## ELNYÚJTOTT ALAKÚ RÉSZECSKÉK RENDEZŐDÉSE NYÍRÓ ÁRAMLÁSBAN

Börzsönyi Tamás, Szabó Balázs, Somfai Ellák MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont, Szilárdtestfizikai és Optikai Kutatóintézet Török János BME, Elméleti Fizika Tanszék

Elnyújtott alakú részecskékből álló anyagok áramlásával széles mérettartományban találkozhatunk. Erre reprezentatív példák a legnagyobb méretskálától az egyre kisebbekig: a folyón úsztatott farönkök, a szintén makroszkopikus szemcsés anyagok, mint például búza vagy rizs, a mikrométer nagyságrendű baktériumok, a nanorészecskék és végül a legkisebb, atomi méretskálán a hosszúkás molekulákból álló rendszerek, például nematikus folyadékkristályok. Alapvető kérdés, hogy ezen rendszerekben az áramlás hatására az alkotóelemek miként rendeződnek, és ez hogyan hat vissza az anyag reológiai tulajdonságaira, különösen a viszkozitásra, illetve az effektív súrlódásra. A



Börzsönyi Tamás fizikus, tanulmányait (diploma, PhD) az ELTE-n végezte. Jelenleg az MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont tudományos főmunkatársa, a Részben Rendezett Rendszerek kutatócsoport vezetője. Kutatásaiban a szemcsés anyagok és a komplex folyadékok (szuszpenziók, folyadékkristályok) folyási jelenségeit és fázisátmeneteit vizsgálja.



Szabó Balázs fizikus, egyetemi tanulmányait az ELTE-n végezte. 2010 és 2017 között az MTA Winger Fizikai Kutatóközpontban dolgozott, jelenleg kutató-fejlesztő a Mediso Kft.-nél. Kutatásai során elsősorban a szemcsés anyagok folyási tulajdonságait vizsgálta, amelynek fókuszában a nem gömbszerű, például elnyújtott alakú részecskéket tartalmazó rendszerek voltak.

A cikk az Eötvös Loránd Fizikai Társulat szegedi Vándorgyűlésén, 2016. augusztus 26-án elhangzott előadás alapján készült.

fenti rendszerek első ránézésre nagyon különböznek egymástól, nemcsak az egyes részecskék közötti kölcsönhatás fajtájában, hanem a rendeződés ellen ható (például termikus) zaj mértékében is. Ennek ellenére – amint azt látni fogjuk – az áramlás hatására kialakuló rendeződésükben nagyon sok közös vonást fedezhetünk fel. Jelen munkában a száraz makroszkopikus szemcsés anyagokat vizsgáljuk, mint például rizst, vagy mm–cm nagyságrendű üveg- és farudakat. Ilyen anyagokban – tágabb értelemben – rengeteg nehezen jósolható és érdekes jelenség figyelhető meg, a mechanikai terhelésnek kitett anyag megcsúszásától a lejtőkön kialakuló lavinákon keresztül a szegregációs, valamint különböző rezonanciajelenségekig [1–7]. a)

A nyírt szemcsés anyagban az egymás mellett elhaladó részecskék a mechanikai kontaktusokon keresztül hatnak kölcsön (például súrlódás, ütközés), ahol a kölcsönhatás intenzitása egyrészt a nyomástól, másrészt a szomszédos részecskék sebességkülönbségétől, vagyis a sebességgradienstől függ. Arra a kérdésre keressük a választ, hogy a nyíró áramlás hatására bekövetkező rendeződés milyen jellegű és mértékű, valamint hogy ez miként függ a sebességgradienstől, vagy más néven nyírási rátától, illetve a részecskék L/d-vel jelölt elnyújtottságának mértékétől.

Laboratóriumi kísérletekben könnyen létrehozhatunk folyamatos nyíró áramlást az úgynevezett osztott aljú hengeres geometriában, ahol a szemcsés réteg alatt elhelyezett körlap állandó sebességgel forog (*1.a ábra*). A réteg felszínéről digitális felvételeket készíthetünk (*1.b ábra*), a minta belsejét pedig röntgentomográf segítségével térképezhetjük fel. A minta egy sáv mentén nyíródik (az ábrán pirossal jelölve), amin belül a nyírási ráta az *1.c ábrán* látható módon függ a forgástengelytől mért távolságtól. Az adatokat az *1.c ábrán* jelölt sávokból külön-külön gyűjtve, illetve különböző forgási sebességeket alkalmazva megmérhetjük, hogy a részecskék folyásiránnyal bezárt  $\theta$  szö-





Somfai Ellák fizikus, az MTA doktora, tudományos tanácsadó. Diplomáját az ELTE-n, PhD fokozatát a University of Michiganen szerezte. 2013 óta dolgozik az MTA Wigner Fizikai Kutatóközpontban. Érdeklődési területe a statisztikus fizikai rendszerek és komplex folyadékok numerikus modellezése, az utóbbi időben elsősorban a szemcsés anyagok vizsgálatával foglalkozik.



Török János fizikus, egyetemi tanulmányait az ELTE-n végezte, majd 2000-ben PhD fokozatot szerzett fizikából a BME-n. Jelenleg a BME Elméleti Fizika Tanszékének docense. Érdeklődési területe a szemcsés anyagok numerikus szimulációja, szemcsék alakváltozásának, illetve a szociális hálózatok dinamikájának modellezése.

1. ábra. a) A szemcsés anyag alá helyezett körlap forgatásával a mintát a pirossal jelzett tartományban folyamatosan nyírjuk. b) A minta felszínéről készült kép, a részecskék folyásiránnyal bezárt szögét  $\theta$ -val jelöljük. c) A felszínen mérhető nyírási ráta a forgástengelytől mért távolság függvényében. d) A kísérletekben használt anyagok: rizsszemek, üvegrudak és farudak. e) A numerikus diszkrételemrendszer oldalnézetből.



2. ábra. a)-b) A nyírásnak kitett szemcsés anyagban (rudak és rizs) mérhető orientációs eloszlás egy adott nyírásiráta-tartományban. A részecskék átlagos iránya kissé eltér a folyásiránytól (0°), és hosszabb részecskékre az eloszlás keskenyebb (nagyobb a rendezettség).
c) Összehasonlításképpen: egy nyírásnak kitett viszkózus folyadékba helyezett ellipszoid nem konstans sebességgel forog, amikor folyásirányba áll, akkor lelassul. d) Az ellipszoid irányának valószínűségeloszlás-maximuma az áramvonalakkal esik egybe.

ge mily módon függ a nyírási ráta értékétől. Az itt bemutatott mérésekben rizsszemeket, üveg-, valamint farudakat használtunk (*1.d ábra*).

Numerikus (diszkrét elem) szimulációkat is végeztünk, amelyekben a kihívást az elnyújtott alakú részecskék realizációja jelenti, amit néhány gömb alakú részecske egymáshoz rögzítésével oldottunk meg (*1.e ábra*). A részecskék fogaskerékszerű összeakadásának megelőzéséhez fontos, hogy ne teljesen legyenek azonosak, ezért a következő paramétereket bizonyos szórással adtuk meg: a gömbök mérete (10%), az átfedésük mértéke (30–70%), illetve a teljes részecskék hossza (10%). A részecskéket alkotó gömbök száma sem minden esetben volt ugyanaz. A numerikus rendszerben 700-1200 ilyen elnyújtott alakú részecske mozgásának modellezésére került sor az ingyenesen letölthető LAMMPS szoftvercsomag segítségével [8].

A részecskék áramvonalakhoz viszonyított orientációjának eloszlását mutatja a *2.a* és *2.b ábra* egy adott nyírásiráta-tartományból. Jól látható, hogy a rendezettség mértéke – amit az eloszlások keskenysége mutat – a részecske elnyújtottságának növelésével egyre erősebb. A részecskék tengelyének átlagos iránya pedig kicsit eltér a folyás irányától, az eltérés az elnyújtottság növelésével csökken. Érdekes összehasonlítani ezt az eredményt azzal az esettel, amikor egyetlen hosszúkás részecskét helyezünk viszkózus folyadékba, és ennek mozgását figyeljük, miközben a folyadékot nyírjuk. A részecske a *2.c ábrán* látható módon forog, forgási sebessége nem egyenletes, hanem felgyorsul, amikor iránya merőleges az áramvonalakra és lelassul, amikor párhuzamos azokkal. Ez a periodikus moduláció a részecske elnyújtottságának növelésével egyre erősebb. Ezek alapján az orientációs eloszlás maximuma az áramvonalakkal esik egybe, szélessége pedig a részecske elnyújtottságának növelésével egyre csökken (*2.d ábra*).

A száraz szemcsés anyag esetére visszatérve, a *3. ábrán* a deformáció függvényében láthatjuk a részecskék irányának alakulását. Megfigyelhetjük, hogy a részecskék sok időt töltenek a  $-25^{\circ} < \theta < 50^{\circ}$  tartományban, és forgásuk – az egymás közti kölcsönhatások következtében – rendszertelen. Ezen a tartományon kívül kerülve a képzeletbeli kontínuummal együtt mozogva forognak. Ez tipikusan a nyíró áramlás vorticitásának megfelelő szögsebességet jelent, amit az ábrán egy ferde vonal jelöl. Megjegyezzük, hogy egy nyírásnak kitett folyadékba helyezett gömb



*3. ábra.* A részecskék irányának fejlődése egy nyírt szemcsés anyagban (rudak, L/d = 3,5). A részecskék a  $-25^{\circ} < \theta < 50^{\circ}$  tartományban időznek, forgásuk zajos. Ha kikerülnek ebből a tartományból, akkor határozottan körbefordulnak, amíg megint vissza nem érnek. A ferde vonal a nyíró áramlás vorticitásának megfelelő forgási sebességet jelöli (1 radián/egységnyi deformáció). Egy gömb fele ilyen gyorsan forogna.

alakú részecske fele ilyen gyorsan forog (azaz a folyadék vorticitása felének megfelelő szögsebességgel, ami 0,5 radián/egységnyi deformáció).

Az eddigiekből tehát az látszik, hogy a nyírás indukálta rendezettség (az eloszlás keskenysége) egyre erősebb a részecske hosszának növelésével, és ez nagyon hasonló a folyadékba helyezett egyetlen részecske és a sok egymással kölcsönható részecske esetén, vagyis alapvetően a részecske – nyírás hatására végbemenő – nem egyenletes forgására vezethető vissza. Az átlagos orientáció folyásiránytól való eltérése pedig – ami a sokrészecskés rendszerben figyelhető meg – a részecskék kölcsönhatásának a következménye.

Az orientációs eloszlásokat különböző nyírási ráták esetére meghatározva megkaphatjuk az átlagos orientációs szög nyírásiráta-függését, amit a *4.a ábra* mutat. Jól látszik, hogy egy adott alakú részecskére a  $\theta_{av}$ átlagos szög a nyírási ráta széles tartományában lényegében változatlan (a nyírási rátát logaritmikus skálán ábrázoltuk).

A rendezettség mértékét általánosan egy tenzor számszerűsíti, melynek legnagyobb *S* sajátértékét rendparaméternek szokás nevezni. Ez teljesen rendezetlen rendszerre 0, a teljesen rendezett esetben pedig 1. A *4.b* és *4.c ábrákon* láthatjuk a  $\theta_{av}$  átlagos szöget, illetve a rendezettség mértékét jellemző *S* rendparamétert a részecskék *L/d* elnyújtottságának függvényében. Mind a rudak, mind a rizs esetében megfigyelhető, hogy az elnyújtottság növelésével a rendezettség mértéke nő, és a részecskék átlagos iránya egyre közelebb kerül a folyás irányához. Numerikus szimulációink adatai nagyon jól egybeesnek a kísér

4. *ábra*. A  $\theta_{av}$  folyásiránnyal bezárt átlagos orientációs szög a) a nyírási ráta és b) a részecskék elnyújtottsága függvényében. c) A nyírás hatására kialakuló rendezettséget leíró *S* rendparaméter a részecskék elnyújtottsága függvényében [9].

leti adatokkal. Az is látható, hogy ugyanolyan elnyújtottság mellett a rudak kisebb szöget zárnak be az áramvonalakkal, mint az ellipszoidhoz hasonló rizsszemek. A rudakkal végzett mérésekben az adatok egy részét tomográfiás (CT) módszerrel gyűjtöttük, így lehetőségünk volt  $\theta_{av}$ és S értékét nemcsak a felszínen, hanem a minta belsejében is meghatározni. A 4.b és 4.c ábrákon látható, hogy a felszínen kisebb a rendezettség – és ehhez nagyobb orientációs szög tartozik -, mint a minta belsejében, ahol a részecskék minden oldalról körülveszik egymást.

Összehasonlításképpen érdemes megemlíteni, hogy



az elnyújtott alakú molekulákból álló nematikus folyadékkristályok folyási orientációja igen hasonló a fent leírtakhoz. Ezt a furcsa anyagot mindannyian használjuk a csavart nematikus (TN - twisted nematic) kijelzőt tartalmazó laptopokban, karórákban vagy LCD televíziókban. Nematikus fázisban - nyíró áramlás hatására – a molekulák átlagos iránya szintén kis szöget zár be a folyás irányával, ami nyírásiráta-független, és a rendparaméter növelésével csökken. Ebben az esetben a rendezettséget nem a nyírás hozza létre, hanem annak mértéke egy külső paraméterrel (a hőmérséklet változtatásával) szabályozható. Nyilvánvaló, hogy a molekulák közötti kölcsönható erők nagyon különböznek a makroszkopikus szemcsék közötti kölcsönhatásoktól. Ezért is figyelemreméltó, hogy a nyírási orientáció ennyire hasonló a két rendszerben, ami az alkotóelemek geometriai tulajdonságainak fontosságát mutatja.

Most vizsgáljuk meg, hogy a nyírás hatására bekövetkező orientációs rendeződés milyen hatással van a szemcsés anyag sűrűségére (térkitöltésére), illetve a nyírással szembeni ellenállására (effektív súrlódására). A térkitöltésre vett hatást vizsgálva fel kell elevenítenünk, hogy egy tartályba öntött, rendezetlen szemcsés rendszer a nyírási deformáció hatására kissé kitágul. Ez azért következik be, mert ahhoz, hogy a szomszédos szemcsék el tudjanak haladni egymás mellett, egy kicsit el kell távolodjanak egymástól (5.a ábra). Ezt a jelenséget – több mint egy évszázaddal ezelőtt - először Osborne Reynolds dokumentálta, aki a híres folyadékdinamikai kutatásai mellett a szemcsés rendszerek tulajdonságait is vizsgálta [10]. A róla elnevezett Reynolds-tágulás1 mértéke 10-15% körül alakul borsó vagy mákszemek esetén [11]. Az elnyújtott részecskék esetében megfigyelhető orientációs rendeződés viszont növeli a térkitöltés mértékét. Kérdés, hogy ez a hatás legyőzi-e az általánosan megfigyelhető Reynolds-tágulást.

Az 5.*b ábra* az L/d = 2 elnyújtottságú rudakból álló szemcsés rendszer térkitöltésének keresztmetszeti eloszlását mutatja 134 CT-felvétel átlagolt adatai alapján. Jól látható, hogy a térkitöltés kisebb a nyírási zónában, mint a két oldalon látható, nyírásnak nem kitett tartományban. Az adatokat egy – a felszínhez közeli - 1 cm vastag vízszintes rétegben átlagolva meghatároztuk a térkitöltést a forgástengelytől való távolság függvényében, amit az 5.c ábrán láthatunk három, különböző elnyújtottságú részecskékből álló minta esetén. Látható, hogy a nyírási zónában mindegyik esetben lecsökkent a sűrűség, azaz az orientációs rendeződés egyik esetben sem tudja legyőzni a Reynolds-tágulást. Megfigyelhető azonban, hogy az egyre elnyújtottabb részecskék esetén a sűrűségcsökkenés mértéke egyre kisebb, azaz az egyre nagyobb



5. ábra. a) A szemcsés anyag nyíró deformáció hatására kitágul (Reynolds-tágulás). b) A sűrűségeloszlás keresztmetszeti képe 134 tomogram átlaga alapján L/d = 2 elnyújtottságú rudakból álló szemcsés anyagban. A nyírási zónában kisebb a térkitöltés, mint a két oldalán lévő deformálatlan tartományban. c) A Reynolds-tágulást részben kompenzálja az orientációs rendeződés, ezért a hosszabb részecskék esetében (amelyeknél nagyobb a rendezettség) kisebb a sűrűségcsökkenés mértéke [11].

rendparaméterrel jellemezhető rendeződés láthatóan egyre nagyobb mértékben kompenzálja a Reynoldstágulást.

A következő kérdés, hogy a rendeződési folyamat következtében mily módon változik az anyag nyírással szembeni ellenállása (effektív súrlódása). Ehhez megmértük, hogy rendezetlen kezdőállapotból indítva, a folyamat során miként alakul a tányér forgatásához szükséges forgatónyomaték. A 6.a ábrán 5 minta esetére láthatjuk a forgatónyomaték alakulását a deformáció függvényében. A 4 elnyújtott részecskékből álló minta mellett az ötödik anyag (mustármagok) esetében kapott görbét referenciának használjuk. Ez lehetővé teszi az irány szerinti rendeződés hatásának elkülönítését, mivel ez a gömbszerű részecskékből álló mintában nincs jelen. A motor bekapcsolása után a forgatónyomaték mind az öt minta esetén erősen emelkedik. Ennek oka egyrészt a részecskék közötti kontaktusok felépülése, másrészt egy instrumentális hatás is hozzájárul: az erőmérő cella és a motor teste

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Nedves tengerparton sétálva azt tapasztaljuk, hogy a homokra lépve – és ezáltal azt deformálva –, lábunk körül a homok felszíne "kiszárad", mivel ekkor a felszíni nedvesség mélyebbre húzódik a homokszemek közötti térfogat megnövekedése, azaz a Reynoldstágulás következtében.



*6. ábra.* a) A rendszer nyírásához szükséges (stacionárius értékkel normált) forgatónyomaték alakulása a rendeződési folyamat során 4 különböző elnyújtottságú minta és gömbszerű mustármagok esetében. b) Hasonló alak esetén az elnyújtottság növelésével egyre nagyobb a forgatónyomaték eltérése a közel gömbszerű mustármagokétól.

közötti mechanikus kapcsolatot jelentő fémszál megfeszülése. Ezen – nem orientációs effektusokból származó – járulékok kiszűrésére a *6.a ábrán* látható 4 adatsorból kivontuk az ötödiket, a mustármagokkal végzett mérések eredményét. Az így kapott adatsorokat mutatja a *6.b ábra*. Látható, hogy a rendeződés hatására a minta effektív súrlódása jelentősen lecsökken. Hasonló alak esetén mind a csökkenés mértéke, mind pedig a kialakulásához szükséges deformáció nagysága L/d növelésével növekszik. A legnagyobb effektus az L/d = 3,5 hosszúságú rudak esetében tapasztalható, és ez összhangban van azzal, hogy a négy minta közül ennél alakul ki a legkisebb orientációs szög (*4.b ábra*).

Összességében elmondhatjuk, hogy az elnyújtott részecskékből álló, nyírásnak kitett szemcsés anyag-

ban a részecskék irány szerint rendeződnek, ami szoros öszszefüggésben van a nyírás hatására megfigyelhető, nem egyenletes sebességű forgásukkal. A szomszédos részecskék kölcsönhatásának következtében az átlagos orientáció nem a folyás irányába mutat, hasonlóan az elnyújtott alakú molekulákból álló nematikus folyadékkristályban megfigyelhető folyási orientációhoz. A szemcsés rendszer a nyírás hatására kicsit kitágul, amit csak részben tud ellensúlyozni az orientációs rendeződésből fakadó sűrűségnövekedés. Az orientációs rendeződés hatására az anyag nyírással szembeni ellenállása (effektív súrlódása) a kezdeti, rendezetlen állapothoz képest jelentősen, mintegy 30%-kal lecsökken.

## Irodalom

- Jánosi I.: Zajongó homokdombok és egyéb furcsaságok: új fejlemények a granuláris anyagok fizikájában. *Fizikai Szemle* 45 (1995) 78.
- Jánosi I.: A homok titkai. Természet Világa 129 (1998) 19.
- Vankó P.: Izgalmas mérések a mérnök-fizikus hallgatói laboratóriumban. *Fizikai Szemle 56* (2006) 307.
- Börzsönyi T.: Lejtőn lefolyó szemcsés anyag dinamikája: instabilitások, lavinák. *Fizikai Szemle* 57 (2007) 217.
- Szabó B.: Hogyan törik a szemcsés anyag? Avagy különös analógia az optikával. Természet Világa 143 (2012) 500.
- Gillemot K., Somfai E., Börzsönyi T.: Szegregáció nyírt, szemcsés keverékekben. Fizikai Szemle 67 (2017) 376.
- T. Börzsönyi, Z. Kovács: High-speed imaging of traveling waves in a granular material during silo discharge. *Phys. Rev. E 83* (2011) 032301.
- 8. http://lammps.sandia.gov/
- T. Börzsönyi, B. Szabó, G. Törös, S. Wegner, J. Török, E. Somfai, T. Bien, R. Stannarius: Orientational order and alignment of elongated particles induced by shear. *Phys. Rev. Lett.* 108 (2012) 228302.
- 10. O. Reynolds: On the dilatancy of media composed of rigid particles in contact. *Phil. Mag. 20* (1885) 469.
- S. Wegner, R. Stannarius, A. Böse, G. Rose, B. Szabó, E. Somfai, T. Börzsönyi: Effects of grain shape on packing and dilatancy of sheared granular materials. *Soft Matter* 10 (2014) 5157.