

Szemcsés anyagok részecske alapú szimulációi

(PhD téziszfüzet)

FAZEKAS SÁNDOR

Témavezető:

Dr. Kertész János



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Elméleti Fizika Tanszék

(2007)

Bevezetés

A szemcsés rendszerek olyan makroszkopikus szilárd részecskék konglomerációi, amelyeket súrlódás és rugalmatlan ütközések jellemeznek. Nemkohéziv esetben a kontaktus erők tisztán taszítóak. Kohéziv esetben tapadó erők is fellépnek. A tipikus szemcseméretekből eredően a termodinamikai fluktuációk és a Brown-mozgás rendszerint irrelevánsak¹, azonban külső hajtóerők komplex kollektív viselkedést, valamint szilárd-, folyékony- és gázszerű halmazállapotok közötti átmeneteket indukálhatnak. A szemcséket nyírással, rázással, külső térfogati erőkkel (nehézségi, elektromos és mágneses terekkel), valamint a köztes teret kitöltő folyadék vagy gáz (pl. víz és levegő) áramlásával lehet gerjeszteni. Legtöbb esetben a szemcsék egyensúlytól távoli metastabil állapotokban vannak. A szemcsés és a tömbi kondenzált anyagok közötti különbségek fő forrását a *termodinamikai effektusok elhanyagolhatósága* és a *disszipatív kölcsönhatások* képezik.

Szemcsés rendszerekkel kapcsolatos jelenségek gyakran előfordulnak a természetben. Erre néhány kiragadott példa a geológiai folyamatok köréből: a homokdűnék vándorlása, az erózió, a törmeléklerakódás vagy a földcsuszamlás. Szemcsés anyagok feldolgozása, szállítása, tárolása fontos szerepet játszik olyan ipari folyamatokban, mint a kémiai, gyógyszerészeti, mezőgazdasági, bányászati és építőipari folyamatok. Kis előrelépés a szemcsés rendszerek viselkedésének megértésében jelentős ipari haszonnal járhat. Ugyanakkor a szemcsés rendszerek a kondenzált anyagok fizikájában és a mérnöki tudományokban számos érdekes kérdést vetnek fel. Szemcsés rendszerekkel kapcsolatosan megfigyelt nemlineáris dinamikai effektusok, olyan folyamatok leírását ihlette mint a letörési jelenségek félvezetőkben, az akadozó csúszás vagy a földrengések dinamikája.

Munkámban sűrű szemcsés rendszerek részecske alapú szimulációira összpontosítottam, valamint ezek komplex dinamikai viselkedésének vizsgálatára, amihez egy általános kvantitatív elmélet még nem áll rendelkezésre és ami továbbra is a tudományterület egyik fő kihívása marad. Az alábbiakban először ismertetem a célkitűzéseimet és az alkalmazott vizsgálati módszereket, majd összefoglalom az elért új eredményeket, és végül bemutatom a kapcsolódó publikációs listámat.

¹Kivéve nano-porok esetében, amiket én nem vizsgáltam.

Célkitűzések és vizsgálati módszerek

A munkám első felét olyan szemcsés rendszerek vizsgálatának szenteltem amelyekben a szemcsék között vonzó erők vannak jelen. A fő hangsúly a vonzó erők jelenlétének a szemcsehalmokra és lavinákra gyakorolt hatásán volt. Széles körben elfogadott, hogy a kohézió rendszerek viselkedését a szemcsék között ható tapadó erők és a tehetetlenségi erők egyensúlya határozza meg. Ilyen megfontolással, a mágneses térbe helyezett vas golyók között jelentkező dipólus kölcsönhatás egyféle adhéziós erőnek tekinthető, a rendszer pedig egy kohézió szemcserendszer modelljének. A mágneses tér nagyságának változtatásával folytonosan változtatható a szemcsék közötti erő, ami lehetővé teszi, hogy a nemkohézió és a kohézió állapotok közötti átmenetet vizsgáljuk. Fontos megérteni, hogy milyen mértékig engedhető meg a fenti analógia, illetve, hogy mik a különbségek a mágneses és a valódi kohézió rendszerek között.

A mágneses rendszerek számítógépes szimulációinak meg kell birkóznia a mágneses kölcsönhatás végtelen hatótávolságának problémájával. A kezelhető rendszerek mérete korlátozott azáltal, hogy N^2 nagyságrendű számítás kell elvégezni minden szimulációs lépésben, ahol N a részecskék száma. Hatékony szimulációk szempontjából döntő fontosságú kérdés, hogy egy ésszerű levágási hossz bevezethető-e egy ilyen rendszerben. Numerikus számításokkal statikus elrendeződések stabilitását összehasonlítva vizsgáltam ezt a kérdést. Ebben, a jellemző helyi elrendeződésekre összpontosítottam, amik központi szerepet játszanak a szemcsés rendszerek viselkedésében. Meghatároztam a legalacsonyabb ésszerű levágási hosszat, ami lehetővé tette kétdimenziós szimulációk szisztematikus futtatását, valamint a mágneses szemcsékből épülő halmok és lavinák vizsgálatát.

A munkám második felében nemkohézió szemcsés rendszerekben megjelenő deformáció-lokalizációt vizsgáltam háromdimenziós részecske alapú szimulációkban. Szemcsés anyagokban, lassú nyírás során a deformáció rendszerint nyírási sávoknak nevezett keskeny zónákban lokalizálódik. A nyírási sávok alakjára vonatkozóan bőséges szakirodalom áll rendelkezésre több évtizedre visszamenőleg, beleértve mind numerikus, mind kísérleti tanulmányokat, azonban ezek többnyire kétdimenziós és peremfeltételek által indukált nyírási sávokkal foglalkoznak. A háromdimenziós leírásra irányuló próbálkozások rendszerint azzal a problémával szembesültek, hogy nehéz a minták belsejéből információt kinyerni, azonban jelentős lendületet kaptak, amikor olyan kísérleti eszközök váltak elérhetővé mint például a számítógé-

pes tomográfia. Triaxiális nyírási tesztek komplex lokalizációs mintákat és nyírási sáv-morfológiákat mutattak ki a kísérleti körülmények függvényében. Ilyen lokalizációs minták vizsgálata részecske alapú szimulációkban legalább két szempontból fontos: (1) elősegíti a deformáció-lokalizáció jobb megértését, és (2) a szimulációk olyan vizsgálatokat tesznek lehetővé (mint pl. a lokalizáció sűrűség- és súrlódásfüggését), amelyek kísérletekkel nehezen tanulmányozhatók.

A pakolási sűrűség fontos szerepet játszik a szemcsés anyagok dinamikájában. Kísérleti eredmények és elméleti megfontolások alapján csábító a gondolat, hogy a nyírási sávokban a pakolási sűrűség önszerveződő módon egy kritikus értékre áll be. Reynolds már 1885-ben megfigyelte, hogy sűrű szemcserendszerek kitágulnak nyírás során. Másrészt ismeretes, hogy a ritka szemcserendszerek ilyenkor sűrűsödnek. Azonban nyitott maradt a kérdés, hogy létezik-e egy kritikus pakolási sűrűség nyírási sávokban. Ezt triaxiális nyírási tesztek számítógépes szimulációiban vizsgáltam, különböző kezdeti sűrűség és súrlódási együttható mellett. Egy hisztogram technikával, ami Otsu küszöbérték módszerére alapult, azonosítottam a nyírási sávokban levő szemcséket és megmértem a pakolási sűrűséget a környezetükben.

Új tudományos eredmények

(I) (a) Numerikus számításokkal megvizsgáltam [1] egy kétdimenziós mágneses szemcserendszerben a kölcsönhatás R levágási hosszának hatását. Egy ilyen rendszerben két jellemző lokális elrendeződés van: (1) egy ferromágneses, ami háromszögrácsba szervezi a dipólusokat, és (2) egy antiferromágneses, ami a négyszögrácsos dipólus elrendeződéseket részesíti előnyben. Kimutattam [1], hogy a ferromágneses állapot sokkal érzékenyebb a levágási hosszra mint az antiferromágneses állapot.

(b) Végtelen hatótávolság és nagy levágási hosszak esetén a ferromágneses állapot csekély mértékben kedvezőbb az antiferromágneses állapotnál. Ez megfordul $R \approx 4$ -nél és a ferromágneses állapot teljes eltűnéséhez vezet $R \approx 2$ -nél. Kettős részecskeláncból álló ferromágneses és antiferromágneses rendszerek hajlításával kimutattam [1], hogy a tipikus helyi elrendeződéseket illetően jelentős változás áll be $R \approx 4$ és $R \approx 5$ között. A fentiekre alapozva az $R \approx 5$ választást javasol-

tam [1] a legalkisebb ésszerű levágási hosszak, ami dipoláris kemény golyókból álló kétdimenziós rendszerek szimulációiban alkalmazható.

(II) (a) Mágneses szemcsékből álló kétdimenziós halmokat vizsgáltam [2] részecske alapú szimulációkban az $R = 6.25$ részecskeátmérőnyi levágási hossz mellett, ami biztosította, hogy a lokális elrendeződések, amik központi szerepet játszanak a szemcsés rendszerek dinamikájában, realisztikusak. Kimutattam [3], hogy a vizsgált mágnesezettségi tartományban mind a halmok rézsűszöge, mind a felszín érdekessége lineárisan függ az f kölcsönhatási erőaránytól, amit a szemcsék érintkezésénél fellépő maximális mágneses erő és a gravitációs erő aránya definiál. Ez összhangban van a kísérletekből ismert mágnesezettségtől való kvadratikus függéssel.

(b) A lavinák különböző keletkezési mechanizmusai szerint alacsony és magas f kölcsönhatási erőarálynál a fenti szimulációkban megkülönböztettem egy *szemcsés* és egy *korrelált tartományt* [3]. A két tartomány közötti átmenet nem éles. Egyszerű stabilitási kritériumokra alapozva megbecsültem az átmeneti pont helyét, amit a szimulációs eredmények alátámasztottak.

(c) A szemcsés tartományban a lavinákat sűrűn egymást követő függőleges részecskeláncok jellemzik és átlagos lefutási idejük arányos a lavinák (golyószámban megadott) méretével. Továbbá, az átlagos lavina áram (vagyis a lavinaméreték és az ezekhez tartozó átlagos lefutási idők aránya) lineárisan függ f -től. A lavinaméreték eloszlásának vizsgálatával kimutattam [3], hogy – kísérleti eredményekkel összhangban – létezik egy jellemző lavinaméret, ami arányos f -fel.

(d) A korrelált tartományban a lavinák átlagos lefutási ideje arányos a lavinaméreték négyzetgyökével, f -től való minden további függés nélkül. Ezt a tartományra jellemző nagy és hosszú részecske-klaszterek szabadesése magyarázza. Megmutattam [3], hogy a szemcsés tartományban jelen levő karakterisztikus méretet a korrelált tartományba való átmenetkor jelentkező nagy fluktuációk elnyomják, és ezt követően a lavinák csak egy f -fel arányosan növvő jellegzetes hosszal rendelkeznek.

(III) (a) Háromdimenziós részecske alapú szimulációkban tengelyszimmetrikus triaxiális nyírési tesztek végeztem [4] sűrű nemkohézív szemcsés mintákkal, nulla gravitáció és alacsony nyomás mellett. Különböző

peremfeltételekkel, kísérletekből ismert nyírási sáv-morfológiákat sikerült azonosítani és leírni. Kimutattam [5], hogy deformáció-lokalizáció során spontán szimmetriasértés jelentkezik, ha a nyírási cella nyomólemeze elbillenhet.

(b) Nyírási sávok azonosítására és behatárolására használható különböző lokális mennyiségeket számoltam és megvizsgáltam azok kvantitatív kapcsolatát. Erős korrelációt találtam [5] a (részecskék elmozdulásával a makroszkopikus deformáció tenzorból számolt) lokális nyírási intenzitás, valamint a szemcsék szögsebessége, a koordinációs szám és a lokális üreghányad között. Ezek közül a lokális nyírási intenzitás és a szemcsék szögsebessége jelezte legmegbízhatóbban a nyírási sávokat.

(IV) (a) További háromdimenziós részecske alapú szimulációkkal, triaxiális nyírási tesztekben vizsgáltam [6] a deformáció-lokalizáció súrlódás- és sűrűség-függését. A globális viselkedést illetően kimutattam, hogy a sűrű minták kitágulnak, a ritka minták pedig sűrűsödnek a tesztek során, ami teljes egyezésben van a kísérleti eredményekkel és az elméleti várakozásokkal.

(b) Megmutattam [6], hogy a deformációs felpuhulás, valamint a nyírási sávok kialakulása, a kezdeti sűrűség és a súrlódási együttható növekedésével jelenik meg és erősödik fel. Ha a szimmetriasértés nem jöhet létre, a nyírási sávok kialakulása után deformációs keményedés jelentkezik [5].

(c) Egy hisztogram-technika segítségével azonosítottam a nyírási sávokat és megmértem a η_{SB} térkitöltési hányadukat. Megmutattam [6], hogy ezekben a megcsúszási zónákban a rendszer önszervező módon egy meghatározott (kritikus) η_c értékre állítja a szemcsesűrűségét függetlenül a kezdeti sűrűségtől. Bizonyítottam, hogy ez a jelenség kizárólag a nyírási sávokra korlátozódik.

(d) Megmutattam [6], hogy η_c függ a μ súrlódási együtthatótól és a $\mu \rightarrow \infty$ határesetben exponenciálisan konvergál egy jól definiált η_c^∞ értékhez, amit meghatároztam keskeny méreteloszlású gömb alakú szemcsékre. Amellett érveltem, hogy η_c^∞ egy *dinamikus véletlen ritka pakolást* definiál, ami jellemző a szemcsés anyagokban jelentkező nyírási sávokra.

Publikációs lista

A tézispontokhoz kapcsolódó tudományos közlemények

- [1] Sándor Fazekas, János Kertész, and Dietrich E. Wolf: *Two-dimensional array of magnetic particles: The role of an interaction cutoff*, Physical Review E, **68**, 041102 (2003).
- [2] Sándor Fazekas, János Kertész, and Dietrich E. Wolf: *Computer simulation of magnetic grains*, in Traffic and Granular Flow '03, p. 489-501, ed. S. P. Hoogendoorn, S. Luding, P. H. L. Bovy, M. Schreckenberg, and D. E. Wolf (Springer - Berlin, 2005).
- [3] Sándor Fazekas, János Kertész, and Dietrich E. Wolf: *Piling and avalanches of magnetized particles*, Physical Review E, **71**, 061303 (2005).
- [4] Sándor Fazekas, János Török, János Kertész, and Dietrich E. Wolf: *Computer simulation of three dimensional shearing of granular materials: Formation of shear bands*, in Powders and Grains 2005, p. 223-226, ed. R. García-Rojo, H. J. Herrmann, and S. McNamara (Balkema - Rotterdam, 2005).
- [5] Sándor Fazekas, János Török, János Kertész, and Dietrich E. Wolf: *Morphologies of three-dimensional shear bands in granular media*, Physical Review E, **74**, 031303 (2006).
- [6] Sándor Fazekas, János Török, and János Kertész: *Critical packing in granular shear bands*, Physical Review E, **75**, 011302 (2007).

További tudományos közlemények

- [7] János Török, Sándor Fazekas, Tamás Unger, and Dietrich E. Wolf: *Relationship between particle size and normal force*, in Powders and Grains 2005, p. 1273-1277, ed. R. García-Rojo, H. J. Herrmann, and S. McNamara (Balkema - Rotterdam, 2005).
- [8] Henning A. Knudsen and Sándor Fazekas: *Robust algorithm for random resistor networks using hierarchical domain structure*, Journal of Computational Physics, **211**, p. 700-718 (2006).