

УДК 539.215.2

**О.І. Герасимов, д.ф.-м.н., М.М. Сомов, магістр**  
*Одеський державний екологічний університет*

## ЛОКАЛЬНА СТРУКТУРА ГРАНУЛЬОВАНИХ МАТЕРІАЛІВ

*У роботі розглянуті методи опису локальної структури складних багаточастинкових систем, які базуються на концепції орієнтаційного та трансляційного параметрів впорядкування. Встановлено існування фази анізотропного флюїду, яка є проміжною між станами із ближнім та далекодійним впорядкуванням. Запропонована оболонкова модель для опису локальної структури гранульованих матеріалів.*

**Ключові слова:** *гранульовані матеріали, локальна структура, параметр впорядкування, анізотропний флюїд.*

### Вступ

Матеріали, дослідженню яких присвячена робота, є об'єктами так званої м'якої матерії. Прикладом можуть бути гранульовані матеріали, які складають об'єкт новітнього глобального екологічного матеріалознавства, що ґрунтується на екологічно «чистих» матеріалах, які не потребують коштовних технологій отримання, і, водночас, демонструють унікальні властивості. Дослідження у цьому напрямку потребують адекватного супроводу з точки зору послідовної теорії.

Незважаючи на значну кількість робіт, присвячених вивченню структури та матеріальних співвідношень гранульованих матеріалів, адекватний опис навіть локальної структури залишається актуальною задачею. Важливим фактором, який ускладнює аналіз, є суттєва структурна неоднорідність, яку важко (особливо у тривимірних системах) досліджувати експериментально. Дифракційні та спектральні експерименти постачають лише осереднену інформацію про структурні перетворення на мікрорівні.

Гранульовані матеріали (г.м.) є конгломераціями великої кількості дискретних твердих частинок, які можуть бути дисперговані у вакуумі чи у повітрі, або ж поєднані у конденсовану речовину. Зазвичай проміж окремими гранулами діють лише некогезійні сили відштовхувального характеру, а отже, г.м. набувають форми, яка зумовлена граничними умовами (наприклад, геометрією об'єму, що її вміщує), та дією гравітаційного поля. Незважаючи на зовнішню простоту, г.м. за певних умов можуть поводитися як подібно, так і цілком відмінно від звичайних агрегатних станів конденсованої речовини, тобто газів, рідин чи твердих тіл. Різноманітність типів г.м., які представлені в природі та використовуються у промисловості (а це пісок, гравій, ґрунти, будівельні, харчові, фармакологічні та фармацевтичні матеріали у гранульованій формі та багато ін.), зумовлює важливість розуміння природи їх фізичних властивостей. Як не дивно (враховуючи, що історія фізичних досліджень г.м. є досить тривалою і починається з робіт Фарадея та Багнольда), але дотепер не існує єдиної точки зору щодо можливості опису гранульованих матеріалів за допомогою методів статистичної фізики. Справа в тім, що незважаючи на екстраординарну поведінку г.м., яка зовні часто виглядає як прояв дії саме колективних ефектів у конденсованому середовищі, вони є суто механічними системами. Поведінка кожної окремої гранули скоріше має сприйматися як наслідок руху пробної частинки у оточенні тотожних сусідів. Наявність непружних зіткнень, а також відкритий характер (відносно зовнішніх збурень різної природи: періодичних чи імпульсних) зумовлює складний, суттєво нелінійний характер динаміки гранульованих систем [1-5].

Одним з інструментів, який веде до адекватного опису локальної структури речовини (зокрема гранульованих матеріалів), причому як для двовимірної, так і для тривимірної, є стереологічний аналіз. Інструментальна база стереології на сьогоднішній день дозволяє не лише якісно, але й кількісно надати опис локальної структури саме у мезо- та макро- масштабах і є адекватною до задач вивчення структури об'єктів із складною морфологією завдяки можливості отримання інформації про структуру будь-якої ділянки системи.

## 1 Опис локальної структури гранульованих матеріалів у термінах параметрів впорядкування

Обмежимо наш аналіз шляхом розгляду дискретної множини точок  $\{G_i\} \equiv \{\vec{r}^{(\alpha)}\}$  ( $\alpha = 0, 1, 2, \dots$ ) із координатами  $\vec{r}_\alpha$ . Ці координати є координатами центрів частинок (гранул), що оточують центральну частинку, яка у свою чергу, знаходиться в початку обраної системи координат.

Будемо вважати, що геометричну структуру  $\{G_\alpha\}$  можна визначити шляхом її порівняння 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.

Відповідний формальний опис локальної структури можна здійснити шляхом введення відповідного локального параметра впорядкування [6].

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.

У подальшому [7], ми будемо вважати, 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  $\{\vec{r}_\alpha\}$ .

Введемо до розгляду орієнтаційний та трансляційний параметри порядку. Визначимо орієнтаційний параметр порядку у такому вигляді

$$g_{s_1 s_2} = \frac{1}{N_{s_1}} \cdot \frac{1}{N_{s_2}} \sum_{j s_1} \sum_{j s_2} \exp(i N_{s_1} \varphi_{j s_1}) \exp(-i N_{s_2} \varphi_{j s_2}), \quad (1)$$

де:  $N_s$  - кількість частинок у  $s$ -ій оболонці,

$\varphi_{js}$  - відносний кут між частинками оболонки і частинкою, навколо якої будується оболонка.

Трансляційний параметр порядку запишемо таким чином

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

де  $N$  - кількість частинок у оболонці;

$\langle |\vec{r}_i|^2 \rangle$  - середнє значення від квадрата відстані проміж центральною частинкою и сусідніми частинками 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), (2) детально проведена у [7].

## 2 Оболонкова модель

Розглянемо наведене на рис. 1 двовимірне впакування дисків на площині (на рисунку чорними точками показані центри дисків). Виділимо частинку, яку будемо вважати першою оболонкою, та окреслимо навколо неї групу найближчих частинок-сусідів.

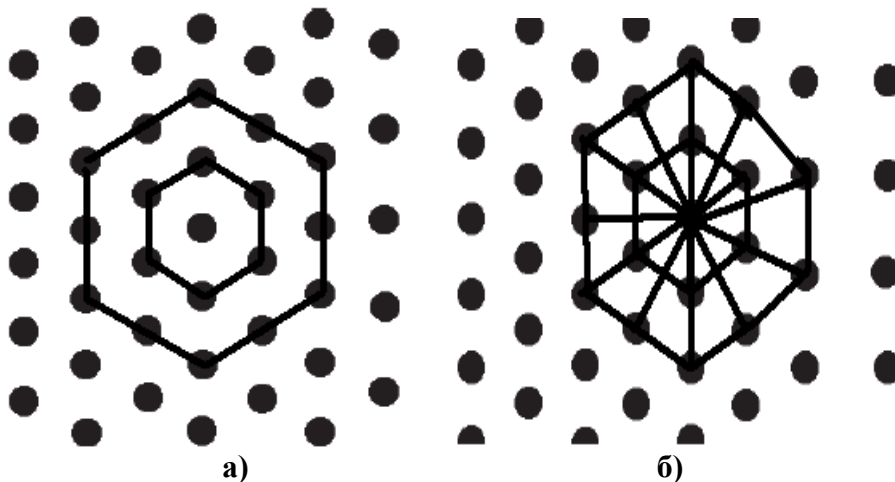


Рис.1 – Найпростіші типи локальної структури двовимірних гранульованих матеріалів.

Як бачимо, для наведеного на рис. 1а типу локального впорядкування навколо центральної частинки знаходиться 6 частинок-сусідів, які формують другу оболонку. У наступній, 3-ій оболонці знаходиться 12 частинок, які повністю заповнюють простір навколо другої оболонки. Керуючись цим підходом, структуру на рис. 1а можна класифікувати таким чином – (1;6;12), тобто числа показують ступінь заповнення оболонок. Зазначимо, що випадок а) відповідає кристалічно впорядкованій локальній структурі. Структуру на рис.1б відповідно класифікуємо як (1;6;11). Таким чином у третій оболонці спостерігається дефект - утворення вакансії, яка внаслідок збурень може відновитися і перейти до структури типу (1;6;12), або навпаки до більш розупорядкованого стану.

Використовуючи вирази (1) та (2), проведемо кількісний опис найпростіших типів локальної структури, наведених на рис.1. Результати розрахунків представимо у вигляді фазових діаграм

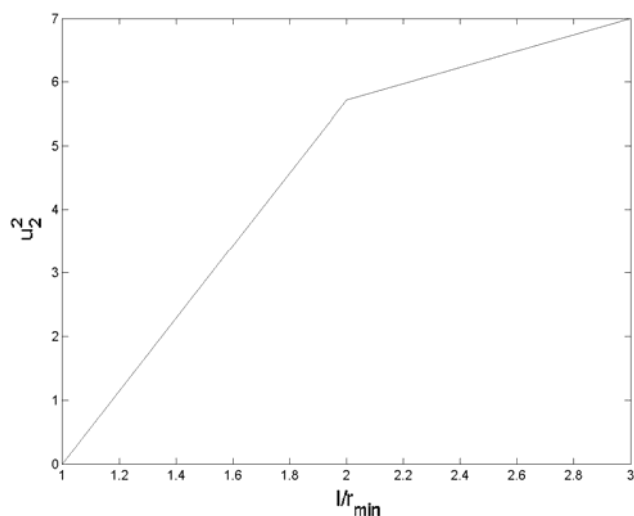


Рис. 2 – Фазова діаграма для трансляційного параметру впорядкування ( $l/r_{\min}$  - відношення радіуса довільної оболонки до мінімального радіусу найменшої оболонки,  $u_2^2$  - трансляційний параметр впорядкування).

З фазової діаграми видно, що зі збільшенням масштабу дослідження трансляційний параметр впорядкування зростає, тобто для кожної подальшої оболонки, відстані проміж центральною частинкою і частинками-сусідами починають зростати.

Відповідно на рисунку 3 представлені чисельні значення параметра взаємного орієнтаційного впорядкування

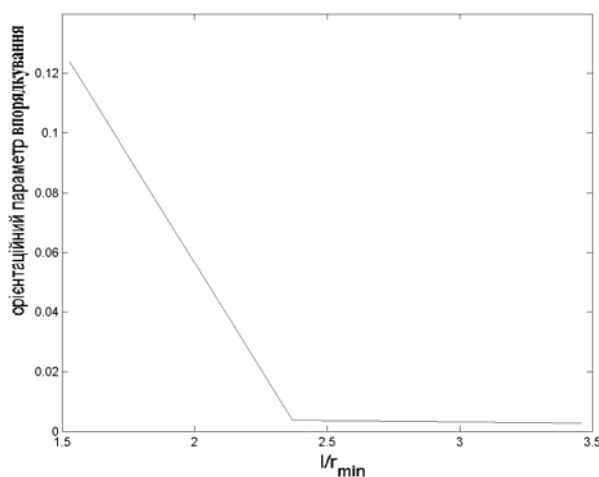


Рис. 3 – Фазова діаграма для параметра взаємного орієнтаційного впорядкування ( $l/r_{\min}$  - відношення радіуса довільної оболонки до мінімального радіусу найменшої оболонки).

Аналіз отриманих даних дозволяє зробити висновок про існування у двовимірних гранульованих системах певного стану, який є подібним до анізотропного флюїду[8].

## Висновки

Таким чином, встановлена поведінка орієнтаційного та трансляційного параметрів впорядкування для двовимірних гранульованих матеріалів свідчить про, по-перше наявність певних (конкретних) ознак існування проміжної між флюїдом та кристалічно впорядкованою (так би мовити – фази анізотропного флюїду). Причому, аналізуючи експерименти по безпосередньому спостереженню двовимірних розподілів частинок – дисків, на горизонтальній підкладці, яка збуджується, доходимо до висновку, що залишкова симетрія цієї екзотичної фази наближена до гексотичної.

По-друге, фактично встановлено кросовер (співіснування) різних типів локальної структури (за прийнятою класифікацією) із збільшенням масштабу спостереження. Кількісний аналіз параметрів локальної структури свідчить про можливість систематизації опису різних її типів за допомогою оболонкової моделі. Опис різних типів кінетики впорядкування під впливом зовнішніх збурень за допомогою оболонкової моделі локальної структури буде здійснено в окремій публікації.

## Список літератури

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. *Mehta A.* Granular Physics .- Harvard, Massachusetts, 2009.-318p.
6. *Patashinskii A.Z., Shumilo B.I.* Theory of condensed matter based on the hypothesis of a local crystalline order //JETP.-1985.-Vol.62,N1.- P.177-184.
7. *Gerasymov O.I.* Structure and Dynamics of Granular Materials Perturbed by External Fields. //Ukr. Journ. Phys.-2010.-Vol.55, N 5.-P.586-592.
8. *Reis P.M., Ingale R.A., Shattuck M.D.* Crystallization of a quasi-two-dimensional granular fluid. //Phys.Rev.Lett.-2006.-Vol.96.-P.258001.

### Локальная структура гранулированных материалов.

**Герасимов О.И., Сомов М.М.**

*В работе рассмотрены методы описания локальной структуры сложных многочастичных дискретных систем, которые основаны на концепции ориентационного и трансляционного параметров порядка. Установлено существование фазы анизотропного флюида, которая является промежуточной между состояниями с ближним и дальним порядком. Предложена оболочечная модель для описания локальной структуры двумерных гранулированных материалов.*

**Ключевые слова:** *гранулированные материалы, локальная структура, параметр порядка, анизотропный флюид.*

### Local structure of granular materials.

**Gerasymov O.I., Somov M.M.**

*Different methods of describing of the local structure of complex many-particle systems which based on conception of the translational and orientational order parameters are developed. The presence of anisotropic fluid phase which is the intermediate between states with short-range and long-range order is discovered. Inner-shell model for the description of the local structure of granular materials has been proposed.*

**Keywords:** *granular materials, local structure, order parameter, anisotropic fluid.*