
О.І. ГЕРАСИМОВ, А.Я. СПІВАК

Одеський національний університет ім. І.І. Мечникова
(Вул. Всеволода Змієнка, 2, Одеса 65082; e-mail: gerasymovoleg@gmail.com)

ВПАКУВАННЯ ТА СТИСЛИВІСТЬ БІКОМПОНЕНТНИХ МІКРОМЕХАНІЧНИХ (ГРАНУЛЬОВАНИХ) СИСТЕМ

УДК 538.9:539.215

Із використанням моделей конгломерацій твердих сфер Карнахана–Старлінга–Мансурі та статистичної теорії Кірквуда–Баффа досліджується вплив компактизації (впакування) на стисливість бінарної гранульованої суміші. Теоретичні результати порівнюються з експериментальними, отриманими в альтернативних дослідженнях на системах, внутрішня структура яких відповідає конструктивним характеристикам моделі. Показано можливість існування ефекту максимального впакування при спеціальних значеннях дисперсії і мольної фракції компонентів. Продemonстровано існування граничних і проміжних станів суміші з переважною концентрацією одного із компонентів та показано можливість найбільш адекватного опису властивостей системи в цих станах за допомогою одного із вищезгаданих підходів. Виділено область значень об'ємної частки компонентів, в якій обидва підходи тотожні та добре описують дані відповідних експериментів.

Ключові слова: гранульовані матеріали, суміші, компактизація, стисливість.

1. Вступ

Дослідження механічних та інших фізичних властивостей мікромеханічних (гранульованих) матеріалів складають традиційно актуальний предмет досліджень різних розділів, як експериментальної так і теоретичної фізики. Наявність вдалих модельних підходів до опису окремих штучно сконструйованих систем у спеціально створених зовнішніх умовах не знімає проблеми відсутності загальної теорії фізичних процесів у гранульованих матеріалах, яка дозволяла б з єдиних позицій описувати всі фізичні явища та процеси, що спостерігаються в них. Вищесказане стосується, як опису

спостерігаємих структуроутворень так і динаміки переходів між станами, які мають різну локальну симетрію. Якщо відволіктися від ефектів пов'язаних з наявністю дисипативних взаємодій між гранулами та впливом форми поверхні частинок у великих конгломераціях мікромеханічних (гранульованих) систем, то досить продуктивною моделлю вищезгаданих систем можуть служити моно- і полі-дисперсні системи, що складаються з твердих сфер, теорія фізичних властивостей яких детально розроблена (див., наприклад, [1–4]).

Зауважимо, що хоча модель твердих сфер не забезпечує достатнього кількісного збігу теоретичних і експериментальних даних, у випадку саме гранульованих матеріалів, які є конгломераціями мікро-механічних частинок, вона дозволяє на якісному рівні ілюструвати такі, скажімо, фізичні явища, як впакування та стисливість.

У нашій роботі, ґрунтуючись на положеннях класичних теорій модельних багато-частинкових

Цитування: Герасимов О.І., Співак А.Я. Впакування та стисливість бікомпонентних мікромеханічних (гранульованих) систем. *Укр. фіз. журн.* **70**, № 8, 550 (2025).

© Видавець ВД “Академперіодика” НАН України, 2025. Стаття опублікована за умовами відкритого доступу за ліцензією CC BY-NC-ND (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

систем [3–5] та використовуючи результати експериментальних досліджень, проведених авторами роботи [6], ми покажемо, що для бінарної системи твердих кульок існує ефект максимальної компактизації (впакування), який досягається підбором дисперсності компонентів. Також буде встановлено, що такого типу немонотонність якісно повторюється і для такої макроскопічної властивості, як стисливість. Таким чином буде продемонстровано існування зв'язку між локальними характеристиками досліджуваних систем та їх макроскопічними властивостями, який має ознаки подібності.

Будуть продемонстровані схожості та відмінності результатів опису стисливості модельних бікомпонентних сумішей із застосуванням підходів Кірквуда–Баффа [5] (КБ) та Карнахана–Старлінга–Мансурі [4] (КСМ) та встановлені інтервали в яких кожний (або навіть обидва) з них може бути застосовано найбільш адекватно.

Модель КСМ – базується на застосуванні напівемпіричної формули для рівняння стану системи твердих куль [4].

Модель КБ – базується на врахуванні флуктуацій густини в багаточастинкових системах за допомогою кореляційних інтегралів [5].

2. Стисливість бікомпонентної конгломерації твердих сфер. Підхід Карнахана–Старлінга–Мансурі

Стисливість, визначається за допомогою співвідношення

$$\beta = -\frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial p} = \frac{1}{n} \frac{\partial n}{\partial p}, \quad (1)$$

де V , p , n – відповідно об'єм, тиск та густина системи.

Також використовується величина, яка носить назву компактизації (параметра компактизації, або параметра впакування), який визначається за формулою

$$\eta = nv_0, \quad (2)$$

де v_0 – об'єм, який займає одна окрема частинка. Зокрема, для гранул сферичної форми $v_0 = \frac{1}{6}\pi\sigma_0^3$, де σ_0 – діаметр частинки.

В роботі [4] показано, що стисливість бінарної багато-частинкової суміші твердих сфер може бу-

ти представлена в такому вигляді

$$\beta_T^{(1,2)} = \frac{1}{n_{12}k_B T} \frac{(1-\eta)^4}{1+a\eta+b\eta^2+c\eta^3+d\eta^4}, \quad (3)$$

де η – параметр компактизації бінарної суміші (з компонентами 1 та 2) $\eta \equiv \eta_{12} = \frac{1}{6}\pi n_{12}\sigma_{12}^3$; n_{12} – щільність кількості частинок для бінарної суміші; σ_{12} – ефективний розмір, який можна визначити через мольну частку x

$$\sigma_{12}^3 = (1-x)\sigma_1^3 + x\sigma_2^3,$$

або через об'ємну частку f

$$\sigma_{12}^3 = \frac{\sigma_1^3\sigma_2^3}{(1-f)\sigma_2^3 + f\sigma_1^3},$$

де σ_1 та σ_2 – твердосферні діаметри компонентів суміші, відповідно; коефіцієнти a, b, c, d – залежать від мольної фракції компонентів суміші x (або їх об'ємної фракції $f = V_S/(V_L + V_S)$, де V_L та V_S – об'єми фракцій які складаються з великих та малих за розмірами частинок, відповідно), а також від відношення розмірів частинок $r = \sigma_1/\sigma_2$.

Як показано в [4] ці коефіцієнти визначаються за допомогою таких співвідношень:

$$\begin{aligned} a &= 4 - 6y_1, & b &= 4 - 3y_1 - 9y_2, \\ c &= -4y_3, & d &= y_3, \end{aligned} \quad (4)$$

де y_1, y_2 та y_3 мають вигляд:

$$y_1 = \Delta \cdot \left(\sqrt{r} + \frac{1}{\sqrt{r}} \right), \quad (5)$$

$$y_2 = \Delta \cdot \left(f\sqrt{r} + \frac{1-f}{\sqrt{r}} \right), \quad (6)$$

$$y_3 = [(1-f)^{2/3} \cdot (1-x)^{1/3} + f^{2/3} \cdot x^{1/3}]^3, \quad (7)$$

$$\Delta = \sqrt{f(1-f)x(1-x)} \cdot \left(\sqrt{r} - \frac{1}{\sqrt{r}} \right)^2. \quad (8)$$

Зауважимо, що зв'язок між об'ємною та мольною фракціями, а також відношенням розмірів, дається співвідношеннями:

$$\begin{aligned} f &= \frac{x}{r^3 - (r^3 - 1)x}, & x &= \frac{r^3 f}{1 + (r^3 - 1)f}, \\ r^3 &= \frac{x}{1-x} \frac{1-f}{f}. \end{aligned} \quad (9)$$

Користуючись формулою Карнахана–Старлінга–Мансурі (3) ми провели числові розрахунки коефіцієнта $n_{12}k_B T \beta_T^{(1,2)} \equiv \chi_{12}$, варіюючи відношення розмірів r , об'ємну фракцію f та параметр компактизації η . Отримані результати представлені у вигляді 3-вимірної фазової діаграми на рис. 1.

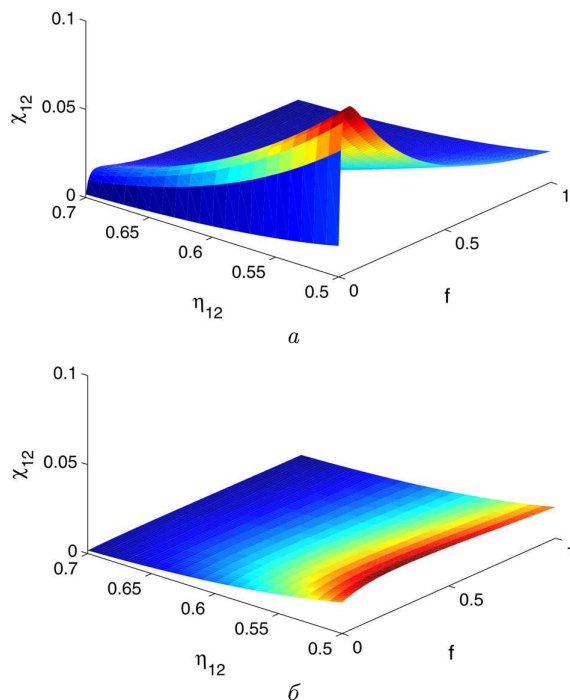


Рис. 1. Коефіцієнт стисливості χ_{12} (розрахований за формулою (3)) в залежності від параметра компактизації суміші η_{12} та об'ємної фракції f : для $r \approx 9$ (а); для $r \approx 2$ (б)

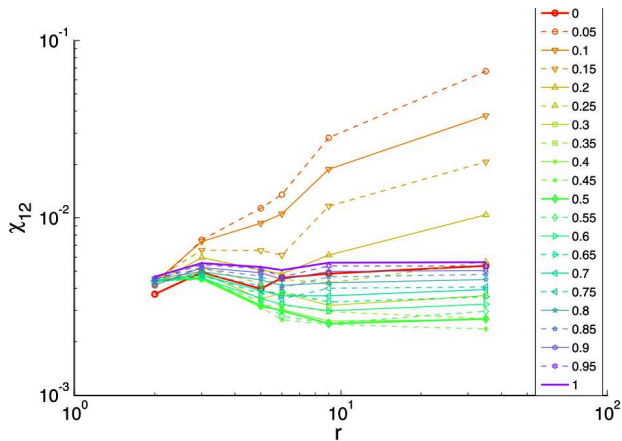


Рис. 2. Коефіцієнт стисливості χ_{12} в залежності від коефіцієнта дисперсії r , розрахований за формулою (3) із використанням параметрів з експериментальної роботи [6]. Коефіцієнт дисперсії r змінювався в інтервалі значень $r \approx 2-35$. Об'ємна фракція f задавалася з дискретністю $\Delta f = 0,05$ у повному інтервалі значень $f = 0-1$

З наведених на рис. 1 результатів випливає, що у поведінці коефіцієнта χ_{12} спостерігається контрастно виражений максимум, амплітуда якого зро-

стає (а ширина зменшується) зі збільшенням фактора дисперсії суміші (відношення розмірів сфер r). Так, зображений на рис. 1, а (для $r \approx 9$) – максимум χ_{12} є за амплітудною високим та вузьким, в той час, як той, що на рис. 1, б (для $r \approx 2$) – більш пологим та згладженим. Чисельні значення коефіцієнта стисливості зменшуються при зростанні параметра компактизації. Також спостерігається зсув положення максимуму від $f \approx 0,5$ (для малих значень відношення розмірів компонентів суміші $r \approx 1$) до $f \rightarrow 0$ (для більших значень $r \gg 1$).

3. Розрахунок коефіцієнта χ_{12} для значень компактизації η_{12} , які були виміряні в [6]

В [6], експериментально досліджувалася бікомпонентна суміш твердих кульок сферичної форми з різними розмірами, відношення яких параметрично змінювалося в інтервалі $r \approx 2-35$. Головним результатом, отриманим у [6] можна вважати немонотонну, з характерним максимумом, поведінку компактизації, як функції об'ємної фракції компонента, а також відношення діаметрів компонентів бінарної суміші.

Користуючись формулою Карнахана–Старлінга–Мансурі (3), ми провели чисельні розрахунки коефіцієнта $n_{12}k_B T \beta_T^{(1,2)}$ при тих самих значеннях ($r \approx 2-35$) відношення розмірів частинок, які використовувалися у вимірюваннях компактизації в роботі [6]. При цьому, самоузгоджено були задіяні, виміряні в [6], відповідні значення компактизації суміші η . Отримані результати представлені у вигляді серії 2-вимірних фазових діаграм на рис. 2–5.

Наведені на рис. 2 результати поведінки коефіцієнта стисливості χ_{12} (в залежності від коефіцієнта r , який характеризує дисперсію компонентів) контрастно демонструють наявність специфічних станів у його поведінці. А саме, можна виділити два характерних типи поведінки: а) різке зростання χ_{12} зі збільшенням r (графіки побудовані для об'ємної фракції в інтервалі $0,05 \leq f \leq 0,20$); б) повільні зміни χ_{12} із збільшенням r (графіки побудовані для об'ємної фракції в інтервалі $0,25 \leq f \leq 1$, а також для $f = 0$).

Таку різницю в поведінці χ_{12} можна пов'язати з наявністю різних з погляду на відповідну локальну структуру станів, які в теоретичній праці [8]

запропоновано називати використовуючи терміни “гравій” (для $f \ll 1$) і “пудинг” (для $(1 - f) \ll 1$), відповідно. В цих термінах тоді поведінка типу (а) є характерною для стану “гравій”, а типу (б) – стану “пудинг”.

Наведені на рис. 3 графіки коефіцієнта стисливості χ_{12} (в залежності від об’ємної фракції f) також демонструють наявність виділених вище граничних станів. А саме: 1) різкий максимум χ_{12} для об’ємної фракції в інтервалі $0 \leq f \leq 0,20$; 2) пологий мінімум χ_{12} для значень об’ємної фракції в інтервалі $0,25 \leq f \leq 1$.

Таку поведінку χ_{12} також можна інтерпретувати, як наявність вищезгаданих станів “гравій” та “пудинг”. Відповідно, зображений на рис. 3 екстремум типу максимуму може відповідати стану “гравій”, а екстремум типу мінімуму – стану “пудинг”. Визначені екстремуми χ_{12} із зростанням коефіцієнта дисперсії r поведуть себе по-різному: максимум – за амплітудою зростає, а мінімум – спочатку зростає, але згодом це зростання припиняється (насичується).

Наведені на рис. 4 результати, демонструють поведінку коефіцієнта стисливості χ_{12} розрахованого за формулою (3) в залежності від параметра компактизації η_{12} , значення якого вибиралося з того ж інтервалу, що використовувався і у роботі [6] ($r \approx 2-35$).

Відповідно до запропонованої в [8] класифікації станів для бідисперсної гранульованої суміші, їх наявність можна визначити також і за допомогою даних, представлених на рис. 4: верхні гілки петльових діаграм відповідають фазі “гравій”; нижні – фазі “пудинг”.

На рис. 4, очевидно, спостерігається асиметрія перехідної області. Саме ця область в [8], яка характеризує перехід між виділеними граничними фазами (на фазовій діаграмі), була описана як умовно існуюча.

4. Стисливість бінарної системи твердих сфер згідно з теорією Кірквуда–Баффа [5]

Класична формула Кірквуда–Баффа для бікомпонентної суміші, яка визначає стисливість бінарної системи $\beta_T^{(1,2)}$, має вигляд [5]:

$$\beta_T^{(1,2)} = \frac{1}{k_B T} \times$$

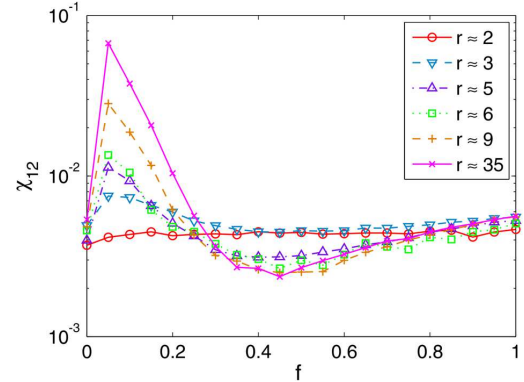


Рис. 3. Графіки коефіцієнта стисливості χ_{12} в залежності від об’ємної фракції f (які розраховані за формулою (3) з використанням експериментальних даних з [6]) для окремих значень коефіцієнта дисперсії в інтервалі значень $r \approx 2 - 35$. В межах одного графіка зміни об’ємної фракції f відбуваються з дискретністю $\Delta f = 0,05$ у всьому можливому інтервалі значень $f = 0-1$

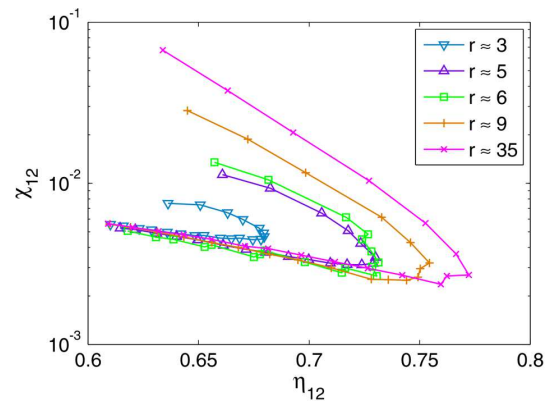


Рис. 4. Коефіцієнт стисливості χ_{12} в залежності від параметра компактизації η_{12} , розрахованого за формулою (3) із використанням параметрів з [6] ($r \approx 3-35$)

$$\times \frac{1 + n_1 G_{11} + n_2 G_{22} + n_1 n_2 (G_{11} G_{22} - G_{12}^2)}{n_1 + n_2 + n_1 n_2 (G_{11} + G_{22} - 2G_{12})}, \quad (10)$$

де $\beta_T^{(1,2)}$ – ізотермічна стисливість суміші, компоненти якої нумеруються, як 1 і 2; $n_1 = \frac{N_1}{V}$ та $n_2 = \frac{N_2}{V}$ – парціальні щільності кількості частинок, відповідно; G_{11} , G_{22} та G_{12} – так звані кореляційні інтеграли; $k_B T$ – масштаб енергії.

Кореляційні інтеграли $G_{\alpha\beta}$ пов’язані із парціальними структурними факторами $S_{\alpha\beta}(0)$ таким співвідношенням:

$$S_{\alpha\beta}(0) = x_\alpha \delta_{\alpha\beta} + x_\alpha x_\beta n_{12} G_{\alpha\beta}, \quad (11)$$

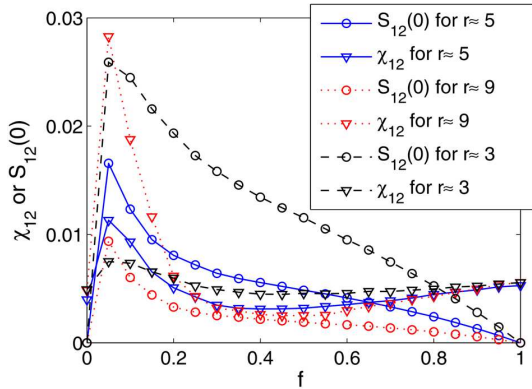


Рис. 5. Коефіцієнт стисливості χ_{12} в залежності від об'ємної фракції f (розрахований за формулами (3) та (19), відповідно, та із використанням даних з [6], для значень $r \approx 3-9$). Об'ємна фракція f змінювалася із дискретністю $\Delta f = 0,05$ у повному інтервалі $f = 0-1$

де x_α , x_β – мольні частки компонент суміші; $\delta_{\alpha\beta}$ – дельта символ Кронекера; $n_{12} = \frac{N}{V} = \frac{N_1 + N_2}{V} = n_1 + n_2$ – щільність суміші.

Користуючись формулою (11) легко отримати:

$$S_{11}(0) = (1-x) + (1-x)^2 n_{12} G_{11}, \quad (12)$$

$$S_{22}(0) = x + x^2 n_{12} G_{22}, \quad (13)$$

$$S_{12}(0) = x(1-x) n_{12} G_{12}, \quad (14)$$

де x – мольна частка 2-ої компоненти суміші.

Підставляючи співвідношення (12)–(14) до формули Кірквуда–Баффа (10), знаходимо зв'язок проміж ізотермічною стисливістю бі-компонентної суміші та парціальними факторами $S_{\alpha\beta}(0)$ у такому вигляді:

$$\beta_T^{(1,2)} = \frac{1}{n_{12} k_B T} \times \frac{S_{11}(0) S_{22}(0) - S_{12}^2(0)}{x^2 S_{11}(0) + (1-x)^2 S_{22}(0) - 2x(1-x) S_{12}(0)}, \quad (15)$$

Зважаючи на те що фактор $S(0)$ монодисперсної системи визначається як:

$$S(0) = 1 + nG = n k_B T \beta_T, \quad (16)$$

та враховуючи (12) та (13), знаходимо, вирази для парціальних факторів монодисперсних фаз $S_{11}(0)$ та $S_{22}(0)$ із парціальними ізотермічними стисливістями $\beta_T^{(1)}$ та $\beta_T^{(2)}$:

$$S_{11}(0) = (1-x) \cdot n_1 k_B T \beta_T^{(1)}, \quad (17)$$

$$S_{22}(0) = x \cdot n_2 k_B T \beta_T^{(2)}. \quad (18)$$

Парціальні (референтні) ізотермічні стисливості $\beta_T^{(1)}$ та $\beta_T^{(2)}$ можуть бути визначені, наприклад із використанням модельних рівнянь стану.

Використовуючи дані про ізотермічну стисливість суміші $\beta_T^{(1,2)}$, які можуть бути отримані із альтернативних джерел (наприклад, з експерименту, або шляхом чисельного моделювання), розв'язуючи (15) відносно фактора $S_{12}(0)$ отримуємо:

$$S_{12}(0) = x(1-x) \cdot \chi_{12}^{KB} \pm \left\{ x^2(1-x)^2 (\chi_{12}^{KB})^2 - \chi_{12}^{KB} [x^2 S_{11}(0) + (1-x)^2 S_{22}(0)] + S_{11}(0) S_{22}(0) \right\}^{1/2}, \quad (19)$$

де $\chi_{12}^{KB} = n_{12} k_B T \beta_T^{(1,2)}$.

В роботі [6] отримані експериментальні данні для компактизації бінарної суміші сферичних частинок із різним ступенем розбіжності у розмірах $r \approx 2-35$. Параметризація отриманих даних проводиться фактично у двох характерних границях (станах) суміші в одному з яких переважає вміст більших за розмірами частинок (“гравій”), а в другому – менших за розмірами (“пудинг”). В роботі [7] робиться спроба опису отриманих експериментальних даних у всіх проміжних станах за допомогою екстраполяції феноменологічних співвідношень отриманих лише для граничних станів із використанням вагових функцій, які відіграють роль невизначених (фактично – підгоночних) параметрів, до того ж, спрямованих лише саме до граничних станів (і залишаються невизначеними послідовно для проміжних).

На рис. 5 представлені результати проведених нами числових розрахунків: коефіцієнта стисливості χ_{12} та структурного фактора $S_{12}(0)$ в залежності від об'ємної фракції f . Коефіцієнт стисливості χ_{12} розраховувався за формулою (3) відповідно до модельного рівняння стану для бінарної системи суміші твердих куль Карнахана–Старлінга–Мансурі [4], а структурний фактор $S_{12}(0)$ – за формулою (19), яка була отримана із використанням теорії Кірквуда–Баффа [9, 10].

Рис. 5 демонструє перетин графіків χ_{12} та $S_{12}(0)$. Наявність двох точок перетинів побудованих графіків, з яких одна точка знаходиться в області малих об'ємних фракцій одного з компонентів суміші, а інша, в області, де вона приймає

найбільші можливі значення, можна інтерпретувати, як виділення двох станів в суміші з однаковою компактизацією і різним компонентним складом. Першого, в якому переважає концентрація більших за розмірами частинок. І другого, у якому превалюють дрібні частинки (фази “гравію” та “пудингу”, як вказувалося раніше).

Для наочності, на рис. 5 використані лише вибіркові значення коефіцієнта дисперсії ($r \approx 3-9$). А саме:

- При перевазі в суміші дрібної компоненти: для $r \approx 5$ маємо що $S_{12}(0) = \chi_{12}$ при об’ємній фракції $f \approx 0,65$; для $r \approx 3$ відповідно – $S_{12}(0) = \chi_{12}$ для об’ємної фракції $f \approx 0,81$. Таким чином, зі зростанням значень коефіцієнта дисперсії r значення об’ємної фракції f , при якому $S_{12}(0) = \chi_{12}$, (стан “пудинг”) зменшується.

- При перевазі в суміші крупної компоненти: для $r \approx 5$ маємо що $S_{12}(0) = \chi_{12}$ при об’ємній фракції $f \approx 0,011$; для $r \approx 3$ відповідно – $S_{12}(0) = \chi_{12}$ при об’ємній фракції $f \approx 0,025$. Таким чином, зі зростанням коефіцієнта дисперсії r , значення об’ємної фракції f , при якому $S_{12}(0) = \chi_{12}$, (стан “гравій”) збільшується.

Можна показати, що для $r \approx 9$ та $r \approx 35$ перетину графіків $S_{12}(0)$ і χ_{12} взагалі не відбувається.

Відсутність точок перетину функцій $S_{12}(0)$ та χ_{12} збігається з виявленим, в роботі [6], існуванням критичної величини коефіцієнта дисперсії $r_c = 3 + \sqrt{12} \approx 6,46$. Якісно, це можна пояснити, наприклад, таким чином. Починаючи з r_c і більшої дисперсії розмірів компонент суміші, стає все більш імовірним просковзування частинок дрібної компоненти крізь зазор між (скажімо – трьома) щільно впакованими частинками крупної компоненти, що призводить до зміни компактизації (за рахунок заповнення нового вільного об’єму який раніше був недоступним), і як наслідок до можливих змін у властивостях суміші (наприклад, як показано в [6], швидкості впакування).

Виявлена в [6] експериментально і отримана нами теоретично наявність існування деякої критичної різниці в розмірах компонентів, проявляється у впливі на швидкість компактизації (та обумовлює принципову можливість отримання її максимальних, чи мінімальних значень). Таким чином, для суміші з $r < r_c$ можна користуватися формулою (3) в якій коефіцієнт $n_{12}k_B T \beta_T^{(1,2)}$ пропорцій-

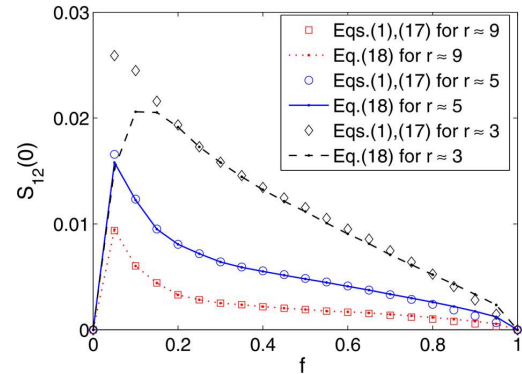


Рис. 6. Функція $S_{12}(0)$ в залежності від об’ємної фракції f (розрахована за формулами (19) та (20), із використанням експериментальних даних з [6] для окремих значень відношення розмірів компонентів в інтервалі $r \approx 3-9$)

ний до $S_{12}(0)$ (строго кажучи, в окремих точках при визначених самоузгоджено значеннях об’ємної фракції f). За умов $r > r_c$ користуватися пропорційністю коефіцієнта $n_{12}k_B T \beta_T^{(1,2)}$ формули (3) і $S_{12}(0)$ є неможливим.

Зауважимо також, що постулюючи заміну в формулі Кірквуда–Баффа (15) коефіцієнта $n_{12}k_B T \beta_T^{(1,2)}$ на функцію $S_{12}(0)$, яка отримується з урахуванням попередньо встановленої можливості співпадіння коефіцієнта χ_{12} та фактора $S_{12}(0)$, і розв’язуючи відносно нього відповідне квадратне рівняння можна отримати таке співвідношення

$$S_{12}(0) = \frac{x^2 S_{11}(0) + (1-x)^2 S_{22}(0)}{2[1-2x(1-x)]} \times \left\{ -1 + \sqrt{1 + \frac{4[1-2x(1-x)]S_{11}(0)S_{22}(0)}{[x^2 S_{11}(0) + (1-x)^2 S_{22}(0)]^2}} \right\}. \quad (20)$$

Графіки функцій $S_{12}(0)$ в залежності від об’ємної фракції f , розраховані за допомогою (20), розглянемо у порівнянні із тими, що розраховані за допомогою формули (19) (див. рис. 6).

Як впливає з рис. 6, залежність вищеописаним чином визначеного $S_{12}(0)$ від об’ємної фракції f носить немонотонний характер, а саме, містить контрастний максимум. Зростання r призводить до зменшення амплітуди максимуму $S_{12}(0)$, а також його зсуву у бік менших значень f . Рис. 6 демонструє таке відношення значень розрахованих за обома формулами (19) та (20) $S_{12}(0)$, а саме: майже співпадіння при $r \approx 9$, якісне – при $r \approx 6$,

розбіжність – для $r \approx 3$. Неспівпадіння спостерігаються при наближенні складу суміші до монодисперсних границь ($f \rightarrow 0$ та $f \rightarrow 1$). В інтервалі значень об'ємної фракції ($f \approx 0,2\text{--}0,8$) спостерігається майже повне співпадіння поведінки для усіх використаних підходів визначення $S_{12}(0)$.

5. Висновки

З урахуванням наведеного вище, приходимо до висновку про те, що застосування моделей бікомпонентних сумішей твердих сфер (Карнахана–Старлінга–Мансури та Кірквуда–Баффа), що ефективно використовуються в молекулярній фізиці, для опису властивостей стисливості реальних гранульованих матеріалів показує її немонотонну поведінку залежно від відношення розмірів і мольних фракцій компонентів, що контрастно виділяє два характерні стани, які характеризуються переважними концентраціями однієї з компонентів (які ми, після [8] називаємо фазами гравій та пудинг) та перехідної області, в якій досягаються максимальні значення коефіцієнта стисливості. Наявність максимуму коефіцієнта стисливості при певних значеннях об'ємної фракції по-перше, характеризує і дозволяє послідовно описати (наприклад у вигляді відповідної фазової діаграми) існування перехідної зони в її поведінці, яка поділяє граничні стани з переважаючими концентраціями одного з компонентів суміші (пудинг та гравій). По-друге, що важливо відзначити, наявність максимуму у коефіцієнта стисливості, яка встановлено нами теоретично, корелює з виявленою експериментально аналогічною поведінкою фактора компактизації [6]. Встановлена поведінка, хай і на модельному рівні, може дозволити виявити за яких саме значень компактизації коефіцієнт стисливості, розрахований за формулами (3) досягає максимальних та граничних значень. Встановлені інтервали параметрів бінарної суміші (граничні стани) при яких може більш адекватно застосовуватися один із використаних підходів до опису стисливості (КСМ [4] або КБ [5]), а також проміжні області в яких вони обидва можуть застосовуватися цілком адекватно, що підтверджується даними відповідних експериментальних вимірювань [6].

1. M.S. Wertheim. Exact solution of the Percus-Yevick integral equation for hard spheres. *Phys. Rev. Lett.* **10**, 321 (1963).

2. E. Thiele. Equation of state for hard spheres. *J. Chem. Phys.* **39**, 474 (1963).
3. N.F. Carnahan, K.E. Starling. Equation of state for non-attracting rigid spheres. *J. Chem. Phys.* **51**, 635 (1969).
4. G.A. Mansoori, N.F. Carnahan, K.E. Starling, T.W. Leland Jr. Equilibrium Thermodynamic Properties of the Mixture of Hard Spheres. *J. Chem. Phys.* **54**, 1523 (1971).
5. J.G. Kirkwood, F.P. Buff. The statistical mechanical theory of solutions. I. *J. Chem. Phys.* **19**, 774 (1951).
6. S. Pillitteri, G. Lumay, E. Opsomer, N. Vandewalle. From jamming to fast compaction dynamics in granular binary mixtures. *Sci. Rep.* **9**, 7281 (2019).
7. S. Pillitteri, G. Lumay, E. Opsomer, N. Vandewalle. How size ratio and segregation affect the packing of binary granular mixtures. *Soft Matt.* **16**, 9094 (2020).
8. T. Boutreux, P.G. de Gennes. Compaction of granular mixtures: A free volume model. *Physica A* **244**, 59 (1997).
9. O. Gerasymov, A. Spivak, I. Andrianova, L. Sidletska, V. Kuryatnikov, A. Kilian. Micro-mechanical (granular) mixtures for environmental safety technologies. *E3S Web of Conferences* **234** [The International Conference on Innovation, Modern Applied Science & Environmental Studies (ICIES2020) Kenitra, Morocco (December 25–27, 2020)], 00075 (2021).
10. O. Gerasymov, I. Andrianova, A. Spivak, L. Sidletska, V. Kuryatnikov, A. Kilian. Tightening (compaction) of bi-component micromechanical (granular) system *Science and Innovation* **17**, 79 (2021).

Одержано 26.02.25

O.I. Gerasymov, A.Ya. Spivak

PACKING AND COMPRESSIBILITY OF BINARY MICROMECHANICAL (GRANULAR) SYSTEMS

Using the Carnahan–Starling–Mansoori hard-sphere conglomeration models and the Kirkwood–Buff statistical theory, the effect of compaction (packing) on the compressibility of a binary granular mixture has been analyzed. The theoretical results are compared with the experimental ones obtained in alternative studies of the systems whose internal structure corresponds to the construction characteristics of the model. The possibility of the maximum packing effect at special dispersion and mole fraction values of the components has been shown. The existence of the limit and intermediate states of the mixture with a predominant concentration of one of the components and the possibility of the most adequate description of the system properties in such states using one of the above-mentioned approaches have been demonstrated. The interval of values for the component volume fractions has been determined, where both approaches well describe the data of corresponding experiments.

Keywords: granular materials, mixtures, compaction, compressibility.