

О.І. ГЕРАСИМОВ,¹ А.Г. ЗАГОРОДНІЙ,² М.М. СОМОВ¹

¹Одеський державний екологічний університет

(Вул. Львівська, 15, Одеса 65016; e-mail: ogerasymov@mail.ru)

²Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України

(Вул. Метрологічна, 14б, Київ 03143)

ЩОДО АНАЛІЗУ СТРУКТУРИ ГРАНУЛЬОВАНИХ МАТЕРІАЛІВ

УДК 539

Структурне впорядкування, яке спостерігається у мезо- та макромасштабі у гранульованих матеріалах, та деяких інших об'єктах м'якої матерії (скажімо у запорощеній плазмі), вивчається за допомогою геометричних методів (методу Вороного), а також у термінах відповідних параметрів порядку. Аналіз фазових діаграм у термінах орієнтаційного та трансляційного параметрів порядку показує, що структура гранульованих матеріалів є природно анізотропною. Ентропійна модель ґраткового газу застосована для опису вертикального профілю густини гранульованих матеріалів у зовнішньому гравітаційному полі. Отримані теоретичні результати добре узгоджуються із експериментальними даними, і майже точно відтворюють їх у найближчому okolí станів з максимальним упакуванням.

Ключові слова: гранульовані системи, локальна структура, структуроутворення, фазові діаграми

1. Вступ

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. У більшості випадків такі контактні взаємодії нелінійні. До природи гранульованих матеріалів (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 гранульованих матеріалах виступає їх енергія в зовнішньому (гравітаційному) полі, яке, разом з граничними умовами, зрештою визначає також і форму гранульованих матеріалів. При припиненні підведення енергії ззовні кінетична енергія гранул майже миттєво перетворюється на нуль і, таким чином, гранульовані матеріали є нетермодинамічними системами.

Перебуваючи дисипативною дискретною мікромеханічною динамічною системою при створенні спеціальних умов, гранульовані матеріали проявляють властивості як типові для агрегатних станів конденсованої матерії: газів, рідин і твердих тіл, так і принципово відмінні від них. Така багатоскладова поведінка гранульованих матеріалів робить завдання опису їх властивостей з точки зору послідовної теорії дуже складною, і, незважаючи на окремі вдачі моделі, далекою від свого остаточного розв'язку задачею [1–4].

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

Візьмемо, наприклад, відому наочну властивість гранульованих матеріалів – 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 гранульованих матеріалів дозволило б якісно істотно поліпшити ефективність їх промислового застосування і зробити

помітний крок у розвитку теорії. Треба зауважити, що дослідження деяких інших об'єктів м'якої матерії (до одної з форм якої і належать гранульовані матеріали), наприклад, запорошеної плазми, яка принципово відрізняється від описаних вище 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 так званому 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 незброєним оком. Моделювання структури та переходів між різними типами структур вимагає мультимасштабного аналізу.

У експериментах із магнітними рідинами, які знаходяться під дією зовнішнього 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 гранульованих матеріалів та запорошеної плазми.

2. Структура 2D гранульованих матеріалів та запорошеної плазми

Дослідження 2D об'єктів м'якої матерії у мезо- та макромасштабах (гранул, порошків, твердих дисків, крапель води та магнітної рідини) дозволили встановити наявність в їх структурі станів, з точки

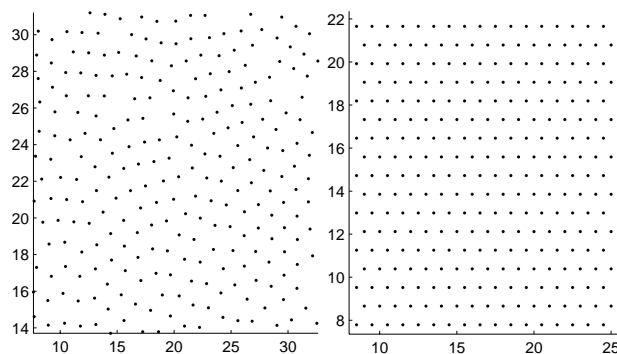


Рис. 1. Структури, які спостерігалися у двовимірній системі твердих дисків, яка збурювалася шляхом зовнішніх горизонтальних струсів (оцифровані, довільно виділені, стробоскопічні знімки системи). Ліворуч – початковий неупорядкований стан; праворуч – стан із гексагональним впорядкуванням

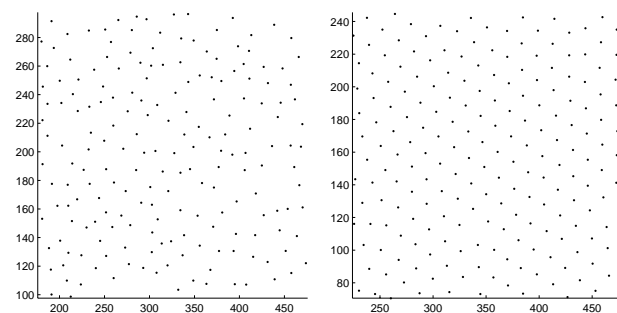


Рис. 2. Структури, які спостерігалися у 2D запорошеної плазмі (за даними [5]). Ліворуч – початковий неупорядкований стан; праворуч – структура, в якій переважають домени із гексагональною симетрією

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 компактності) у випадку гранульованих матеріалів), 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 становить 17 мм, прямокутна кювета, яка містила систему, має лінійні розміри $16,5 \times 20$ см. Початковий розподіл дисків мав довільний характер. Після

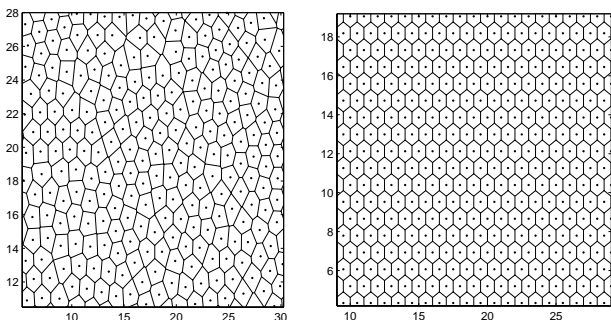


Рис. 3. Фігури Вороного для структур, які спостерігалися у двовимірній системі твердих дисків, яка збурювалася шляхом зовнішніх горизонтальних струсів. Ліворуч – початковий неупорядкований стан; праворуч – діаграми, які відповідають структурі із гексагональною симетрією

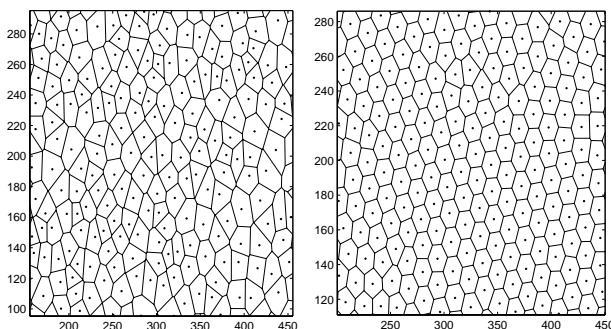


Рис. 4. Фігури Вороного для структур, які спостерігалися у 2D заповненої плазмі (за даними [5]). Ліворуч – початковий неупорядкований стан; праворуч – структура, в якій переважають домени із гексагональною симетрією

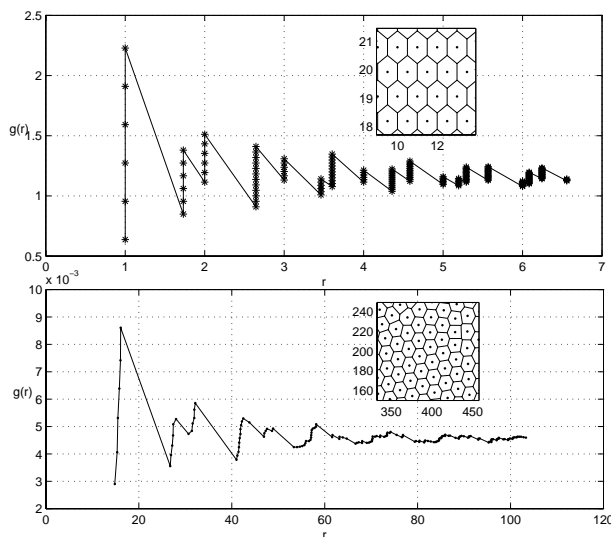


Рис. 5. Функція $g(r)$ для гранульованих матеріалів (зверху) та заповненої плазми (знизу). На вставках наведено фігури Вороного для відповідних структур

припинення підводу енергії зовні система зупинялася і здійснювалося її фотографування. На рис. 1 наведено дані, отримані в описаних вище спостереженнях. На них ми вочевидь спостерігаємо формування кластерів із гексагональною симетрією у розташуванні гранул.

Цікаво відзначити, що аналогічне структуроутворення спостерігалось у принципово відмінних від гранульованих матеріалів системах, зокрема – у заповненої плазмі. На рис. 2 зображено аналогічні структури, які спостерігалися в експерименті по дослідженню структуроутворень системи, яка складається з порошків у заповненої 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 центра частинки, в якому знаходяться усі точки, що є найближчими до цього центра [8]. На рис. 3 та 4 наведено фігури Вороного, які відповідають виділеним типам структур у 2D гранульованих матеріалах та заповненої плазмі зображених на рис. 1 та рис. 2.

Аналіз даних, наведених на рис. 1–4, свідчить про те, що в обох, різних по фізичній природі системах, структуроутворення в мезомасштабі має певні схожі риси. Так, наприклад, 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 у заповненої плазмі, а також частинок-гранул у 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 рис. 5.

Аналіз даних, наведених на рис. 5, свідчить про те, що розподіл густини у системах, що досліджуються, відповідає формуванню в них оболонкової структури.

Розглянемо, наприклад, двовимірне упакування твердих дисків на площині (на рис. 6 чорними точками показано 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 рис. 6 зображено стани, які спостерігаються у системі двовимірних дисків у мезомасштабі.

Як видно, у випадку наведеного на рис. 6,а типу впорядкованої структури навколо центральної частинки у найближчому оточенні знаходиться шість частинок-сусідів, які можна інтерпретувати як другу оболонку. У наступній, 3-й оболонці, знаходиться 12 частинок. На шляху такого оболонкового підходу, структура, яка зображена на рис. 6,а 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 рис. 6,б, 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 параметра впорядкування ϕ , 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 $N(s)$ такого вигляду:

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

де $s = S_V/S_h$ – 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) зводиться до визначення відповідних параметрів a та b . Поведінку функції розподілу (1) у випадку систем із різним значенням впакувальної фракції відображено на рис. 7.

Із наведених на рис. 7 результатів випливає, що із зростанням впакувальної фракції η відбувається зменшення дисперсії відповідного розподілу (1).

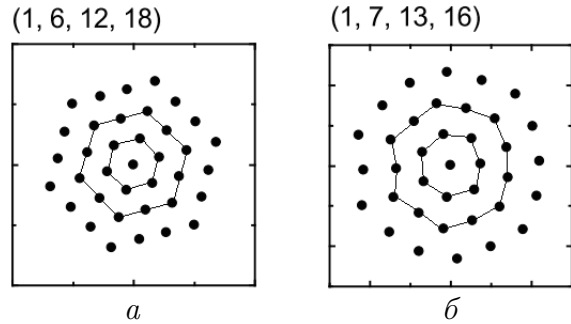


Рис. 6. Типи локальної структури, які спостерігаються у 2D системах твердих дисків

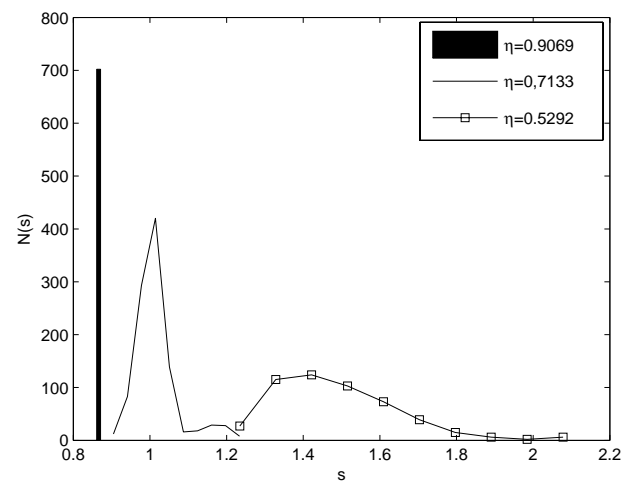


Рис. 7. Характеристична функція розподілу $N(s)$ для 2D гранульованих матеріалів із різними значеннями впакувальної фракції

На рис. 8 наведено графік дисперсії розподілу D залежно від впакувальної фракції η .

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

3. Модель ентропії ґраткового газу для опису щільності гранульованих матеріалів

Збурення гранульованих систем приводить до ущільнення, тобто до зменшення об'єму, який займає система [10]. 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

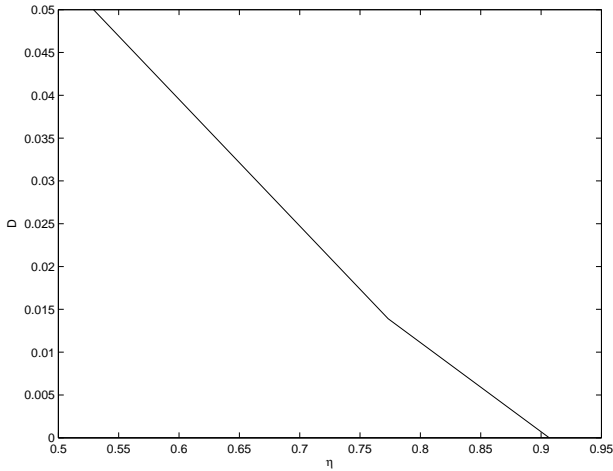


Рис. 8. Дисперсії розподілу $N(s)$ залежно від впакувальної фракції η

функціонала вільної енергії системи у так званих “інгерентних” станах [11] у вигляді

$$F(\rho) = E(\rho) - \beta^{-1}S(\rho), \quad (2)$$

де енергія системи в гравітаційному полі задається виразом

$$E(\rho) = mg \int_{(V)} z \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (3)$$

Тут z – вертикальна координата, $\beta = \frac{1}{k_B T}$ – масштаб енергії, ρ – густина системи.

У ролі виразу для $S(\rho)$ використаємо відоме співвідношення для ентропії ґраткового газу [12]:

$$S(\rho) = - \int_{(V)} d\mathbf{r} \left\{ \frac{\rho}{\rho_0} \ln \frac{\rho}{\rho_0} + \left(1 - \frac{\rho}{\rho_0}\right) \ln \left(1 - \frac{\rho}{\rho_0}\right) \right\}, \quad (4)$$

де ρ_0 – максимальна густина системи.

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

$$\rho(\mathbf{r}) = \frac{\rho_0}{1 + ce^{\Gamma z}}, \quad \Gamma = mg\rho_0\beta, \quad (5)$$

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

Саме формулу типу (4) було використано у [13] для параметризації експериментальних вимірів вертикального профілю густини у гранульованих матеріалах.

Розглянемо нашу систему в околі впорядкованого (симетризованого) стану. Таким чином, відхилення від цього стану (див. рис. 6,а) можна інтерпретувати як руйнацію (“плавління”) симетризованого (“кристалічного”) стану (див. рис. 6,б). Зазначимо, що, зазвичай, для кількісного визначення руйнації кристалічного впорядкування у твердих тілах (плавління) використовується так званий параметр Ліндемана [14]. Останній розраховується як середньоквадратичне відхилення окремої частинки від положення рівноваги:

$$\gamma = \sqrt{\langle (r - \langle r_i \rangle)^2 \rangle} / L, \quad (6)$$

де r_i – відстань між частинками-сусідами у стані, що спостерігається, r – відстань між частинками-сусідами у симетризованому стані, L – стала ґратки.

У термінах використаної моделі вираз для параметра набуває вигляду

$$\gamma = \frac{\rho_0 c}{\Gamma^2} A(\rho),$$

$$A(\rho) = \rho \frac{\ln^2 \frac{1}{c} \left(\frac{\rho_0}{\rho} - 1 \right)}{c\rho_0} - \frac{1}{c} \ln^2 \frac{1}{c} \left(\frac{\rho_0}{\rho} - 1 \right) - 2 \left[\ln c \ln \frac{\rho_0}{\rho} + Li_2 \left(\frac{\rho_0}{\rho} \right) \right] - \rho_0 c \left[\rho \frac{\ln c}{\rho_0} - \ln \frac{\rho_0}{\rho} + \frac{\rho_0 - 1}{\rho} \ln \left(\frac{\rho_0}{\rho} - 1 \right) \right]^2, \quad (7)$$

де Li_2 – спеціальна функція ділогарифм [15].

На рис. 9 зображена розрахована за формулою (7) поведінка залежності γ від параметра впакування η .

З наведених на рис. 9 даних випливає, що отримана експериментально залежність параметра γ від густини, по-перше, якісно відповідає передбаченням запропонованої аналітичної моделі. По-друге, свідчить про те, що профіль ущільнення гранульованих матеріалів у гравітаційному полі не відповідає розподілу Больцмана. Варіація граничного значення густини ρ_0 у межах фізичного змісту моделі (зокрема, у напрямку реально досяжних значень параметра впакування), приводить до кращого збігання даних експерименту і отриманих на підставі теоретичної моделі. Реально досяжні значення параметра 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 збігаються у найближчому околі максимального впакування у системі (див. рис. 9).

4. Трансляційний та орієнтаційний параметри впорядкування. Анізотропія гранульованих систем

Окремий інтерес дослідження структури матеріалів, які нас цікавлять, становить їхня організація у глобальному (макро) масштабі. Так, в роботі [16] структурний аналіз здійснюється за допомогою дискретної множини точок $\{G_i\} \equiv \{\mathbf{r}^{(\alpha)}\}$ ($\alpha = 0, 1, 2, \dots$) із координатами \mathbf{r}_α (координати центрів частинок (гранул), що оточують центральну частинку, яка, у свою чергу, знаходиться в початку вибраної 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 (наприклад, гранецентрованої кубічної, гексагональної щільної ґратки або ін.). Відомості про $\{\Gamma_\alpha\}$ можна одержати з альтернативних джерел інформації про локальну будову вибраних зразків. Зауважимо, що, наприклад, у випадку типових рідин вибір $\{\Gamma_\alpha\}$ є суттєво обмеженим внаслідок недостатньо повної інформації про їхню локальну структуру. Щодо гранульованих матеріалів, їх структуру достатньо легко можна спостерігати навіть неозброєним оком.

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

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

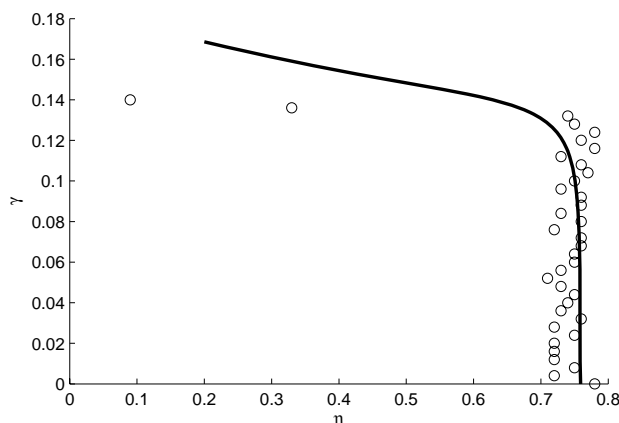


Рис. 9. Залежність параметра γ , який розраховано за (7) від параметра впакування. Точками показано дані експерименту [13]

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

Зазвичай вважають, що флюктуації $\{\mathbf{r}_\alpha\}$, які у випадку гранульованих матеріалів 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 $\{\mathbf{r}_\alpha\}$.

Якщо розрізняти орієнтаційний та трансляційний параметри порядку, то можна визначати, скажімо, орієнтаційний параметр порядку:

$$g_n = \frac{1}{N_n} \sum_1^{N_n} \exp(iN_n \varphi_n), \quad (8)$$

де N_n – кількість частинок у n -й оболонці, φ_n – відносний кут між радіус-векторами, які задають положення частинок виділеної оболонки і частинкою, навколо якої вона будується:

Трансляційний параметр порядку запишемо у такому вигляді:

$$u_2^2 = \frac{1}{N} \sum_i \left[\langle |\mathbf{r}_i|^2 \rangle - \langle |\mathbf{r}_i| \rangle^2 \right], \quad (9)$$

де N – кількість частинок у оболонці; $\langle |\mathbf{r}_i|^2 \rangle$ – середнє значення квадрата відстані між центральною частинкою та i -м сусідом в оболонці; $\langle |\mathbf{r}_i| \rangle^2$ –

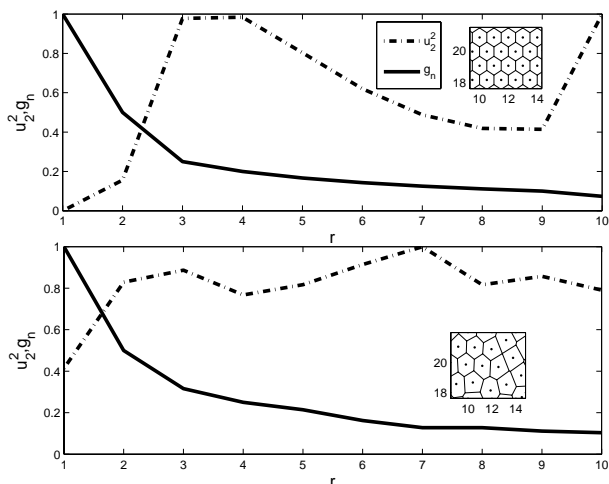


Рис. 10. Розрахунок параметрів впорядкування (8) та (9) для гранульованих матеріалів. Результати чисельної обробки даних, наведених на рис. 1

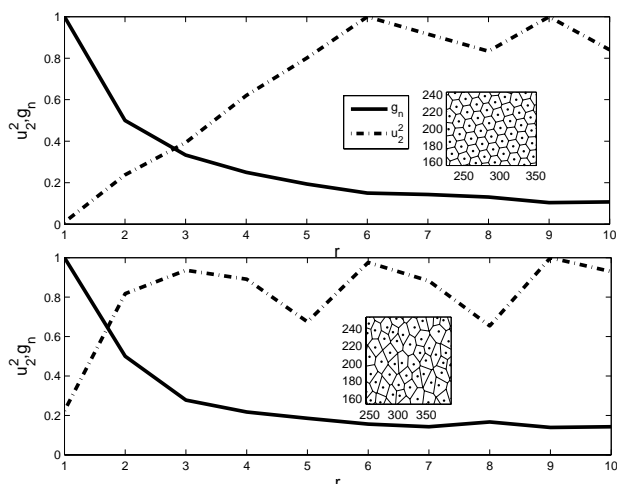


Рис. 11. Розрахунок параметрів впорядкування (8) та (9) для запоорошеної плазми. Результати чисельної обробки даних, наведених на рис. 2

квадрат середньої відстані між центральною частинкою і частинками, які знаходяться у оболонці, для якої проводиться вимір.

Класифікацію типів локального впорядкування в термінах параметрів (8), (9) детально проведено у [16].

На рис. 10 та 11 наведено результати розрахунків параметрів впорядкування за формулами (8) та (9) для гранульованих матеріалів та для запоорошеної плазми відповідно.

Підсумовуючи отримані результати, приходимо до висновку, що обидві системи, які досліджують

ться, перебувають у анізотропних станах з відмінними від нуля значеннями орієнтаційного параметра впорядкування. Саме анізотропний характер згаданих вище систем та їх станів ускладнює їх опис з точки зору послідовного теоретичного підходу. Зауважимо, що пошук анізотропної фази у рідинах історично відбувався шляхом досить трудомких досліджень [17]. У випадку гранульованих систем та закристалізованої запоорошеної 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.

5. Висновки

На шляху вивчення локальної структури гранульованих матеріалів та запоорошеної 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 пакуваннях супроводжується симетризацією відповідних фігур Вороного, то вказано на можливість вивчення структурних змін за допомогою модельних характеристичних функцій.

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. Зазначимо також, що застосована ентропійна модель тривіально відтворює невольцманівський характер профілю густини г.м. у гравітаційному полі.

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

За допомогою вивчення поведінки трансляційного та орієнтаційного параметрів впорядкування показано, що гранульовані матеріали, запоорошена

плазма, а також деякі інші об'єкти м'якої матерії є прикладами систем, які природно перебувають у анізотропних станах.

Автори висловлюють подяку за часткову фінансову підтримку цієї роботи в рамках Програми спільних досліджень НАН України та Російського фонду фундаментальних досліджень.

1. H.M. Jaeger, S.R. Nagel, and R.P. Behringer, *Rev. Mod. Phys.* **68**, 1259 (1996).
2. J. Duran, *Sands, Powders and Grains* (Springer, New York, 2000).
3. L. Kadanoff, *Rev. Mod. Phys.* **71**, 435 (1999).
4. P.G. de Gennes, *Rev. Mod. Phys.* **71**, 374 (1999).
5. P. Hartmann, A. Douglass, J.C. Reyes *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 115004 (2010).
6. F. Boyer and E. Falcon, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 144501 (2009).
7. А.В. Шавлов, В.А. Джуманджи, *ЖЭТФ* **141**, 288 (2012).
8. Г.Ф. Вороной, *Собр. соч., Т. 2.* (Изд-во АН УССР, Киев, 1952).
9. О.И. Герасимов, *Рассеяние излучений в статистических системах: решаемые модели* (Маяк, Одесса, 1999).
10. N. Vandewalle, G. Lumay, O. Gerasymov, and F. Ludewig, *Eur. Phys. J. E* **22**, 241 (2007).
11. О.І. Герасимов, Доповіді НАН України № 11, 59 (2010).
12. А. Исихара, *Статистическая физика* (Мир, Москва, 1973).
13. H. Kokstein and P.V. Quinn, *Physica A* **374**, 1 (2007).
14. Ч. Киттель, *Введение в физику твёрдого тела* (Наука, Москва, 1978).
15. *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, edited by M. Abramowitz and I.A. Stegun (Dover, New York, 1974).
16. O.I. Gerasymov, *Ukr. Fiz. Zh.* **55**, 586 (2010).

17. А.З. Паташинский, В.Л. Покровский, *Флуктуационная теория фазовых переходов* (Наука, Москва, 1982).

Одержано 16.05.12

О.И. Герасимов, А.Г. Загородний, М.М. Сомов

К АНАЛИЗУ СТРУКТУРЫ ГРАНУЛИРОВАННЫХ МАТЕРИАЛОВ

Резюме

Структурное упорядочение в мезо- и в макромасштабе, которое наблюдается в гранулированных материалах и некоторых других объектах мягкой материи (например, в запылённой плазме) изучается с помощью анализа геометрических методов (метод диаграмм Вороного), а также в терминах соответствующих структурных параметров порядка. Анализ фазовых диаграмм в терминах ориентационного и трансляционного параметров порядка показывает, что гранулированные материалы представляют собой пример анизотропной системы. Модель энтропии решёточного газа использована для расчёта вертикального профиля плотности гранулированных материалов в гравитационном поле. Полученные теоретические результаты качественно – а в окрестности состояний с максимальной упаковкой – количественно согласуются с экспериментом.

O.I. Gerasymov, A.G. Zagorodny, M.M. Somov

TOWARD THE ANALYSIS OF THE STRUCTURE OF GRANULAR MATERIALS

Summary

The structural ordering, which is observed in granular materials and some other soft-matter objects (e.g., dusty plasma) on the meso- and macroscales, has been studied using geometrical methods (Voronoi diagrams) and by analyzing the structural order parameters. The phase diagrams for the translational and orientational order parameters testify to the native anisotropic character of granular materials. The model of lattice gas entropy has been used to describe the vertical density distribution in granular materials in a gravitational field. The obtained theoretical results agree well with experimental data and reproduce them in the nearest vicinity of the states with maximum packing.