

Magyar–német (TKA–DAAD) kutatócsere projekt

Záró beszámoló

A projekt adatai:

Nyilvántartási szám: 274464

Projektcím: Összetett kölcsönhatású részecskerendszerek: felület, alak és deformálhatóság hatása

Magyar projektvezető neve: Dr. Börzsönyi Tamás

Magyar intézmény neve: MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont

Német projektvezető neve: Prof. Ralf Stannarius

Német intézmény neve: Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg

Támogatási időszak: 2018–2019

A. A projektidőszakban elvégzett munka összefoglalása (max. 2 oldal)

A kutatócsere projekt keretében azt vizsgáltuk, hogy a részecskék alakja, felületi sűrűsége, és deformálhatósága hogyan befolyásolja a szemcsés rendszerek, vagy komplex (hajlított-törzsű molekulákból álló) folyadékkristályos anyagok szerkezeti és folyási tulajdonságait. Kísérleti és numerikus módszerrel vizsgáltuk a tartályban folyó anyag viselkedését 2 és 3 dimenziós rendszerekben, a nyírásnak kitett rendszereket, ill. egy rázásnak kitett szemcsés réteg dinamikáját is.

A projekt a terveknek megfelelően halad, az eddigi munkában számos diák vett részt.

Mindkét évre négy utazást terveztünk Budapestről Magdeburgba, és hasonlóan négyet Magdeburgból Budapestre (összesen 16 utazás), melyek mindegyike megvalósult. (Az utolsó két látogatás jelenleg – 2019 december első hetében – zajlik.)

Az együttműködés nagyon sikeres volt, az eredményeket magas impakt faktorú folyóiratcikkekben publikáltuk és számos konferencia előadást tartottunk. A projektvezetők meghívott nemzetközi konferencia előadásokat is tartottak, de a diákok is nemzetközi konferenciákon mutatták be eredményeiket.

Ezen túl kiemelendő, hogy áttörést sikerült elérnünk az ügyben, hogy ezt a TKA–DAAD bilaterális együttműködést magasabb szintre emeljük: 12 másik Európai Laboratóriummal és Ipari Partnerrel benyújtottunk egy Horizon H2020 Marie–Curie ITN (Initial Training Network) pályázatot CALIPER néven, amely támogatásra került (3.6 Millió EURO). Ez az ilyen jellegű pályázatok igen kicsi nyerési esélyét tekintve nagy eredmény. Ennek a projektnek a címe "Creating Granular Materials Experts by Developing Experimental Calibrations for Computational Methods", és fő célja 14 PhD hallgató oktatása (mindegyik ebből a

projektből finanszírozva), melyekből egy Budapesten, egy pedig Magdeburgban lesz. Perspektivikusan, a CALIPER projekt egy csapat különleges képzést kapott szakembert ad majd Európának, akik a szemcsés anyagokhoz kapcsolódó ipari innovációt tudják támogatni. Ez a projekt 2019 szeptemberében indult és 4 évig fog futni. A jelen TKA-DAAD projektben résztvevő magyar diák (Pongó Tivadar), aki 2019 júniusában szerezte meg az MSc fokozatát, már ennek az új CALIPER programnak a keretében folytatja doktori tanulmányait 2019 szeptemberétől Spanyolországban. A CALIPER projekt támogatásával a Budapest-Magdeburg kollaboráció is erősödni fog, mivel ez a következő 4 évben több hónapos diákcserére ad lehetőséget.

Az alábbiakban időrendi sorrendben számolunk be mind a 16 utazás részleteiről:

(1 és 2) Pongó Tivadar és Börzsönyi Tamás 2018 júniusában 12 napot töltött a magdeburgi Otto von Guericke Egyetemen, ahol Maja Illiggel és Ralf Stannariussal közösen egyrészt kísérletileg vizsgálták egy olyan kétkomponensű szemcsés keverék folyási és torlódási tulajdonságait, amely kis sűrűségű deformálható és sűrű kemény részecskékből állt. Ez a munka az alább részletezett (5) utazás keretében folytatódott. Másrészt egy három dimenziós elrendezésben a deformálható részecskék kitöltési hányadát vizsgálták a töltési magasság függvényében röntgen CT mérések segítségével Diego Sancho-Martinezszel. Ez a munka vezetett az [2]-es publikációhoz (lásd alább). Ralf Stannarius és Börzsönyi Tamás látogatást tettek a Drezda-Rossendorf-i Helmholtz-Zentrum-ban, hogy előkészítsenek egy esetleges mérést az ultragyors röntgen tomográfia, ami később meg is valósult és a [1]-es publikációhoz vezetett. A fent leírt EU H2020 ITN (CALIPER) projekt pályázat előkészítése is ezalatt az utazás alatt zajlott.

(3) Nagy Dániel 2018 júniusában 12 napot töltött a magdeburgi Otto von Guericke Egyetemen, melynek keretében numerikus számolásokat végzett egy saját fejlesztésű diszkrét elem modellel, amiben az elnyújtott alakú részecskékből álló szemcsés anyagban nyírás hatására kialakuló másodlagos áramlásokat vizsgálta. Ezt a jelenséget a korábban végzett kísérleteink során fedeztük fel, de a megjelenését okozó mechanizmust eddig még nem sikerült tisztázni.

(4) Lévy Sára 2018 júniusában 21 napot töltött a magdeburgi Otto von Guericke Egyetemen, és laboratóriumi kísérletek segítségével azt vizsgálta, hogy egy rázásnak kitett függőleges szemcsés rétegben milyen átrendeződések történnek, és ez milyen hatással van a kitöltési hányadra. Ezt a rendszert Sára diszkrét elem szimulációk segítségével numerikusan is vizsgálja.

(5) Maja Illig 2018 júliusában 10 napot töltött a budapesti Wigner Fizikai Kutatóközpontban. Pongó Tivadar és Börzsönyi Tamással a kétkomponensű szemcsés keverékkel kétdimenziós silóban felvett mérések adatait elemezte, az (1-2) utazások során végzett munka folytatásaként

(6) Tina Hanselka 2018 októberében 6 napot töltött a budapesti Wigner Fizikai Kutatóközpontban. Kísérletileg vizsgálta, hogy elnyújtott alakú részecskék esetén a tartályból történő kifolyási sebesség és a tartály alján mérhető nyomás hogyan függ a töltési magasságtól.

(7–8) Kirsten Harth és Ralf Stannarius 2018 decemberében 6 napot töltött a budapesti Wigner Fizikai Kutatóközpontban. Kísérleti adatokat elemeztek, melyek egy tartályból kifolyó szemcsés anyag dinamikáját írják le.

(9) Margarita Kurachkina 2019 február–márciusban 14 napot töltött a budapesti Wigner Fizikai Kutatóközpontban. Kísérletekben vizsgálta a hajlott törzsű molekulákból álló folyadékkristályok mechanikai és reológiai tulajdonságait rotációs és oszcillációs nyírással. Ezeknek az anyagoknak egy különleges jellemzője, hogy a nematikus fázisban szmektikus jellegű domének jelenhetnek meg. Ez ahhoz vezet, hogy a reológiai viselkedésben egy newtoni – nem-newtoni átmenet figyelhető meg a hűtés hatására növekvő szmektikus domének miatt. Az anyagot alkotó molekuláknak UV fény hatására megváltozik az alakjuk. Kísérletileg demonstráltuk, hogy ennek következtében az anyag reológiai viselkedése is megváltozik. Ennek a munkának az eredményeit két konferencián mutattuk be, egy cikk kézirat pedig előkészületben van.

(10–11) Pongó Tivadar és Börzsönyi Tamás 2019 júniusában 12 napot töltött a magdeburgi Otto von Guericke Egyetemen, ahol Diego Sancho–Martinezzel végeztek röntgen-tomográfias méréseket deformálható és kemény részecskékkel. Ez a munka az alább részletezett (14) utazás keretében folytatódott.

(12) Nagy Dániel 2019 szeptemberében 12 napot töltött a magdeburgi Otto von Guericke Egyetemen. Numerikusan vizsgálta egy nyírásnak kitett, elnyújtott alakú részecskékből álló szemcsés anyag viselkedését. Az eredményekből Dániel előadást tartott az az European Rheological Society „Annual European Rheological Conference” c. konferenciáján Szlovéniában (lásd alább).

(13) Lévy Sára 2019 szeptember–októberben 21 napot töltött a magdeburgi Otto von Guericke Egyetemen, és folytatta a rázásnak kitett függőleges szemcsés réteg kísérleti és numerikus vizsgálatát. Az eredményekből Dániel is előadást tartott az az European Rheological Society „Annual European Rheological Conference” c. konferenciáján Szlovéniában (lásd alább).

(14) Diego–Sancho Martinez 2019 novemberében 11 napot töltött a budapesti Wigner Fizikai Kutatóközpontban. Kísérletileg vizsgálta, hogy különböző minták esetén miként alakul a nyomás egy szemcsés anyaggal feltöltött tartály alján.

(15–16) Kirsten Harth és Ralf Stannarius 2019 decemberében 5 napot tölt a budapesti Wigner Fizikai Kutatóközpontban. A szemcsés anyag silóból történő kifolyásakor megfigyelhető torlódási jelenségeket vizsgálnak, valamint további publikációk előkészítésén dolgoznak.

B. A közös projekt első évben elért eredményei (max. 2 oldal)

Kísérletileg vizsgáltuk, hogy a részecskék deformálhatósága milyen hatással van egy szemcsés rendszer silóban megfigyelhető mechanikai konfigurációjára ill. az anyag silóból való kifolyására. A korábbi vizsgálatok nagy része deformálhatatlan (kemény) részecskékkel történt. Ultragyors (1000 kép/s) röntgentomográf segítségével térképeztük fel a folyási teret. Kimutattuk, hogy a hagyományos (kemény, súrlódó) részecskékből álló szemcsés rendszerekkel szemben (melyek

esetében stagnáló tartományok figyelhetők meg) a kis felületi súrlódású és deformálható hidrogél részecskékből álló anyag esetén a folyási tér jóval folytonosabb, nagy sebesség-gradiensektől mentes. Az eredmények a következő folyóiratcikkben kerültek publikálásra:

[1] Ralf Stannarius, Diego Sancho Martinez, Tamás Börzsönyi, Martina Bieberle, Frank Barthel and Uwe Hampel: "High-speed x-ray tomography of silo discharge", *New Journal of Physics*, 21 113054 (2019). IF: 3.849

Hagyományos röntgen tomográfias eljárással is vizsgáltuk a részecskék deformálhatóságának hatását a szemcsés rendszer silóban megfigyelhető mechanikai konfigurációira ill. az anyag silóból való kifolyására. Ez a kísérleti berendezés jóval (10000x) lassabb, mint a fent ismertetett ultragyors tomográf, de jobb a térbeli felbontása és teljes tomogramot ad, míg a fenti csak két egymás fölötti rétegről szolgáltat információt. Kísérleteink segítségével számszerűsítettük, hogy a lokális sűrűség, hogyan függ a mélységtől (azaz a fölötte lévő, ránehezedő anyag súlyától). Az eredmények a következő folyóiratcikkben kerültek publikálásra:

[2] Ralf Stannarius, Diego Sancho Martinez, Tilo Finger, Ellák Somfai and Tamás Börzsönyi: "Packing and flow profiles of soft grains in 3D silos reconstructed with X-ray computed tomography", *Granular Matter*, 21:56 (2019). IF: 2.145

Egy kétkomponensű szemcsés rendszer tartályból való kifolyásakor megfigyelhető torlódási (bedugulási) jelenséget vizsgáltuk. Számszerűsítettük, hogy a kemény súrlódó részecskék mennyivel nagyobb valószínűséggel vesznek részt benne, mint a kis súrlódású, deformálható részecskék (egy kézirat előkészületben).

Megmutattuk, hogy egy tisztán kemény részecskékből álló rendszerrel ellentétben (melyben a tartályból kifolyás sebessége lényegében független a töltési magasságtól) a kis súrlódású deformálható részecskék esetében a folyási ráta folyamatosan csökken a töltési magasság csökkenésével. Az ehhez kapcsolódó numerikus számolásaink azt mutatták, hogy a súrlódási együttható csökkentésével már egy kemény részecskékből álló rendszerben is hasonló változás következik be (egy kézirat előkészületben).

Összességében, a kollaboráció igen sikeres volt, magas impakt faktorú publikációk, nemzetközi konferencia előadások és poszterek születtek. Ezeknek a listája alább található. Még egyszer kiemeljük, hogy az együttműködés másik nagy eredménye a közös EU H2020 ITN (CALIPER) project elnyerése (részletek fentebb).

C. Az együttműködés további szempontjai: (max. 3 oldal)

1. Mennyiben alapulnak a projekt elért eredményei a német–magyar együttműködésen?

A projekt eredményei tisztán ennek a két csoportnak a kutatócsere által segített együttműködésén alapulnak.

2. Hogyan befolyásolta a támogatás a projekt előmenetelét?

A TKA–DAAD kutatócsere projekt anyagi támogatása alapvető fontosságú volt a két kutatócsoport sikeres együttműködésében. A fent említett utazások nélkülözhetetlenek voltak a közös mérések kivitelezéséhez, a diskussziókhöz, a doktorandusz és egyetemista hallhatók tapasztalatszerzéséhez, valamint a közös publikációk szerkesztéséhez.

3. Hogyan csatlakozott a második évi munka az első év eredményeihez?

A második évi munka közvetlen folytatása az első évnek, a két éves projektben célirányosan haladtunk a kutatásban, folyamatosan építve az addig elért eredményekre.

4. Milyen szempontból volt jelentős a projekt a fiatal kutatók tapasztalatszerzése, szakmai fejlődése szempontjából?

A magyar fiatal kutatók a németországi látogatásukkor megismerkedhettek modern kísérleti technikákkal (pl. Röntgentomográfiás, illetve ultragyors tomográfiás mérések a szemcsés anyagok szerkezetének vizsgálatára), a német fiatal kutatók megismerkedtek a budapesti csoport mérési módszereivel (gyors kamerás mérések, reometriai vizsgálatok). A közös kutatás igen eredményes volt (lásd alább a közös publikációk és konferencia prezentációk listáját) – kiemelendő, hogy a kutatásban való részvételen túl a fiatalok saját maguk is előadták az eredményeket nemzetközi konferenciákon.

Két végzős diák (egy Budapestről, egy pedig Magdeburgból) diplomamunka témája ehhez a projekthez kapcsolódott.

Végül kiemelendő, hogy sikerült elnyernünk egy EU H2020 ITN (CALIPER) projekt támogatását, mely a következő 4 évben még magasabb szintre emeli a két csoport együttműködését.

5. Sorolja fel azokat a hazai vagy külföldi tudományos közleményeket és publikációkat, amelyek az együttműködés eredményeként jelentek meg!

[1] Ralf Stannarius, Diego Sancho Martinez, Tamás Börzsönyi, Martina Bieberle, Frank Barthel and Uwe Hampel: “High-speed x-ray tomography of silo discharge”, *New Journal of Physics*, 21 113054 (2019). IF: 3.849

[2] Ralf Stannarius, Diego Sancho Martinez, Tilo Finger, Ellák Somfai and Tamás Börzsönyi: “Packing and flow profiles of soft grains in 3D silos reconstructed with X-ray computed tomography”, *Granular Matter*, 21:56 (2019). IF: 2.145

Prezentációk nemzetközi konferenciákon:

- (1) Ralf Stannarius: "The Inside Story, 3D Imaging of Granular Ensembles by X-Ray and NMR Tomography", Invited talk delivered at the Gordon Research Conference on Granular Matter, 22–27 July, 2018, Stonehill College, Easton, MA, USA
- (2) Tivadar Pongó, Viktória Stiga, János Török, Sára Lévy, Balázs Szabó, Ralf Stannarius and Tamás Börzsönyi: "Time evolution of discharge rate in silo flows for various particle shapes", Poster presented at the Gordon Research Conference on Granular Matter, 22–27 July, 2018, Stonehill College, Easton, MA, USA
- (3) Dániel B. Nagy: "Rheology of 3D frictionless spherocylinders", Talk presented at the DFG Spring Meeting, 11–16 March, 2018, Berlin, Germany.
- (4) Sára Lévy: "Simulation and modelling of the frustrated packing in a granular system", Talk presented at the DFG Spring Meeting, 11–16 March, 2018, Berlin, Germany.
- (5) Tina Hanselka: "Dynamics of self-propelled granular particles on a vibrated plate", Talk presented at the DFG Spring Meeting, 11–16 March, 2018, Berlin, Germany.
- (6) Tamás Börzsönyi: "Experimental observations on hopper flows with elongated grains" Talk presented at the 3rd CFDEM Conference, 14–15 March, 2019, Linz, Austria
- (7) Dániel Nagy: "Numerical simulation of the rheology of frictional spherocylinders", Talk presented at the Annual European Rheological Conference, 8–11 Apr 2019, Portoroz, Slovenia
- (8) M. Kurachkina, A. Eremin, M. Alaasar, C. Tschierske, P. Salamon, T. Börzsönyi: "Manipulation of mechanical properties of photoswitchible bent-core mesogens" Talk presented at the 15th European Conference on Liquid Crystals, June 30 – July 5, 2019, Wrocław, Poland
- (9) M. Kurachkina, A. Eremin, M. Alaasar, C. Tschierske, P. Salamon: "Peculiarities of photoisomerization in cybotactic nematic", Talk presented at EuroDisplay, 16–20 September, 2019
- (10) Sára Lévy: "Multiple shear bands in granular materials in slow shear", Talk presented at the Annual European Rheological Conference, 8–11 Apr 2019, Portoroz, Slovenia
- (11) Diego Sancho-Martinez: "3D granular flow of soft and hard spheres studied by ultrafast electron beam X-ray computed tomography (ROFEX)", Talk presented at the Annual European Rheological Conference, 8–11 Apr 2019, Portoroz, Slovenia
- (12) Tamás Börzsönyi: "Flow and rheology of elongated particles" Invited Talk delivered at the Traffic and Granular Flow 2019 conference, 4–5 July, 2019, Pamplona, Spain
- (13) Ralf Stannarius: "Silo outflow of soft frictionless spheres", Talk presented at the Annual European Rheological Conference, 8–11 Apr 2019, Portoroz, Slovenia
- (14) Tamás Börzsönyi: "Shear flows and hopper flows with elongated grains" Invited Talk delivered at the 4th International Granular Flow Workshop, 15–17 September, 2019, Liyang, China

Diplomamunkák:

- (1) Jonas Schulze finished a Bachelor thesis on Packing in $2+$ dimensional confinement. This thesis contains results achieved together with Sara Levay in the context of the present project during her visit in Magdeburg.
- (2) Pongó Tivadar, Diplomamunka, BME Budapest, 2019.

6. Milyen akadályokat vagy problémákat érzékelt a projekt végrehajtása során?

Nem voltak lényeges akadályok.

7. Mi a legjelentősebb szakmai eredmény, amit kiemelne a projektegyüttműködés kapcsán?

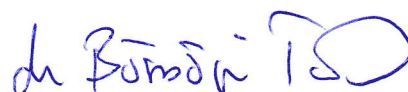
1. Ultragyors (1000 kép/s) röntgentomográfiás mérésekkel karakterizáltuk egy silóból kifolyó anyag dinamikáját ([1]-es publikáció).
2. Hagyományos röntgentomográfiás eljárással vizsgáltuk egy szemcsés rendszer mechanikai konfigurációit és folyását kis felületi súrlódású deformálható és kemény részecskék esetében ([2]-es publikáció).
3. Egy kis súrlódású-deformálható és súrlódó-kemény részecskékből álló szemcsés keverék torlódási tulajdonságait vizsgáltuk egy két-dimenziós tartályban. Számszerűsítettük, hogy a súrlódó-kemény részecskék a részarányukhoz viszonyítva mennyivel nagyobb valószínűséggel vesznek részt a torlódás kialakulásában (egy kézirat előkészületben).
4. Megmutattuk, hogy egy tisztán kemény részecskékből álló rendszerrel ellentétben (melyben a tartályból kifolyás sebessége lényegében független a töltési magasságtól) a kis súrlódású deformálható részecskék esetében a folyási ráta folyamatosan csökken a töltési magasság csökkenésével. Az ehhez kapcsolódó numerikus számolásaink azt mutatták, hogy a súrlódási együttható csökkentésével már egy kemény részecskékből álló rendszerben is hasonló változás következik be (egy kézirat előkészületben).

8. Van-e olyan javaslat, amivel módosítaná a pályázati felhívás és végrehajtás szempontjait a jövőre nézve?

A pályázat és a projekt végrehajtás a jelenlegi formában gördülékenyen zajlik.

A budapesti tartózkodás költségei (különösen a szálláslehetőségek árai) az utóbbi időben megemelkedtek, így a német vendégdiákok budapesti tartózkodásához kapott 8eft/nap napi díj szűkösnek bizonyul, ezt célszerű lenne megemelni.

Kelt: 2019.12.03.



Aláírás