

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ОДЕСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
імені І. І. МЕЧНИКОВА

СЕМЕНОВ АНДРІЙ КОСТЯНТИНОВИЧ

УДК 538.956; 537.9; 544.72.05; 544.77

**ЕЛЕКТРОФІЗИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ
БАГАТОФАЗНИХ ДИСПЕРСНИХ СИСТЕМ**

01.04.02 — теоретична фізика

АВТОРЕФЕРАТ

дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

Одеса — 2019

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана на кафедрі теоретичної фізики і астрономії Одеського національного університету імені І. І. Мечникова.

Науковий керівник: кандидат фізико-математичних наук, доцент
Сушко Мирослав Ярославович,
доцент кафедри теоретичної фізики та астрономії,
Одеський національний університет імені
І. І. Мечникова.

Офіційні опоненти: доктор фізико-математичних наук, професор
Лебовка Микола Іванович,
Інститут біоколоїдної хімії ім. Ф.Д. Овчаренка
НАН України, завідувач відділу фізичної хімії
дисперсних мінералів;

доктор фізико-математичних наук,
старший науковий співробітник
Лисенков Едуард Анатолійович,
доцент кафедри математичного аналізу,
Миколаївський національний університет імені
В.О. Сухомлинського.

Захист дисертації відбудеться «___» _____ 2019 р. о ___ годині на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 41.051.04 Одеського національного університету імені І. І. Мечникова за адресою: 65082 м. Одеса, вул. Пастера, 27, ОНУ імені І. І. Мечникова, Велика фізична аудиторія.

З дисертацією можна ознайомитись у бібліотеці Одеського національного університету імені І. І. Мечникова за адресою: 65026 м. Одеса, вул. Преображенська, 24 та на сайті: <http://theorphys.onu.edu.ua/theses>.

Автореферат розісланий «___» _____ 2019 р.

Вчений секретар
спеціалізованої вченої ради Д 41.051.04
доктор фізико-математичних наук, професор

Панько О. О.

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Актуальність роботи визначається як загальними практичними задачами створення та застосування нових композитних матеріалів з бажаними та контрольованими електрофізичними властивостями (наприклад, тверді композитні та полімерні композитні електrolіти), суттєво відмінними від властивостей природних речовин, так і необхідністю побудови і вдосконалення надійних теоретичних моделей для кількісного опису та діагностики їх характеристик.

Робота присвячена побудові та аналізу теоретичної моделі для опису найменш дослідженого, але найбільш поширеного типу тривимірних неупорядкованих систем, утворених диспергуванням частинок наповнювача в несучу матрицю. Ключовими проблемами, далекими до свого розв'язання, при створенні послідовної теорії таких систем є врахування різного роду міжфазних ефектів (нерегулярність форми частинок; контактний опір; утворення оксидних шарів; формування високопровідних областей з підвищеною концентрацією дефектів чи іонів; аморфізація полімерної матриці тощо), змін властивостей самої матриці (внаслідок неконтрольованого легування, забруднення, змін внутрішньої структури тощо) та послідовний розрахунок багаточастинкових поляризаційних та кореляційних ефектів.

Побудована в дисертаційній роботі аналітична теорія ефективного квазістатичного електричного відгуку неупорядкованих систем частинок з морфологією тверде ядро-проникна оболонка є багаточастинковою та дозволяє враховувати вплив міжфазних та матричних ефектів через моделювання одностинкового електричного профілю комплексної діелектричної проникності оболонок. Здобуті основні теоретичні співвідношення між ефективною статичною електричною провідністю системи та електричними і геометричними параметрами компонентів підтверджуються результатами їх порівняння з існуючими даними симуляцій методом Random Resistor Network (RRN) та спроможністю адекватно описувати широкі масиви експериментальних даних для ефективної квазістатичної провідності твердих композитних і полімерних композитних електrolітів, ефективних електричної провідності та діелектричної проникності в околі порогу електричної перколяції в системі діелектрик-провідник із міжфазним шаром. Теорія також дозволяє показати непослідовність та обмеженість поширеної диференціальної схеми для обчислення ефективних електричних параметрів гетерогенних систем.

Зв'язок з науковими програмами, планами, темами. Дисертаційна робота виконувалась на кафедрі теоретичної фізики і астрономії Одеського національного університету імені І. І. Мечникова, а також є складовою частиною досліджень, які проводились за держбюджетною темою “Дослідження термодинамічних, критичних та кінетичних властивостей рідких металів та їх сплавів” No 0118U000202, а також за держбюджетною темою “Рівняння стану, термодинамічні та кінетичні властивості нанофлюїдів. Дослідження структурування нанофлюїдів на основі кореляційної спектроскопії та спектроскопії діелектричної проникності” No 113U000374.

Мета, задачі, об'єкт, предмет та методи досліджень. *Метою роботи є побудова теорії ефективних електричних властивостей неупорядкованих дисперсних систем частинок з морфологією тверде ядро-проникна оболонка. У зв'язку з цим були поставлені задачі:*

1. Розробити теорію електродинамічної гомогенізації неупорядкованих систем провідних частинок у рамках методу компактних груп (МКГ) [1–4], для чого узагальнити та замкнути МКГ на випадок провідних частинок.
2. Проаналізувати в рамках цієї теорії ефективні електричні властивості неупорядкованих систем частинок з морфологією тверде ядро-проникна оболонка та протестувати теорію шляхом порівняння отриманих результатів з даними числових симуляцій.
3. Дослідити застосовність теорії до опису електричних властивостей твердих та полімерних композитних електролітів.
4. Дослідити застосовність теорії до опису електричної перколяції в дисперсноподібних композитах.
5. Виконати критичний аналіз диференціальної схеми обчислення ефективних електрофізичних параметрів гетерогенних систем

Об'єкт дослідження: неупорядковані дисперсні системи частинок з морфологією тверде ядро-проникна оболонка.

Предмет дослідження: ефективні електрична провідність та діелектрична проникність.

Методи дослідження. У роботі був використаний метод компактних груп неоднорідностей [1–4], який дозволяє врахувати багаточастинкові поляризаційні і кореляційні ефекти в довгохвильовому межі, уникаючи деталізації їх розрахунку.

Наукова новизна отриманих результатів. В роботі отримано наступні результати:

- В рамках методу компактних груп неоднорідностей побудовано внутрішню замкнену статистичну модель квазістатичного електричного відгуку макроскопічно однорідних та ізотропних дисперсних систем частинок з морфологією типу тверде ядро–проникна оболонка.
- Показано адекватність моделі для опису концентраційних залежностей статичної провідності, отриманих методом числових симуляцій RRN для модельних систем з електрично однорідними та неоднорідними оболонками, та її суттєві переваги над моделям Максвелла-Гарнетта, Бруггемана та Накамури-Нана.
- Показано застосовність теорії до кількісного опису експериментальних даних з ефективної провідності твердих композитних та полімерних композитних електролітів та аналізу ролі різних фізико-хімічних механізмів у її формуванні. Внески останніх можна ефективно врахувати через профіль комплексної діелектричної проникності проникних оболонок.
- Показано застосовність теорії до кількісного опису ефективних електричної провідності та діелектричної проникності твердих неупорядкованих композитів в околі порогу електричної перколяції. Встановлено залежність положення порогу перколяції від геометричних параметрів оболонки. Продемонстровано залежність ефективних критичних індексів для таких систем від геометричних та електричних параметрів компонентів та способу обробки експериментальних даних.
- Показано внутрішню непослідовність та загальну обмеженість диференціальної схеми для аналізу ефективних квазістатичних електричних параметрів дисперсних систем.

Практичне значення отриманих результатів. Розвинута теорія може розглядатися як новий гнучкий інструмент для аналізу та діагностики як ефективних електрофізичних параметрів неупорядкованих композитних систем, так і існуючих методів їх вивчення.

Особистий внесок здобувача. Три статті [5–7] виконані у співавторстві з науковим керівником. Загальна постановка задач статей [5–7] належить доц. Сушку М.Я.. При роботі над цими статтями здобувач брав участь в пошуку та аналізі пов'язаних з ними теоретичних матеріалів та

експериментальних даних, виконував з науковим керівником паралельні взаємоконтролюючі теоретичні розрахунки та обробки даних симуляцій та експерименту, брав участь в інтерпретації, аналізі результатів та підготовці їх до опублікування. Також здобувачем було виказано ідею про використання крайових умов для замикання процедури гомогенізації, проаналізовано проблему відображення результатів досліджуваної моделі на результати існуючих комп'ютерних симуляцій, розв'язано задачу відновлення провідності реальної матриці через параметри дальньої частини модельного профілю провідності оболонки.

Задачу статті [8] та її повне розв'язання належать здобувачу.

Апробація результатів дисертації. Результати дисертації доповідалися на семінарах кафедри теоретичної фізики, а також були представлені автором на наукових конференціях/школах/семінарах, з яких дванадцять міжнародних:

1. 4-th International Conference on Statistical Physics: Modern Trends and Applications, Lviv, Ukraine, 2012.
2. 25-th International Conference: Disperse Systems, Odesa, Ukraine, 2012.
3. 5-th International Symposium: Methods and Applications of Computational Chemistry, Kharkiv, Ukraine, 2013.
4. 6-th International Conference Physics of Liquid Matter: Modern Problems, Kyiv, Ukraine, 2014.
5. 26-th International Conference: Disperse Systems, Odesa, Ukraine, 2014.
6. 2015 International Young Scientists Forum on Applied Physics, Dnipropetrovsk, Ukraine, 2015.
7. 27-th International Conference: Disperse Systems, Odesa, Ukraine, 2016.
8. International conference: Development of innovation in the technical, physical and mathematical fields of sciences, Mykolayiv, Ukraine, 2016.
9. 8-th International Conference Physics of Liquid Matter: Modern Problems, Kyiv, Ukraine, 2018.
10. 5-th International Conference on Statistical Physics: Modern Trends and Applications, Lviv, Ukraine, 2019.
11. 7-th International Conference: Nanotechnologies and Nanomaterials, Lviv, Ukraine, 2019.
12. 28-th International Conference: Disperse Systems, Odesa, Ukraine, 2019.

Структура та обсяг роботи. Дисертація складається зі вступу, п'яти розділів, висновків і списку використаних джерел, що містить 81 посилання. Загальний обсяг дисертації – 115 сторінок друкованого тексту.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **Вступі** обґрунтовано актуальність теми дисертації, визначені мета, завдання, об'єкт, предмет та методи дослідження. Обговорені наукова новизна і практичне значення отриманих результатів.

В **першому розділі** наведено огляд деяких з основних теорій, що використовуються для вивчення та аналізу електрофізичних властивостей макроскопічно однорідних дисперсних систем. Задля простоти всі теоретичні викладки робилися для діелектричних двофазних систем, якщо не було зазначено інше, але всі приведені результати легко розповсюджуються й на випадок комплексної діелектричної проникності. Розглянуті границі Вінера [9] та Хашина-Штрікмана [10] для лінійного відгуку; останні більш точні для даного типу дисперсних систем, та можуть бути строго отримані в рамках варіаційного принципу. Далі розглядаються класичні одночастинкові підходи Максвелла-Гарнетта [11] та ефективного середовища Бругемана [12], що досі часто використовуються та грають роль бази для побудови нових теорій. Зокрема, розглянуті дві модифікації підходу Бругемана: 1) емпіричний “узагальнений” підхід ефективного середовища Маклачлана [13–16], що представляє собою модифікацію закону Бругемана шляхом штучного введення підгінних параметрів таким чином, щоб поблизу порогу перколяції задовільнялися скейлінгові співвідношення; 2) теорія Накамури-Нана [17, 18], яка була розроблена для опису концентраційної поведінки композитних електролітів, та представляє собою спрощений варіант модифікації Накамури [19] підходу Бругемана. Далі розглянуті так звані диференціальний [12, 20, 21] та поступовий (incremental) [22, 23] підходи, які є по суті розвиненнями ідеї Максвелла-Гарнетта на клас підходів ефективного середовища. Після цього розглянуті два сучасні більш послідовні підходи: теорія сильних флуктуацій [24–29] та метод компактних груп (МКГ) неоднорідностей [1, 2, 4, 30]. Обґрунтовано вибір останнього методу як базового для роботи в рамках дисертації.

Другий розділ дисертації присвячений розвиненню моделі тверде ядро–проникна оболонка (див. рис. 1) в рамках МКГ, сформульованого для випадку квазістатичної комплексної діелектричної проникності. Ця модель

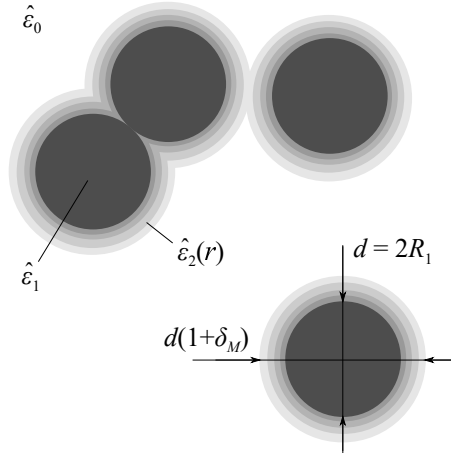


Рис. 1: Схематичне зображення моделі твердої ядро-проникної оболонки. Розглядається макроскопічно однорідна та ізотропна система сферичних частинок, що знаходяться в однорідній матриці з проникністю $\hat{\epsilon}_0$ (біла область). Кожна частинка складається з твердого (непроникного) ядра радіусом $R_1 = d/2$ та проникністю $\hat{\epsilon}_1$ (чорні області), покритого електрично однорідною концентричною проникною оболонкою товщиною $R_2 = R_1 \delta_M$ та проникністю $\hat{\epsilon}_2 = \hat{\epsilon}_2(\mathbf{r})$ (сірі області). Всі проникності комплексні та мають форму (1). Локальне значення проникності визначається відстанню від даної точки до центру найближчої частинки.

широко відома в літературі та часто використовується при роботі з дисперсними системами, однак її формальні реалізації навіть у найпростішому випадку електрично однорідних оболонок не є тривіальною задачею. Вже при досить невеликих концентраціях перекриття оболонок стає істотним, тож виникає питання чи вважати поляризацію кластера декількох частинок з перекритими оболонками одночастинковою (як для частинки зі складною структурою) чи багаточастинковою. Математично це пов'язано з необхідністю розрахунку всіх багаточастинкових вкладів вже на етапі розрахунку об'ємної концентрації таких частинок. Крім цього, постає питання вибору електродинмічної гомогенізації такої системи. МКГ дозволяє ефективно впоратися з цими обома задачами у довгохвильовому наближенні.

В **підрозділі 2.1** робиться послідовне узагальнення МКГ для немагнітних провідних систем у квазістатичному наближенні. Останнє позначає, що робочі частоти падаючого поля на стільки малі, що будь-якими вкладами процесів діелектричних втрат можна знехтувати. Тоді, для таких систем у комплексному представленні діелектрична проникність буде мати вигляд:

$$\hat{\varepsilon} = \varepsilon + i \frac{4\pi\sigma}{\omega}, \quad (1)$$

де ε , σ – відповідно, низькочастотні дійсна частина діелектричної проникності та провідність; i – уявна одиниця; символ “хатки” над символом позначає його комплексність. Ефективна комплексна проникність системи $\hat{\varepsilon}_{\text{eff}}$ визначається як коефіцієнт пропорційності між статистичними середніми комплексного струму та напруженістю електричного поля:

$$\langle \mathbf{J}(\mathbf{r}) \rangle = -i \frac{\omega}{4\pi} \langle \hat{\varepsilon}(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r}) \rangle = -i \frac{\omega}{4\pi} \hat{\varepsilon}_{\text{eff}} \langle \mathbf{E}(\mathbf{r}) \rangle, \quad (2)$$

де кутові дужки відповідають за статистичне усереднення. Показано, що ці співвідношення легко знаходяться з макроскопічних рівнянь Максвелла для електромагнітної хвилі в середовищі та рівняння неперервності.

Для знаходження $\langle \mathbf{J} \rangle$ та $\langle \mathbf{E} \rangle$ в рамках МКГ, розглядається допоміжна система \mathcal{S} , що складається з реальної системи \mathcal{D} , розташованої у однорідній матриці \mathcal{M} з поки що невідомою проникністю $\hat{\varepsilon}_f$. В рамках МКГ вважається, що у довгохвильовому наближенні відгук \mathcal{S} еквівалентний відгуку \mathcal{D} [4, 7], тобто $\hat{\varepsilon}_f$ є параметр електродинамічної гомогенізації системи. Сама ж система \mathcal{S} розглядається як сукупність областей (компактних груп) з лінійними розмірами d , набагато меншими за довжину хвилі λ в системі, але досить великими, щоб мати властивості всієї \mathcal{S} . Тоді локальне значення комплексної проникності можна записати наступним чином:

$$\hat{\varepsilon}(\mathbf{r}) = \hat{\varepsilon}_f + \delta\hat{\varepsilon}(\mathbf{r}),$$

де $\delta\hat{\varepsilon}(\mathbf{r})$ – частково гладка функція локальних відхилень проникності, викликаних компактною групою у точці \mathbf{r} .

Середні поля знаходяться як довгохвильове наближення ітераційного рішення рівняння розповсюдження електромагнітної хвилі в \mathcal{S} :

$$\langle \mathbf{E}(\mathbf{r}) \rangle = \left[1 + \langle \hat{Q}(\mathbf{r}) \rangle \right] \mathbf{E}_0; \quad (3)$$

$$\langle \mathbf{J}(\mathbf{r}) \rangle = -i \frac{\omega \hat{\varepsilon}_f}{4\pi} \left[1 - 2\langle \hat{Q}(\mathbf{r}) \rangle \right] \mathbf{E}_0, \quad (4)$$

де

$$\hat{Q}(\mathbf{r}) = -\frac{\delta \hat{\varepsilon}(\mathbf{r})}{3\varepsilon_f + \delta \hat{\varepsilon}(\mathbf{r})}. \quad (5)$$

Показано, що цей ряд є асимптотичним.

Нарешті, підставляючи вирази для середніх полів (3), (4) до (2) отримуємо наступне рівняння для ε_{eff} , що залежить лише від $\hat{\varepsilon}_f$ та $\delta \hat{\varepsilon}$:

$$\langle \hat{Q} \rangle = \frac{\hat{\varepsilon}_f - \hat{\varepsilon}_{\text{eff}}}{2\hat{\varepsilon}_f + \hat{\varepsilon}_{\text{eff}}}. \quad (6)$$

Тип гомогенізації (значення параметру $\hat{\varepsilon}_f$) знаходиться в **підрозділі 2.2** виходячи з граничних умов для нормальних компонент комплексних струмів на межі розділу допоміжної матриці \mathcal{M} та гомогенізованим середовищем:

$$\hat{\varepsilon}_f \mathbf{E}_0 = \hat{\varepsilon}_{\text{eff}} \langle \mathbf{E}(\mathbf{r}) \rangle. \quad (7)$$

Користуючись цією рівністю та виразом (3), відкидаючи нефізичні розв'язки отримано $\hat{\varepsilon}_f = \hat{\varepsilon}_{\text{eff}}$, що разом з (6) дає рівняння для ε_{eff} :

$$\langle Q(\mathbf{r}) \rangle = 0. \quad (8)$$

Рівняння (8) є точним у наближенні $\omega \rightarrow 0$ для кусково-гладких функцій $\delta \hat{\varepsilon}(\mathbf{r})$.

Модель ядро-оболонка (див. рис. 1) розвинена в **підрозділі 2.3** в рамках симетричного підходу моделювання мікроструктури системи через те, що він не робить додаткових припущень щодо моделювання компонентів, може бути застосований для всієї концентраційної області та, як буде показано у Розділі 5, є більш послідовним ніж асиметричний диференціальний підхід.

Спочатку розглядається випадок електрично однорідного профілю оболонки. Функція $\delta \hat{\varepsilon}(\mathbf{r})$ такої моделі може подаватись у вигляді ступінчатої функції, що залежить від відстані $l = \min_{1 \leq a \leq N} |\mathbf{r} - \mathbf{r}_a|$ від даної точки \mathbf{r} до найближчої частинки, та може бути записана в термінах характеристичних функцій відповідних областей:

$$\delta \hat{\varepsilon}(\mathbf{r}) = (1 - \tilde{\chi}_2(\mathbf{r})) \Delta \hat{\varepsilon}_0 + \tilde{\chi}_1(\mathbf{r}) \Delta \hat{\varepsilon}_1 + (\tilde{\chi}_2(\mathbf{r}) - \tilde{\chi}_1(\mathbf{r})) \Delta \hat{\varepsilon}_2, \quad (9)$$

де $\Delta\hat{\varepsilon}_j = [\hat{\varepsilon}_j - \hat{\varepsilon}_f]$ ($j = \{0, 1, 2\}$); $\tilde{\chi}_1$ та $\tilde{\chi}_2$ – характеристичні функції, відповідно, всіх ядер (всієї чорної області на рис. 1) та частинок разом з їх оболонками (всі чорні та сірі області). Використовуючи властивості цих характеристичних функцій, моменти $\delta\hat{\varepsilon}$ можна записати у наступному вигляді:

$$\langle(\delta\hat{\varepsilon})^s\rangle = (1 - \phi)(\Delta\hat{\varepsilon}_0)^s + c(\Delta\hat{\varepsilon}_1)^s + (\phi - c)(\Delta\hat{\varepsilon}_2)^s, \quad (10)$$

де

$$\phi = \langle\tilde{\chi}_2(\mathbf{r})\rangle = N\langle\chi_2^{(1)}(\mathbf{r})\rangle - \frac{N(N-1)}{2}\langle\chi_2^{(1)}(\mathbf{r})\chi_2^{(2)}(\mathbf{r})\rangle + \dots \quad (11)$$

є об'ємною концентрацією всіх частинок разом з їх оболонками, та для нашої системи може бути розрахована статистичними методами у наближенні Кірквуда [31] ($\psi = (1 + \delta)^{-3}$, $\phi_t = c/\psi$):

$$\begin{aligned} \phi(c, \delta) = & 1 - (1 - c) \exp\left[-\frac{(1 - \psi)\phi_t}{1 - c}\right] \times \\ & \times \exp\left[-\frac{3c\phi_t}{2(1 - c)^3} \left(2 - 3\psi^{1/3} + \psi - c \left(3\psi^{1/3} - 6\psi^{2/3} + 3\psi\right)\right)\right]. \end{aligned} \quad (12)$$

Далі у **підрозділі 2.3.1** ця модель узагальнюється на випадок електрично неоднорідного профілю провідності оболонок. Спершу, розглядається випадок частинок, що складаються з M концентричних однорідних оболонок, кожна m -а з яких має зовнішній радіус $R_{2,m} = R_1(1 + \delta_m)$ ($R_{m-1} < R_m$) та проникність $\hat{\varepsilon}_{2,m}$. Правило перекриття оболонок залишається тим самим. Тоді локальні відхилення проникності можна знову ж таки записати в термінах характеристичних функцій:

$$\begin{aligned} \delta\hat{\varepsilon}(\mathbf{r}) = & (1 - \tilde{\chi}_{2,M}(\mathbf{r}))\Delta\hat{\varepsilon}_0 + \tilde{\chi}_1(\mathbf{r})\Delta\hat{\varepsilon}_1 + (\tilde{\chi}_{2,1}(\mathbf{r}) - \tilde{\chi}_1(\mathbf{r}))\Delta\hat{\varepsilon}_{2,1} + \\ & + \sum_{m=2}^M (\tilde{\chi}_{2,m}(\mathbf{r}) - \tilde{\chi}_{2,m-1}(\mathbf{r}))\Delta\hat{\varepsilon}_{2,m}, \end{aligned} \quad (13)$$

де $\Delta\hat{\varepsilon}_{2,m} = [\hat{\varepsilon}_{2,m} - \hat{\varepsilon}_f]$. Користуючись властивостями характеристичних функцій відповідних областей, моменти $\delta\hat{\varepsilon}$ можна записати у наступному вигляді:

$$\langle(\delta\hat{\varepsilon})^s\rangle = (1 - \phi(c, \delta))(\Delta\hat{\varepsilon}_0)^s + c(\Delta\hat{\varepsilon}_1)^s + \sum_{m=1}^M (\phi(c, \delta_m) - \phi(c, \delta_{m-1}))(\Delta\hat{\varepsilon}_{2,m})^s, \quad (14)$$

де було введено позначення $\delta_0 = 0$ ($\phi(c, \delta_0) = c$), та $\phi(c, \delta_m) \equiv \langle \tilde{\chi}_{2,m}(\mathbf{r}) \rangle$ – об’ємна концентрація областей всіх ядер разом з їх першими m оболонками, що для сферичних частинок дається виразом (12) при $\delta = \delta_m$. Нарешті переходячи до границь $M \rightarrow \infty$, $|\delta_{2,m} - \delta_{2,m-1}| \rightarrow 0$, ($\delta_M = \text{const}$) та вимагаючи, щоб $\phi(c, \delta)$ була диференційована за δ , для систем частинок з кусково-гладкої функції профілю оболонки $\hat{\varepsilon}_2(r)$ отримуємо:

$$\langle (\delta \hat{\varepsilon})^s \rangle = (1 - \phi(c, \delta))(\Delta \hat{\varepsilon}_0)^s + c(\Delta \hat{\varepsilon}_1)^s + \int_0^{\delta_m} \frac{\partial \phi(c, u)}{\partial u} (\Delta \hat{\varepsilon}_2(u))^s du, \quad (15)$$

де $\Delta \hat{\varepsilon}_2(u)$ є функція $\hat{\varepsilon}_2(r) - \hat{\varepsilon}_f$, що виражена в термінах змінної $u = (r - R_1)/R_1$, а δ_M відповідає зовнішній границі оболонки. Для однорідної оболонки ($\Delta \hat{\varepsilon}_2(u) = \text{const}$) вираз (15) одразу зводиться до (10) при $\delta = \delta_M = \delta_1$.

Нарешті в **розділі 2.4** за результатами попередніх розділів надаються остаточні рівняння для $\hat{\varepsilon}_{\text{eff}}$ в рамках моделей з однорідною та кусково-гладкою радіально-симетричною неоднорідною оболонками, відповідно:

$$(1 - \phi) \frac{\hat{\varepsilon}_0 - \hat{\varepsilon}_{\text{eff}}}{2\hat{\varepsilon}_{\text{eff}} + \hat{\varepsilon}_0} + c \frac{\hat{\varepsilon}_1 - \hat{\varepsilon}_{\text{eff}}}{2\hat{\varepsilon}_{\text{eff}} + \hat{\varepsilon}_1} + (\phi - c) \frac{\hat{\varepsilon}_2 - \hat{\varepsilon}_{\text{eff}}}{2\hat{\varepsilon}_{\text{eff}} + \hat{\varepsilon}_2} = 0; \quad (16)$$

$$(1 - \phi) \frac{\hat{\varepsilon}_0 - \hat{\varepsilon}_{\text{eff}}}{2\hat{\varepsilon}_{\text{eff}} + \hat{\varepsilon}_0} + c \frac{\hat{\varepsilon}_1 - \hat{\varepsilon}_{\text{eff}}}{2\hat{\varepsilon}_{\text{eff}} + \hat{\varepsilon}_1} + \int_0^{\delta_M} \frac{\partial \phi(c, u)}{\partial u} \frac{\hat{\varepsilon}_2(u) - \hat{\varepsilon}_{\text{eff}}}{2\hat{\varepsilon}_{\text{eff}} + \hat{\varepsilon}_2(u)} du = 0. \quad (17)$$

Зазначимо, що форма частинок грає роль лише на етапі вибору їх статистичного розподілу, тобто вибору функції ϕ ; в загальному випадку, результати (16) та (17) можуть бути застосовані до будь-яких багатофазних макроскопічно однорідних та ізотропних систем у довгохвильовому наближенні, відповідним чином вибираючи функцію ϕ .

Наостанок ці вирази були записані у квазістатичному наближенні:

$$(1 - \phi) \frac{\sigma_0 - \sigma_{\text{eff}}}{2\sigma_{\text{eff}} + \sigma_0} + c \frac{\sigma_1 - \sigma_{\text{eff}}}{2\sigma_{\text{eff}} + \sigma_1} + (\phi - c) \frac{\sigma_2 - \sigma_{\text{eff}}}{2\sigma_{\text{eff}} + \sigma_2} = 0, \quad (18a)$$

$$(1 - \phi) \frac{\varepsilon_0 \sigma_{\text{eff}} - \varepsilon_{\text{eff}} \sigma_0}{(2\sigma_{\text{eff}} + \sigma_0)^2} + c \frac{\varepsilon_1 \sigma_{\text{eff}} - \varepsilon_{\text{eff}} \sigma_1}{(2\sigma_{\text{eff}} + \sigma_1)^2} + (\phi - c) \frac{\varepsilon_2 \sigma_{\text{eff}} - \varepsilon_{\text{eff}} \sigma_2}{(2\sigma_{\text{eff}} + \sigma_2)^2} = 0. \quad (18b)$$

$$(1 - \phi) \frac{\sigma_0 - \sigma_{\text{eff}}}{2\sigma_{\text{eff}} + \sigma_0} + c \frac{\sigma_1 - \sigma_{\text{eff}}}{2\sigma_{\text{eff}} + \sigma_1} + \int_0^{\delta_M} \frac{\partial \phi(c, u)}{\partial u} \frac{\sigma_2(u) - \sigma_{\text{eff}}}{2\sigma_{\text{eff}} + \sigma_2(u)} du = 0, \quad (19a)$$

$$(1 - \phi) \frac{\varepsilon_0 \sigma_{\text{eff}} - \varepsilon_{\text{eff}} \sigma_0}{(2\sigma_{\text{eff}} + \sigma_0)^2} + c \frac{\varepsilon_1 \sigma_{\text{eff}} - \varepsilon_{\text{eff}} \sigma_1}{(2\sigma_{\text{eff}} + \sigma_1)^2} + \int_0^{\delta_M} \frac{\partial \phi(c, u)}{\partial u} \frac{\varepsilon_2(u) \sigma_{\text{eff}} - \varepsilon_{\text{eff}} \sigma_2(u)}{(2\sigma_{\text{eff}} + \sigma_2(u))^2} du = 0. \quad (19b)$$

за умови

$$|\sigma_i - \sigma_{\text{eff}}| \gg \epsilon_0 \omega (\varepsilon_i + 2\varepsilon_{\text{eff}}). \quad (20)$$

Надалі розглядаються тільки такі системи, для яких ця умова виконується.

В розділі 3 розроблена модель застосовується та аналізується для не-впорядкованих систем типу композитних електролітів на неорганічній та полімерній основі. Характерною особливістю цих систем є наявність навколо дисперсної фази областей, що мають велику провідність у порівнянні з іншими компонентами системи ($\sigma_1, \sigma_0 \ll \sigma_2$). **За рахунок цього концентраційна поведінка провідності має немонотонний характер:** .

Для аналізу основних характеристик концентраційної поведінки σ_{eff} таких систем розглядалась найпростіша модель композиту з електрично однорідною оболонкою ($\sigma_2(u) = \text{const}$) у наближенні $\sigma_1 \rightarrow 0$.

ВИСНОВКИ

У дисертаційній роботі в рамках методу компактних груп неоднорідностей побудована та проаналізована модель дисперсної системи типу тверде-ядро-проникна-оболонка, що була далі застосована для обробки експериментальних даних залежностей квазістатичних діелектричної проникності та провідності як функцій об'ємної концентрації компонент системи та температури.

Основні висновки з результатів роботи наступні.

- Макроскопічні електричні властивості дисперсних систем суттєвим чином визначаються геометриними та електричними параметрами міжфазних шарів та можуть бути кількісно описані в рамках статистичної моделі ефективного електричного відгуку не-впорядкованих систем частинок з морфологією тверде ядро-проникна оболон-

ка, побудованої в роботі шляхом узагальнення методу компактних груп на такі модельні системи.

- Отримані рівняння для ефективної статичної провідності в достатній мірі точні для розглянутих модельних систем, що підтверджуються результатами порівняння їх розв'язків з даними симуляцій, отриманими методом Random Resistor Network.
- Отримані з кількісного опису експериментальних даних для квазістатичної провідності різних типів твердих композитних та полімерних композитних електролітів та провідності й проникності композитів типу діелектрик–провідник одночастинкові профілі провідності враховують вплив основних фізико-хімічних механізмів в системі та можуть бути використані для їх аналізу.
- Положення порогу електричної перколяції в моделі визначається відносною товщиною оболонки, а значення ефективних критичних індексів залежать як від геометричних та електричних параметрів компонентів, так і способу обробки експериментальних даних, а тому демонструють широкий спектр значень.
- Диференціальна схема аналізу ефективних квазістатичних електричних параметрів дисперсних систем є внутрішньо непослідовою та застосовною лише для систем з малими різницями діелектричних проникностей компонентів та вузьких концентраційних інтервалів диспергованих частинок.

Розроблена модель є гнучким інструментом для обробки та електроспектроскопічного аналізу даних дисперсних систем різного типу.

СПИСОК ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

Публікації в наукових журналах:

1. Sushko M. Ya. Conductivity and permittivity of dispersed systems with penetrable particle-host interphase / M. Ya. Sushko, A. K. Semenov // Cond. Matter Phys. — 2013 — Vol. 16 — No. 1 — P. 13401.
2. Semenov A. K. On applicability of differential mixing rules for statistically homogeneous and isotropic dispersions / A. K. Semenov // J. Phys. Commun. — 2018. — Vol. 2. — No. 3 — P. 035045.
3. Sushko M. Ya. A mesoscopic model for the effective electrical conductivity of composite polymeric electrolytes. / M. Ya. Sushko, A. K. Semenov // J. Mol. Liq. — 2019. — Vol. 279 — P. 677.

4. Sushko M. Ya. Rigorously solvable model for the electrical conductivity of dispersions of hard-core-penetrable-shell particles and its applications / M. Ya. Sushko, A. K. Semenov // Phys. Rev. E — 2019. — Vol. 100. — P. 052601.

Тези доповідей на наукових конференціях:

5. Semenov A. Complex permittivity of disperse systems with penetrable particle-host interphase / A. Semenov, M. Sushko // 4-th International Conference on Statistical Physics: Modern Trends and Applications, 3-6 Jul., 2012: abstract - Lviv (Ukraine), 2012.
6. Семенов А.К. Роль межфазной границы в формировании проводимости и диэлектрической проницаемости мелкодисперсных систем / А.К. Семенов, М.Я. Сушко // 25-th International Conference: Disperse Systems, 17-21 Sept., 2012: abstract - Odesa (Ukraine), 2012.
7. Sushko M. Ya. Finding the parameters of the interphase layers in fine dispersions with dielectric spectroscopy studies near the electrical percolation threshold / M.Ya. Sushko, A.K. Semenov // 5-th International Symposium: Methods and Applications of Computational Chemistry, 1-5 Jul., 2013: abstract - Kharkiv (Ukraine), 2013.
8. Sushko M. Ya. Effect of interphase on the effective electrophysical parameters of fine dispersions and nanofluids / M.Ya. Sushko, A.K. Semenov // 6-th International Conference Physics of Liquid Matter: Modern Problems, 23-27 May, 2014: abstract - Kyiv (Ukraine), 2014.
9. Gotsulskiy V. Ya. Conductivity and permittivity of isopropyl alcohol- and water-based nanofluids: experimental results, theory and inferences / V.Ya. Gotsulskiy, A.K. Semenov, M.V. Stiranec, and M.Ya. Sushko // 6-th International Conference Physics of Liquid Matter: Modern Problems, 23-27 May, 2014: abstract - Kyiv (Ukraine), 2014.
10. Семенов А. К. Диэлектрическая проницаемость и проводимость дисперсных систем с неоднородной межфазной границей / А.К. Семенов, М.Я. Сушко // 26-th International Conference: Disperse Systems, 22-26 Sept., 2014: abstract - Odesa (Ukraine), 2014.
11. Semenov A. K. A model for conductivity and permittivity of heterogeneous systems with complex microstructures / A.K. Semenov, M.Ya. Sushko // 2015 International Young Scientists Forum on Applied Physics, 29 Sept.-2 Oct., 2015: abstract - Dnipropetrovsk (Ukraine), 2015.
12. Бабий К. А Особенности электрической проводимости дисперсных си-

- стем на основе полимерных матриц / К.А. Бабий, А.К. Семенов, М.Я. Сушко // 27-th International Conference: Disperse Systems, 19-23 Sept., 2016: abstract - Odesa (Ukraine), 2016.
13. Семенов А. К. Роль міжфазних шарів у формуванні провідних та діелектричних властивостей дисперсноподібних систем: модель та застосування / А.К. Семенов, М.Я. Сушко // International conference: Development of innovation in the technical, physical and mathematical fields of sciences, 22-24 Sept., 2016: abstract - Mykolayiv (Ukraine), 2016.
 14. Sushko M. Ya. Effective electrical conductivity of composite polymer electrolytes / M.Ya. Sushko, A.K. Semenov // 8-th International Conference Physics of Liquid Matter: Modern Problems, 18-22 May, 2018: abstract - Kyiv (Ukraine), 2018.
 15. Semenov A. K. Is the classical differential scheme for permittivity of emulsions consistent? / A.K. Semenov // 8-th International Conference Physics of Liquid Matter: Modern Problems, 18-22 May, 2018: abstract - Kyiv (Ukraine), 2018.
 16. Sushko M. Ya. Recent developments in the theory of electrodynamic homogenization of random particulate systems / M.Ya. Sushko, A.K. Semenov // 5-th International Conference on Statistical Physics: Modern Trends and Applications, 3-6 Jul., 2019: abstract - Lviv (Ukraine), 2019.
 17. Semenov A. K. Hard-core–penetrable-shell model for effective electric parameters of random particulate systems / A.K. Semenov, M.Ya. Sushko // 7-th International Conference: Nanotechnologies and Nanomaterials, 27-30 Aug., 2019: abstract - Lviv (Ukraine), 2019.
 18. Семенов А. К. Моделювання електрофізичного відгуку дисперсних систем з твердим дисперсійним середовищем / А.К. Семенов, М.Я. Сушко // 28-th International Conference: Disperse Systems, 16-20 Sept., 2019: abstract - Odesa (Ukraine), 2019.

СПИСОК ЦИТОВАНИХ РОБІТ

- [1] Sushko, M. Dielectric permittivity of suspensions / M.Ya. Sushko // *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* — 2007. — Vol. 132. — P. 478. — [*JETP* **105**, 426 (2007)].
- [2] Sushko, M. Compact group method in the theory of permittivity of heterogeneous systems / M.Ya. Sushko, S.K. Kriskiv // *Zh. Tekh. Fiz.* — 2009. — Vol. 79. — P. 97. — [*Tech. Phys.* **54**, 423 (2009)].

- [3] Sushko, M. Effective permittivity of mixtures of anisotropic particles / M.Ya. Sushko // J. Phys. D: Appl. Phys. — 2009. — Vol. 42. — P. 155410.
- [4] Sushko, M. Effective dielectric response of dispersions of graded particles / M.Ya. Sushko // Phys. Rev. E. — 2017. — Vol. 96. — P. 062121.
- [5] Sushko, M. Y. Conductivity and permittivity of dispersed systems with penetrable particle-host interphase / M. Ya. Sushko, A. K. Semenov // Cond. Matter Phys. — 2013. — Vol. 16. — P. 13401.
- [6] Sushko, M. Y. A mesoscopic model for the effective electrical conductivity of composite polymeric electrolytes / M. Ya. Sushko, A. K. Semenov // J. Mol. Liq. — 2019. — Vol. 279. — P. 677.
- [7] Sushko, M. Y. Rigorously solvable model for the electrical conductivity of dispersions of hard-core-penetrable-shell particles and its applications / M. Ya. Sushko, A. K. Semenov // Phys. Rev. E. — 2019. — Vol. 100. — P. 052601.
- [8] Semenov, A. On applicability of differential mixing rules for statistically homogeneous and isotropic dispersions / A.K. Semenov // J. Phys. Commun. — 2018. — Vol. 2. — P. 035045.
- [9] Wiener, O. Die theorie des mischkörpers für das feld der stationären strömung / O. Wiener // Abh. Math. Phys. K1 Königl. Sächs. Ges. — 1912. — Vol. 32. — P. 509.
- [10] Hashin, Z. A variational approach to the theory of the effective magnetic permeability of multiphase materials / Z. Hashin, S. Shtrikman // J. Appl. Phys. — 1962. — Vol. 33. — P. 3125.
- [11] Maxwell-Garnett, J. Colours in metal glasses and metallic films / J. Maxwell-Garnett // Trans. R. Soc. Lond. — 1904. — Vol. 203. — P. 385.
- [12] Bruggeman, D. Berechnung verschiedener physikalischer konstanten von heterogenen substanzen. i. dielektrizitätskonstanten und leitfähigkeiten der mischkörper aus isotropen substanzen / D. Bruggeman // Ann. Phys. — 1935. — Vol. 416. — P. 636.
- [13] McLachlan, D. An equation for the conductivity of binary mixtures with anisotropic grain structures / D. McLachlan // J. Phys. C: Solid State Phys. — 1987. — Vol. 20. — P. 865.
- [14] McLachlan, D. Electrical resistivity of composites / D. McLachlan, M. Blaszkiewicz, R. E. Newnham // J. Am. Ceram. Soc. — 1990. — Vol. 73. — P. 2187.
- [15] Wu, J. Electrical resistivity of composites / J. Wu, D. S. McLachlan // J. Am. Ceram. Soc. — 1990. — Vol. 73. — P. 2187.

- [16] Chitame, C. ac and dc conductivity, magnetoresistance, and scaling in cellular percolation systems / C. Chitame, D. S. McLachlan // *Phys. Rev. B.* — 2003. — Vol. 67. — P. 024206.
- [17] Nan, C.-W. Conduction theory of ionic conductor containing dispersed second phase / C.-W. Nan // *Acta Physica Sinica.* — 1987. — Vol. 36. — P. 191.
- [18] Nan, C.-W. Physics of inhomogeneous inorganic materials / C.-W. Nan // *Prog. Mater. Sci.* — 1993. — Vol. 37. — P. 1–116.
- [19] Nakamura, M. Conductivity for the site-percolation problem by an improved effective-medium theory / M. Nakamura // *Phys. Rev. B.* — 1984. — Vol. 29. — P. 3691.
- [20] Hanai, T. Theory of the dielectric dispersion due to the interfacial polarization and its application to emulsions / T. Hanai // *Kolloid-Zeitschrift.* — 1960. — Vol. 171. — P. 23.
- [21] Sen, P. A self-similar model for sedimentary rocks with application to the dielectric constant of fused glass beads / P. Sen, C. Scala, M. Cohen // *Geophysics.* — 1981. — Vol. 46. — P. 781.
- [22] Lakhtakia, A. Incremental maxwell garnett formalism for homogenizing particulate composite media / A. Lakhtakia // *Microw. Opt. Technol. Lett.* — 1998. — Vol. 17. — P. 276.
- [23] Incremental and differential maxwell garnett formalisms for bi-anisotropic composites / B. Michel, A. Lakhtakia, W.S. Weiglhofer, T.G. Mackay // *Composites Science and Technology.* — 2001. — Vol. 61. — P. 13.
- [24] Bourret, R. C. Stochastically perturbed fields, with applications to wave propagation in random media / R. C. Bourret // *Nuovo Cimento.* — 1962. — Vol. 26. — P. 1.
- [25] Ryzhov, Y. A. Spacial dispersion of inhomogeneous media / Yu. A. Ryzhov, V. V. Tamoikin, V. I. Tatarskii // *Zh. Exp. Teor. Phys.* — 1965. — Vol. 48. — P. 656. — [Sov. Phys. JETP **21** (1965) 433].
- [26] Ryzhov, Y. A. Radiation and propagation of electromagnetic waves in randomly inhomogeneous media / Yu. A. Ryzhov, Tamoikin // *Radiophys. Quantum Electron.* — 1970. — Vol. 13. — P. 273.
- [27] Tsang, L. Scattering of electromagnetic waves from random media with strong permittivity fluctuations / L. Tsang, J. A. Kong // *Radio Sci.* — 1981. — Vol. 16. — P. 303.

- [28] Mackay, T. Strong-property-fluctuation theory for homogenization of bianisotropic composites: Formulation / T. Mackay, A. Lakhtakia, W. Weiglhofer // Phys. Rev. E. — 2000. — Vol. 65. — P. 6052.
- [29] Mackay, T. G. Third-order implementation and convergence of the strong-property-fluctuation theory in electromagnetic homogenization / T. G. Mackay, A. Lakhtakia, W. S. Weiglhofer // Phys. Rev. E. — 2001. — Vol. 64. — P. 066616.
- [30] Sushko, M. Molecular light scattering of multiplicity 1.5 / M.Ya. Sushko // Zh. Eksp. Teor. Fiz. — 2004. — Vol. 126. — P. 1355. — [*JETP* **99**, 1183 (2004)].
- [31] Rikvold, P. D-dimensional interpenetrable-sphere models of random two-phase media: Microstructure and an application to chromatography / P. Rikvold, G. Stell // J. Coll. and Int. Sci. — 1985. — Vol. 108. — P. 158.

АНОТАЦІЯ

Семенов А.К. Електрофізичні властивості багатофазних дисперсних систем. – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика. Одеський національний університет імені І.І. Мечникова, МОН України, Одеса, 2019.

Практичне застосування композитних матеріалів стає все більш розповсюдженим через їх унікальні фізичні властивості, що не спостерігаються у природних речовин. Через це росте як потреба вирішення задач створення композитних матеріалів з бажаними та контрольованими електрофізичними властивостями (наприклад, тверді композитні та полімерні композитні електроліти), так і необхідність побудови й вдосконалення надійних теоретичних моделей для кількісного опису та аналізу їх характеристик.

Найбільш економічним та поширеним, але найменш теоретично дослідженим типом таких систем є тривимірні неупорядковані системи, утворені диспергуванням частинок наповнювача в несучу матрицю. Теоретичне вивчення електрофізичних властивостей таких систем є нетривіальною та далекою від свого точного розв'язання задачею, оскільки їх характеристики, як правило, є результатом дії різних структурних та фізико-хімічних факторів і механізмів, ключові з яких є: різного роду міжфазні ефекти

(нерегулярність форми диспергованих частинок; контактний опір; оксидні шари; формування високопровідних областей з підвищеною концентрацією дефектів чи іонів; аморфізація полімерної матриці тощо), зміни властивості самої матриці (внаслідок неконтрольованого легування, забруднення, змін внутрішньої структури тощо). Вже лише спроба включити їх в єдину модель системи є нетривіальною проблемою, яка після переходу до задачі гомогенізації додатково ускладнюється необхідністю врахування багаточастинкових поляризацій і кореляцій.

В даній дисертаційній роботі побудовано замкнений теоретичний підхід до опису ефективного квазістатичного електричного відгуку неупорядкованих систем частинок, з морфологією тверде ядро–проникна оболонка, диспергованих в однорідну матрицю. Оболонки є, у загальному випадку, електрично неоднорідними та підкоряються певним правилам перекриття. Властивості різних частин оболонок ефективно проявляються в різних концентраційних інтервалах, що дозволяє ефективно відобразити через них роль відповідних механізмів у формуванні ефективного відгуку системи. Електродинамічна гомогенізація моделі здійснена в рамках методу компактних груп неоднорідностей, що був узагальнений на випадок провідних систем, з використанням граничних умов для нормальних компонент електричного поля. Метод компактних груп дозволяє врахувати багаточастинкові поляризаційні та кореляційні процеси без їх деталізації, використовуючи розклад пропагатора поля на сингулярну та головну частини разом із властивостями симетрії досліджуваної моделі. Це дозволяє стверджувати, що отримані теоретичні співвідношення між ефективною статичною електричною провідністю системи та електричними і геометричними параметрами компонентів є строгими, що підтверджуються результатами їх порівняння з існуючими даними симуляцій тривимірних модельних систем сферичних частинок з проникною оболонкою методом Random Resistor Network (RRN). Також показано, що ці результати спроможні адекватно описувати широкі масиви експериментальних даних для ефективної квазістатичної провідності твердих композитних і полімерних композитних електролітів, ефективних електричної провідності та діелектричної проникності в околі порогу електричної перколяції в системі діелектрик–провідник із міжфазним шаром. Теорія також дозволяє показати непослідовність та обмеженість поширеної диференціальної схеми для обчислення ефективних електричних параметрів гетерогенних систем.

Розвинута теорія може розглядатися як новий гнучкий інструмент для

аналізу та діагностики як ефективних електрофізичних параметрів непорядкованих композитних систем, так і існуючих методів їх вивчення.

Ключові слова: метод компактних груп, модель ядро-оболонка, провідність, діелектрична проникність, дисперсна система, перколяція, композитні електроліти, наноккомпозити, диференціальний метод

АННОТАЦИЯ

Semenov A.K. Electrophysical properties of multiphase disperse systems. –

Qualification scientific paper, manuscript.

Candidate degree (PhD) thesis in Physics and Mathematics Sciences. Speciality 01.04.02 – theoretical physics. – Odesa I.I. Mechnikov National University, the MES of Ukraine, Odesa, 2019.

Manyphase disperse systems are macroscopic

Key words: compact group approach, core-shell model, conductivity, dielectric permittivity, disperse system, percolation, composite electrolytes, nanocomposites, differential scheme

ABSTRACT

Semenov A.K. Electrophysical properties of multiphase disperse systems. – Qualification scientific paper, manuscript.

Candidate degree (PhD) thesis in Physics and Mathematics Sciences. Speciality 01.04.02 – theoretical physics. Odesa I.I. Mechnikov National University, the MES of Ukraine, Odesa, 2019.

Practical application of composite materials becomes more widespread due to their unique physical properties, which natural substances can not demonstrate. As a result, both the need to solve the problems of creating composite materials with desired and controlled electrophysical properties (e.g. solid composite and polymer composite electrolytes), and the need to build and improve reliable theoretical models for quantitative description and analysis of their characteristics are increasing.

The most sparing and widespread, but the least theoretically researched type of such systems are three-dimensional disordered systems formed by dispersion of filler particles into a carrier matrix. Theoretical study of electrophysical properties of such systems is not a trivial and far from its accurate solution task, since their characteristics are usually the result of various structural and physico-chemical factors and mechanisms, the key of which are: various interphase effects (form irregularities of dispersed particles; contact resistance; oxide layers; formation of highly conductive regions with increased concentration of defects or ions; amorphization of a polymer matrix, etc.), and changes in properties of the matrix itself (as the result of uncontrolled doping, pollution, changes in internal structure, etc.). Just trying to integrate them into a single model of the system is a non-trivial problem, which after the transition to the homogenization problem is further complicated by the need to take into account multi-particle polarizations and correlations.

In this dissertation, a closed theoretical approach to the description of the effective quasi-static electrical response of disordered particle systems is constructed, with a solid core morphology - a permeable shell dispersed in a homogeneous matrix. The shells are generally electrically heterogeneous and obey certain overlapping rules. The properties of different parts of the shells are effectively manifested at different concentration intervals, which allows them to effectively reflect through them the role of appropriate mechanisms in the formation of effective system response. The electrodynamic homogenization of the model was carried out in the framework of the compact group of inhomogeneities, which was generalized in the case of conducting systems, using boundary conditions for normal components of the electric field. The compact group method allows one to take into account multiparticulate polarization and correlation processes without detailing them, using the field propagator arrangement on the singular and head parts together with the symmetry properties of the model under study. This suggests that the obtained theoretical relationships between the effective static electrical conductivity of the system and the electrical and geometric parameters of the components are rigorous, as evidenced by the results of their comparison with existing simulation data of three-dimensional spherical particle model systems with a Random RR Network Resistor Network. It is also shown that these results are capable of adequately describing the broad arrays of experimental data for the effective quasi-static conductivity of solid composite and polymer composite electrolytes, effective electrical conductivity, and dielectric constant around the percolation threshold

in an interphase-conductor dielectric conductor system. The theory also allows us to show the inconsistency and limitations of a widespread differential scheme to calculate the effective electrical parameters of heterogeneous systems.

The developed theory can be considered as a new flexible tool for analysis and diagnostics of both effective electrophysical parameters of disordered composite systems and existing methods of their study.

Key words: compact group approach, core-shell model, conductivity, dielectric permittivity, disperse system, percolation, composite electrolytes, nanocomposites, differential scheme

Підп. до друку ???.?.?.?.?. Формат $60 \times 84/16$.
Гарн. Таймс. Умов.-друк. арк. ?. Тираж 100 прим.
Зам. № ???.

Видавець і виготовлювач:
**Одеський національний університет
імені І. І. Мечникова**

Україна, 65082, м. Одеса, вул. Єлісаветинська, 12
Тел.: (048) 723 28 39. E-mail: druk@onu.edu.ua
Свідоцтво ДК № 4215 від 22.11.2011 р.