

颗粒尺寸分散度对颗粒体系力学和几何结构特性的影响*

冯旭¹⁾ 张国华^{1)†} 孙其诚²⁾

1) (北京科技大学物理系, 北京 100083)

2) (清华大学, 水沙科学与水利水电工程国家重点实验室, 北京 100084)

(2013年5月4日收到; 2013年6月18日收到修改稿)

利用颗粒离散元方法, 研究了由 2048 个光滑颗粒组成的体系在各向同性压缩条件下, 颗粒尺寸分散度 s 对颗粒体系力学和几何结构特性的影响. 结果表明: 配位数、剪切模量、静态结构因子以及取向序关联函数等都随分散度的变化而变化, 而力的累积分布不受分散度的影响. 其中, 单分散体系 (亦即 $s = 0$) 的静态结构因子在低波数区域 (亦即低 k) 遵从幂律标度 $S(k) \propto 0.2k^{-4/3}$, 各分散度下取向序关联函数峰值符合 e 指数变化规律 $g_6(r) \propto ae^{-r/\xi_6}$, 其中序关联长度 ξ_6 随分散度 s 增大而减小.

关键词: 颗粒物质, 尺寸分散度, 结构因子, 取向序关联

PACS: 45.70.-n, 61.43.Bn, 81.05.Rm

DOI: 10.7498/aps.62.184501

1 引言

近年来, 无序材料的力学和几何结构特性受到了较多关注. Silbert 和 Silbert^[1] 对比分析了三维无摩擦和有摩擦颗粒体系的静态结构因子 $S(k)$, 发现光滑颗粒体系在双对数坐标下 $S(k)$ 曲线在低 k 区的线性行为, 其斜率近似为 1. Xu 和 Ching^[2] 研究了三维双分散光滑颗粒体系中, 发现静态结构因子强烈的依赖颗粒粒径比, 以前发现的低 k 部分的 $S(k) \sim k$ 仅仅是颗粒的粒径比接近 1 时的特殊情况.

与此同时, 关于二维体系力学和几何结构特性的研究也取得了很大进展. Han 等^[3] 研究了二维胶体晶体的取向序关联函数, 发现当处于 Hexatic 相 - 液相共存区时, 系统的取向序关联函数 $g_6(r) \sim e^{-r/\xi_6}$, 且取向序关联长度 ξ_6 随面密度 ρ 的变化规律与 Kosterlitz-Thouless-Halperin-Nelson-Young 理论的预测相符^[4]. Peng 等^[5] 发现甚至当二维胶体晶体融化到液相时, 取向序关联 $g_6(r)$ 曲

线仍然以指数方式衰减.

近年来, 关于二维体系结构因子的研究也取得了很大进展. Meyer 等^[6] 发现在中间波矢区域二维聚合物溶液结构因子随 k 呈幂律标度 $S(k) \sim k^\nu$, 且随着链长度 N 的增加, 幂律指数 ν 从 -2 变到 -3 . Wen 等^[7] 发现二维颗粒链的静态结构因子 $S(k) \sim k^{-2}$, 与密集的聚合物溶液结构相似.

在本文中, 我们用颗粒离散元法 (DEM) 生成了由 2048 个二维圆形颗粒、边壁压强为 1000Pa 的系统, 为了研究颗粒尺寸分散度 s 对系统性质的影响, 每个分散度下随机生成 100 个位形. 通过研究体系的配位数、剪切模量、静态结构因子、取向序关联、力的累积分布等物理量随尺寸分散度的变化规律, 进一步分析了体系的无序程度对二维颗粒体系力学和几何结构特性造成的影响.

2 数值模拟

在 $2\text{ m} \times 2\text{ m}$ 的正方形盒子里, 随机放置质量相

* 国家自然科学基金 (批准号: 11272048, 11034010, 51239006) 和中央高校基本科研业务费专项资金 (批准号: FRF-BR-11-015A) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: zhguohua@sas.ustb.edu.cn

等的 2048 个光滑圆盘颗粒, 采用了周期性边界条件. 为了研究粒径分散度 s 对系统力学性质的影响, 颗粒半径在 $d_0 \left(1 - \frac{s}{2}\right) - d_0 \left(1 + \frac{s}{2}\right)$ 范围内等概率取值, 其中 $d_0 = 0.01 \text{ m}$ 为颗粒的平均直径, s 的取值范围为 $[0, 0.5]$. 我们对每个粒径分散度随机生成 100 个压强为 1000 Pa 的位形, 本文所涉及的物理量都是这 100 个位形的统计平均值. 文中, 颗粒与颗粒相互作用为单边线性弹簧, 即当颗粒 i 和 j 间距 $r_{ij} = r_i - r_j$ 小于它们的半径之和时存在相互作用, 其中 r_i, r_j 分别为颗粒 i 和 j 的位置矢量. 接触力的法向分量由 $F_{nij} = -k_n n_{ij}$ 给出, 其中 k_n 是法向接触刚度, $n_{ij} = r_{ij}/|r_{ij}|$. 在本文的模拟中, 颗粒法向刚度系数为 $1.0 \times 10^6 \text{ N/m}$, 切向刚度系数为 0, 不考虑重力.

具体产生位形的过程如下: 首先, 我们在盒子中随机产生 2048 个粒径很小的多分散颗粒, 此时颗粒间没有任何重叠, 体系处于松弛状态. 然后, 在保持分散度固定的前提下使颗粒半径增大, 直至体系的体积分数达到 0.88. 最后, 利用半径减小的办法卸载, 使得体系达到目标压强 1000 Pa. 其中, 位形稳定的判据是经过 1000 个循环前后系统的能量差的比例小于 1.0×10^{-15} .

3 结果与分析

3.1 配位数和剪切模量

配位数是某一颗粒与周围其他颗粒的接触数目, 它是表征系统几何特征的重要物理量. 为了研究尺寸分散度对系统几何特征的影响, 我们分析了平均配位数随尺寸分散度的变化规律, 如图 1(a) 中所示. 当 $s < 0.1$ 时, 平均配位数的值随分散度的增加迅速减小; 而当 $s > 0.1$ 时, 体系中颗粒的平均配位数趋于 4.1, 说明此时系统的尺寸无序程度对配位数基本没有影响.

剪切模量是弹性材料承受 τ 剪应力与产生的 γ 剪应变的比值, 是表征颗粒物质抗剪切能力的力学指标. 图 1(b) 是系统平均剪切模量随尺寸分散度 s 的变化曲线. 可以看出, 平均剪切模量和平均配位数随 s 的变化趋势一致. 图 1(c) 给出了平均剪切模量随平均配位数的线性变化规律, $\langle Z \rangle = 3.5 + 3.3 \times 10^{-5} \cdot G$. 由图 1(a), (b), (c) 可以看出, $s = 0.1$ 可能是个分界点: 当体系的尺寸 $s < 0.1$

时, s 越大 (系统越无序), 系统的抗切应变能力越弱; 而当 $s > 0.1$ 时, 系统的无序程度已经对其几何和力学性质没有任何影响.

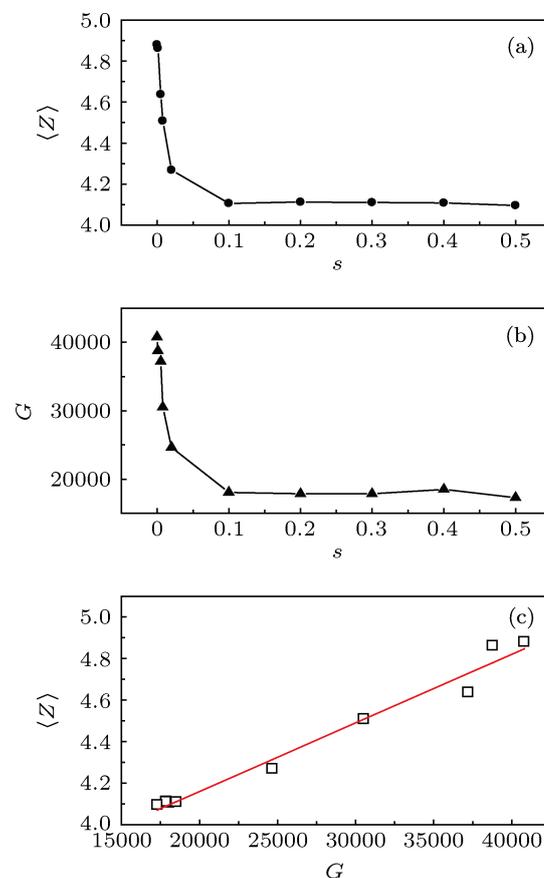


图 1 平均配位数 $\langle Z \rangle$, 剪切模量 G 随分散度 s 的变化及二者的线性关系 (a) $\langle Z \rangle$ 随 s 的变化; (b) G 随 s 的变化; (c) $\langle Z \rangle$ 随 G 的变化

3.2 静态结构因子

静态结构因子 $S(k)$ 是表征颗粒体系微观结构的典型参量^[8-13], 定义为

$$S(k) = \frac{1}{N} \left| \sum_j \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j) \right|^2, \quad (1)$$

由于采用了周期性边界条件, 波矢量 \mathbf{k} 满足 $k = \frac{2\pi}{L}(n_x \hat{x} + n_y \hat{y} + n_z \hat{z})$, \mathbf{k} 的大小等于 $\frac{2\pi}{L} \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}$, 其中 $(n_x, n_y, n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$ ^[1,14].

我们模拟了 $s = 0, 0.001, 0.005, 0.008, 0.02, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4$ 和 0.5 时的静态结构因子, 结果如图 2 所示. 可以看出, 在高 k 区域, 尺寸分散度 $s < 0.1$ 的 $S(k)$ 曲线基本重合, 并且在 $k' = 2k\pi/L = 45, 80, 90$ 附近各出现一个尖锐峰. 随着 s 增大, 峰值趋于平缓, 而且在 $k' = 80$ 和 $k' = 100$ 附近这两个峰逐渐合

并成一个平滑的峰. 在低 k 区域 ($k < 20$), 当 $s > 0.1$ 时, $S(k)$ 几乎不随 k 变化, $S(k)$ 的值随着分散度的增大而增加; 当 $s \leq 0.02$ 时, 二维体系的 $S(k)$ 曲线在 $3 < k' < 5$ 区域遵从幂律标度, $S(k) \sim k^{-4/3}$, 如图 2 插图所示. 这一点符合二维线性聚合物链体系中在中间波矢范围的标度关系, $S(k) \sim k^{-1/\nu}$, 与文献 [6, 7, 15] 的结果类似, 这暗示着二维单分散体系中存在颗粒链结构.

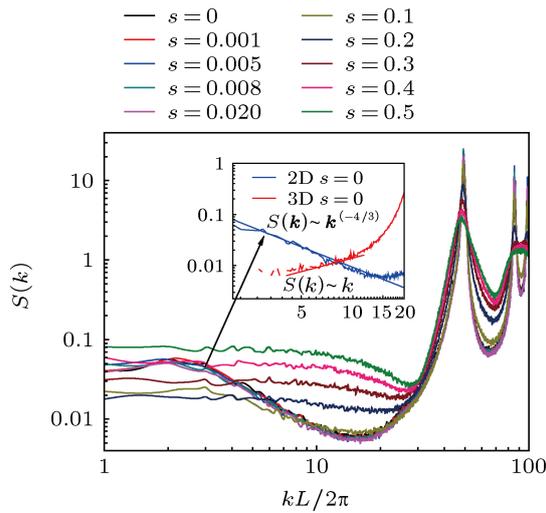


图 2 静态结构因子 $S(k)$ 随 k 的变化, 插图为单分散体系下 $S(k)$ 曲线低 k 部分数值拟合

为了研究维度对体系结构因子的影响, 我们生成了由 10000 个球形颗粒组成、压强为 10^{-4} Pa 的三维单分散颗粒体系, 并计算了其结构因子, 如图 2 插图所示. 可以发现, 三维单分散体系的静态结构

因子在低 k 区域满足: $S(k) \sim k$, 与文献 [1] 中的结论一致. 造成二维和三维体系 $S(k)$ 在低 k 区域不同的原因可能是, 在二维体系中更容易形成长程关联.

图 3 为不同分散度下二维颗粒体系 $S(k)$ 的云图. 可以看出, 单分散体系 (即 $s = 0$) 表现出晶体的特征, 其 $S(k)$ 呈三角格子排列; 而 $s = 0.1$ 的体系则表现出典型的多晶衍射图样的特征, 衍射图形呈现出明暗不均匀的同心圆环; 随着粒径多分散度的增大, 图形中从中心开始的第二个圆环由正六边形演变为圆形, 圆环的径向宽度也随之增加, 而且看不到明显的点; 当 $s \geq 0.3$ 时, 同心圆环变得更宽且彼此合并, 其外围轮廓逐渐变得模糊, 表明系统随着 s 的增大越来越无序; 当 $s = 0.5$ 时, 只能看到一个比较清晰的圆环.

3.3 取向序关联

为了量化颗粒 i 的取向序, 引入键取向序参数 Ψ_{6i} [16]:

$$\Psi_{6i} = \frac{1}{n_i} \sum_{j=1}^{n_i} e^{i6\theta_{ij}}, \quad (2)$$

式中, n_i 表示颗粒 i 的最近邻颗粒的数目, θ_{ij} 表示颗粒 i 和其近邻颗粒 j 之间的极角. 为了进一步量化取向序的空间关联, 本文计算了颗粒体系的取向序关联函数 $g_6(\mathbf{r})$ [3,17,18], 定义为

$$g_6(\mathbf{r} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) = \langle \Psi_{6i}^*(\mathbf{r}_i) \Psi_{6j}(\mathbf{r}_j) \rangle. \quad (3)$$

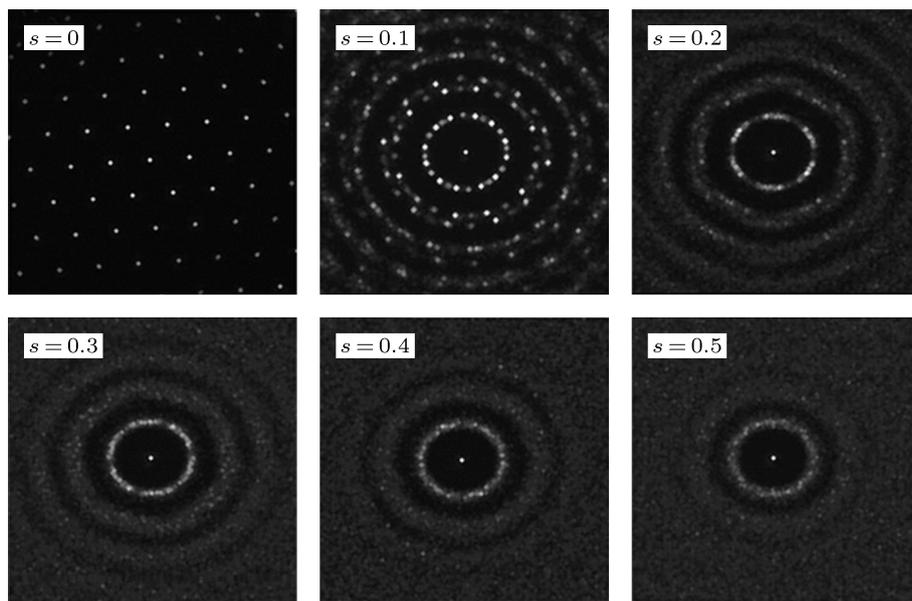


图 3 不同分散度下静态结构因子 $S(k)$

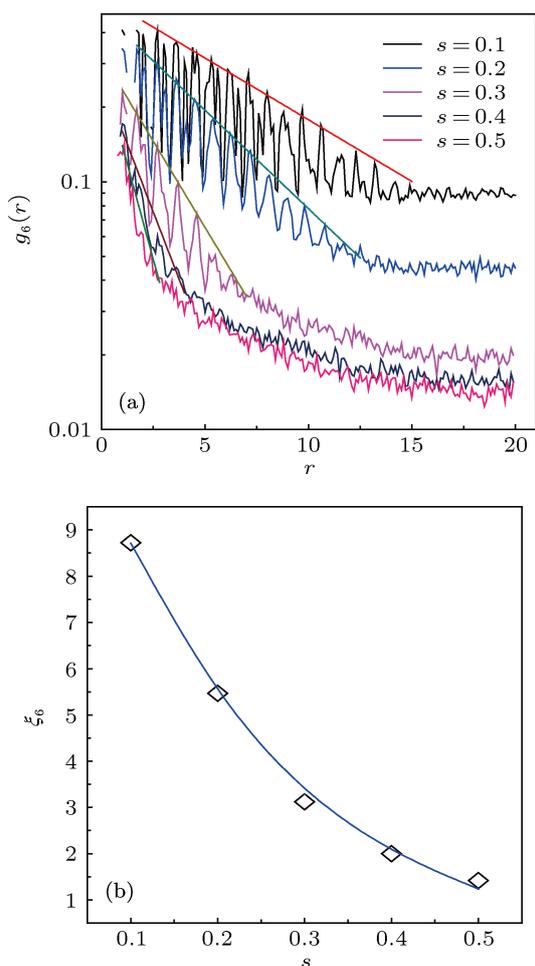


图4 取向序关联 $g_6(r)$ 随 r 的变化及拟合参数 ξ_6 随分散度 s 的变化规律 (a) $g_6(r)$ 随 r 的变化; (b) ξ_6 随 s 的变化; 实线为 $\xi_6 \propto 14.2e^{-s/0.2}$

图 4(a) 给出了不同分散度下的取向序关联函数 $g_6(r)$. 由图 4(a) 可知, 取向序关联函数呈现随着 r 的增大幅值逐渐减小的振荡行为. 其中, $g_6(r)$ 的极小可能与颗粒没有占据晶格的位置有关, 而 $g_6(r)$ 振荡衰减的长度范围则对应取向关联的长度. 为了得到取向序关联长度, 我们对曲线进行了 e 指数拟合, 如图 4(a) 所示. 虚线为拟合曲线: $g_6(r) \propto ae^{-r/\xi_6}$, 其中 ξ_6 是序关联长度. 由图 4(a) 可知, $s > 0.1$ 的 $g_6(r)$ 曲线均呈 e 指数衰减, 表明 $s > 0.1$ 的颗粒体系表现出与液体类似的短程序 [3,19]. 图 4(b) 给出了序关联长度随分散度变化的曲线, 显然, 随着 s 的增加序关联长度近似以 e 指数规律衰减, 如图 4(b) 中的实线所示. 总之, 随着粒径分散度 s 增大, ξ_6 减小, 而且减小的幅度越来越慢, 变化比较连续. 说明随着粒径多分散度 s 从 0.1 到 0.5, 体系越来越无序, 而且它的变化并不是一个突变, 而是一个结构连续变化的过程. 此时, 体系无序程度对颗粒间取向序关联的影响比较明显.

3.4 力的累积分布

在静态颗粒排布中, 颗粒间接触力形成高度各向异性的力网络, 其基本特征可以用接触力的概率密度函数 $p(f)$ 表征, 其中 $f = F/\langle F \rangle$ 为归一化力. 近年来, 大量的实验和模拟关注大 f 处 $p(f)$ 的分布, 由于实验上的困难, 对于小 f 处 $p(f)$ 分布的研究还不是很多 [20]. 我们计算了不同分散度下颗粒体系中的力累积分布 $G(f)$, $G(f) = \int_0^f P(f')df'$. 从图 5 可以看出, 当 $f < 2$ 时, 随着 f 的增大, $G(f)$ 值也增大; 当 $f > 2$ 后, $G(f)$ 趋近于 1. 而且, 不同分散度下的 $G(f)$ 曲线几乎重合, 暗示系统的无序程度对力累积分布几乎没有影响.

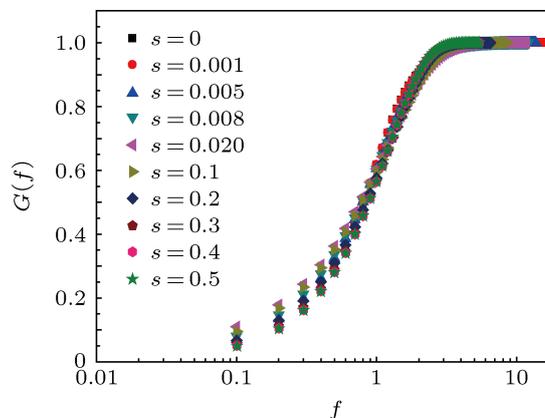


图5 力的累积分布 $G(f)$ 随 f 的变化

4 结论

采用颗粒离散元方法生成了具有不同尺寸分散度的二维颗粒体系, 进一步研究了尺寸分散度对体系力学和几何结构特征的影响, 得到如下结论: 1) 二维颗粒体系, 平均配位数和平均剪切模量随着 s 的增大而减小; 当 $s > 0.1$ 时, 二者都基本保持为定值, 说明随着 s 的增大, 体系的无序程度增加; 2) 当分散度 $s \leq 0.02$ 时, 静态结构因子低 k 部分的曲线基本重合; 当 $s > 0.1$ 时, 随着 s 的增大, $S(k)$ 的值也均匀增加, 尤其是 $s = 0$ 时, 二维颗粒体系 $S(k)$ 的低 k 区域行为与聚合物颗粒链的类似, $S(k) \sim k^{-1/\nu}$ ($\nu = 3/4$), 这一点不同于三维单分散颗粒体系 (其 $S(k)$ 曲线低 k 部分斜率近似等于 1), 暗示二维单分散颗粒体系 (包括分散度较小的体系) 结构上与颗粒链相似; 3) 不同分散度下, 取向序关联函数 $g_6(r)$ 曲线的峰值均满足 e 指数关系, 序关联长度 ξ_6 也随尺寸分散度的增大而减小; 4) 力的累积分布 $G(f)$ 不随尺寸分散度的变化而变化, 说明它基本不受系统无序程度的影响.

- [1] Silbert L E, Silbert M 2009 *Phys. Rev. E* **80** 041304
 [2] Xu N, Ching E S C 2010 *Soft Matter* **6** 2944
 [3] Han Y, Ha N Y, Alsayed A M, Yodh A G 2008 *Phys. Rev. E* **77** 041406
 [4] Artoni R, Santomaso A C, Gabrieli F, Tono D, Cola S 2013 *Phys. Rev. E* **87** 032205
 [5] Peng Y, Wang Z, Alsayed A M, Yodh A G, Han Y 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 205703
 [6] Meyer H, Schulmann N, Zabel J E, Wittmer J P 2011 *Comput. Phys. Commun.* **182** 1949
 [7] Wen P P, Zheng N, Li L S, Li H, Sun G, Shi Q F 2012 *Phys. Rev. E* **85** 031301
 [8] Yang J K, Schreck C, Noh H, Liew S F, Guy M I, O'Hern C S, Cao H 2010 *Phys. Rev. A* **82** 053838
 [9] Xu W S, Sun Z Y, An L J 2012 *J. Chem. Phys.* **137** 104509
 [10] Berthier L, Chaudhuri P, Coulais C, Dauchot O, Sollich P 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 120601
 [11] Paulus M, Gutt C, Tolan M 2008 *Phys. Rev. B* **78** 235419
 [12] Donev A, Stillinger F H, Torquato S 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 090604
 [13] Torquato S, Stillinger F H 2003 *Phys. Rev. E* **68** 041113
 [14] Warr S, Hansen J P 1996 *Europhys. Lett.* **36** 589
 [15] Maier B, Rädler J O 1999 *Phys. Rev. Lett.* **82** 1911
 [16] Schreck C F, O'Hern C S, Silbert L E 2011 *Phys. Rev. E* **84** 011305
 [17] Agarwal U, Escobedo F A 2012 *Soft Matter* **8** 5916
 [18] Prestipino S, Saija F, Giaquinta P V 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 235701
 [19] Bakker A F, Bruin C, Hilhorst H J 1984 *Phys. Rev. Lett.* **52** 449
 [20] Charbonneau P, Corwin E I, Parisi G, Zamponi F 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 205501

Effects of size polydispersity on mechanical and geometrical properties of granular system*

Feng Xu¹⁾ Zhang Guo-Hua^{1)†} Sun Qi-Cheng²⁾

1) (Department of Physics, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China)

2) (State Key Laboratory for Hydrosience and Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

(Received 4 May 2013; revised manuscript received 18 June 2013)

Abstract

In this paper, the multi-disperse systems composed of 2048 frictionless particles with different size polydispersities are simulated by using the distinct element method, and effects of size polydispersity on mechanical and geometrical properties of these systems are studied under isotropic confining. The result shows that changing polydispersity can qualitatively affect the coordination number, shear modulus, static structure factor and orientational order correlation function, but it does not influence the cumulative force distribution. At small wave number k , static structure factor of mono-disperse systems shows the power scaling law $S(k) \propto 0.2k^{-4/3}$. Moreover, the peak of orientational order correlation function exhibits an exponent scaling law $g_6(r) \propto ae^{-r/\xi_6}$, and the scaling exponent ξ_6 decreases with polydispersity increasing.

Keywords: granular matter, size polydispersity, structure factor, orientational order correlation

PACS: 45.70.-n, 61.43.Bn, 81.05.Rm

DOI: 10.7498/aps.62.184501

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11272048, 11034010, 51239006), and the Fundamental Research Funds for the Central Universities, China (Grant No. FRF-BR-11-015A).

† Corresponding author. E-mail: zhguohua@sas.ustb.edu.cn