УДК 339.215

ИСКЛЮЧЕННЫЕ ПУСТОТЫ В ПЛОТНОУПАКОВАННОЙ БИНАРНОЙ СИСТЕМЕ ДВУМЕРНЫХ СФЕРИЧЕСКИХ ЧАСТИЦ

В.Г. Бондарев*, Л.В. Мигаль

Белгородский государственный университет,
308007, г. Белгород, ул. Студенческая,14

В статье излагается геометрический подход к изучению плотноупакованной бинарной системы двумерных сферических частиц. Рассматривается способ расчета площади исключенных пустот, знание о которых позволяет в дальнейшем перейти к аналитическому изучению структуры бинарной системы частиц.

Введение

Исследования по случайной упаковке систем частиц сопряжены с целым рядом трудностей, связанных как с описанием процессов, происходящих при упаковке частиц, так и с необходимостью теоретического расчета основных характеристик структуры бинарной системы частиц. Одной из таких характеристик является коэффициент плотности упаковки η системы частиц [1], показывающий, какая часть площади S_0, занимаемой системой частиц, заполнена твердой фазой

$$\eta = \frac{S_p}{S_0}, \tag{1}$$

где S_p – площадь твердой фазы системы.

Общую площадь S_0 бинарной системы частиц [2] можно представить в следующем виде:

$$S_0 = S_1 + S_e + S_{20} + S_w, \tag{2}$$

где S_1 – площадь частиц первого компонента; S_e – площадь исключенных пустот, представляющих собой пустоты в системе, которые недоступны для их заполнения частицами второго компонента; S_{20} – площадь, занимаемая частицами второго компонента; S_w – площадь свободных пустот между частицами первого компонента, которые могут быть заполнены частицами второго компонента системы. Целью данного исследования является теоретический вывод формулы для расчета площади исключенных пустот S_e для бинарной системы сферических частиц.

Теория

Исключенная площадь S_e, по определению [3], есть площадь пустот, расположенных вблизи поверхности частиц первого компонента, в которые частицы второго компонента системы никоим образом попасть не могут

$$S_e = N_1 s_e, \tag{3}$$

где N_1 – количество частиц первого компонента; s_e – площадь исключенных пустот, относящихся к отдельной частице первого компонента.

Площадь S_1 твердой фазы первого компонента представим в виде: $S_1 = N_1 s_1$ (s_1 – площадь частицы первого компонента). Тогда формула (3) примет следующий вид:

$$S_e = S_1 \frac{s_e}{s_1}. \tag{4}$$

* Bondarev@bsu.edu.ru

Площадь исключенных пустот s_e отдельной частицы первого компонента выразим через площадь w_e единичной исключенной пустоты (рис. 1)

$$s_e = N_e w_e, \tag{5}$$

где N_e – число единичных исключенных пустот, расположенных вблизи границы частицы первого компонента.

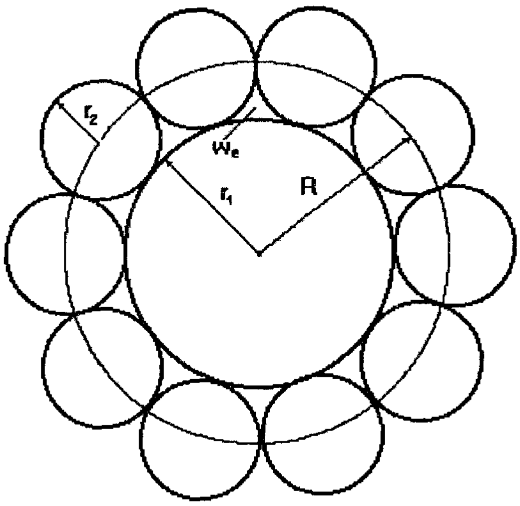

Рис. 1. Расположение частиц второго компонента на границе с частицей первого компонента системы частиц

Площадь w_e единичной исключенной пустоты определим следующим образом. Будем считать, что частицы второго компонента системы на границе с частицей первого компонента находятся в наиболее плотном состоянии. Выделим единичную исключенную пустоту и впишем в нее частицу второго компонента таким образом, чтобы последняя соприкасалась с тремя частицами второго компонента (рис. 2).

В этом случае площадь единичной исключенной пустоты w_e можно представить в следующем виде:

$$w_e = w_r + w_n, \tag{6}$$

где w_r – часть площади единичной исключенной пустоты, занятая вписанной частицей второго компонента; w_n – оставшаяся часть площади единичной исключенной пустоты.

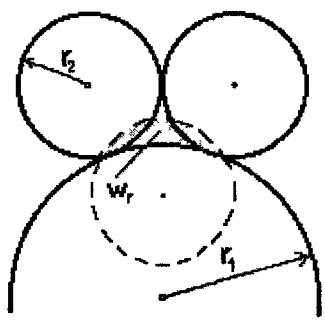

Рис. 2. Расположение вписанной частицы второго компонента

Для определения площади w_r отсечем плоскостью *Y-Y'* круговые сегменты *ABC* площадью s_a и *AEC* площадью s_b (рис. 3). В этом случае выражение для площади w_r можно записать следующим образом:

$$w_r = s_a - s_b. \tag{7}$$

Площадь s_a кругового сегмента *ABC* вписанной частицы определим по формуле

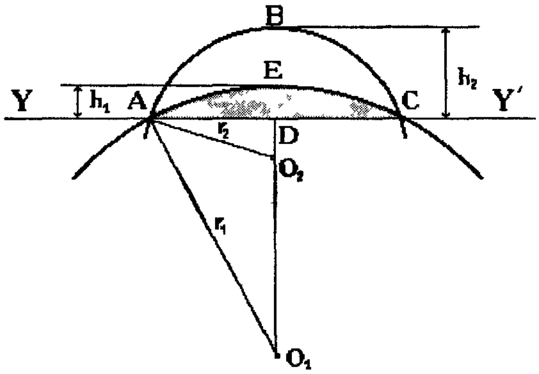

Рис. 3. Круговые сегменты вписанной частицы второго компонента и частицы первого компонента

$$s_a = \pi h_2^2 (r_2 - \frac{h_2}{3}), \tag{8}$$

где h_2 – высота кругового сегмента ABC; r_2 – радиус частицы второго компонента.

Высоту h_2 кругового сегмента ABC выразим через расстояние O_2D, которое обозначим как h_0

$$h_2 = r_2 - h_0 . \tag{9}$$

Высоту h_0 определим из сравнения прямоугольных треугольников AO_1D и AO_2D

$$h_0 = \frac{r_1^2 - r_2^2 - d_0^2}{2d_0}, \tag{10}$$

где d_0 – расстояние O_1O_2 между центрами частиц.

При плотноупакованной системе одинаковых сферических частиц второго компонента, включающих и вписанную частицу (рис. 2), расстояние d_0 между центрами частиц выражается через радиусы частиц первого и второго компонентов

$$d_0 = r_2\{\sqrt{(1+\frac{r_1}{r_2})^2 - \frac{4}{3}} - \sqrt{\frac{8}{3}}\}. \tag{11}$$

Площадь s_b, отсекаемая плоскостью от сферической частицы первого компонента радиуса r_1, равна

$$s_b = \pi h_1^2 (r_1 - \frac{h_1}{3}), \tag{12}$$

где h_1 – высота кругового сегмента AEC.

Высоту h_1 определим по формуле

$$h_1 = r_1 - d_0 - h_0 . \tag{13}$$

Площадь w_n, представляющая собой оставшуюся часть площади единичной исключенной пустоты, которая не занята вписанной частицей второго компонента, найдем следующим образом. Пусть у нас есть регулярная система, состоящая из плотноупакованных частиц только второго компонента. Тогда площадь пустот, приходящихся на одну частицу, равна разности между площадью s_0, занимаемой частицей второго компонента, и площадью s_2 твердой фазы данной частицы. Число единичных исключенных пустот на границе такой частицы с соседними частицами второго компонента, численно равно максимальному значению координационного числа z_{max} частиц (для однокомпонентной системы двумерных сферических частиц: $z_{max} = 6$)

Следовательно, площадь w_n можно определить по следующей формуле:

$$w_n = \frac{s_0 - s_2}{z_{\max}},$$

или, учитывая, что $s_0 = \frac{s_2}{\eta_{\max}}$ (η_{max} – максимальная плотность упаковки однокомпонентной системы: $\eta_{max} = 0{,}9069$), получим

$$w_n = \frac{(1-\eta_{\max})s_2}{\eta_{\max} z_{\max}}. \quad (14)$$

Подставляя выражения (7) и (14) в уравнение (6), окончательно имеем

$$w_e = s_a - s_b + \frac{(1-\eta_{\max})s_2}{\eta_{\max} z_{\max}}. \quad (15)$$

Число N_e единичных исключенных пустот, принадлежащих частице первого компонента, определим как отношение длины L_R окружности круга радиуса R к величине отрезка L_r, приходящегося на одну частицу второго компонента (рис. 1). Учитывая, что $R = r_1 + r_2$, для длины L_R окружности круга получим следующее выражение:

$$L_R = 2\pi r_2 (1 + \frac{r_1}{r_2}).$$

Длину L_r, приходящуюся на одну частицу второго компонента, будем считать пропорциональной радиусу данной частицы: $L_r = Cr_2$ (C – коэффициент пропорциональности). Тогда число N_e единичных исключенных пустот, принадлежащих частице первого компонента, можно определить следующим образом:

$$N_e = \frac{2\pi}{C}(1 + \frac{r_1}{r_2}). \quad (16)$$

Площадь s_e исключенной пустоты найдем, подставив в формулу (5) выражение (15) для площади w_e единичной исключенной пустоты и выражение (16) для числа N_e единичных исключенных пустот:

$$s_e = \frac{2\pi}{C}(\frac{r_2}{r_1})^2 (1 + \frac{r_1}{r_2})\{\frac{s_a - s_b}{s_2} + \frac{(1-\eta_{\max})}{\eta_{\max} z_{\max}}\} s_1. \quad (17)$$

Коэффициент пропорциональности C найдем, воспользовавшись следующим граничным условием. Так как в случае перехода к однокомпонентной системе площади круговых сегментов (рис. 3) совпадут ($s_a = s_b$), то площадь s_e исключенных пустот частицы будет равна: $s_e = s_{20} - s_2$, а площадь w_e единичной исключенной пустоты совпадет с площадью пустот w_n. Подставляя полученные выражения в уравнение (17), коэффициент C можно выразить следующим образом:

$$C = \frac{4\pi}{z_{\max}} \frac{(1-\eta_{\max})\eta_2}{(1-\eta_2)\eta_{\max}}.$$

Тогда формула для площади s_e исключенных пустот частицы первого компонента примет окончательный вид:

$$s_e = \frac{z_{\max}(1-\eta_2)\eta_{\max}}{2(1-\eta_{\max})\eta_2}(\frac{r_2}{r_1})^2 (1 + \frac{r_1}{r_2})[\frac{s_a - s_b}{s_2} + \frac{(1-\eta_{\max})}{\eta_{\max} z_{\max}}] s_1. \quad (18)$$

Зная площадь s_e исключенных пустот, приходящихся на одну частицу первого компонента, и подставив её выражение (18) в формулу (4) для площади исключенных пустот S_e бинарной системы двумерных частиц, имеем следующее решение поставленной задачи

$$S_e = S_1 \frac{z_{\max}(1-\eta_2)\eta_{\max}}{2(1-\eta_{\max})\eta_2}\left(\frac{r_2}{r_1}\right)^2\left(1+\frac{r_1}{r_2}\right)\left[\frac{s_a - s_b}{s_2} + \frac{(1-\eta_{\max})}{\eta_{\max} z_{\max}}\right]. \quad (19)$$

Формула (19) совместно с уравнениями (8)-(13) для площадей круговых сегментов и их параметров составляют полную систему уравнений, необходимых для определения площади исключенных пустот системы двумерных сферических частиц.

Анализ формулы для площади исключенных пустот показывает непротиворечивость данного уравнения также и второму граничному условию. Так, при большом различии в размерах частиц вторая часть выражения в квадратных скобках стремится к нулю, и, следовательно, площадь S_e исключенных пустот в этом случае тоже стремится к нулю.

Заключение

В работе приведено решение задачи по определению вида уравнения для площади исключенных пустот, которое является одним из наиболее важных этапов построения математической модели стохастической упаковки бинарной системы частиц. Здесь мы ограничились рассмотрением бинарной системы только двумерных сферических частиц. Для определения площади исключенных пустот системы с частицами произвольной формы необходимо проведение дополнительных экспериментальных и теоретических исследований. В тоже время отметим, что косвенное влияние формы частиц на величину площади исключенных пустот уже учитывается при определении плотностей упаковки отдельных компонентов системы, а также при оценке координационного числа. Этот факт позволяет нам предположить, что полученное уравнение для площади исключенных пустот системы двумерных сферических частиц можно будет в дальнейшем применять и к бинарным системам с произвольной формой частиц.

Литература

1. Visscher W.H., Bolsterly M. Random packing of equal and unequal spheres in two and three dimensions // Nature. - 1972. – V. 239, № 11. – P. 504-507.
2. Бондарев, В.Г. Математическое моделирование случайной упаковки бинарной системы частиц / В.Г. Бондарев // Научные ведомости БелГУ. – 2005. – №3(15). – С. 92-95.
3. Займан, Дж. Модели беспорядка. Теоретическая физика однородно неупорядоченных систем / Дж. Займан. – М. : Мир, 1982. – 592 с.

EXCLUDED VACUUMS IN DENSEPACKING OF BINARY SYSTEM OF DWODIMENTIONAL SPHERICAL PARTICLES

V.G. Bondarev, L.V. Migal

Belgorod State University, Studencheskaja St., 14, Belgorod, 308007, Russia

In paper the receiving geometrical approach to study densepacking of binary system of dwodimentional spherical particles. Consideration manner calculation of square excluded vacuums, permission later on pass to analytical study of structure binary of system particles.