаємо, що наш ланцюжок складається із гранул з одного матеріалу та з однаковими радіусами кривизни контактів (які суттєво впливають на параметр нелінійності  $\delta$ ).

Додержуючись [34], введемо нову змінну  $\varphi_n$ , яка визначає відхилення частинок від положення рівноваги:

$$\varphi_n = z_n - \left[ (n-1)d - \sum_{k=1}^{n-1} \varepsilon_k \right], \quad (2.24)$$

де  $\varepsilon_k = d - (z_{k+1} - z_k)$  - величина перекриття частинок в межах контакту за умови знаходження усіх частинок ланцюжка у стані статичної рівноваги (стані спокою).

Беручи  $z_n'' = 0$  у рівнянні (2.23), найпростіше рівноважне перекриття частинок  $\varepsilon_n$  знаходимо у такому вигляді

$$\varepsilon_n = \left( \frac{gn}{\gamma} \right)^{1/\delta}. \quad (2.25)$$

Підставляючи (2.24) та (2.25) у рівняння руху (2.23), після лінеаризації (див. [34]), отримуємо наступне рівняння

$$\frac{d^2 \varphi_n}{d\tau^2} = \kappa_n \left\{ \frac{\kappa_{n-1}}{\kappa_n} \varphi_{n-1} - \left( \frac{\kappa_{n-1}}{\kappa_n} + 1 \right) \varphi_n + \varphi_{n+1} \right\}, \quad (2.26)$$

$$\text{де } \tau = t \sqrt{g\delta} \left( \frac{\gamma}{g} \right)^{1/2\delta};$$

$$\kappa_n = n^{1-1/\delta}.$$

Враховуючи, що із збільшенням номера частинки практично для всіх внутрішніх точок системи  $\frac{\kappa_{n-1}}{\kappa_n} \rightarrow 1$ , отримуємо замість (2.26)

$$\frac{d^2 \varphi_n}{dT^2} = \varphi_{n-1} - 2\varphi_n + \varphi_{n+1}, \quad (2.27)$$

де  $T = \tau \sqrt{\kappa_n}$ .

Рівняння хвильової дифузії (2.27) належить до класу функціонально-диференціальних. Користуючись загальним базисом власних функцій дискретного оператора хвильової дифузії [31], у [34] було знайдено точний розв'язок (2.27), який описується циліндричними хвилями і має такий вигляд

$$\varphi_n = C \cdot J_{2n}(2T), \quad (2.28)$$

де  $J_\nu(x)$  - функція Беселя 1-го роду з цілими значеннями порядку  $\nu$  від аргументу  $x$ ;

$C$  - стала.

Як впливає із припущень, які було зроблено при отриманні рівняння (2.27), розв'язок (2.28) задовільняє рівняння (2.27) практично у всіх внутрішніх точках, але очевидно, за винятком границь  $n \in (1, N)$ .

На рисунку 2.2 наведені результати чисельних розрахунків (зображені точками), проведених за допомогою рівняння (2.27) для першого із двох розглянутих типів граничних умов:  $\varphi_1(0)=1$ ,  $\varphi_1'(0)=0$  (т.з. збудження за допомогою початкового зміщення).

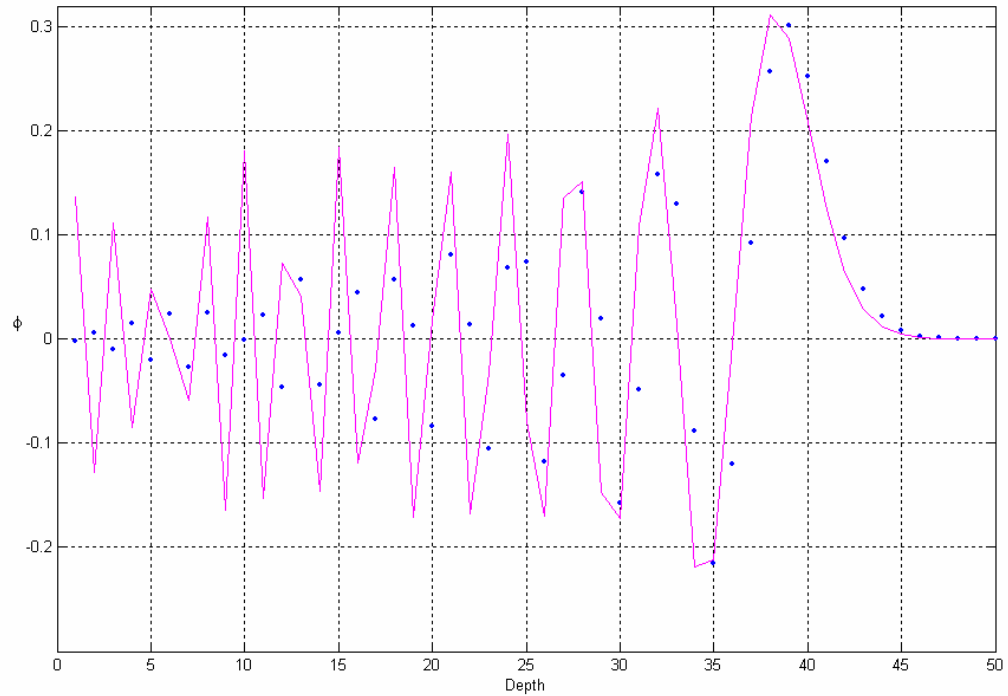


Рисунок 2.2 – Функція зміщення  $\varphi_n$  для одновимірного напівобмеженого ланцюжка за результатами чисельних розрахунків (зображується точками) та аналітичного розв’язку (2.28) (суцільна лінія) для граничних умов у вигляді:  $\varphi_1(0)=1$ ,  $\varphi_1'(0)=0$ .

Зважаючи на те, що рівняння (2.27) є лінійним та задовільняє умови скейлінгу, доцільним є усунення помітних розбіжностей аналітичних та чисельних розв’язків, які спостерігаються на рисунку 2.2 на початку системи, шляхом побудови лінійної комбінації власних функцій оператора хвильової дифузії (2.28).

Використання замість (6) лінійної комбінації функцій базису у вигляді

$$\varphi_n(T) = x_0 \cdot [J_{2n-2}(2T) + J_{2n}(2T)], \quad (2.29)$$

де  $x_0 = \varphi_1(0)$  - амплітуда початкового збудження для випадку, коли імпульс входить у ланцюжок з боку першої частинки (верхньої границі ланцюжка);

дозволяє отримати відмінне співпадання даних чисельних розрахунків із аналітичним розв'язком. Відзначимо, що розв'язок (2.29) є точним та на відміну від (2.28) задовільняє рівняння (2.27) у будь-якій внутрішній точці ланцюжка, у тому числі і у його границях (див. Рис. 2.3).

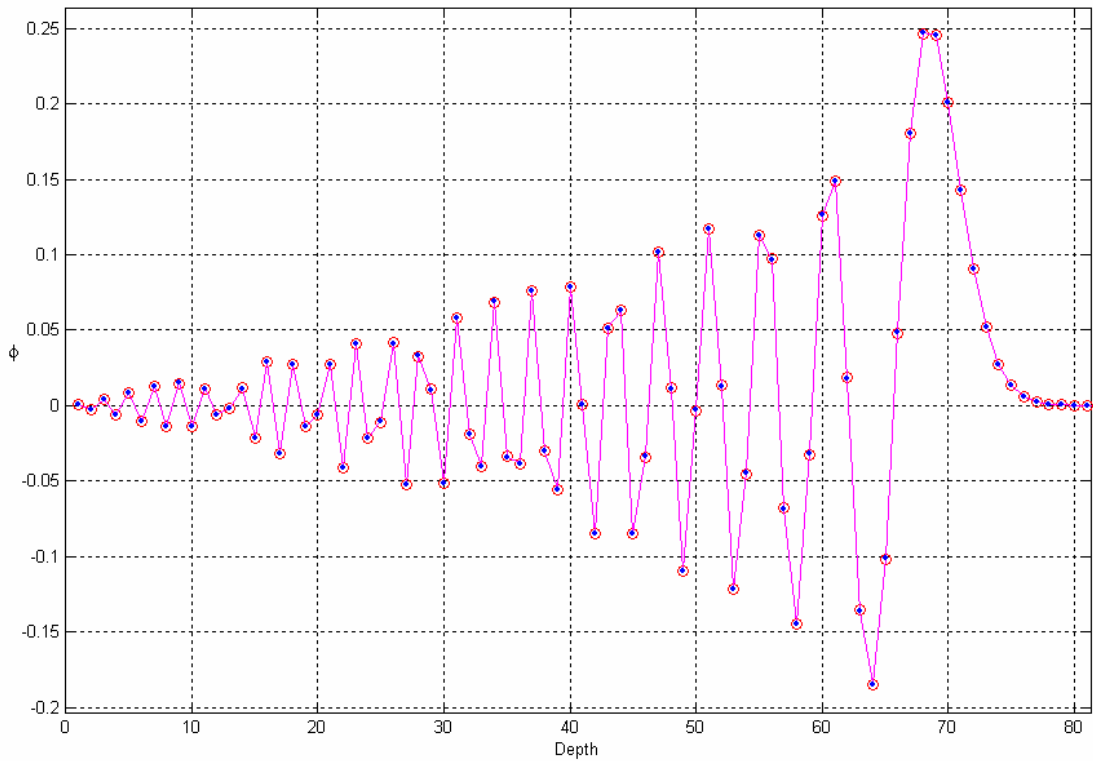


Рисунок 2.3 – Функція зміщення  $\varphi_n$  для одновимірного напівобмеженого ланцюжка за результатами чисельних розрахунків (суцільна лінія) та аналітичного розв'язку (2.29) (точки), для граничних умов у вигляді:  $\varphi_1(0) = x_0$ ,  $\varphi_1'(0) = 0$ .

Розглянемо тепер поведінку функції зміщення у випадку збудження, яке відповідає граничним умовам у вигляді:  $\varphi_1(0) = 0$ ,  $\varphi_1'(0) = v_0$  (т.з. динамічне збудження). Вибираючи функцію  $\varphi_n(T)$  у вигляді лінійного перетворення

$$\varphi_n(T) = v_0 \cdot \int_0^T [J_{2n-2}(2T) + J_{2n}(2T)] dT, \quad (2.30)$$

де  $v_0 = \varphi_1'(0)$  - амплітуда початкового збудження, у випадку коли імпульс входить у ланцюжок зверху ланцюжка;

та виконуючи чисельні розрахунки, результати яких наведені на рисунку 2.4, отримуємо повне співпадання даних чисельних розрахунків із аналітичним розв'язком.

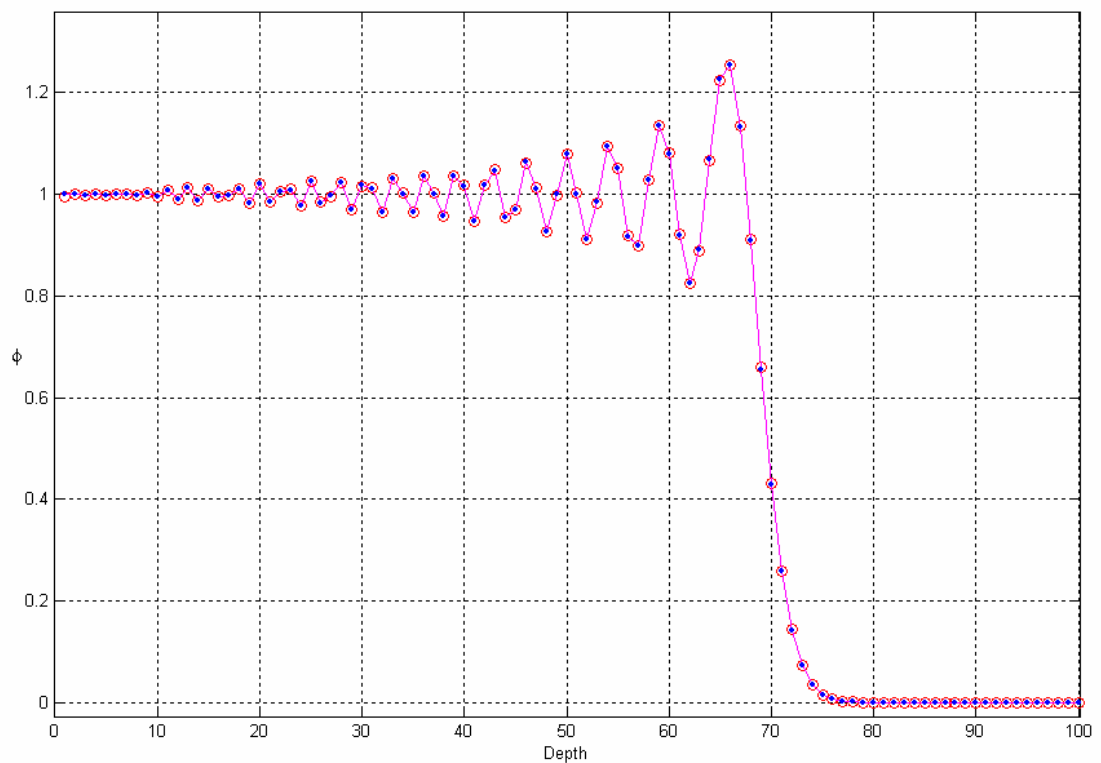


Рисунок 2.4 – Функція зміщення  $\varphi_n$  для одновимірного напівобмеженого ланцюжка за результатами чисельних розрахунків (суцільна лінія) та аналітичного розв'язку (2.30) (точки) для граничних умов у вигляді:  $\varphi_1(0) = 0$ ,  $\varphi_1'(0) = v_0$ .

Коментуючи дані, наведені на рисунках 2.3-2.4, зауважимо, що перенесення імпульсу у ланцюжку не може описуватись у однохвильовому наближенні, а має спиратися на мульти-хвильовий базис.

Розглянемо тепер випадок багаторазового відбиття сигналу від границь системи, в ході якого відбувається накладення відбитих та падаючих хвиль. Нижченаведені суперпозиції розв'язків, які даються співвідношеннями (2.29) або (2.30), дозволяють точно відтворити хід функції зміщення при відбитті сигналу від границь ланцюжка (див. Рис. 2.5):

$$\varphi_n(T) = x_0 \cdot \sum_{k=1}^K \text{sign}(v) [J_{v-1}(2T) + J_{v+1}(2T)], \quad (2.31)$$

$$\varphi_n(T) = v_0 \cdot \sum_{k=1}^K \text{sign}(v) \int_0^T [J_{v-1}(2T) + J_{v+1}(2T)] dT, \quad (2.32)$$

$$\text{де } v = \text{sign}\left(\sin \frac{\pi k}{2}\right) \cdot (2n - 1) + \text{sign}\left(\cos \frac{\pi k}{2}\right) \cdot (k - \text{mod}(k, 2))(2N - 1);$$

$\text{sign}(f)$  - знак функції  $f$ ;

$\text{mod}(k, 2)$  - залишок від цілочисельного ділення на 2;

$K$  - кратність проходження сигналом ланцюжка.

У параграфі розглянуті розв'язки функціонально-диференціального рівняння, яке описує розповсюдження початкового імпульсного збурення у 1D вертикальному гранульованому ланцюжку.

У термінах, знайдених у [34] точних розв'язків керуючого рівняння у вигляді циліндричних функцій запропоновані апроксимації функції зсуву, які задовільняють рівняння руху у всіх точках ланцюжка, у тому числі на його границях. На підставі проведеного дослідження зроблено висновок про мульті-хвильовий характер переносу імпульсу вздовж неоднорідного ланцюжка.

Отримані результати мають сприяти більш адекватній параметризації експериментальних даних з вивчення розповсюдження імпульсу у гранульованих матеріалах [23].



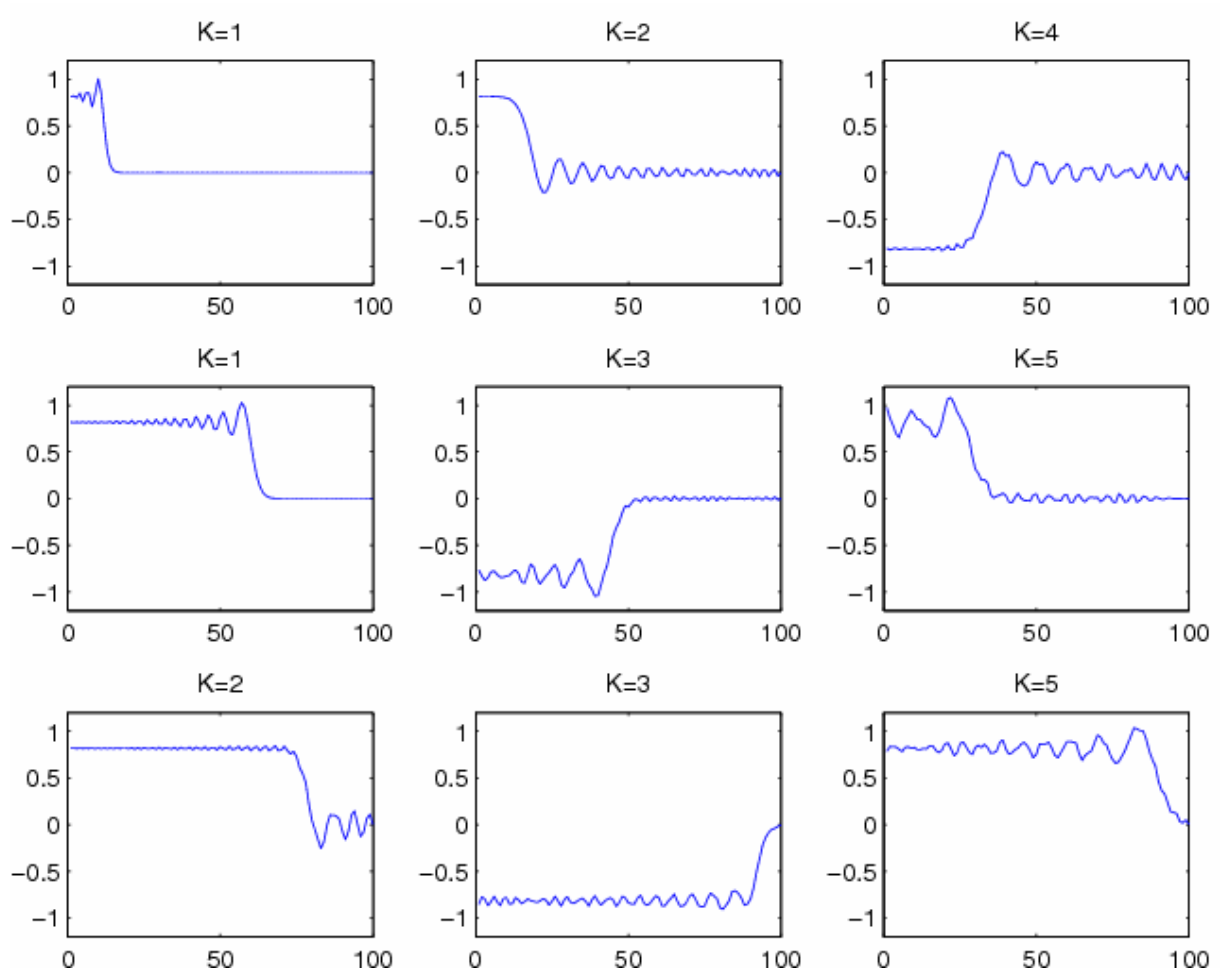


Рисунок 2.5 – Поведінка функції зміщення  $\varphi_n$  у випадку багаторазового відбиття імпульсу від границь ланцюжка ( $N=100$ ), збудженого динамічно ( $\varphi_1(0)=0$ ,  $\varphi_1'(0)=v_0$ ) за результатами чисельних розрахунків та аналітичного розв'язку (2.32) (які повністю співпадають).

### 2.3 Перенесення збудження у гранульованих ланцюжках в умовах конфайнменту

**Вступ** Задача про перенесення імпульсу у гранульованих одновимірних ланцюжках нескінченної довжини детально вивчалася в роботах [34-44]. Визначення точних розв'язків цієї задачі становить важливий елемент вивчення розподілу енергії по внутрішніх ступенях свободи у дискретних системах із силовими контактами [36-38]. До того ж, вивчення транспортних властивостей хвиль, які збуджуються у таких системах, та розбудова засобів використання відповідної схемотехніки потребує знань про вплив граничних умов, розмірів системи та матеріальних співвідношень.

На цьому шляху в запропонованій роботі розглянуті обмежені ланцюжки, які складаються із декількох елементів. Показано, що передача імпульсу збудження в таких системах описується за допомогою так званих вибираючих функцій, які у свою чергу визначаються за допомогою лінійних комбінацій дисперсійних хвиль. Отримані аналітичні розв'язки можна записати у формі, яка задовольняє довільні граничні умови. Вони також добре узгоджуються із результатами чисельних розрахунків моделі. Досліджено вплив граничних умов та матеріальних співвідношень на динаміку імпульсу. Проаналізовано роль, яку відіграє неоднорідність у переносі збурення крізь обмежену систему.

**Керуюче рівняння та його розв'язки** Розглянемо керуюче рівняння, яке описує рух імпульсу енергії у неоднорідному гранульованому ланцюжку у такому (лінеаризованому) вигляді [42]

$$\frac{\partial^2 \varphi_n(\tau)}{\partial \tau^2} = \kappa_n \varphi_{n+1}(\tau) - [\kappa_n + \kappa_{n-1}] \varphi_n(\tau) + \kappa_{n-1} \varphi_{n-1}(\tau), \quad (2.33)$$

де  $\varphi_n(\tau)$  - зміщення  $n$ -ої частинки (гранули) від положення її рівноваги;

$\tau$  - час;

$n$  - номер частинки;

$\kappa_n$  - коефіцієнт, який залежить від степені нелінійності «початкової» системи і, фактично, відіграє роль позиційно залежної силової сталої (для випадку герцівських контактів  $\kappa_n = n^{1/3}$ ).

Частинний розв'язок (2.33) будемо шукати у вигляді періодичної функції

$$\varphi_n(\tau) = X_n \cdot \cos \omega \tau, \quad (2.34)$$

де амплітуда  $X_n$  залежить від положення частинки  $n$ ;

$\omega$  - частота.

Із урахуванням (2.34) із рівняння (2.33) отримуємо:

$$\frac{X_2}{X_1} = 1 + \lambda, \quad n = 1, \quad (2.35)$$

$$\frac{X_3}{X_1} = \frac{\kappa_2 + 1 + \lambda}{\kappa_2} \cdot (1 + \lambda) - \frac{1}{\kappa_2}, \quad n = 2, \quad (2.36)$$

Узагальнюючи, маємо що функції  $\{X_n\}$  задовольняють рекурсивному співвідношенню

$$\frac{X_{n+1}}{X_1} = \frac{\kappa_n + \kappa_{n-1} + \lambda}{\kappa_n} \cdot \frac{X_n}{X_1} - \frac{\kappa_{n-1}}{\kappa_n} \cdot \frac{X_{n-1}}{X_1}, \quad n = 1..(N-1). \quad (2.37)$$

де  $X_1$  - відповідає граничним умовам задачі ( $X_1 \neq 0$ ).

Зауважимо, що  $X_1$  може бути вибраним у класі різних за аналітичної поведінкою функцій. Наприклад, у класі періодичних функцій, кусково-безперервних, або навіть узагальнених функцій.

Розглянемо для визначеності граничну умову  $\varphi_N(\tau) = 0$  (яка відповідає  $X_N = 0$ ). Відповідно, поліном  $P(\lambda) = \frac{X_N}{X_1} = 0$ . Позначимо корені попереднього рівняння через:  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{N-1}$ .

Користуючись вищевизначеним (див. також [35]), повний розв'язок рівняння (2.33) може бути записано у наступному вигляді

$$\varphi_n(\tau) = \sum_{p=1}^{N-1} \frac{1}{K_p} X_n(\lambda_p) X_k(\lambda_p) \cos[\omega(\lambda_p)\tau], \quad (2.38)$$

де  $k$  - номер частинки яка локально збурюється у початковий момент часу  $\tau = 0$  (тобто  $\varphi_k(0) = 1$ );

$K_p$  - визначається із умов ортогональності за допомогою співвідношення

$$\sum_{n=1}^{N-1} X_n(\lambda_p) X_n(\lambda_q) = K_p \delta_{pq}, \quad (2.39)$$

де  $\delta_{pq}$  - дельта символ Кронекера.

**Ланцюжок, що складається з двох частинок ( $N = 2$ )** Розглянемо тепер детальніше ланцюжки, які вміщують лише декілька центрів. Почнемо з ланцюжка, який вміщує дві частинки  $N = 2$ . Одна із частинок ланцюжка нехай буде зафіксована, наприклад  $\varphi_2(\tau) = 0$  (відповідно  $X_2 = 0$ ). Користуючись (2.35), знаходимо

$$\lambda = -1,$$

ВІДПОВІДНО

$$\omega = \sqrt{-\lambda} = 1.$$

Функцію зміщення першої частинки в цьому разі отримуємо у вигляді

$$\varphi_1(\tau) = \frac{1}{K_1} X_1(\lambda) X_1(\lambda) \cos(\tau). \quad (2.40)$$

Фактор у (2.40)  $K_1$  дорівнює

$$K_1 = [X_1(\lambda)]^2.$$

Таким чином, остаточний розв'язок для  $N = 2$  набуває такого вигляду

$$\varphi_1(\tau) = \cos(\tau). \quad (2.41)$$

Зауважимо, що роль другої частинки може відігравати відбиваюча стінка.

**Ланцюжок, який вміщує три частинки ( $N = 3$ )** Повторюючи попередній розгляд у випадку, коли ланцюжок складається з трьох частинок  $N = 3$ , та користуючись аналогічною граничною умовою  $\varphi_3(\tau) = 0$  ( $X_3 = 0$ ), отримуємо, відповідно, два подальших розв'язки

$$\lambda_{1,2} = -\frac{\kappa_2 + 2}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\kappa_2 + 2}{2}\right)^2 - \kappa_2}. \quad (2.42)$$

Зміщення першої та другої частинок, відповідно, задовольняє співвідношення:

$$\varphi_1(\tau) = \frac{1}{K_1} X_1(\lambda_1) X_1(\lambda_1) \cos(\omega_1 \tau) + \frac{1}{K_2} X_1(\lambda_2) X_1(\lambda_2) \cos(\omega_2 \tau),$$
(2.43)

$$\varphi_2(\tau) = \frac{1}{K_1} X_2(\lambda_1) X_1(\lambda_1) \cos(\omega_1 \tau) + \frac{1}{K_2} X_2(\lambda_2) X_1(\lambda_2) \cos(\omega_2 \tau).$$

Фактори  $K_1$  та  $K_2$  визначаються з умов:

$$p = 1, q = 1: \quad X_1(\lambda_1) X_1(\lambda_1) + X_2(\lambda_1) X_2(\lambda_1) = K_1,$$
(2.44)

$$p = 2, q = 2: \quad X_1(\lambda_2) X_1(\lambda_2) + X_2(\lambda_2) X_2(\lambda_2) = K_2.$$

Підсумовуючи, маємо такі аналітичні розв'язки:

$$\varphi_1(\tau) = \frac{1}{1 + (1 + \lambda_1)^2} \cos(\omega_1 \tau) + \frac{1}{1 + (1 + \lambda_2)^2} \cos(\omega_2 \tau),$$
(2.45)

$$\varphi_2(\tau) = \frac{1 + \lambda_1}{1 + (1 + \lambda_1)^2} \cos(\omega_1 \tau) + \frac{1 + \lambda_2}{1 + (1 + \lambda_2)^2} \cos(\omega_2 \tau).$$

Якщо змінювати умови відбиття від крайньої частинки, тоді розв'язок буде мати інший вигляд.

**Ланцюжок з чотирьох частинок ( $N = 4$ )** З огляду на попередні розгляди, у випадку коли ланцюжок складається з чотирьох частинок ( $N = 4$ ), користуючись граничною умовою  $\varphi_4(\tau) = 0$  ( $X_4 = 0$ ), застосовуючи формули Кардано [45], отримуємо:

$$\lambda_{1,2} = -\frac{A+B}{2} \pm i \frac{A-B}{2} \sqrt{3} - \frac{b}{3}, \quad \lambda_3 = A + B - \frac{b}{3},$$
(2.46)

$$\text{де } A = \sqrt[3]{-\frac{q}{2} + \sqrt{Q}};$$

$$B = \sqrt[3]{-\frac{q}{2} - \sqrt{Q}};$$

$$Q = \left(\frac{p}{3}\right)^3 + \left(\frac{q}{2}\right)^2;$$

$$p = \frac{c}{a} - \frac{b^2}{3a^2};$$

$$q = \frac{2b^3}{27a^3} - \frac{bc}{3a^2} + \frac{d}{a};$$

$$\text{де } a = 1;$$

$$b = \kappa_3 + 2\kappa_2 + 2;$$

$$c = 2\kappa_3 + 3\kappa_2 + \kappa_3\kappa_2;$$

$$d = \kappa_3\kappa_2 - \text{коєфіцієнти в кубічному рівнянні.}$$

Зміщення частинок у випадку ланцюжка з  $N = 4$ , знаходимо у наступному вигляді:

$$\begin{aligned} \varphi_1(\tau) = & \frac{1}{K_1} X_1(\lambda_1) X_1(\lambda_1) \cos(\omega_1 \tau) + \\ & + \frac{1}{K_2} X_1(\lambda_2) X_1(\lambda_2) \cos(\omega_2 \tau) + \frac{1}{K_3} X_1(\lambda_3) X_1(\lambda_3) \cos(\omega_3 \tau) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \varphi_2(\tau) = & \frac{1}{K_1} X_2(\lambda_1) X_1(\lambda_1) \cos(\omega_1 \tau) + \\ & + \frac{1}{K_2} X_2(\lambda_2) X_1(\lambda_2) \cos(\omega_2 \tau) + \frac{1}{K_3} X_2(\lambda_3) X_1(\lambda_3) \cos(\omega_3 \tau) \end{aligned} \quad (2.47)$$

$$\begin{aligned} \varphi_3(\tau) = & \frac{1}{K_1} X_3(\lambda_1) X_1(\lambda_1) \cos(\omega_1 \tau) + \\ & + \frac{1}{K_2} X_3(\lambda_2) X_1(\lambda_2) \cos(\omega_2 \tau) + \frac{1}{K_3} X_3(\lambda_3) X_1(\lambda_3) \cos(\omega_3 \tau) \end{aligned}$$

Фактори  $K_1$ ,  $K_2$  та  $K_3$ , які входять у (2.47), визначаються за допомогою співвідношень:

$$p = 1, q = 1: \quad X_1(\lambda_1)X_1(\lambda_1) + X_2(\lambda_1)X_2(\lambda_1) + X_3(\lambda_1)X_3(\lambda_1) = K_1,$$

$$p = 2, q = 2: \quad X_1(\lambda_2)X_1(\lambda_2) + X_2(\lambda_2)X_2(\lambda_2) + X_3(\lambda_2)X_3(\lambda_2) = K_2, \quad (2.48)$$

$$p = 3, q = 3: \quad X_1(\lambda_3)X_1(\lambda_3) + X_2(\lambda_3)X_2(\lambda_3) + X_3(\lambda_3)X_3(\lambda_3) = K_3.$$

Користуючись (2.35), (2.36), (2.48), (2.47) остаточний розв'язок можна записати у вигляді:

$$\varphi_1(\tau) = \sum_{i=1}^3 \frac{1}{1 + (1 + \lambda_i)^2 + \left( \frac{\kappa_2 + 1 + \lambda_i}{\kappa_2} \cdot (1 + \lambda_i) - \frac{1}{\kappa_2} \right)^2} \cos(\omega_i \tau),$$

$$\varphi_2(\tau) = \sum_{i=1}^3 \frac{1 + \lambda_i}{1 + (1 + \lambda_i)^2 + \left( \frac{\kappa_2 + 1 + \lambda_i}{\kappa_2} \cdot (1 + \lambda_i) - \frac{1}{\kappa_2} \right)^2} \cos(\omega_i \tau), \quad (2.49)$$

$$\varphi_3(\tau) = \sum_{i=1}^3 \frac{\frac{\kappa_2 + 1 + \lambda_i}{\kappa_2} \cdot (1 + \lambda_i) - \frac{1}{\kappa_2}}{1 + (1 + \lambda_i)^2 + \left( \frac{\kappa_2 + 1 + \lambda_i}{\kappa_2} \cdot (1 + \lambda_i) - \frac{1}{\kappa_2} \right)^2} \cos(\omega_i \tau).$$

**Оцінка впливу матеріальних співвідношень та обговорення отриманих результатів** Розглянемо тепер розв'язок повного керуючого рівняння (нелінійного та неоднорідного), яке має такий вигляд (див. (2.1))

$$m \frac{\partial^2 z_n}{\partial t^2} = C[d - (z_n - z_{n-1})]^\delta - C[d - (z_{n+1} + z_n)]^\delta + mg, \quad (2.50)$$



де  $z_n$  - координата центра мас  $n$ -ої сферичної гранули, яка є функцією часу  $t$ ;

$m$  - маса частинки;

$d$  - діаметр частинки;

$g$  - прискорення вільного падіння;

$\delta$  - параметр, який визначає нелінійність рівняння (2.50) та визначається типом контакту між частинками;

$C$  - силова стала, яка залежить від пружних властивостей матеріалу частинок та типу контакту між ними.

Для випадку ланцюжка із тотожних частинок сферичної форми, коли  $\delta = 3/2$  (т.з. герцівський контакт), силова стала визначається таким чином [30]:

$$C = \frac{E\sqrt{d}}{3(1-\nu^2)}, \quad (2.51)$$

де  $E$  - модуль пружності Юнга;

$\nu$  - стала Пуассона.

Для випадку ланцюжка із частинок, з'єднаних пружинками, коли  $\delta = 1$  (закон Гука), силова стала визначається таким чином:

$$C = k, \quad (2.52)$$

де  $k$  - жорсткість пружини.

Чисельне моделювання системи гранул, яка описується нелінійним рівнянням руху (2.50), було здійснено за допомогою алгоритму предиктор-коректор Гіра 4-го порядку. При цьому використані такі граничні умови:

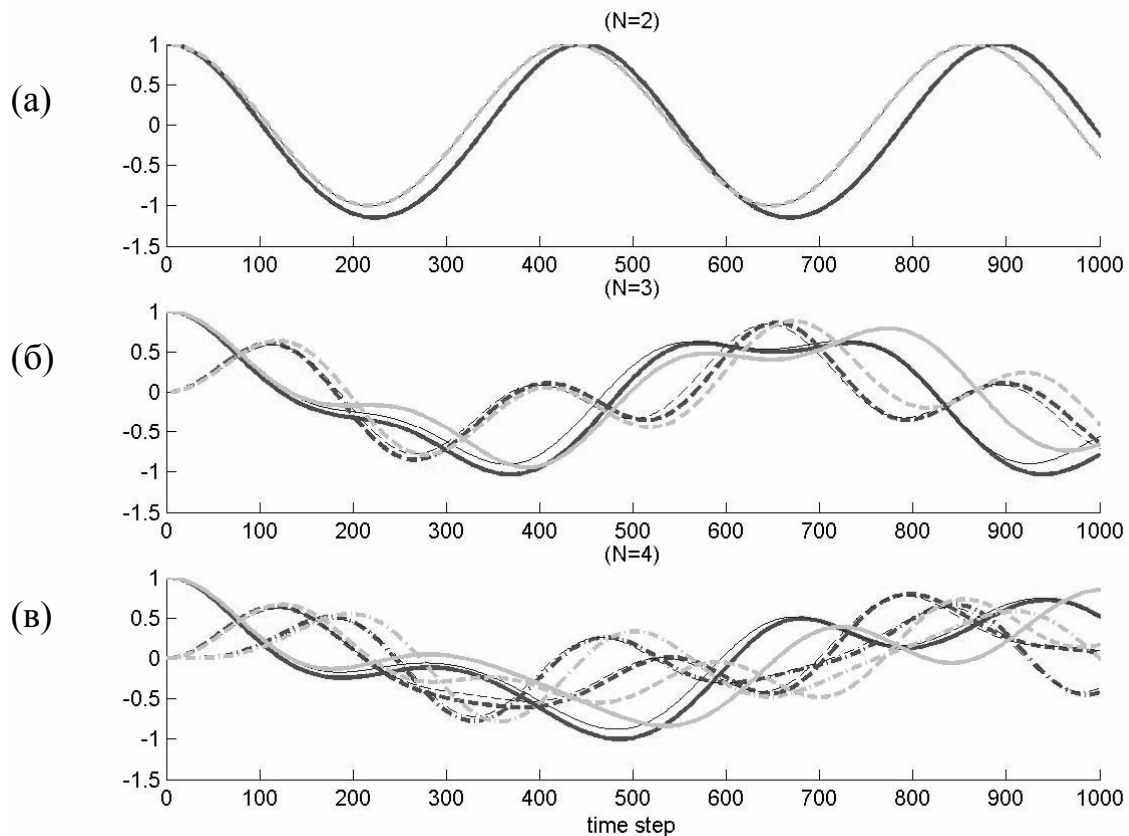
– система складається із невеликої кількості ( $N = 2; 3; 4$ ) частинок;

- матеріал частинок – скло ( $E = 62 \text{ ГПа}$ ,  $\nu = 0.2$ ,  $d = 1 \text{ мм}$  густина скла  $\rho = 2426 \text{ кг/м}^3$ );
- у початковий момент часу всі рівнодіючі на частинки сили дорівнюють нулю;
- збудження ланцюжка відбувається раптовим зміщенням першої (верхньої) частинки у бік підкладки (величина цього зсуву дорівнює  $5 \text{ \AA}$ );
- частинки знаходяться у полі тяжіння ( $g = 9.81 \text{ м/с}^2$ );
- часовий крок (step time) у термінах  $\tau$  відповідає  $0.0146$ .

Отримані у вищевказаному моделюванні дані наведені на рисунку 2.6 (чорна жирна лінія). Результати чисельних розрахунків проведених за формулами (2.41), (2.45) та (2.49) також наведені на рисунку 2.6 (тонка лінія).

Аналіз результатів наведених на рисунку 2.6 показує гарне співпадання отриманих аналітичних розв'язків (2.41), (2.45) та (2.50) з чисельними розрахунками за головним керуючим (нелінійним та неоднорідним) рівнянням з якого отримано рівняння (2.33) [34,37-44]. Вищевизначене відбувається коли збудження є значно меншим за величину прекомпесії частинок у не збудженому стані. Із збільшенням довжини ланцюжка із  $(N-1)$  вільною частинкою, траєкторія руху частинок ускладнюється за рахунок суперпозиції  $(N-1)$  гармонічних коливань. Як показують чисельні розрахунки, вже за наявності 7-10 центрів формується біжуча хвиля, яка у лінійному однорідному випадку відповідає циліндричній хвилі у термінах функцій Беселя першого роду [34,41-44]. Розв'язок такого типу, як можна показати [23], строго задовольняє керуюче рівняння.

Наведені на рисунку 2.6 результати розрахунків для лінійного однорідного рівняння (сіра лінія) отримані покладанням у головному керуючому рівнянні показника нелінійності  $\delta = 1$ , тобто такого, що відповідає закону Гука. За таких умов неоднорідність практично зникає ( $\kappa_n = n^{1-1/\delta} = 1$ ). З аналізу рисунку 2.6 можна бачити повне співпадання даних з результатами розрахунку за формулою (2.41) (див. Рис. 2.6а).



$\varphi_1$  - суцільна лінія,  $\varphi_2$  - пунктир,  $\varphi_3$  - крапки

Рисунок 2.6 – Зміщення  $n$ -ої частинки  $\varphi_n$  в залежності від часу  $\tau$  у неоднорідних ланцюжках, які складаються з: а) 2-х, б) 3-х, в) 4-х частинок. Тонка лінія – розрахунки проведені за точними формулами (2.41), (2.45) та (2.49). Чорна жирна лінія – результати чисельних розв’язків головного керуючого рівняння (2.50) для неоднорідного герцівського ланцюжка. Сіра лінія – чисельні розрахунки для лінійного однорідного рівняння.

Розглянемо вплив нелінійності на масштаб часу  $\tau_0$ . Враховуючи зв’язок нормованого часу ( $\tau$ ) з реальним ( $t$ ) [34,41-43]:  $\tau = t \cdot \sqrt{g\delta} (\gamma/g)^{1/2\delta}$ , де  $\gamma$  - силова стала (яка для скляних частинок розміром 1 мм,  $\gamma = 5.3593 \cdot 10^{14}$ ); розрахуємо відношення  $\tau_0^{lin} / \tau_0^{nonlin} = 2.3150 \cdot 10^7 / 1.4555 \cdot 10^5 = 159.0519$ . Таким чином, наведені на рисунку 2.6 результати, які стосуються розв’язків

лінійного однорідного рівняння (зображено сірою лінією), мають приблизно у 159 разів менший масштаб часу. З фізичної точки зору це відповідає більшій швидкості розповсюдження збуджень у лінійному ланцюжку у порівнянні із нелінійним. Як відомо з фізичних експериментів з гранульованими ланцюжками, швидкість розповсюдження збуджень уздовж ланцюжка дійсно менша більш ніж на порядок у порівнянні із розповсюдженням у суцільному середовищі [46]. Як бачимо з вищенаведеного розгляду причина цього у нелінійності.

Аналізуючи дані, наведені на рисунку 2.6б та рисунку 2.6в, доходимо до висновку, що залежність зсуву фази, відносно отриманих по аналітичних розв'язках (тонка лінія), збільшується за умови зростання числа частинок у ланцюжку. Вищесказане дозволяє припустити поступове зменшення різниці у швидкості із збільшенням довжини ланцюжка. Асимптотично, для нескінченного ланцюжка (у континуальній границі) вони можуть навіть співпасти.

**Висновки** Наочно продемонстровано, як використовуючи відомий алгоритм Бейтмена [35], можна знайти аналітичні розв'язки рівняння руху імпульсу у неоднорідному герцівському ланцюжку із довільними граничними умовами. Отримані результати добре узгоджуються із чисельними розрахунками повного керуючого рівняння (2.50) у випадку ланцюжків обмеженої довжини та дозволяють зробити висновок, що за умов конфайнменту взаємний вплив нелінійності та неоднорідності на характеристики транспорту імпульсу є мультипараметричним фактором і для своєї оцінки потребує врахування граничних умов і матеріальних співвідношень.

Зменшення швидкості руху фронту збудження, яке точно спостерігається при збільшенні розмірів системи, вказує на потенційну можливість перетворення дисперсійної моди на нелінійну (лінійаризовану). У суцільній границі, розв'язки солітоподібного типу були знайдені явно [34]. Процес взаємного перетворення локалізованих та делокалізованих збурень у

дискретних мікро-механічних системах у певному сенсі нагадує корпускулярно-хвильовий дуалізм у квантовій механіці, хоча й відтворюється фактично у макро-масштабі.

### 3 МАТЕРІАЛЬНІ СПІВВІДНОШЕННЯ В ГРАНУЛЬОВАНИХ МАТЕРІАЛАХ

#### 3.1 Статистичний опис властивостей бікомпонентних гранульованих сумішей

**Вступ** Для опису властивостей бікомпонентних бінарних гранульованих систем використовується масштабно-інваріантної модель парної функції розподілу [9,47,48], яка базується на апараті узагальнених функцій. Це дозволило отримати аналітичні вирази відповідних кореляційних інтегралів, які містять інформацію про впакувальні фракції компонентів та дозволяють враховувати феноменологічну інформацію про стереологічні параметри локальної структури. Отримані співвідношення наочно демонструють вплив морфології локальної структури на надлишкові властивості бінарних систем. Розповсюдження запропонованого модельного підходу для опису відповідних параметрів бімодальних систем із локальною структурою розвиненою у мезо- та макромасштабах, зокрема - гранульованих матеріалів, та деяких інших об'єктів м'якої матерії, буде здійснено у окремій роботі.

**Метод Кірквуда-Баффа** Слідуючи [47], розглянемо бінарну багаточастинкову систему, яка складається з частинок сортів  $\alpha$  та  $\beta$  та займає об'єм  $V$  і введемо одно- та двох частинкові функції  $\rho_{\alpha}^{(1)}(r_1)$  та  $\rho_{\alpha\beta}^{(2)}(r_1, r_2)$  завдаються за допомогою інтегрального перетворення :

$$\int_V dr_1 \int_V dr_2 [\rho_{\alpha\beta}^{(2)}(r_1, r_2) - \rho_{\alpha}^{(1)}(r_1)] = \langle N_{\alpha} N_{\beta} \rangle - \langle N_{\alpha} \rangle \langle N_{\beta} \rangle - \delta_{\alpha\beta} \langle N_{\alpha} \rangle, \quad (3.1)$$

де  $N_{\alpha}$  - кількість частинок сорту  $\alpha$  в об'ємі  $V$ ;

$\langle \rangle$  - означає усереднення за ансамблем;

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

За допомогою (3.1) можуть бути визначені парціальні величини типу:

$$\rho_{\alpha}^{(1)}(r) = c_{\alpha} \text{ та } \rho_{\alpha\beta}^{(2)}(r_1, r_2) = c_{\alpha} c_{\beta} g_{\alpha\beta}(r_{12}), \quad (3.2)$$

де  $c_{\alpha} = \frac{\langle N_{\alpha} \rangle}{V}$  - густина частинок;

$g_{\alpha\beta}(r_{12})$  - парціальна парна функція розподілу.

Кореляційний інтеграл КБ визначається за допомогою набутого співвідношення

$$G_{\alpha\beta}^V \equiv \frac{1}{V} \iint_V (g_{\alpha\beta}(r_{12}) - 1) dr_1 dr_2 = V \frac{\langle N_{\alpha} N_{\beta} \rangle - \langle N_{\alpha} \rangle \langle N_{\beta} \rangle}{\langle N_{\alpha} \rangle \langle N_{\beta} \rangle} - \frac{\delta_{\alpha\beta}}{C_{\alpha}} \quad (3.3)$$

Складність використання підходу КБ полягає у обмеженості інформації про парціальні функції розподілу. Як для простих рідин, так і для випадку складних багаточастинкових систем визнаним джерелом отримання інформації про функції розподілу виступають експериментальні виміри статичних структурних факторів, із самоузгодженим розв'язком зворотної задачі з реконструкції самої функції розподілу [48-51].

**Аналітична модель парної функції розподілу** Для спрощення подальшого аналізу розглянемо модельний вираз для функції розподілу, який базується на врахуванні лише деяких рис структурної морфології і має наступний вигляд

$$g_{ij}(r) = \Theta(r - d_0^{(ij)}) + A\delta(r - d_1^{(ij)}), \quad (3.4)$$

де  $r = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ ;  $\vec{r}_1$  і  $\vec{r}_2$  - координати виділеної пари частинок;

$\theta(z)$  і  $\delta(z)$  узагальнені функції Хевісайда та Дірака, відповідно;

Величини  $d_0^{(ij)}$ ,  $d_1^{(ij)}$  та  $A_{ij}$  будуть визначені нижче. Детальний розгляд цієї моделі було надано у [9,48].

Як вже згадувалось вище, функції типу (3.4) описують найпростіші структурні риси, тобто, скажімо нульову ймовірність зближення будь-якої виділеної пари частинок на відносні відстані заменьшки  $d_0^{(ij)}$ . При цьому  $d_0^{(ij)}$  можна розглядати в якості діаметру твердої сфери (індекси  $i$ ,  $j$  відповідають сорту молекул).

Таким чином, модельний вираз (3.4) наближено описує ближнє впорядкування частинок в завданому околі виділеної. Якщо  $d_0^{(ij)}$  визначає “діаметр” частинки, тоді параметр  $d_1^{(ij)}$  можна визначити за допомогою масштабних параметрів впорядкування, наприклад, радіусів координаційних сфер  $b$ ,  $d_1^{(ij)} = bd_0^{(ij)}$ .

Користуючись (3.4) і розраховуючи кореляційні інтеграли (3.3) отримуємо

$$G_{ij} = \frac{4}{3} \pi \left\{ d_0^{(ij)3} - d_1^{(ij)3} + 3A_{ij}d_1^{(ij)2} \right\}, \quad G_{ii} = G_i \quad (3.5)$$

Коефіцієнт  $A_{ij}$  визначимо, використовуючи умови нормування ПФР

$$\frac{1}{\tilde{V}} \int_{\tilde{V}} g_{ij}(r) dr = 1, \quad A_{ij} = \frac{\tilde{V} - 8V_{ij}N_{ij}}{4\pi N_{ij}b^2 d_0^{(ij)2}} \quad (3.6)$$

де  $\tilde{V}$  - це розмір області для якої проводиться розрахунок;

$N_{ij}$  - кількість частинок сорту  $ij$  у області  $V$ ;

$V_{ij}$  - об'єм частинки сорту  $ij$ .

Підстановка (3.5) у (3.6) дає



$$G_{ij} = V_{ij} \{2 - \eta_{ij} - 8b_{ij}^3\} \quad (3.7)$$

де  $\eta_{ij}$  параметр впакування.

Отримані вирази для кореляційних інтегралів дозволяють записати співвідношення між параметрами системи (стисливістю та ексцесом ентропії) та параметрами структури [52,53].

Ізотермічна стисливість в рамках підходу КБ [47] для монодисперсних систем пов'язана із кореляційним інтегралом наступним чином

$$\beta_T = \frac{\rho G + 1}{k_b T \rho} \quad (3.8)$$

Узагальнення (3.8) на випадок бікомпонентної суміші має вигляд

$$\beta_T^{(KB)} = \frac{1}{k_b T} \cdot \frac{1 + \rho_1 G_1 + \rho_2 G_2 + \rho_1 \rho_2 (G_1 G_2 - G_{12}^2)}{\rho_1 + \rho_2 + \rho_1 \rho_2 (G_1 + G_2 - 2G_{12})}. \quad (3.9)$$

Для надлишкової ентропії маємо :

$$S^{ex} = -\frac{k_B \rho \Delta_{12} x^2}{2}, \quad (3.10)$$

де  $\Delta_{12} = G_{12} = G_{11} + G_{22} - 2G_{12}$ .

Співвідношення (3.7)-(3.10) наочно демонструють залежність стисливості та надлишкової ентропії від морфології локальної структури, зокрема параметру впакування  $\eta$  [52-54]. Інші параметри, які визначають локальну стереологію, і, в свою чергу, залежать від парціальних

концентрацій і степені асиметрії системи, можуть бути визначені експериментально або за даними чисельного моделювання.

**Висновки** Використання аналітичної моделі ПФР у термінах узагальнених функцій дозволило отримати аналітичні вирази для кореляційних інтегралів. Встановлено, що модельні вирази КБІ, завдяки властивостям моделі ПФР, демонструють помітну залежність від степені впакування в детермінованому околі частинки. Використаний підхід, формально, є масштабно-інваріантним, а також спирається на феноменологічну інформацію про локальну структуру, отриману з альтернативних джерел. З урахуванням вищесказаного, вкажемо на потенційну можливість використання запропонованого підходу до опису макроскопічних параметрів полідисперсних об'єктів м'якої матерії із складною морфологією, розвиненою у мезомасштабі.

### **3.2 Кінетична модель компактизації гранульованих матеріалів**

**Вступ** Гранульовані матеріали є конгломераціями великої кількості мікрочастинок, які взаємодіють між собою лише шляхом відштовхування, внаслідок яких, вони втрачають частку енергії. Фізичні властивості, які показують такі системи під впливом зовнішніх збурень створюють вагомий сектор сучасних як теоретичних так і експериментальних досліджень [1-4].

Так, компактизація гранульованих матеріалів під впливом зовнішніх струсів, яка має безпосереднє ефективне практичне застосування, детально вивчалася у низці робіт (див. наприклад [17,55-61]). Експериментально встановлено, що кінетична фазова діаграма, яка описує компактизацію, показує асимптотичне насичення до квазірівноважних станів, які відповідають максимальній (або такий, що близька до неї) щільності впакування. У загальному випадку найпростіших систем (твердих кульок)

закон релаксації із достатньою точністю відтворює відомий однорідний сценарій Колмогорова-Фогеля-Фулчера [56,57]. Теоретичні підходи до опису кінетики впакування, серед яких достатньо вказати кінетичну модель вільного об'єму [17,57-59,61] в цілому, задовільно описують асимптотичну поведінку відповідного параметру впорядкування. Водночас, для параметризації експериментальних даних бракує підходів які враховували б матеріальні співвідношення, які належать до фізичної природи та конструкції системи яка розглядається. У пропонуємій роботі ми зосередимо увагу на вивченні саме деяких аспектів, які належать саме до цього останнього питання.

Як було показано у роботі [55], навіть мінімальна деталізація в описі структури систем із складною внутрішньою морфологією (якими як раз і є гранульовані матеріали) приводить до формулювання рівняння стану у вигляді диференціального рівняння Абеля яке не інтегрується в квадратурах і припускає розв'язки лише в окремих визначених інтервалах значень параметра впакування.

В даній роботі буде розглянуто систему твердих сфер яка задовольняє рівнянню стану Карнахана-Старлінга [51], що формулюється у термінах параметрів компактизації. Просте кінетичне рівняння для відповідно визначеного параметру впорядкування буде проаналізоване за допомогою підходу Ландау [18,62]. В рамках запропонованого підходу буде проаналізовано вплив параметрів (зокрема - компактизації), які визначають стан системи та її кінетику, на характерні часи релаксації системи до асимптотичного квазістаціонарного стану [25,58]. На цьому шляху наближення до квазістаціонарного стану відбувається шляхом кусково-неперервних однорідних релаксаційних циклів, які заповнюють повний інтервал впакувальної фракції.

**Вільна енергія для моделі твердих кульок Карнахана-Старлінга**  
Рівняння стану Карнахана-Старлінга для твердих сфер має вигляд [51]

$$PV = NkT \cdot \frac{1 + \eta + \eta^2 - \eta^3}{(1 - \eta)^3}, \quad (3.11)$$

де  $P$  – тиск;

$V$  - об'єм;

$N$  - кількість частинок;

$kT$  - добуток який, покладемо, нехай визначає масштаб енергії частинок;

$\eta = \frac{1}{6} \pi \sigma^3 \frac{N}{V}$  – параметр компактизації;

$\sigma$  - діаметр частинок.

Користуючись співвідношенням для визначення тиску  $P = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T$ , енергію  $F$ , яка відповідає (3.11), в термінах параметра  $\eta$  отримуємо у наступному вигляді

$$F = NkT \left( \frac{3 - 2\eta}{(1 - \eta)^2} - \frac{3 - 2\eta_1}{(1 - \eta_1)^2} + \ln \frac{\eta}{\eta_1} \right), \quad (3.12)$$

де  $\eta$ ,  $\eta_1$  - відповідно, поточне та початкове значення параметру компактизації.

У граничному випадку, коли розміри частинок прямують до нуля, із (3.12) випливає відоме співвідношення для енергії ідеального газу

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

Експериментальні спостереження [57] показують, що система асимптотично насичується (шляхом впакування) до деякого граничного квазістаціонарного стану (див. Рис. 3.1).

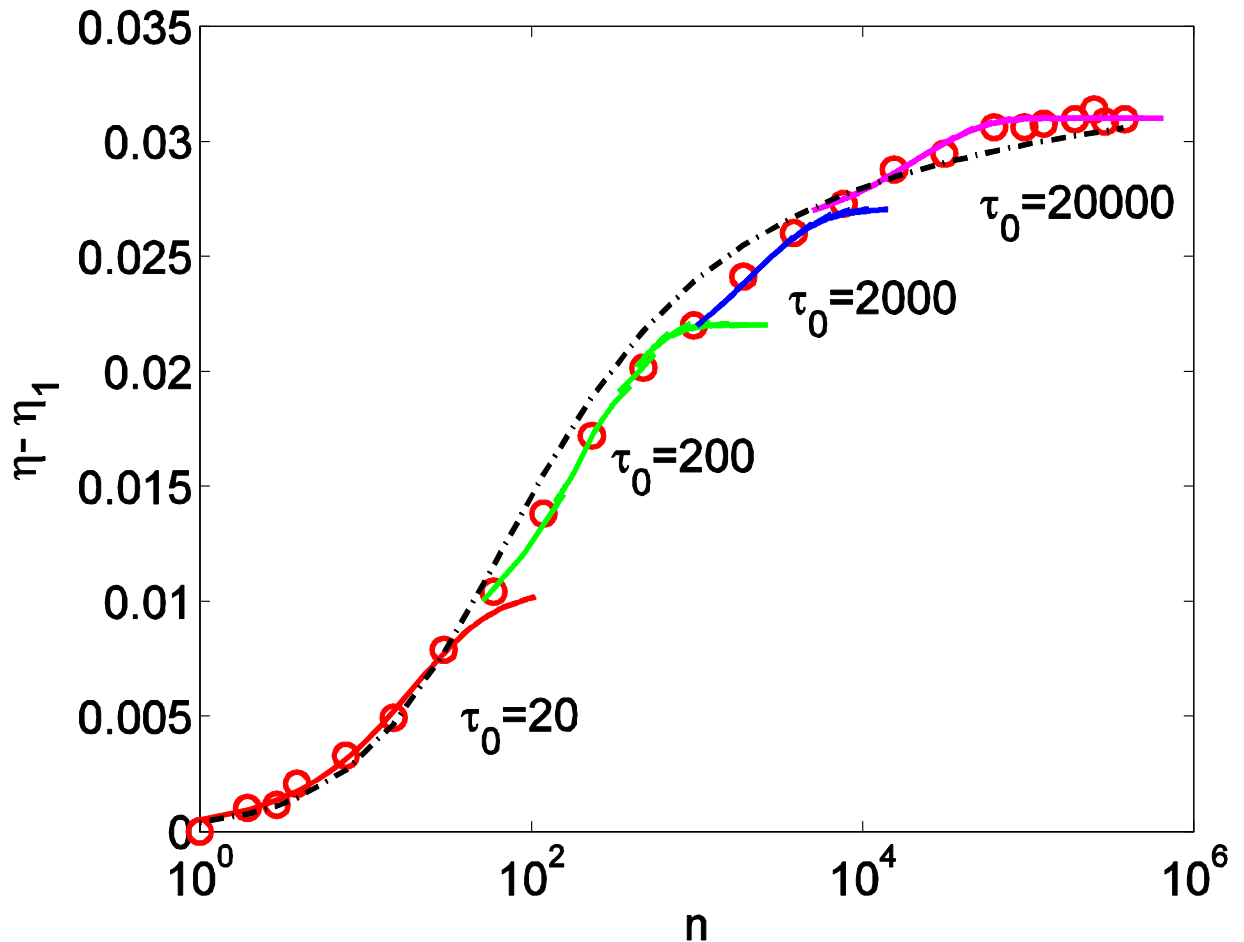


Рисунок 3.1 – Експериментальна залежність (о) впакування ( $\eta - \eta_1$ ) у гранульованій системі [57], де  $n$  - кількість струсів; апроксимація експериментальних даних за законом оберненого логарифма (крапка-тире) [57] та кусково-безперервна (суцільні лінії) з використанням отриманого тут простого експоненційного закону релаксації (3.22). Дані експерименту [57]:  $\eta_1=0.56$ ,  $\eta_\infty=0.591$ .

Для дослідження процесу релаксації системи поблизу насиченого стану введемо параметр впорядкування за наступним правилом

$$\phi(t) = \frac{\eta_\infty - \eta(t)}{\eta_\infty - \eta_1}, \quad (3.13)$$

де  $\phi(0) = 1$  - відповідає початковому;

$\phi(\infty) = 0$  - відповідає асимптотичному квазістаціонарному станам системи.

Надане вище визначення параметру впорядкування дозволяє у подальшому скористатися підходом Ландау [62] у описі релаксації поля впорядкування у околі асимптотичного стаціонарного стану.

Вільну енергію  $F$  яка дається співвідношенням (3.12) (і невраховує флуктуаційні ефекти), як функцію параметра  $\phi$  перепишемо у наступному вигляді

$$\frac{F(\phi)}{NkT} = \frac{3 - 2\eta_\infty + 2(\eta_\infty - \eta_1)\phi}{(1 - \eta_\infty + (\eta_\infty - \eta_1)\phi)^2} - \frac{3 - 2\eta_1}{(1 - \eta_1)^2} + \ln \frac{\eta_\infty - (\eta_\infty - \eta_1)\phi}{\eta_1}. \quad (3.14)$$

Розкладаючи  $F(\phi)$  у степеневий ряд:

$$\frac{F(\phi)}{NkT} = A_0 + A\phi + B\phi^2 + C\phi^3 + D\phi^4 + \dots, \quad (3.15)$$

і користуючись (3.14), (3.15) отримуємо рівняння

$$\frac{F(\phi)}{NkT} = A_0 + \sum_{k=1}^{\infty} \phi^k (\eta_\infty - \eta_1)^k \left[ \frac{(3+k) - 2\eta_\infty}{(1 - \eta_\infty)^{k+2}} (-1)^k - \frac{1}{k\eta_\infty^k} \right], \quad (3.16)$$

$$\text{де } A_0 = \ln \frac{\eta_\infty}{\eta_1} + \frac{3 - 2\eta_\infty}{(1 - \eta_\infty)^2} - \frac{3 - 2\eta_1}{(1 - \eta_1)^2}.$$

Можна показати, що сума у виразі (3.16) безпосередньо незалежить від початкового значення впакування  $\eta_1$  твердих сфер. Вище сказане свідчить про можливість переходу системи, шляхом впакування до одного і тогож асимптотичного квазістаціонарного стану починаючи з різних початкових станів.

**Кінетичне рівняння** Запишемо кінетичне рівняння для параметра впорядкування  $\phi$  у такому вигляді:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -\Gamma \frac{\delta F}{\delta \phi}, \quad (3.17)$$

де  $\Gamma$  - кінетичний коефіцієнт.

Аналіз отриманого для  $F$  виразу показує, що функції, отримані обмеженням ряду (3.16) з урахуванням внесків до квадратичного степеня включно, мають у фізичній області значень параметру упакування  $\eta$  один екстремум (а саме мінімум). У околі таких станів можна очікувати сповільнення процесів релаксації модельної системи. Розглянемо у якості прикладу рівняння (3.17) з урахуванням ряду (3.16), обмеженого врахуванням до квадратичного внеску включно.

Відповідне кінетичне рівняння у вищевизначеному наближенні набуває вигляду

$$\frac{\partial \phi}{\partial \tau} = \alpha - \beta \phi, \quad (3.18)$$

де  $\alpha = -A$ ;

$\beta = 2B$ ;

$\tau = t \cdot (\Gamma N k T)$ .

Рівняння (3.18) має тривіальний розв'язок

$$\phi = \frac{\alpha}{\beta} + \left(1 - \frac{\alpha}{\beta}\right) e^{-\beta \tau}. \quad (3.19)$$

Підстановка (3.13) до (3.19) дає

$$\eta(\tau) = \eta_1 + (\eta_c - \eta_1)(1 - e^{-\tau/\tau_0}), \quad (3.20)$$

де  $\tau_0 = \beta^{-1}$  - характерний час релаксації;

$$\eta_c = \eta_\infty - (\eta_\infty - \eta_1) \frac{\alpha}{\beta}. \quad (3.21)$$

Звернемо увагу на самоузгоджене (в рамках моделі) визначення величин  $\eta_c$ .

Рівняння (3.20) показує, що характер релаксації, який описує вище побудована спрощена модель, задовільняє однорідному сценарію Колмогорова-Фогеля-Фулчера [57].

**Загальні риси релаксації параметру компактизації** Як витікає з визначення  $\tau_0$  (див. (3.18)-(3.20)), із урахуванням виразів (3.18), (3.15) та (3.16), витікає:  $\tau_0 \sim (\eta_\infty - \eta_1)^{-2}$ . Тобто, із збільшенням початкового впакування системи ( $\eta_1 \rightarrow \eta_\infty$ ), характерний час релаксації  $\tau_0$  зростає, помітно уповільнюючи процес ущільнення.

Із співвідношення (3.20) можна бачити, що параметр впакування  $\eta(\tau)$  асимптотично прямує до визначеного значення  $\eta_c$ , величина якого складає 0.647. Відхилення значення  $\eta_c$  від  $\eta_\infty=0.74$  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  $\eta_c$ , величина якого складає 0.62. Врахування у (3.17) 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  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\eta_c$ .

Отримані результати показують що в рамках запропонованої моделі впакування відбувається за немонотонним сценарієм. Використання у кінетичному рівнянні (3.17) поліномів з парними степенями, показують що існують певні значення впакування  $\eta_c$ , поблизу яких система наближується до асимптотичного квазістаціонарного стану.

Використання поліномів з непарним степенем у кінетичному рівнянні (3.17), не дає розв'язків з насиченням впакування системи до асимптотичних станів та добре апроксимуються лінійними функціями.

Останнє пов'язано з наявністю мінімуму у поліномів парного степеня та відсутністю його у поліномів непарного степеня у фізичній (для впакування твердих сфер) області. Положення мінімумів в залежності від розміру полінома показані у таблиці 3.1.

Таблиця 3.1 – Положення мінімумів в залежності від рангу полінома  $F(\eta)$

$N$	2	4	6	8	10	12	$\infty$
$\eta_c$	0.647	0.620	0.602	0.589	0.579	0.570	0.48

Значення  $\eta_c=0.647$ , яке було розраховано за формулою (3.21) з використанням у якості максимально можливого впакування величини  $\eta_m=0.74$ , знаходиться у межах відомого для твердих сфер значення  $\eta_{RCP}$  (random close packing) від 0.63 до 0.65. Зауважимо, що рівняння стану Карнахана-Старлінга, яким ми скористалися для отримання цього результату невраховує деяких присутніх у реальній гранульованій системі чинників: таких як дисипацію енергії, відхилення від сферичності частинок та стан їх поверхні, дисперсію розмірів, інтенсивність та тип збурення системи, а також

наявність зовнішніх полів (наприклад тяжіння). Вкажемо, що у багатьох експериментах асимптотичні значення впакування гранульованих матеріалів мають різні значення [11,57,63-67].

Таким чином, наближено для використання отриманого результату (3.20) з метою параметризації експериментальних даних, можна замінити розраховане критичне значення впакування  $\eta_c$  на асимптотичне  $\eta_\infty$ , яке наприклад спостерігається експериментально. З урахуванням вище зроблених зауважень, простий експоненційний закон релаксації може бути надано у наступному вигляді [1]:

$$\eta(\tau) = \eta_1 + (\eta_\infty - \eta_1) \left(1 - e^{-\tau/\tau_0}\right), \quad (3.22)$$

Як можна бачити з рисунку 3.1, кусково-безперервна аппроксимація експериментальних даних експоненційними законами релаксації параметра впакування ( $\eta$ ) з характерними часами ( $\tau_0$ ), що відрізняються один від одного майже на порядок при переході між сусідніми ділянками кінетичної функції впакування, задовільно дозволяє описати експеримент за допомогою характерних ділянок [68]. 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 [57]

$$\eta(\tau) = \eta_1 + (\eta_\infty - \eta_1) \left(1 - e^{-[\tau/\tau_0]^\alpha}\right), \quad (3.23)$$

та обернений логарифм [1]

$$\eta(\tau) = \eta_\infty - \frac{\eta_\infty - \eta_1}{1 + B \ln(1 + \tau/\tau_0)}, \quad (3.24)$$

(див. Рис. 3.1), 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 [67]:

$$\eta(\tau) = \eta_{\infty} - \Delta\eta \cdot E_{\alpha} \left( - \left( \frac{\tau}{\tau_0} \right)^{\alpha} \right), \quad (3.25)$$

де  $\Delta\eta = \eta_{\infty} - \eta_1$ ;

$E_{\alpha}$  - функція Міттаг-Леффлера порядку  $\alpha$ ,  $0 < \alpha < 1$ ;

$\eta_{\infty}$  та  $\eta_1$ , відповідно, параметр впакування у асимптотичному квазістаціонарному стані (поблизу якого відбувалося розкладання функціоналу вільної енергії) та параметр впакування у початковому стані;

$\tau = k\Gamma$ ;

$\Gamma$  - параметр збудження;

$k$  - матеріальна стала.

Асимптотично, коли ( $\alpha \rightarrow 1$ ), розв'язок (3.25) перетворюється на простий експоненційний закон релаксації (3.22):

$$\alpha \rightarrow 1; \Rightarrow E_{\alpha} \left( - \left( \frac{\tau}{\tau_0} \right)^{\alpha} \right) \rightarrow \exp \left( - \frac{\tau}{\tau_0} \right), \quad (3.26)$$

який відповідає кінетичному сценарію релаксації Ландау-Гінзбурга у лінійному наближенні, який було описано вище. У випадку коли показник  $\alpha$  прямує до нуля асимптотика функції Міттаг-Леффлера змінюється на логарифмічну і описує, як вже згадувалося, закон релаксації повільної компактизації, який спостерігається в експериментах з впакування гранульованих матеріалів [1]. Отримані результати показують, що

впакування та властивості мобільності в гранульованих (пористих) матеріалах цілком вписуються у сценарій фракційної (дробової) кінетики, а сам процес є неоднорідним і суттєво залежить від інтервалу значень впакувальної фракції в якому він здійснюється.

**Висновки** Отримані результати свідчать про можливість формального застосування методів статистичної фізики до опису окремих явищ у мікромеханічних багаточастинкових системах (зокрема, компактизації гранульованих матеріалів, які є суто динамічними дисипативними системами) поблизу асимптотичних квазі-стаціонарних станів.

Також проаналізовані можливості використання моделі фракційної кінетики у застосуванні до опису релаксації параметру компактизації, яка є більш загальною у випадку неоднорідного розподілу щільності.

Для моделі твердих сфер, яка задовольняє рівнянню стану Карнахана-Старлінга, сформульовано просте кінетичне рівняння, яке описує релаксацію фактору компактизації до асимптотичного квазістаціонарного стану. Користуючись підходом Ландау знайдені аналітичні розв'язки моделі, які описують однорідну релаксацію відповідно визначеного параметру впорядкування у послідовній кусково-безперервній низці інтервалів значень параметра впакування. Характерний час релаксації ступеня впорядкування визначено в термінах параметрів моделі. Показано, що задовільний опис компактизації може бути здійснений за допомогою моделі фракційної кінетики, яка у відповідних границях відтворює відомі асимптотичні закони релаксації. Отримані результати добре узгоджуються із даними експериментів в яких безпосередньо вимірюється компактизація гранульованих матеріалів під впливом зовнішніх збурень.

### 3.3 Модель ентропії ґраткового газу для опису щільності гранульованих матеріалів

Збурення гранульованих систем веде до ущільнення, тобто до зменшення об'єму, який займає система [57]. З огляду на це, постає питання теоретичного обґрунтування та параметризації цього явища. Скористаємося квазістатистичним підходом до опису густини гранульованих матеріалів. На цьому шляху запишемо вираз для функціоналу вільної енергії системи у т.з. «інгерентних» станах [61] у вигляді

$$F(\rho) = E(\rho) - \beta^{-1}S(\rho), \quad (3.27)$$

де енергія системи в гравітаційному полі надається виразом

$$E(\rho) = mg \int_{(V)} z\rho(\vec{r})d\vec{r}, \quad (3.28)$$

де  $z$  - вертикальна координата;

$\beta = \frac{1}{k_B T}$  - масштаб енергії;

$\rho$  - густина системи.

В якості виразу для  $S(\rho)$  скористаємося відомим співвідношенням для ентропії ґраткового газу [69]

$$S(\rho) = - \int_{(V)} d\vec{r} \left\{ \frac{\rho}{\rho_0} \ln \frac{\rho}{\rho_0} + \left( 1 - \frac{\rho}{\rho_0} \right) \ln \left( 1 - \frac{\rho}{\rho_0} \right) \right\}, \quad (3.29)$$

де  $\rho_0$  - максимальна густина системи.

Розрахунок варіаційної похідної  $\frac{\delta F(\rho)}{\delta \rho}$ , породжує рівноважний профіль густини у формі розподілу подібного до функції Фермі

$$\rho(\vec{r}) = \frac{\rho_0}{1 + ce^{\Gamma z}}, \quad \Gamma = mgr_0\beta, \quad (3.30)$$

де  $c$  - стала, яка визначається шляхом порівняння з експериментальними даними.

Саме формулу типу (3.29) було використано у [70] для параметризації експериментальних вимірів вертикального профілю густини у гранульованих матеріалах.

Розглянемо нашу систему в околі впорядкованого (симетризованого) стану. Тоді відхилення від цього стану (див. Рис. 1.6а) можна інтерпретувати як руйнування ("плавління") симетризованого ("кристалічного") стану (див. Рис. 1.6б). Зазначимо, що зазвичай, для кількісного визначення руйнації кристалічного впорядкування у твердих тілах (плавління) використовується т.з. параметр Ліндемана [71]. Останній розраховується, як середньоквадратичне відхилення окремої частинки від положення рівноваги

$$\gamma = \sqrt{\langle (r - \langle r_i \rangle)^2 \rangle} / L, \quad (3.31)$$

де  $r_i$  - відстань проміж частинками-сусідами у спостерігаємому стані;

$r$  - відстань проміж частинками-сусідами у симетризованому стані;

$L$  - стала ґратки.

В термінах використаної моделі вираз для параметру набуває вигляду

$$\gamma = \frac{\rho_0 c}{\Gamma^2} \left\{ \rho \frac{\ln^2 \frac{1}{c} \left( \frac{\rho_0}{\rho} - 1 \right)}{c \rho_0} - \frac{1}{c} \ln^2 \frac{1}{c} \cdot \left( \frac{\rho_0}{\rho} - 1 \right) - \right. \\ \left. - 2 \left[ \ln c \ln \frac{\rho_0}{\rho} + Li_2 \left( \frac{\rho_0}{\rho} \right) \right] - \rho_0 c \left[ \rho \frac{\ln c}{\rho_0} - \ln \frac{\rho_0}{\rho} + \frac{\rho_0 - 1}{\rho} \ln \left( \frac{\rho_0}{\rho} - 1 \right) \right]^2 \right\}, \quad (3.32)$$

де  $Li_2$  - є спеціальна функція ділогарифм [35].

На рисунку 3.2 зображена розрахована за формулою (3.32) поведінка залежності  $\gamma$  від параметру впакування  $\eta$ .

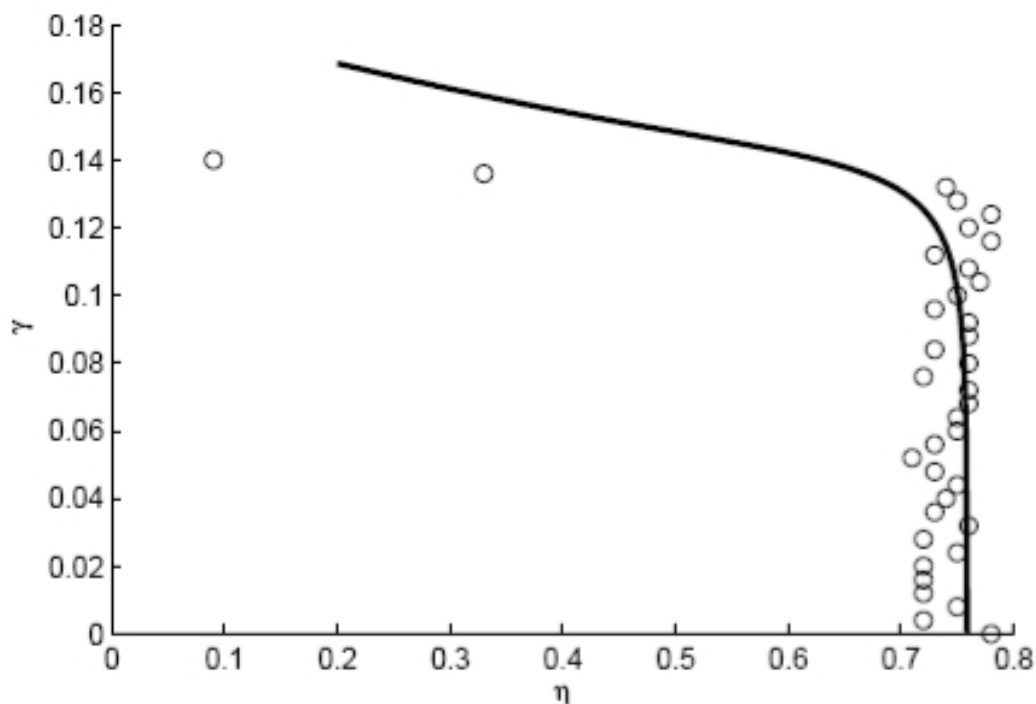


Рисунок 3.2 – Залежність параметра  $\gamma$ , який розраховано за (3.32) від параметру впакування. Точками показано дані експерименту [70].

З наведених на рисунку 3.2 даних випливає, що отримана експериментально залежність параметра  $\gamma$  від густини, по-перше, якісно

відповідає передбаченням запропонованої аналітичної моделі. По-друге, свідчить про те, що профіль ущільнення г.м. у гравітаційному полі не відповідає розподілу Больцмана. Варіація граничного значення густини  $\rho_0$  в межах фізичного змісту моделі (зокрема у напрямку реально досяжних значень параметру впакування), веде до кращого узгодження даних експерименту і отриманих на підставі теоретичної моделі. Реально досяжні значення параметру впакування в вертикальній системі твердих сфер досягають 0.78. Наближуючи початкові умови до цієї границі, ми звужуємо інтервал впакування, в якому розвиваються сценарії структуроутворень. Фактично, це обмежує кінетичні ступені вільності руху частинок-гранул, збільшуючи роль відносних конфігурацій та ентропійних ефектів, які їм відповідають. Порівняльний аналіз теоретичних та експериментальних даних, свідчить про те, що вони майже повністю співпадають у найближчому околі максимального впакування у системі (див. Рис. 3.2).

Для опису поведінки вертикального профілю густини гранульованих матеріалів у гравітаційному полі запропоновано наочну комбіновану модель ентропії ґраткового газу. Побудована фазова діаграма в термінах параметра, типу параметра Ліндемана в теорії плавлення кристалів та компактизації у системі. Отримані дані свідчать про відповідність базових принципів ентропійної моделі до природи структурних перетворень у гранульованих системах, особливо для щільно впакованих систем. Відмітимо також, що застосована ентропійна модель тривіально відтворює небольцманівський характер профілю густини г.м. у гравітаційному полі.

Наочно спостерігається наявність критерію переходу до кристалічно впорядкованного стану у термінах параметру компактизації, з якого відбуваються переходи у різні за симетрією стани.



## **4 СПЕКТРАЛЬНІ ВЛАСТИВОСТІ ГРАНУЛЬОВАНИХ МАТЕРІАЛІВ ТА УЗАГАЛЬНЕННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ ДОСЛІДЖЕННЯ ЗА ТЕМОЮ МОНОГРАФІЇ «ФІЗИКА ГРАНУЛЬОВАНИХ МАТЕРІАЛІВ»**

### **4.1 Розповсюдження електромагнітних хвиль в моделі 1D гранульованої системи у наближенні віртуального впорядкування**

Гранульовані системи є конгломератами великої кількості дискретних макроскопічних частинок, що взаємодіють лише за допомогою сил відштовхування. При цьому форму усєї системи визначають граничні умови (наприклад, форма об'єму включення) або конфігурація зовнішніх полів (наприклад, гравітаційних сил). Сили відштовхування між гранулами в точці їх контакту є дисипативними (навіть в стані спокою між гранулами діють сили герцівського статичного тертя). Гранульований матеріал, таким чином, є нерівноважною, нелінійною, дисипативною багаточастинковою мікро-механічною системою, а його теоретичний опис вимагає спеціального визначення і належить до актуальних і досить складних завдань сучасної фізики, окремих положень теорії рідини і твердого тіла, що вимагають об'єднання, статистичної фізики і теорії імовірності, стереології і теорії динамічних систем у виділену концепцію, адаптовану до їх спостережуваних незвичайних властивостей .

До унікальних властивостей гранульованих матеріалів належить, наприклад, їх природна анізотропія, що в принципі відкриває перспективу їх застосування як елементів ізоморфних низькорозмірним фотонним кристалам, але не в звичному микро-, а в мезо- і навіть в макро- масштабі. Приведена нижче аргументація, яка базується на простих наочних загальновідомих моделях, дозволяє припустити, що цей клас матеріалів є потенційно придатним для їх використання як елементів оптичної схемотехніки (гранульована фотоніка).

**Фізичні принципи електронного і оптичного переносу** Як відомо фотонним кристалом називають матеріал, структура якого характеризується періодичною зміною показника заломлення в просторових напрямках. У ряді робіт дається наступне визначення фотонних кристалів - "фотонними кристалами прийнято називати середовища, у яких діелектрична проникність періодично змінюється в просторі з періодом, що припускає брегівську дифракцію світла". Нарешті зустрічається ще таке визначення фотонних кристалів - "структури з фотонною забороненою зоною".

Інтерес до дослідження властивостей так званих розвпорядкованих фотонних кристалів обумовлений двома тісно пов'язаними причинами. По-перше, можливістю існування фотонного кристала, фотонна заборонена зона (ФЗЗ) якого не буде заповнена дозволеними станами внаслідок безладу. По-друге, можливістю локалізації світла в таких кристалах.

Відомо, наприклад, що наявність безладу в напівпровідниках може призводити до локалізації електронів, що веде до зниження електричної провідності. Подібний ефект (локалізація світла) може спостерігатися і у відповідних діелектричних структурах. На цьому шляху, враховуючи, що теорія локалізації електронів в розвпорядкованих твердих тілах досить добре розвинена, а також внаслідок подібності хвильових рівнянь для світла і рівнянь руху для носіїв заряду, природним здається перенесення результатів, отриманих для носіїв заряду, на випадок поширення фотонів.

Помітимо, проте, що незважаючи на подібність хвильового рівняння для світла:

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) = \varepsilon(\mathbf{r}) \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{E}(\mathbf{r}), \quad (4.1)$$

де  $\varepsilon(\mathbf{r})$  - просторова залежність діелектричної проникності, яка може включати як регулярну (періодичну), так і випадкову (флуктуаційну або пов'язану із наявністю дефектів) частини:  $\varepsilon(\mathbf{r}) = \varepsilon^{(0)}(\mathbf{r}) + \varepsilon_{fluct}(\mathbf{r})$ ,

та рівняння Шредингера для хвильової функції електрона:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(\mathbf{r})\psi = E\psi, \quad (4.2)$$

де  $V(\mathbf{r}) = V^{(0)}(\mathbf{r}) + V_{fluct}(\mathbf{r})$  - потенційна енергія;

$E$  - енергія стану;

в цих двох рівняннях є і дуже істотна відмінність. А саме, потенціал  $V(\mathbf{r})$  в рівнянні (4.2) може бути як позитивним, так і негативним. Крім того,  $V(\mathbf{r})$  входить в (4.2) незалежно від  $E$ . Діелектрична проникність  $\varepsilon(\mathbf{r})$  в непоглинаючих матеріалах є дійсним позитивним числом і фігурує в рівнянні (4.1) у вигляді добутку  $\varepsilon(\mathbf{r})\omega^2$ . Електрон може бути локалізований в мінімумах потенціалу  $V(\mathbf{r})$ , тоді як для фотонів, енергія яких позитивна, така можливість відсутня. В той же час, когерентне зворотне розсіяння (яке, як відомо, супроводжується слабкою локалізацією електронів, і яке прийнято вважати предтечею локалізації), проявляється в експериментах, у формі збільшення інтенсивності розсіяння світла невпорядкованим середовищем в напрямі, протилежному до напрямку випромінювання, що падає. Останнє вказує на те, що локалізація світла в невпорядкованих фотонних мікроструктурах в принципі можлива.

Окрім того, внаслідок електрон-електронної та електрон-фотонної взаємодії для електронів можна ввести поняття так званої довжини збою фази. Для світла, яке поширюється в непоглинаючих середовищах неможливо адекватно визначити поняття довжини збою фази. Це означає, що когерентність фотонного стану не порушується на масштабах, відповідних розміру зразка. Наслідком вищезгаданої властивості є те, що поширене

уявлення про розповсюдження фотонів як про дифузію, яка описується коефіцієнтом дифузії що залежить від розміру зразка, є не зовсім адекватним. Також при описі властивостей власних оптичних мод потрібний, облік процесів, що відбуваються на межах зразка.

Для систем, що характеризуються провідністю, середня швидкість електронів змінюється і пропорційна прикладеному електричному полю. Швидкість же фотонів апріорі стала. Крім того, провідність - величина, усереднена за ансамблем різних електронів, тоді як коефіцієнт пропускання фотонів на фіксованій частоті є характеристика однієї фотонної моди (чи порівняно невеликої їх кількості).

Таким чином аналогія між провідністю фотонного кристала в електронній і коефіцієнтом пропускання світла в оптичній задачах не є наслідком однакових фізичних механізмів і до того ж є неповною.

Локалізація електронів призводить до зниження провідності. Локалізація світла можлива, наприклад в мікрорезонаторах, що є ізольованим дефектом (скажімо, шар товщина якого складає половину довжини хвилі), або, наприклад, у фотонному кристалі (брегівському відбивачі, що має вигляд періодичної послідовності пар шарів з товщиною в чверть довжини хвилі). При цьому, для власної моди мікрорезонатора щільність електромагнітної енергії  $\rho(z)$  дається виразом

$$\rho(z) \sim \exp(-|z|/\xi), \quad (4.3)$$

де  $\xi$  - довжина згасання.

У спектрі пропускання локалізований стан проявляється, як гострий пік (коефіцієнт пропускання при цьому може досягати одиниці), тобто локалізація не веде до повної неможливості переносу.

Дослідження поширення світла в експериментах з різними фотонними кристалами (з різною мірою розвпорядкування) показали, що в області частот, відповідної ФЗЗ, в спектрах пропускання світла є чіткий мінімум, і при цьому коефіцієнт пропускання експоненціально зменшується при

збільшенні товщини зразка (причому довжина загасання більша, ніж у разі ідеальної, впорядкованої структури).

Можна допустити, що в розвпорядкованих фотонних кристалах світло, частота якого відповідає ФЗЗ, може бути локалізоване навіть при малому безладі. Припущення може бути підкріплене наступними міркуваннями. З достатньою точністю амплітуда електричного поля хвилі, що поширюється, може бути представлена суперпозицією полів вільного фотона з хвилевим вектором  $\mathbf{k}$  і такої ж хвилі, що здійснила брегівське відбиття, з хвилевим вектором  $\mathbf{k} - \mathbf{G}$ . Коли  $\omega$  зсовується в дозволена зону, така стояча хвиля модульована огиноючою, довжина хвилі якої визначається співвідношенням  $2\pi/q$ , де  $q$  - величина відхилення вектору  $\mathbf{k}$  від брегівської площини.

Прийнято вважати фотонний стан локалізованим, якщо виконується критерій Іоффе-Регеля:

$$kl < 1, \quad (4.4)$$

де  $l$  - довжина вільного пробігу.

У разі фотонного кристала в критерії Іоффе-Регеля повинна фігурувати довжина хвилі огиноючої  $\lambda_{env} = 2\pi/q$ . При цьому критерій  $2\pi/\lambda_{env} \approx 1$  априорі задовольняється поблизу межі зон.

У загальному випадку припущення (4.4) для фотонного кристала не виконується. Якщо в ідеальному нескінченному кристалі частота лежить зовні ФЗЗ, електромагнітне поле є блохівською хвилею сталої амплітуди. Якщо частота відповідає ФЗЗ, то електромагнітне поле є експоненціально згасаючою блохівською хвилею. Застосування критерію Іоффе-Регеля для фотонного кристала виглядає дещо штучним, оскільки моди не є строго плоскими хвилями. Окрім того, не зовсім чітко визначається така величина, як довжина вільного пробігу у фотонному кристалі. А саме, елементи фотонного кристала є розсіювачами, для кожного з яких можна розрахувати переріз розсіяння (або, в одновимірному випадку, коефіцієнт відбиття). Надалі, знаючи їх концентрацію, треба визначити середню довжину

вільного пробігу фотонів. Проте спільна дія періодично розташованих розсіювачів призводить не до розсіяння, а до формування блохівської хвилі. Тому підстановка в критерій Іоффе-Регеля  $\lambda_{env}$ , помноженої на деякий хвилевий вектор, розрахований за допомогою наближення ефективного середовища (яке в даній області частот, строго кажучи, не працює), взагалі кажучи не дозволяє зробити однозначний висновок про можливість локалізації світла у фотонних кристалах.

Помітимо також, що у фотонних кристалах обмеженого розміру має місце модуляція щільності енергії. При цьому огинюча щільності енергії для стану, найближчого до межі забороненої зони, є півхвилею, довжина якої відповідає розміру зразка, а для другого від межі стану - дві півхвилі, для третього - три, і так далі.

Одним з найбільш поширених теоретичних методів дослідження поведінки електромагнітного поля в розвпорядкованих фотонних мікроструктурах є розрахунок "довжини локалізації світла", що визначається за формулою:

$$\xi = -L / \langle \ln T \rangle, \quad (4.5)$$

де  $T$  - коефіцієнт пропускання світла;

$L$  - розмір зразка;

кутові дужки - означають осереднення за ансамблем.

Такий підхід заснований на уявленні про те, що в розвпорядкованих структурах осереднене поле експоненціально згасає.

Експоненціальне згасання світлової хвилі не означає, проте, наявності локалізованого стану, що характеризується відповідною довжиною згасання. Описані вище теоретичні підходи, таким чином, не дозволяють повною мірою однозначно відповісти на питання про стійкість ФЗЗ до розвпорядкування фотонного кристала, та не формують загальної фізичної картини явищ що спостерігаються. Для "електронної" задачі електрон-електронна та електрон-фононна взаємодії не дозволяють отримати точний розв'язок задачі для макроскопічної системи. У "фотонному" випадку окремі моди електромагнітного

поля для систем великого розміру можуть бути розраховані точно шляхом чисельного розв'язку рівнянь Максвелла.

**Зонна структура фотонного кристала** Чисельні розрахунки показника заломлення в одновимірному розвпорядкованому фотонному кристалі показують, що, якщо параметр, що характеризує безлад, не перевищує деякого граничного значення, істотного збільшення довжини згасання в центрі ФЗЗ, осередненої за ансамблем конфігурацій, із зростанням безладу не відбувається. Аналогічні результати були отримані і для двовимірного випадку. У зв'язку з цим була висунена гіпотеза, що заповнення ФЗЗ фотонними станами починається тільки після того, як безлад в структурі перевищує деяке граничне значення.

Розглянемо спектр власних оптичних станів в одновимірних розвпорядкованих фотонних кристалах в області частот, відповідної ФЗЗ. Спробуємо встановити зв'язок між коефіцієнтом пропускання світла (що є величиною яка спостерігається експериментально) і змінами спектру власних мод внаслідок розвпорядкування структури, показник заломлення якої описується формулою:

$$\begin{aligned} n_A &= n_0 \\ n_B &= n_0 + \Delta n, \end{aligned} \quad (4.6)$$

де  $n_0$  - показник заломлення однорідного (впорядкованого) середовища;

$\Delta n$  - модуляція показника заломлення.

Для такої періодичної структури методом матриці переносу може бути отримане дисперсійне рівняння у вигляді:

$$\cos KD = \cos \frac{\omega}{c} \sqrt{n_A} d \cos \frac{\omega}{c} \sqrt{n_B} d - \frac{1}{2} \left( \sqrt{\frac{n_A}{n_B}} + \sqrt{\frac{n_B}{n_A}} \right) \sin \frac{\omega}{c} \sqrt{n_A} d \sin \frac{\omega}{c} \sqrt{n_B} d \quad (4.7)$$

де  $D = 2d$  - період структури;

$K$  - блохівський хвильовий вектор.

Розв'язуючи (4.7), можна переконатися, що у спектрі такої структури є ФЗЗ з центром на частоті  $\omega_0 = \pi c / (n_0 D)$ .

При цьому відносна ширина ФЗЗ складає  $\Delta\omega / \omega_0 \approx 4\Delta n / (\pi n_0)$ , а згасання світла на одному періоді, що визначається за допомогою співвідношення

$$\ln K_0 D = D / \xi_0 = \ln n_A / n_B \approx 2\Delta n / n_0,$$

де  $K_0$  - уявна частина блохівського хвильового вектору на частоті  $\omega_0$ ;

$\xi_0$  - довжина загасання в центрі зони;

на частоті яка відповідає центру ФЗЗ прямо пропорційно модуляції показника заломлення  $\Delta n$ . Дисперсійні рівняння у вигляді (4.7) були отримані і досліджені аналітично або чисельно для широкого класу одновимірних фотонних кристалів.

**Фотоніка одновимірного гранульованого кристала** З урахуванням природної анізотропії гранульованих матеріалів, запропонована вище модель развпорядкованної структури (4.6) може бути використана для опису переносу електромагнітної хвилі в квазіодновимірній системі контактуючих гранул в припущенні, що має місце модуляція показника заломлення  $\Delta n$  (скажемо в результаті прекомпресії), яка описує зміну показника заломлення матеріалу гранул в областях герцевських контактів (перекриттів). Власне морфологія перекриттів, що лежить в основі такої простої моделі може бути описана, наприклад, в наближенні віртуальної впорядкованості.

Побудована вищеописаним способом модель одновимірного гранульованого кристала має наступні апріорні властивості: по-перше, відповідний моделі експериментальний прототип може бути створений і вивчений без принципових труднощів, по-друге, детермінованість і керованість такої системи очевидні, на відміну, скажемо від



напівпровідникового фотонного кристала, по-третє, покладені в основу моделі фізичні принципи і методи добре вивчені і апробовані.

На рисунку 4.1 приведені дані, що описують спектр пропускання модельної системи для значень параметрів, властивих різним упаковкам деяких гранульованих матеріалів. Відзначимо наявність провалів в спектрах пропускання світла, відповідних ФЗЗ.

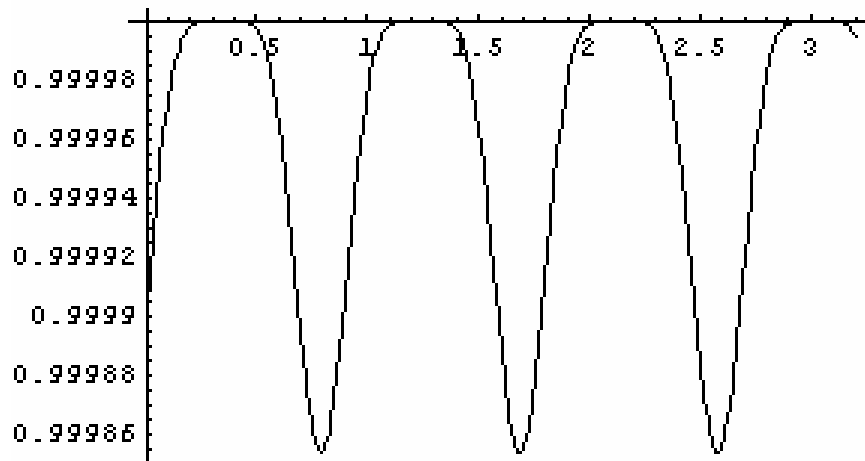


Рисунок 4.1 – Спектр пропускання модельної гранульованої системи.

Для структури обмеженого розміру можна зіставити граничні умови, згідно з якими світло не падає на структуру ззовні, а використовуючи рівняння

$$M \begin{pmatrix} 1 \\ -n_f \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ n_l \end{pmatrix}, \quad (4.8)$$

де  $n_f$  та  $n_l$  - показники заломлення напівнескінченних середовищ, що обмежують структуру;

$M$  - матриця перенесення.

отримати спектр власних оптичних мод. Для системи кінцевих розмірів спектр власних мод буде дискретним (див. Рис. 4.1), причому власні частоти  $\omega_i$  ще і матимуть ненульову уявну частину (внаслідок "витоків" світла через межі структури). Інакше кажучи, час життя власних станів  $\tau = 1/\text{Im}\omega_i$  буде кінцевим. За

величиною часу життя стану можна судити, є стан локалізованим або ні. Відповідно до критерію Таулеса, якщо ширина рівня (зворотний час життя) менша, ніж відстань між рівнями, стан локалізований, інакше делокалізований.

У цьому параграфі основну увагу було приділено аналізу відмінностей в поведінці електронів, що поширюються в середовищі, і фотонів, а також проведено обґрунтування застосування методів зонної теорії твердих тіл і теорії фотонних кристалів (фотоніки) для опису спектральних характеристик гранульованих матеріалів. Безперечний інтерес подальших досліджень викликає інтерпретація явищ і процесів, що описуються в класичних "електронній" та "фотонній" задачах (таких, як зонна структура спектру, локалізація, тунелювання та ін.), у застосуванні безпосередньо до гранульованих матеріалів в областях частот, де раніше подібні ефекти не спостерігалися. [72]

## **4.2 Монографія «Фізика гранульованих матеріалів»**

Монографія [54] підсумовує результати більш як 15 річної наукової праці з вивчення структурних, механічних та інших фізичних властивостей дискретних мікромеханічних систем із складною морфологією розвиненою у широкому діапазоні масштабів – від субмікроскопічних до макроскопічних. Визначення умов перебування таких систем у квазістаціонарних станах з компенсацією непружних втрат енергії її поповненням за рахунок зовнішніх збурень, дозволило запропонувати низку методів динамічної теорії, статистичної фізики, механіки суцільних середовищ, фізики твердого тіла та рідин, до опису структури та окремих властивостей гранульованих систем. Розбудова моделей, які адекватно описують окремі риси статистики та динаміки структуроутворень у збурених зовні г.м., дозволила здійснити адекватну як параметризацію сценаріїв фізичної поведінки г.м. так і розвинути прогностичну базу, яка є підставою до їх практичного застосування у чисельних технологічних процесах.

В монографії розвинуті також методи спектральних досліджень г.м., які, з урахуванням створення джерел когерентних випромінювань у террагерцевому діапазоні, відкривають перспективи їх новітніх досліджень та застосувань. Окремо треба виділити розвинення в матеріалах монографії концепції побудови статичних та динамічних матеріальних співвідношень, які з урахуванням динамічного скейлінгу відкривають перспективи їх подальших детальніших досліджень.

## ВИСНОВКИ

- 1) Для теоретичного опису структури гранульованих матеріалів у просторі фігур Вороного використовується формула Неванлінни із функціонального аналізу, яка отримана із урахуванням теорії ортогональних поліномів Чебишева та класичної теорії моментів. Запропонований підхід дозволяє теоретично описати дані безпосередніх спостережень структури ГМ у мікро-, мезо-, та макромасштабах із використанням лише перших двох моментів розподілу керуючих параметрів побудов Вороного (які визначаються безпосередньо з експериментальних даних). Порівняний аналіз із альтернативними підходами, зокрема із моделлю стретч-Гамма функції показує переваги запропонованого підходу, який не потребує використання додаткових припущень щодо застосування концепцій статистичної механіки для опису ГМ, які за своєю очевидною природою є мікромеханічними системами.
- 2) За допомогою вивчення поведінки трансляційного та орієнтаційного параметрів впорядкування показано, що гранульовані матеріали, запорошена плазма, а також деякі інші об'єкти м'якої матерії є прикладами систем, які природно перебувають у анізотропних станах.
- 3) Для опису поведінки вертикального профілю густини гранульованих матеріалів у гравітаційному полі запропоновано наочну комбіновану модель ентропії ґраткового газу. Побудована фазова діаграма в термінах параметра, типу параметра Ліндемана в теорії плавлення кристалів та компактизації у системі. Отримані дані свідчать про відповідність базових принципів ентропійної моделі природі структурних перетворень у гранульованих системах, особливо, для щільно впакованих систем. Відзначимо також, що застосована

ентропійна модель тривіально відтворює неБольцманівський характер профілю густини г.м. у гравітаційному полі.

- 4) Знайдений новий клас точних розв'язків диференціально-різницевого рівняння, що описує транспорт механічного збурення в одновимірному вертикальному гранульованому ланцюжку. Підсумкове керуюче рівняння (після фізично адекватній лінеаризації), відноситься до класу функціонально-диференціальних і, як показано в роботі, має точний розв'язок у класі циліндричних функцій. Знайдений клас точних розв'язків узагальнює раніше відомі розв'язки у вигляді дисперсійних хвиль. Отримані розв'язки відкривають перспективу модельної параметризації експериментальних даних по вивченню динаміки збуджень в гранульованих матеріалах [34,41,44].
- 5) За допомогою підходу Бейтмена [35], визначені аналітичні розв'язки лінеаризованого рівняння руху імпульсу збудження у вертикальних гранульованих ланцюжках обмеженої довжини. Проаналізовано вплив довжини ланцюжків, граничних умов та матеріальних співвідношень на хвильову динаміку збуджень у досліджених системах.
- 6) Використання аналітичної моделі ПФР у термінах узагальнених функцій дозволило отримати аналітичні вирази для кореляційних інтегралів. Встановлено, що модельні вирази КБІ, завдяки властивостям моделі ПФР, демонструють помітну залежність від степені впакування в детермінованому околі частинки. Використаний підхід, формально, є масштабно-інваріантним, а також спирається на феноменологічну інформацію про локальну структуру, отриману з альтернативних джерел. З урахуванням вищесказаного, вкажемо на потенційну можливість використання запропонованого підходу до опису макроскопічних параметрів полідисперсних об'єктів м'якої матерії із складною морфологією, розвиненою у мезомасштабі.
- 7) Елементи зонної теорії твердого тіла і твердотілої фотоніки пропонуються як теоретичний базис для опису властивостей і

характеристик поширення електромагнітних хвиль в моделях дискретних механічних систем та розбудови новітнього напрямку фізики г.м. – фотоніки у мезо- та макро- масштабі (гранульованої фотоніки).

Головні результати:

- за допомогою вивчення поведінки трансляційного та орієнтаційного параметрів впорядкування показано, що гранульовані матеріали, заповнена плазма, а також деякі інші об'єкти м'якої матерії є прикладами систем, які природно перебувають у анізотропних станах.

- для опису поведінки вертикального профілю густини гранульованих матеріалів у гравітаційному полі запропоновано наочну комбіновану модель ентропії ґраткового газу.

- знайдений новий клас точних розв'язків диференціально-різницевого рівняння, що описує транспорт механічного збурення в одновимірному вертикальному гранульованому ланцюжку.

- чисельно досліджено вплив матеріальних співвідношень на транспорт енергії/імпульсу у гранульованому ланцюжку з герцівськими контактами.

- опис надлишкових властивостей бінарної суміші г.м. із застосуванням теорії Кірквуда-Баффа.

- з рівняння стану твердих сфер типу Карнахана-Старлінга, використовуючи підхід Ландау до фазових перетворень, отримано адекватний до відповідного фізичного експерименту сценарій компактизації у г.м.

- проведене теоретичне обґрунтування застосування основних положень зонної теорії твердого тіла та фотоніки для опису властивостей і характеристик гранульованих матеріалів.

Проведені дослідження (наприклад, компактизації) показують можливість застосування методів ізоморфних до методів статистичної фізики до вивчення нелінійних дисипативних систем (зокрема – г.м.) поблизу виявлених квазі-стаціонарних станів.

Результати НДР використані при написанні двох монографій [54,73] (одна з яких є англomовною [73]), статей до журналів: Eur.Phys.Journ.E [44], Journal of Nanoscience and Nanotechnology [74], Доповіді НАН України [34], Український Фізичний Журнал [52,53,75-78], Український гідрометеорологічний журнал [79] та Вісник ОДЕКУ [41,43,72,80-84]; пройшли апробацію на конференціях (як на вітчизняних, так і міжнародних та закордонних) [42,85-129], а також до матеріалів кандидатської та докторської дисертації, які виконуються на кафедрі.

У 2012 році на базі кафедри було проведено Міжнародну наукову конференцію «Фізика м'якої матерії». Професор Герасимов О.І. очолював оргкомітет конференції на якій від імені кафедри її співробітниками було зроблено 5 доповідей [42,86-88].

Результати НДР впроваджено у Інститутах теоретичної фізики і механіки НАН України (м. Київ), їх також використано у навчальному процесі в спецкурсах «Екологічна фізика», «Моделювання фізико-хімічних процесів», «Основи наукових досліджень», при написанні курсових, дипломних та магістерських робіт, які виконуються на кафедрі.

Тема НДР належить до традиційного для кафедри напряму досліджень «Фізика складних динамічних дисипативних систем» (у різні роки вже було виконано 5 НДР [130-134]), тому наразі плануються подальші дослідження за цим напрямом.

## ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ

1. *Jaeger H.M., Nagel S.R., Behringer R.P.* The physics of granular materials. //Rev.Mod.Phys.-1996.-Vol.68.- P.1259-1273.
2. *Duran J. Sands, Powders and Grains.*-New York: Springer Verlag, 2000.- 200p.
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.- 71,S.- P.374-385.
5. *P. Hartmann, A.Douglass, J.C.Reyes at al.* Crystallization dynamics of a single layer complex plasma. //Phys. Rev. Lett. – 2010. - Vol.105, P.115004;
6. *F. Boyer, E. Falcon,* Two-Dimensional Melting of a Crystal of Ferrofluid Spikes. //Phys. Rev. Lett. – 2009.-Vol. **103**, No.14.-P.144501.
7. Шавлов А.В., Джуманджи В.А. Геометрические параметры кластера из капель воды. //ЖЭТФ.- 2012.-Vol. **141**, №2.-P.288-291.
8. *Вороной Г.Ф.,* Собр. соч. Т. 2. – К.: Изд-во АН УССР, 1952.
9. *Герасимов О. И.* Рассеяние излучений в статистических системах: решаемые модели. – Одесса: Маяк, 1999. – 284с.
- 10.*Bideau D., Gervois A., Oger L., Troadec J.P.* Geometrical properties of disordered packings of hard disks. //J.Physique.-1986.-Vol.47.-P.1697-1707.
- 11.*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, - P.028002.
- 12.*G.Voronoi, J. Reine Angew.* Nouvelles applications des paramètres continus à la théorie des formes quadratiques. Deuxième mémoire. Recherches sur les paralléloèdres primitifs. //Journal für die reine und angewandte Mathematik.-1908.-Vol.134.-P.198-287.



13. *Quickenden T.I., Tan G.K.* Random packing in two dimensions and the structure of monolayers. //Journal of Colloid and Interface Science.-1974.-Vol.48.-P.382-393.
14. *Aste T., Matteo T.D.* Emergence of Gamma distributions in granular materials and packing models. //Phys. Rev. E.-2008.-Vol.77.-P.021309.
15. *Edwards S. F.* The full canonical ensemble of a granular system. //Physica A.-2005.-Vol.353.-P.114-118.
16. *Achiezer N.I.* Classical problem of moments.– М.:Наука, 1961.-600с
17. *Gerasymov O.I.* Structure and Dynamics of Granular Materials Perturbed by External Fields. //Ukr. Journ. Phys.-2010.-Vol.55, N 5.-P.560-567.
18. *А.З. Паташинский, В. Л. Покровский,* Флуктуационная теория фазовых переходов. – Москва: Наука, 1982.-381 с.
19. *Bhatnagar P.L.* Nonlinear waves in one-dimensional dispersive systems. – New York: The Clarendon Press; Oxford University Press, 1979.-142p.
20. *Jackson E.A.* Perspectives of nonlinear dynamics. – Cambridge: Cambridge Univ. Press, 1990.-632p.
21. *Nesterenko V.F.* Dynamics of Heterogeneous materials. – New York: Springer, 2001.-510p.
22. *Coste C., Falcon E., Fauve S.* Solitary waves in a chain of beads under Hertz contact. //Phys. Rev. E - 1997.-**56**.- P.6104-6117.
23. *Sen S., Hong J., Bang J., Avalos E., Doney R.* Solitary waves in the granular chain. //Phys. Rep.-2008.-No 462, P.21-66.
24. *Somfai E., Roux J.-N., Snoeijer J.H. et al.* Elastic wave propagation in confined granular systems. //Phys. Rev. E - 2005.-**72**.-P.021301, 18p.
25. *Герасимов О. І., Вандевалле Н., Снівак А.Я., Худинцев М.М., Люме Г., Дорболло С., Клименков О.А.* Стаціонарні стани у 1D системі непружних частинок //Укр.фіз.журн. - 2008.- **53**, № 11. - С. 1129-1137.
26. *Hinch E.J., Saint-Jean S.* The fragmentation of a line of balls by an impact. //Proc.Roy.Soc.London A - 1999.-No 455.-P.3201-3220.

27. *Job S., Santibanez F., Tapia F., Melo F.* Wave localization in strongly nonlinear Hertzian chains with mass defect. //Phys. Rev. E - 2009.-**80**.-P.025602, 4p.
28. *Harbola U., Rosas A., Romero A., Esposito M., Lindenberg K.* Wave transport in granular chains. //Phys. Rev. E - 2009.-**80**.-P.051302, 9p.
29. *Lima Dias Pinto I., Rosas A., Romero A.H., Lindenberg K.* Pulse propagation in a chain of a o-rings with and without precompression. //Phys. Rev. E - 2010.-**82**.-P.031308, 6p.
30. *Landau L.D.* Theory of elasticity, 3rd ed. – Heinemann: Butterworth, 1986.-200p.
31. *Pinney E.* Ordinary difference-differential equations. – Berkley; Los Angeles: University of California Press, 1958.-262p.
32. *Abramowitz M., Stegun I.A.* Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables. – New York: Dover, 1966.-1046p.
33. *Polyanin A.D., Zaitsev V.F.* Handbook of exact solutions for ordinary differential equations. 2nd ed. – Boca Raton: Chapman & Hall, CRC Press, 2003.-787p.
34. *Герасимов О.І., Вандевалле Н.* Щодо двох точних розв'язків задачі про перенесення імпульсу у неоднорідному гранульованому ланцюжку. //Доповіді НАН України. – 2012.-№ 8.-С.67-72.
35. *Bateman H.* Some simple differential difference equations and the related functions. //Bulletin of the American Mathematical Society.-1943.-Vol.49, N7.-С. 494-512.
36. *Fermi E., Pasta J., Ulam S.* Studies of non linear problems. //Los Alamos Sc.Lab.Rep. -1955.- Vol.LA-1940, P.978-988.
37. *Hascoët E., Herrmann H.J., Loreto V.* Shock propagation in a granular chain. //Phys. Rev. E -1999.-Vol.59, P.3202–3206.

38. *Sarmiento A., Reigada R., Romero A.H., Lindenberg K.* Enhanced pulse propagation in nonlinear arrays of oscillators. //Phys. Rev. E – 1999.-Vol.60, P.5317–5326.
39. *Rosas A., Lindenberg K.* Pulse dynamics in a chain of granules with friction. //Phys. Rev. E – 2003.-Vol.68, P.041304.
40. *Герасимов О.І., Снівак А.Я., Худинцев М.М., Клименков О.А.* Транспорт енергії (імпульсу) в модельних низьковимірних дисипативних системах. //Вісник ОДЕКУ.-2008.-№6.-С.225-233.
41. *Герасимов О.І.* О новом классе точных решений дифференциально-разностного уравнения движения для механических возбуждений в одномерной неоднородной гранулированной цепочке. //Вісник ОДЕКУ.-2011.-№11.-С.198-202.
42. *Gerasymov O., Spivak A.* Performing of the momentum dynamics in 1D models of granular systems. //Book of extended abstracts of I-st Belgian-Ukrainian Mini-Symposium Selected Topics of Soft Matter Physics: Granular Materials. Edited by O.Gerasymov (Odessa, 2012), P.34-40.
43. *Герасимов О.І., Снівак А.Я.* Моделивання руху механічних збуджень у одновимірних неоднорідних гранульованих ланцюжках: вплив граничних умов. //Вісник ОДЕКУ.-2012.-№14.-С.217-223.
44. *Lumay G., Dorbolo S., Gerasymov O., Vandewalle N.* Experimental study of a vertical column of grains submitted to a series of impulses. //Eur. Phys. J. E - 2013.- Vol.36, N2, P.1-6.
45. *Корн Г., Корн Т.* Справочник по математике для научных работников и инженеров. – М.: Наука, 1984.-835с.
46. *Porter M.A., Daraio C., Szelengowicz I., Herbold E.B., Kevrekidis P.G.* Highly nonlinear solitary waves in heterogeneous periodic granular media. //Physica D: Nonlinear Phenomena.-2009.-Vol. 238, N6.-P.666-676.
47. *J.G. Kirkwood, F.P. Buff,* The Statistical Mechanical Theory of Solutions. I. //J. Chem. Phys. - 1951.- Vol. 19.-P. 774-777.

48. *Герасимов О.І.* Функції розподілу груп частинок у статистичній фізиці: монографія. – Одеса: Екологія, 2008.-84 с.
49. *I.Z. Fisher*, Statistical Theory of Liquids. – Chicago: Chicago University Press, 1964.-335p.
50. *Prigogine I., Defay R.* Chemical thermodynamics. – London: Longmans, Green, 1954.-543p.
51. *Hansen J.-P., McDonald I.R.* Theory of Simple Liquids. – London: Academic Press, 1986.-416p.
52. *Герасимов О.І., Сомов М.М.* Статистичний опис надлишкових властивостей бікомпонентних систем. //Укр.фіз.журн.-2015.-Т.60, №4.- С.326-330.
53. *Gerasymov O.I., Somov M.M.* Statistical description of excess properties of many-particle binary systems. //Ukr.Journ.Phys.-2015.-Vol.60, N4.-P.324 - 327.
54. *Герасимов О.І.* Фізика гранульованих матеріалів: Монографія. – Одеса: ТЕС, 2015. – 264с.
55. *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: Statistical Mechanics and its Applications. – 2002. – Vol. 312. – №. 1. – P. 172-180.
56. *Gerasimov O.I., Schram P.P.J.M, Kitahara K.* Kinetics of granular segregation. //Ukr.Journ.Phys.-2003.- **48**, No.8.- P.885-896.
57. *Vandewalle N., Lumay G., Gerasymov O., Ludewig F.* The influence of grain shape, friction and cohesion on granular compaction dynamics. //Eur.Phys.Journ.E.-2007.-22.- P.241-248.
58. *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. //Ukr.Journ.Phys.-2005.-**50**, No 6.- P.624-632.

59. Герасимов О.І., Клименков О.А., Співак А.Я., Худинцев М.М. Кінетика гранульованих матеріалів у полі віброприскорювань. //Вісник ОДЕКУ.- 2006.-№3.-С.247-252.
60. Герасимов О.І., Співак А.Я. Кінетична дисперсійна модель середнього поля для ущільнення гранульованих матеріалів. //Вісник ОДЕКУ.- 2010.-№9.-С.190-197.
61. Герасимов О.І. Структура та динаміка гранульованих матеріалів. //Доповіді НАН України.-2010.-№11.-С.59-65.
62. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика, Т.V. Статистическая физика. Часть 1. – Изд. 3-е, доп. – М.: Наука, 1976.-584с.
63. Knight J.B., Fandrich C.G., Lau C.N., Jaeger H.M., Nagel S. R. Density relaxation in a vibrated granular material. //Physical review E. – 1995. – Vol. 51. – №. 5. – P. 3957-3963.
64. Nicodemi M., Coniglio A., Herrmann H.J. Frustration and slow dynamics of granular packings. //Physical Review E. – 1997. – Vol. 55. – №. 4. – P. 3962-3969.
65. Nowak E.R., Knight J.B., Ben-Naim E., Jaeger H.M., Nagel S.R. Density fluctuations in vibrated granular materials. //Physical Review E. – 1998. – Vol. 57. – №. 2. – P. 1971-1982.
66. Philippe P., Bideau D. Compaction dynamics of a granular medium under vertical tapping. //Europhysics Letters. – 2002. – Vol. 60. – №. 5. – P. 677.
67. D. Arsenović, S.B. Vrhovac, Z.M. Jakšić, Lj. Budinski-Petković and A. Belić, Simulation study of granular compaction dynamics under vertical tapping. //Physical Review E. – 2006. – Vol. 74. – №. 6. – P. 061302.
68. Reis P.M., Ingale R.A., Shattuck M.D. Crystallization of a quasi-two-dimensional granular fluid. //Phys.Rev.Lett.-2006.- 96.- P.258001.
69. А. Исихара. Статистическая физика. – М.: Мир, 1973.-443с.
70. Holly Kokstein, Paul V. Quinn Sr. Fermi statistics applied to a weakly excited column of granular particles in a vibrating bed. //Physica A: Statistical Mechanics and its Applications.-2007.-Vol.374, N 1.-P.66-76.

71. *Куммель Ч.* Введение в физику твёрдого тела. – М.: Наука, 1978.-600с.
72. *Герасимов О.И., Худынцев Н.Н.* Распространение электромагнитных волн в модели 1D гранулированной системы в приближении виртуальной упорядоченности. //Вісник ОДЕКУ.-2013.-№15.-С.197-201.
73. *Aliotta F., Gerasymov O., Calandra P.* Electrospray jet emission: theory invoking merely dielectrophoretic forces. //Series Advanced Materials Vol.2 Advances in electrospinning materials (Ed. A. Tiwari), WILEY-Scrivener Publisher, USA, 2015.
74. *Aliotta F., Calandra P., Gerasymov O., Ponterio R.C., Pochylsky M., Salvato G.* Droplet dynamics under non-uniform electric fields. //Journal of Nanoscience and Nanotechnology -2015.-P.[12 pages].
75. *Герасимов О.И., Загородній А.Г., Сомов М.М.* Щодо аналізу структури гранульованих матеріалів. //Укр.фіз.журн. – 2013.-Т.58, №1.-С.32-39.
76. *O.I. Gerasymov, A.G. Zagorodny, M.M. Somov,* Toward the analysis of the structure of granular materials. //Ukrainian Journal of Physics -2013.- Vol. 58, No. 1.-P.32-39.
77. *Герасимов О.И., Співак А.Я.* Кінетична модель компактизації гранульованих матеріалів. //Укр.фіз.журн.-2015.-Т.60, №3.-С.254-258
78. *Gerasymov O.I., Spivak A.Ya.* Kinetic model of compaction in granular materials. //Ukr.Journ.Phys.-2015.-Vol.60, N3.-P.253-257.
79. *Gerasymov O.I., Andrianova I.S.* Towards theoretical modeling of the sand dunes motion. //Ukr. Hydrometeorol. Journ.-2015.-N16.-P.17-23.
80. *Герасимов О.И., Сомов М.М.* Стереологічний аналіз локальної структури гранульованих матеріалів (метод Вороного). //Вісник ОДЕКУ.-2011.-№12.-С.215-219.
81. *Герасимов О.И., Сомов М.М.* Ентропійна модель для опису вертикального профілю густини у гранульованих матеріалах у гравітаційному полі. //Вісник ОДЕКУ. – 2012.-№14.-С.224-228.

82. *Герасимов О.И.* Физика гранулированных материалов: состояние и перспективы исследований. Часть 1. //Вісник ОДЕКУ.-2013.-№16.- С.196-204.
83. *Герасимов О.І., Співак А.Я.* Перенесення збудження у 1D гранульованих ланцюжках в умовах конфайменту. //Вісник ОДЕКУ – 2014.-№18.-С.204-211.
84. *Герасимов О.І., Худинцев М.М.* Побудови Вороного та класична теорія моментів у застосуванні до параметризації структури гранульованих матеріалів. //Вісн.Одес.держ.екол.унів.-2015.-№19.-С.170-175.
85. *Aliotta F., Calandra P., Gerasymov O., Ponterio R.C., Pochylsky M., Salvato G.* Droplet dynamics under non-uniform electric fields. //EMN Conference, 2015.-P.[12 pages].
86. *Gerasymov O.* Structure and momentum transport properties of granular materials. Book of extended abstracts of I-st Belgian-Ukrainian Mini-Symposium Selected Topics of Soft Matter Physics: Granular Materials. *Edited by O.Gerasymov* (Odessa, 2012), P.9-13.
87. *Gerasymov O., Khudyntsev N.* Electromagnetic wave propagation in 1D model granular system. Book of extended abstracts of I-st Belgian-Ukrainian Mini-Symposium Selected Topics of Soft Matter Physics: Granular Materials. *Edited by O.Gerasymov* (Odessa, 2012), P.17-21.
88. *Gerasymov O., Somov M.* Towards the studying of structure of the granular matter. Book of extended abstracts of I-st Belgian-Ukrainian Mini-Symposium Selected Topics of Soft Matter Physics: Granular Materials. *Edited by O.Gerasymov* (Odessa, 2012), P.42-48.
89. *Герасимов О.І., Сомов М.М.* Структура гранулированных материалов. //X Международное Курнаковское совещание по физико-химическому анализу: сборник трудов в 2 томах. Том 2. – Самара: Самара гос. Техн. ун-т. 2013. – С. 207-212.
90. *Gerasymov O., Khudyntsev N., Shpyrko I.* Nondestructive diagnostics of structural radioactive macro-scale defects by applying THz spectroscopy.

- //Proceedings of “IV All Ukrainian Congress of Ecologists with International Participation” (ECOLOGY – 2013). VNTU, Vinnytsia, September 25-27, 2013. –С.342-344.
91. *Герасимов О.И., Худынецев Н.Н., Сомов М.М., Ермолова М.И.* Оптимизация системы наземного радиационного мониторинга с учетом гидрометеорологического и стереологического факторов: на примере Южно-Украинской АЭС. //Proceedings of “IV All Ukrainian Congress of Ecologists with International Participation” (ECOLOGY – 2013). VNTU, Vinnytsia, September 25-27, 2013. –С.183-185.
92. *Gerasymov O.I., Spivak A.Ya.* Asymmetric waves transportation in 1D granular chain. //III Міжнародна конференція молодих вчених: «Сучасні проблеми теоретичної фізики», Інститут теоретичної фізики ім.М.М.Боголюбова НАН України, м.Київ, 21-23 грудня 2011р.-Р45.
93. *Gerasymov O.I., Somov M.M.* Structure of soft materials (granular systems and dust plasma) in meso-scale. //III Міжнародна конференція молодих вчених: «Сучасні проблеми теоретичної фізики», Інститут теоретичної фізики ім.М.М.Боголюбова НАН України, м.Київ, 21-23 грудня 2011р.-О38.
94. *Gerasymov O., Somov M.* Towards the studying of structure of the granular matter. //IV Міжнародна конференція молодих вчених: «Сучасні проблеми теоретичної фізики», Інститут теоретичної фізики ім.М.М.Боголюбова НАН України, м.Київ, 23-26 жовтня 2012р.-О35.
95. *Gerasymov O.I., Spivak A.Ya.* Performing of the momentum dynamics in 1D models of granular systems. //IV Міжнародна конференція молодих вчених: «Сучасні проблеми теоретичної фізики», Інститут теоретичної фізики ім.М.М.Боголюбова НАН України, м.Київ, 23-26 жовтня 2012р.-Р14.
96. *Gerasymov O.I., Romanova R.I.* Coherent behavior of granular materials subjected to external perturbations. //IV Міжнародна конференція молодих вчених: «Сучасні проблеми теоретичної фізики», Інститут



- теоретичної фізики ім.М.М.Боголюбова НАН України, м.Київ, 23-26 жовтня 2012р.-P15.
97. *Gerasymov O., Somov M.* Towards the description of the excess properties of bi-component many-particle systems. //V Міжнародна конференція молодих вчених: «Сучасні проблеми теоретичної фізики», Інститут теоретичної фізики ім.М.М.Боголюбова НАН України, м.Київ, 24-27 грудня 2013р.-O.36.-C.56.
98. *Gerasymov O.I., Spivak A.Ya.* Momentum dynamics in nonlinear models of granular systems influenced by constitutive relations. //V Міжнародна конференція молодих вчених: «Сучасні проблеми теоретичної фізики», Інститут теоретичної фізики ім.М.М.Боголюбова НАН України, м.Київ, 24-27 грудня 2013р.-O.34.-C.54.
99. *Gerasymov O.I., Romanova R.I.* Towards coherent dynamics in granular systems. //V Міжнародна конференція молодих вчених: «Сучасні проблеми теоретичної фізики», Інститут теоретичної фізики ім.М.М.Боголюбова НАН України, м.Київ, 24-27 грудня 2013р.-P.43.-C.100.
100. *Gerasymov O., Somov M.* To possibility of implementation of statistical mechanics methods in physics of granular materials //VI Міжнародна конференція молодих вчених: «Сучасні проблеми теоретичної фізики», Інститут теоретичної фізики ім.М.М.Боголюбова НАН України, м.Київ, 25-27 листопада 2014р.-O.21.
101. *Boguslavenko O., Gerasymov O., Somov M.,* To modelling of local structure in the jammed states of granular systems. //VI Міжнародна конференція молодих вчених: «Сучасні проблеми теоретичної фізики», Інститут теоретичної фізики ім.М.М.Боголюбова НАН України, м.Київ, 25-27 листопада 2014р.-O.23.
102. *Gerasymov O.I., Romanova R.I.* Modelling of learning processes. //VI Міжнародна конференція молодих вчених: «Сучасні проблеми

- теоретичної фізики», Інститут теоретичної фізики ім.М.М.Боголюбова НАН України, м.Київ, 25-27 листопада 2014р.-Р.17.
103. *Gerasymov O.I., Khudyntsev N.N.* Towards granular photonics. //XII Міжнародна наукова конференція «Фізичні явища в твердих тілах» (м.Харків, 1-4 грудня, 2015р.), ХНУ ім.В.Н.Каразіна.-С.131.
104. *Gerasymov O.I., Khudyntsev N.N., Zelenin S.V.* Quantum particle transmitting through 1D slide periodic system (SPS) with manipulated parameters. //XII Міжнародна наукова конференція «Фізичні явища в твердих тілах» (м.Харків, 1-4 грудня, 2015р.), ХНУ ім.В.Н.Каразіна.-С.132.
105. *Герасимов О.І., Спивак А.Я.* Розповсюдження хвиль у низьковимірних ланцюжках силових центрів. //XII Міжнародна наукова конференція «Фізичні явища в твердих тілах» (м.Харків, 1-4 грудня, 2015р.), ХНУ ім.В.Н.Каразіна.-С.133.
106. *Кобза Д.Ю., Албул М., Герасимов О.І., Сомов М.М.* Локальна структура гранульованих матеріалів. //Збірник статей за матеріалами студентської наукової конференції ОДЕКУ 6-16 квітня 2011р.-Одеса: Екологія, 2011.-С.230-235.
107. *Кушнырева Е.А., Спивак А.Я.* Модель нелінійного контакту. //Збірник статей за матеріалами студентської наукової конференції ОДЕКУ 6-16 квітня 2011р.-Одеса: Екологія, 2011.-С.226-230.
108. *Тодоров Є.О., Худинцев М.М.* Діагностика структуро утворень у моделі плоскошарової гранульованої системи. //Збірник статей за матеріалами студентської наукової конференції ОДЕКУ 2-7 квітня 2012.-Одеса: ТЕС, 2012.-С.204-207.
109. *Гычак С., Романова Р.И.* Структуризация водно-капельной системы, левитирующей над поверхностью нагретой жидкости. //Збірник статей за матеріалами студентської наукової конференції ОДЕКУ 2-7 квітня 2012.-Одеса: ТЕС, 2012.-С.207-210.

110. *Денисенко О., Комісаров В., Герасимов О.І., Сомов М.М.* Структура гранульованих матеріалів у мезомасштабі. //Збірник статей за матеріалами студентської наукової конференції ОДЕКУ 2-7 квітня 2012.-Одеса: ТЕС, 2012.-С.210-213.
111. *Тодоров Р.И., Романова Р.И.* Физическое моделирование сложных систем в окружающей среде с когерентной динамикой. //Збірник статей за матеріалами студентської наукової конференції ОДЕКУ 2-7 квітня 2012.-Одеса: ТЕС, 2012.-С.200-201.
112. *Свид У., Ткач К., Сомов М.М.* Параметризация локальной структуры гранулированных материалов. //Збірник статей за матеріалами студентської наукової конференції ОДЕКУ, 15-20 квітня 2013р.-Одеса: ТЕС, 2013.- С.239-242.
113. *Тингаев Ю.С., Соколова В.І., Герасимов О.І., Андріанова І.С.* Експериментальне дослідження структури гранульованих фаз речовини. //Збірник статей за матеріалами студентської наукової конференції ОДЕКУ 15-20 квітня 2013р.-Одеса: ТЕС, 2013.- С.235-238.
114. *Сары Н., Никифорова В.В., Велищук Н.А., Крысак Е.А. Андріанова И.С., Сомов М.М., Сергунова О.Д.* Динамика гранулированных поверхностей. //Збірник статей за матеріалами студентської наукової конференції ОДЕКУ 8-12 квітня 2014р.-Одеса: ТЕС, 2014.- С.228-231.
115. *Лулу Г.В., Герасимов О.І., Романова Р.І.* Гранульовані матеріали навколо нас. //Збірник статей за матеріалами студ.наук.конф. (м.Одеса, 6-10 квітня, 2015р.), ОДЕКУ.-С.129-131.
116. *Верзун В.М., Герасимов О.І.* Транспорт квантової частинки у мікропористих матеріалах. //Збірник статей за матеріалами студ.наук.конф. (м.Одеса, 6-10 квітня, 2015р.), ОДЕКУ.-С.132-134.
117. *Стрельцова А.В., Сергунова О.Д.* Квазігідродинаміка піщаних дюн. //Збірник статей за матеріалами студ.наук.конф. (м.Одеса, 6-10 квітня, 2015р.), ОДЕКУ.-С.138-140.

118. *Сомов М.М., Герасимов О.І.* Локальна структура гранульованих матеріалів. //Матеріали конференції молодих вчених, ОДЕКУ, м.Одеса, 11-16 травня 2011р. -С.189.
119. *Подольн І.Л., Герасимов О.І., Співак А.Я.* Транспорт сигналу та імпульсу у мікромеханічних багаточастинкових системах з нелінійними взаємодіями та діагностика активних домішок у гранульованих матеріалах. //Матеріали конференції молодих вчених, ОДЕКУ, м.Одеса, 11-16 травня 2011р. -С.190.
120. *Сомов М.М., Герасимов О.І.* Ентропія локального впорядкування. //Матеріали XII конференції молодих вчених ОДЕКУ 9-13 квітня 2012.- Одеса: ТЕС, 2012.-С.158.
121. *Романова Р.И., Герасимов О.И.* Когерентная динамика сложных систем. //Матеріали XII конференції молодих вчених ОДЕКУ 9-13 квітня 2012.-Одеса: ТЕС, 2012.-С.157.
122. *Сомов М.М., Герасимов О.І.* Змінна анізотропія гранульованих матеріалів. //Матеріали XIII наукової конференції молодих вчених ОДЕКУ, 22-26 квітня 2013, Одеса: ТЕС, 2013.-С.147.
123. *Ермолова М.И., Герасимов О.И.* Оптимизация системы наземного радиационного мониторинга с учетом стереологических и гидрометеорологических факторов: на примере ЮУ АЭС. //Матеріали XIII наукової конференції молодих вчених ОДЕКУ, 22-26 квітня 2013, Одеса: ТЕС, 2013. –С. 151.
124. *Шпырко И.С., Герасимов О.И.* Рассеяние света гранулированными материалами в терагерцевом диапазоне. //Матеріали XIII наукової конференції молодих вчених ОДЕКУ, 22-26 квітня 2013, Одеса: ТЕС, 2013. –С. 149.
125. *Сомов М.М., Герасимов О.І.* Сучасні методи опису локальної структури мікро-механічних систем з урахуванням симетрії впорядкування. //Матеріали XIII конференції молодих вчених ОДЕКУ 22-25 квітня 2014, Одеса.-С.168-169.

126. *Богуславленко О., Герасимов О.І.* Моделювання структури мікромеханічних (гранульованих) систем за допомогою алгоритму LAMMPS. //Матеріали XIII конференції молодих вчених ОДЕКУ 22-25 квітня 2014, Одеса.-С.166.
127. *Зубрицька Д., Герасимов О.І.* Дослідження асимптотичних квазістаціонарних станів у збуджених мікро- механічних (гранульованих) системах. //Матеріали XIII конференції молодих вчених ОДЕКУ 22-25 квітня 2014, Одеса.-С.166-167.
128. *Финонченко Н.И., Герасимов О.І.* Методы дезактивации в радиационной безопасности с использованием вещества в пенной фазе. //Матеріали XIV наукової конференції молодих вчених (м.Одеса, 11-15 травня, 2015р.), ОДЕКУ.-С.171.
129. *Верзун В.М., Герасимов О.І.* Транспорт квантової частинки у мікропористих матеріалах. //Матеріали XIV наукової конференції молодих вчених (м.Одеса, 11-15 травня, 2015р.), ОДЕКУ.-С.174.
130. *Герасимов О.І., Алексеев О.С., Худинцев М.М., Ідомський В.В., Співак А.Я.* Дослідження структури і динамічних властивостей складних статистичних систем: колоїдних розчинів та сухих гранульованих матеріалів. //Звіт НДР №ДР0201U003438.- Одеса, Україна, 2000. -40 с.
131. *Герасимов О.І., Худинцев М.М., Співак А.Я., Клименков О.А.* Фізика складних систем: динамічні дисипативні матеріали у гранульованих фазах //Звіт НДР ПНДЛ ФССФПД (№62), №ДР0203U008730.- Одеса, Україна, 2003. -89 с.
132. *Герасимов О.І., Худинцев М.М., Співак А.Я., Клименков О.А.* Статистична фізика складних систем //Звіт НДР №ДР0206U004865.- Одеса, Україна, 2006.- 114с.
133. *Герасимов О.І., Худинцев М.М., Співак А.Я.* Дослідження структурних та динамічних властивостей гранульованих матеріалів. //Звіт НДР ДФФД №Ф25/604-2007 (№106), №ДР0207U010167.- Одеса, Україна, 2007- 46с.

134. Герасимов О.І., Худинцев М.М., Співак А.Я., Сомов М.М., Клименков О.А., Андріанова І.С. Фізика складних систем з дисипативними взаємодіями. //Звіт НДР №ДР0212U004023.- Одеса, Україна, 2010.- 107с.