

UPAKOWANIE SFRUSTROWANEGO UKŁADU GRANULARNEGO

Jolanta Błaszczuk¹, Zbigniew Domański^{1,2}

¹*Instytut Matematyki i Informatyki, Politechnika Częstochowska*

²*Instytut Informatyczno-Matematyczny, Akademia Polonijna w Częstochowie*

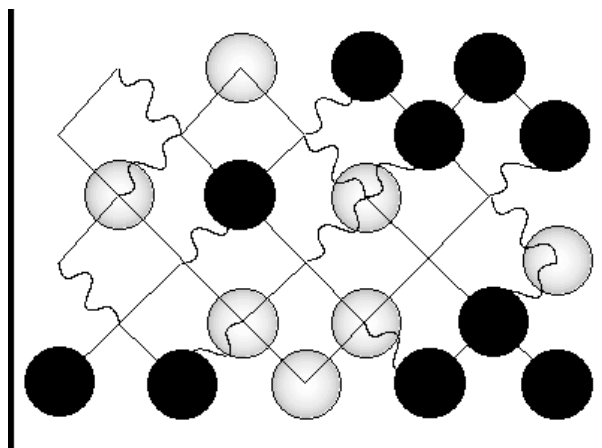
Streszczenie. Rozpatrywany jest model sieciowy niejednorodnego układu granularnego składającego się z dwóch rodzajów cząstek. Układ jest strukturalnie niejednorodny z możliwością występowania geometrycznej frustracji. Numerycznie analizowane są konfiguracje odpowiadające stanowi upakowania gęstego w obecności frustracji.

Materiały sypkie są powszechnie spotykane w środowisku naturalnym. Od dawna stosowane są w przemyśle, w szczególności w takich instalacjach, jak: silosy zbożowe, linie pakowania w zakładach farmaceutycznych, nie wspominając o budownictwie i przemyśle wydobywczym, gdzie obecność hałd kruszyw jest widokiem podstawowym. We wspomnianych przykładach bardzo istotne jest zachowanie statyczne i dynamiczne materiału granularnego w procesach formowania stosów. Sypkie materiały granularne utrzymują określony kształt głównie dzięki obecności grawitacji. Ziarnista struktura granulatu powoduje, że w określonych warunkach obserwuje się zachowania typowe dla substancji płynnych bądź typowe zachowania charakteryzujące ciała stałe. Przykłady to płynięcie ziaren, występowanie lawin na zboczu piramidy piasku czy klasyczne, gęste upakowanie, jakie występuje, gdy kąt nachylenia ściany bocznej stosu nie przekracza pewnej wartości krytycznej.

Analiza własności materiałów granularnych, w szczególności materiałów sypkich, jest przedmiotem wielu opracowań, zarówno teoretycznych, jak i eksperymentalnych, wśród których coraz powszechniejsze są eksperymenty numeryczne. Stosowane podejścia bazują na opisie wykorzystującym język i aparat matematyczny odpowiedni do opisu ośrodków ciągłych lub ten właściwy dla ośrodków o strukturze dyskretnej. Podejściem odpowiednim do analizy własności mikroskopowych względnie małych układów jest podejście wykorzystujące modele sieciowe, w których ziarna granulatu mają określony zbiór dostępnych położeń charakteryzowany przez węzły wybranej sieci, np. kwadratowej kraty, która będzie wykorzystana w niniejszej pracy.

W układach granularnych w naturalny sposób są obecne: nieporządek strukturalny i geometryczna frustracja, będące niezbędnymi czynnikami generującymi zachowania charakterystyczne dla układów szkieł spinowych. W ostatnich latach pojawiło się kilka prac dotyczących wykorzystania modelu sfrustrowanego gazu sieciowego do opisu układów granularnych.

W niniejsze pracy rozpatrywany jest model [1, 5], będący układem dwu rodzajów cząsteczek rozmieszczanych w węzłach strukturalnie niejednorodnej sieci kwadratowej. Rysunek 1 przedstawia fragment takiej sieci wraz z kilkoma umieszczonymi na niej cząstkami.



Rys. 1. Model sieciowy

Puste i wypełnione kółka obrazują dwa rodzaje cząsteczek scharakteryzowanych odpowiednio liczbami $S_i = -1$ oraz $S_i = +1$. Takie rozróżnienie pozwala rozpatrywać zachowanie się mieszaniny cząstek np. o kształtach odbiegających od sferycznego. Z kolei linie proste i faliste reprezentują dwa rodzaje oddziaływań między węzłami, występujących gdy warunki lokalne nie są homogeniczne w obrębie materiału. Oddziaływania te są charakteryzowane liczbami losowymi ε_{ij} , zgodnymi z zadanym rozkładem liczb losowych.

Cząstki związane z węzłami podlegają ograniczeniu wynikającemu z konieczności dostosowania się rodzaju cząstek do warunków lokalnie panujących w obrębie sieci. Rozpatrzmy możliwie prosty warunek postaci

$$\varepsilon_{ij} S_i S_j = 1 \quad (1)$$

który umożliwia powstanie niejednorodnej struktury upakowania cząstek wynikającej z różnorodności ich kształtu.

Przykładowe, energetycznie faworyzowane konfiguracje, zwane dopuszczalnymi, oraz konfiguracje niekorzystne energetycznie (niedopuszczalne) zaprezentowano na rysunku 2.

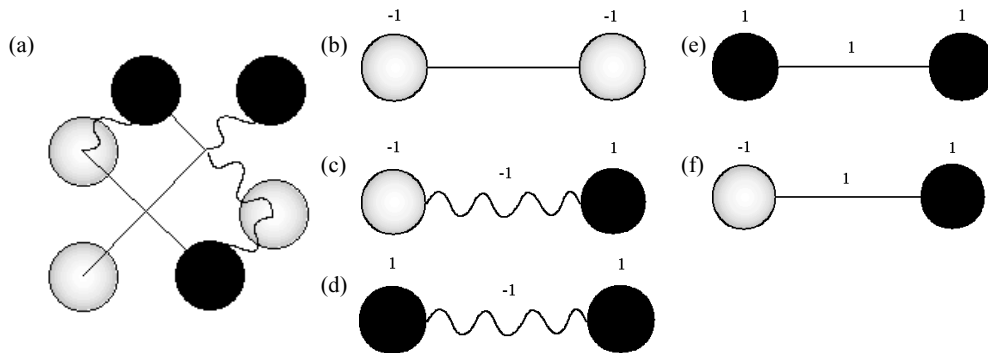
Wśród węzłów występują węzły geometrycznie sfrustrowane, tzn. takie, dla których nie istnieje konfiguracja obsadzeń umożliwiająca spełnienie warunku (1), tj. na osiągnięcie przez układ minimum energii.

Przy wysokiej gęstości cząstek w układzie oddziaływania ε_{ij} silnie wpływają na upakowanie cząstek w układzie. Generują one geometryczną frustrację w układzie,

spowodowaną kształtem i aktualnym obsadzeniem węzłów przez cząsteczki. Ponieważ liczba par węzłów geometrycznie sfrustrowanych w układzie nie jest równa zero, to znaczy, że suma

$$\sum_{ij} (\varepsilon_{ij} S_i S_j - 1) \quad (2)$$

po wszystkich węzłach sieci nie będzie równa zero. Tak więc możemy nigdy nie zapełnić sfrustrowanego węzła w sieci, a tym samym nie unikniemy pustych węzłów.



Rys. 2. Przykłady konfiguracji obsadzeń węzłów: a) konfiguracje z frustracją geometryczną, b, c, e) konfiguracje energetycznie faworyzowane oraz d, f) konfiguracje energetycznie niekorzystne

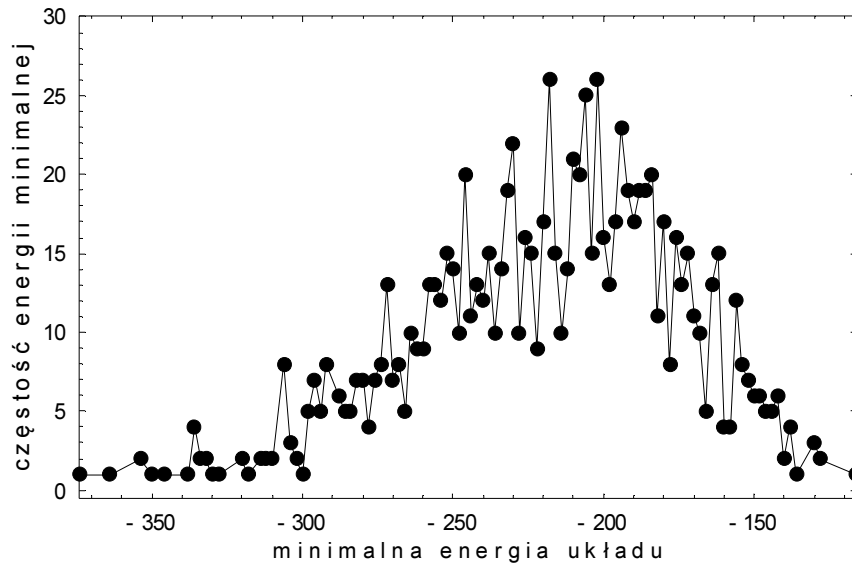
Zbadanie zachowania się układu, poddanego wibracjom w obecności grawitacji, są interesującym zagadnieniem z uwagi na stabilność układów granularnych występujących w warunkach rzeczywistych. Dynamika takich układów była przedmiotem badań numerycznych, jednak, jak dotąd, nie jest jasne, jakie są konfiguracje stacjonarne, do których ewoluuje układ. Stąd, interesujące jest określenie, jakie są stany podstawowe tak zdefiniowanego układu. W ujęciu mikroskopowym energia konfiguracji cząstek jest obliczona ze wzoru

$$E = -J \sum_{(i,j)} (\varepsilon_{ij} S_i S_j - 1) n_i n_j \quad (3)$$

gdzie $n_i = 0, 1$ jest zmienną obrazującą obecność cząstek w węzle i ; J jest jednostką energii (koszt „fałszywego upakowania”).

Dla opisanego modelu wykonano obliczenia energii minimalnej (3) dla przypadku, gdy połowa węzłów była pusta, tj dla gęstości $\frac{1}{2}$ cząstki na węzeł. Druga połowa została zapełniona dwoma rodzajami cząstek o jednakowej liczności. Liczby były losowane zgodnie z rozkładem jednorodnym w przedziale $[-1, 1]$. Zbadano układy zawierające $n \times n$ węzłów, gdzie $n = 10, 20, \dots, 70$. Zwiększanie liczby węzłów w układzie, przy zachowaniu gęstości $\frac{1}{2}$ cząstki na węzeł, nie powodowało

istotnych zmian w rozkładzie energii układu. Przykład takiego rozkładu prezentuje rysunek 3 dla układu 70x70 węzłów.



Rys. 3. Rozkład energii minimalnej układu 70x70 węzłów dla 50 000 próbek

Literatura

- [1] Nicodemi M., Coniglio A., Herrmann H.J., Physical Review 1997, E55, 3962.
- [2] Nicodemi M., Coniglio A., Herrmann H.J., Physica 1997, A 240, 405-418.
- [3] Caglioti E., Coniglio A., Herrmann H.J., Loreto V., Nicodemi M., Physica 1998, A 257, 419-423.
- [4] Scarpetta S., de Candia A., Coniglio A., Physical Review 1997, E55, 4943.
- [5] Franzese G., Coniglio A., Physical Review 1999, E59, 6409.