

Statikus és dinamikus struktúrák jellemzése szemcsés anyagokban

PhD téziszfüzet

Unger Tamás

Témavezető: Dr. Kertész János
MTA lev. tagja

Elméleti Fizika Tanszék
Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

2004

Bevezetés

A szemcsés anyagok, jelentős technológiai szerepük mellett, nagyon gazdag jelenségkörrel is rendelkeznek, melyhez sok nyitott kérdés kapcsolódik. Ez az oka annak, hogy napjainkban a szemcsés anyagok aktív kutatása folyik a fizika és mérnöki tudományok területén. A kutatás egyik legfontosabb célja, hogy összekösse a szemcséket leíró, ismertnek tekinthető mikromechanikai törvényeket a nagyskálájú kollektív viselkedéssel.

A szemcsés anyag részecskéi makroszkopikus objektumok, melyek között a kölcsönhatás disszipatív. Külső gerjesztés nélkül a mozgás leáll, és a gravitációs térbe vagy nyomás alá helyezett rendszer „beragad” egy metastabil állapotába. Egy ilyen sűrű véletlen pakolású rendszerben a kontaktus erők súrlódással és kemény mag taszítással írhatók le (mivel a szemcsedeformációk általában kicsik). A kontaktusok rendezetlen szerkezetén keresztül egy inhomogén erőhálózat épül fel, amely helyenként az átlagosnál nagyobb, láncokba rendeződő erőket tartalmaz, máshol pedig leárnnyékolt tartományok jönnek létre, ahol a szemcsék nem vagy alig érzik a külső terhelést.

Nyomásnak vagy nyírásnak kitett szemcsés rendszerek több lényeges kérdést vetnek fel, melyekre nem ismerjük a pontos választ: Hogyan függnek az anyag mechanikai tulajdonságai a kontaktus- és erőhálózattól? Milyen elvek határozzák meg az anyagban kialakuló feszültséget, ami a külső terheléssel szemben biztosítja a mechanikai egyensúlyt? Hasonlóan fontos kérdés, hogy hogyan írható le az anyag viselkedése, ha nem képes ellenállni a terhelésnek (pl. erős nyírásnak) és megfolyik.

Célkitűzések és alkalmazott módszerek

Statikus rendszerekben ébredő feszültség az első témakör, melyet a PhD dolgozatomban vizsgáltam. Itt kiterjedt számítógépes szimulációkra tá-

maszkodtam, ahol a használt eljárás a kontaktdinamika elnevezésű, merev részecskék modellezésére alkalmas diszkrét elem módszer volt. Emellett analitikus módszereket is alkalmaztam, ahol erre lehetőség nyílt.

Ebben a témában két probléma tanulmányozása volt a céloom. Az első a kontaktus erők statikai határozatlanságának kérdése: Egyértelműen meghatározza-e a kontaktus szerkezet a felépülő erőhálózatot vagy több mechanikailag elfogadható erőállapot létezik ugyanahhoz a geometriához? Hogyan függ ez a tulajdonság a súrlódástól? Ha létezik az erő-megoldásoknak egy sokasága, akkor milyen mértékű az erők határozatlansága és milyen tulajdonságokkal rendelkezik a megoldáshalmaz? Ezek a kérdések szorosan kapcsolódnak a rendszer külső hatásra adott választulajdonságaihoz.

A második probléma egy olyan modell vizsgálata volt, ahol a kontaktusoknál nem csak erők, de forgatónyomatékok átadása is lehetséges. Itt arra a kérdésre kerestem a választ, hogy az anyagban fellépő feszültségeket hogyan befolyásolják ezek a forgatónyomatékok. A modellt kohézív porok motiválták, ahol a szemcseméret 100 nanométernél kisebb.

Az előbbi statikus rendszereken túl vizsgáltam nyírási sávok képződését is. Ez a jelenség sűrű szemcsés anyagban jön létre nyírás hatására, amikor az anyag nem homogén módon folyik, hanem a relatív mozgás egy keskeny sávra koncentrálódik. Egy módosított Couette cellával végzett nyírás kísérletek új eredményeket szolgáltatottak: itt nem triviális alakot mutat a nyírási sáv, mely a cella falától távol és anyagfüggetlen módon jön létre. Célul tűztem ki a jelenséget leíró modell megtalálását. A javasolt variációs modell megoldásánál numerikus és analitikus technikákat használtam.

Új tudományos eredmények

1. Vizsgáltam a merev részecskék szimulációjára alkalmas kontaktdinamika algoritmust. Megmutattam, hogy az erők relaxációja

az iteratív meghatározás során egy diffúziós folyamat, mely meghatározó az eljárás számítási idejére nézve. A számítási idő a részecskeszám $1 + 2/D$ -dik hatványával arányos D dimenzióban [2].

Csökkentve a számítási pontosságot elérhető lineáris skálázás is, de ebben a tartományban a számítási hibák a részecskék effektív lágyságát eredményezik. Megmutattam hogy ez a hamis elasztikus viselkedés véges sebességű hangterjedéshez vezet, és leírható egy csillapított hullámegyenlettel [1]. A részecskék közötti kölcsönhatás megfeleltethető lineárisan csillapított lineáris rugóknak. Meghatároztam az effektív rugóállandó és a csillapítási együttható függését a szimulációs eljárás paramétereitől: az iterációk számától és az időlépés méretétől.

- 2.a.** Merev korongok közötti kontaktus erők statikai határozatlanságát vizsgáltam sűrű pakolású rendszerekben. Javasoltam egy a kontakt dinamika módszerén alapuló eljárást, mely lehetővé teszi a lehetséges erőállapotok feltérképezését [3]. Bebizonyítottam, hogy a megoldások halmaza konvex és így összefüggő a kontaktus erők terében [6]. Megmutattam, hogy a “fizikai” erőállapot, amely a részecskék pozíciójával és a kontaktus hálózattal együtt fejlődve alakul ki, kitüntetett pont a megoldások halmazában, tehát - ellentétben az utóbbi időben gyakran használt feltevésével - az ilyen pontokra az erők terén értelmezett egyenletes mérték nem alkalmazható.
- 2.b.** Szimuláció segítségével [2] megállapítottam, hogy a súrlódás statikailag határozatlanná teszi a kontaktuserőket. Bemutattam, hogy a különböző megoldások közötti erőfluktuációk arányosak a súrlódási együtthatóval kis súrlódás esetén, és a súrlódásmentes esetben visszakaptam az izosztatikus szerkezetnek megfelelő statikai határozottságot [3].

A várakozással ellentétben a szimulációs eredményeim azt mutatják, hogy a fluktuáció nem monoton növekvő függvénye a súrlódásnak. A jelenség magyarázata, hogy a nagyobb súrlódás erősebb stabilizáló hatása miatt csökken a kontaktushálózat konnektivitása, ami túlkompenzálja a növekvő Coulomb kúp okozta szabadságot. Ez az effektus kis elkülönített térrészekbe szorítja a határozatlan erőket vivő kontaktusokat, és így jelentősen csökkenti az erők átlagos fluktuációját [6].

3. Háromdimenziós kontaktdinamikai szimuláció [2] segítségével tanulmányoztam a kontaktusoknál fellépő forgatónyomatékok hatását kohézív porok esetén [5]. Bemutattam, hogy a gördülési és torziós nyomatékok erős stabilizáló hatásuk révén jelentősen növelik az anyag porozitását. A nyomatékok ki és bekapcsolása minőségileg más típusú feszültség kialakulásához vezet: külső terhelés hatására nyomatékok nélkül erős húzóerők ébrednek, melyek a nyomott kontaktusok által kifejtett nyomás számottevő részét semlegesítik. Ha azonban figyelembe vesszük a forgatónyomatékokat, a húzott kontaktuserők lecsökkennek és a nyomóerők a külső terhelésre fordítódnak.
4. Elméletileg vizsgáltam a nyírási sávok képződését keskeny sáv határesetben [4]. Egy módosított Couette cella esetére geometriai megfontolással meghatároztam az összefüggést a nyírási sáv alakja és a kísérletileg jól mérhető görbe között, mely a felületi pozíciót a feltöltési magassággal kapcsolja össze. Javasoltam egy egyszerű, a minimális disszipáció elvén alapuló modellt és numerikusan megoldottam a kapcsolódó variációs problémát. Megmutattam, hogy a modell jól követi a felszínre kifutó, nyitott sávok kísérletekben megfigyelt viselkedését. Nagy feltöltési magasság illetve nagy nyomás esetén megjósoltam a felszín alatt záródó, kupola alakú sáv megjelenését. A modell elsőrendű fázisátalakulással rendelkezik a nyitott

és a zárt fázisok között, melyhez hiszterézis társul. A modellt analitikusan megoldottam nagy nyomás határesetben.

Publikációs lista

A tézispontokhoz kapcsolódó publikációk

- [1] Tamás Unger, Lothar Brendel, Dietrich E. Wolf, János Kertész, *Elastic behavior in contact dynamics of rigid particles*, Phys. Rev. E, **65**, 061305 (2002). [1. tézisp.]
- [2] Tamás Unger, János Kertész; *The Contact Dynamics Method for Granular Media*, in Modeling of Complex Systems, p. 116, ed. P. L. Garrido and J. Marro, (American Institute of Physics, Melville, New York, 2003). [1., 2.b. és 3. tézisp.]
- [3] Tamás Unger, János Kertész; *Frictional indeterminacy of forces in hard-disk packings*, Int. J. of Mod. Phys. B, **17**, 5623 (2003). [2.a. és 2.b. tézisp.]
- [4] Tamás Unger, János Török, János Kertész, Dietrich E. Wolf; *Shear band formation in granular media as a variational problem*, cond-mat/0401143 (2004), accepted for publication in Phys. Rev. Letters. [4. tézisp.]
- [5] Guido Bartels, Tamás Unger, Dirk Kadau, Dietrich E. Wolf, János Kertész; *The effect of contact torques on porosity of cohesive powders*, cond-mat/0403110 (2004), submitted to Granular Matter. [3. tézisp.]
- [6] Tamás Unger, Dietrich E. Wolf, János Kertész; *Force indeterminacy in the jammed state of hard disks*, cond-mat/0403089, (2004), submitted to Phys. Rev. Letters. [2.a. és 2.b. tézisp.]

Egyéb publikációk

- [7] Tamás Unger, Zoltán Rácz; *Concentration profiles and reaction fronts in $A + B \rightarrow C$ type processes: Effect of background ions*, Phys. Rev. E, **61**, 3583 (2000).
- [8] Zénó Farkas, Guido Bartels, Tamás Unger, Dietrich E. Wolf; *Frictional coupling between sliding and spinning motion*, Phys. Rev. Lett., **90**, 248302 (2003).