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
Кошманенко Володимир Дмитрович,
Інститут математики НАН України, провідний
науковий співробітник відділу математичної
фізики;

кандидат фізико-математичних наук,
старший науковий співробітник
Назаренко Микола Олексійович,
доцент кафедри математичного аналізу,
Київський національний університет імені Тараса
Шевченка.

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/thesises.

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 нагальними практичними задачами створення та застосування нових композитних матеріалів з бажаними та контрольованими електрофізичними властивостями (наприклад, тверді композитні та полімерні композитні електроліти), 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 невпорядкованих 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 невпорядкованих систем частинок з морфологією тверде ядро-проникна оболонка є багаточастинковою та дозволяє враховувати вплив міжфазних та матричних ефектів через моделювання одночастинкового 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 та спроможністю 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.

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 невпорядкованих дисперсних систем частинок з морфологією тверде ядро-проникна оболонка. У зв'язку з цим були поставлені **задачі**:

1. Розробити теорію електродинамічної гомогенізації невпорядкованих систем провідних частинок у рамках методу компактних груп [1–4], для чого узагальнити та замкнути МКГ на випадок провідних частинок.
2. Проаналізувати в рамках цієї теорії ефективні електричні властивості невпорядкованих систем частинок з морфологією тверде–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. Модельна макроскопічно однорідна та ізотропна система частинок з морфологією тверде ядро–проникна оболонка.

Предмет дослідження. Квазістатична комплексна діелектрична проникність систем частинок з морфологією тверде ядро–проникна оболонка.

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 внутрішньо 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 невпорядкованих 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 диспесних систем.

Практичне значення отриманих результатів. Розвинута теорія може розглядатися як новий гнучкий інструмент для аналізу та діагностики як ефективних електрофізичних параметрів невпорядкованих 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 висказано 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 Максвела-Гарнетта [11] та ефективного середовища Бруггемана [12], що досі часто використовуються та грають роль бази для побудови нових теорії. 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 диференціальній [12, 20, 21] та поступовий (incremental) [22, 23] підходи, які є по суті розвиненнями ідеї Максвела-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

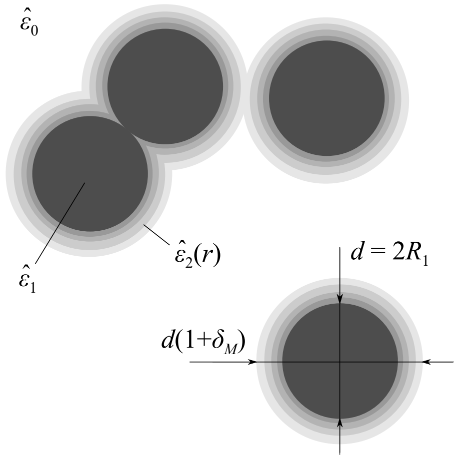

Рис. 1: Схематичне зображення моделі тверду ядро-проникна оболонка. Розглядається макроскопічно однорідна та ізотропна система сферичних частинок, що знаходяться в однорідній матриці з проникністю $\hat{\varepsilon}_0$ (біла область). Кожна частинка складається з твердого (непроникного) ядра радіусом $R_1 = d/2$ та проникністю $\hat{\varepsilon}_1$ (чорні області), покритого електрично однорідною концентричною проникною оболонкою товщиною $R_2 = R_1\delta_M$ та проникністю $\hat{\varepsilon}_2 = \hat{\varepsilon}_2(\mathbf{r})$ (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:

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

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:

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

де кутові дужки відповідають за статистичне усереднення. Показано, що ці співвідношення легко знаходяться з макроскопічних рівнянь Максвела 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 $\hat{\varepsilon}_{\text{f}}$. В рамках МКГ вважається, що у довгохвильовому наближенні відгук $\mathcal{S}$ еквівалентний відгуку $\mathcal{D}$ [4, 7], тобто $\hat{\varepsilon}_{\text{f}}$ 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:

$$\hat{\varepsilon}(\mathbf{r}) = \hat{\varepsilon}_{\text{f}} + \delta\hat{\varepsilon}(\mathbf{r}),$$

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 електромагнитної хвилі в $\mathcal{S}$:

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

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

де

$$\hat{Q}(\mathbf{r}) = -\frac{\delta\hat{\varepsilon}(\mathbf{r})}{3\varepsilon_{\mathrm{f}}+\delta\hat{\varepsilon}(\mathbf{r})}. \tag{5}$$

Показано, що цей ряд є асимптотичним.

Нарешті, підставляючи вирази для середніх полів (3), (4) до (2) отримаємо наступне рівняння для $\varepsilon_{\mathrm{eff}}$, що залежить лише від $\hat{\varepsilon}_{\mathrm{f}}$ та $\delta\hat{\varepsilon}$:

$$\langle\hat{Q}\rangle = \frac{\hat{\varepsilon}_{\mathrm{f}}-\hat{\varepsilon}_{\mathrm{eff}}}{2\hat{\varepsilon}_{\mathrm{f}}+\hat{\varepsilon}_{\mathrm{eff}}}. \tag{6}$$

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

$$\hat{\varepsilon}_{\mathrm{f}}\mathbf{E}_0 = \hat{\varepsilon}_{\mathrm{eff}}\langle\mathbf{E}(\mathbf{r})\rangle. \tag{7}$$

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

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

Рівняння (8) є точним у наближенні $\omega \to 0$ 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 $l = \min\limits_{1\leqslant a\leqslant N}|\mathbf{r}-\mathbf{r}_a|$ від даної точки $\mathbf{r}$ до найближчої частинки, та може бути записана в термінах характеристичних функцій відповідних областей:

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

де $\Delta\hat{\varepsilon}_j = [\hat{\varepsilon}_j - \hat{\varepsilon}_{\rm f}]$ $(j = \{0,1,2\})$; $\tilde{\chi}_1$ 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:

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

де

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

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

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

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:

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

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

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

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 $M \to \infty$, $|\delta_{2,m} - \delta_{2,m-1}| \to 0$, ($\delta_M$ = 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:

$$\langle (\delta\hat{\varepsilon})^s \rangle = (1 - \phi(c,\delta))(\Delta\hat{\varepsilon}_0)^s + c(\Delta\hat{\varepsilon}_1)^s + \int\limits_0^{\delta_m} \frac{\partial\phi(c,u)}{\partial u}(\Delta\hat{\varepsilon}_2(u))^s\, du, \qquad (15)$$

де $\Delta\hat{\varepsilon}_2(u)$ є функція $\hat{\varepsilon}_2(r) - \hat{\varepsilon}_{\mathrm{f}}$, що виражена в термінах змінної $u = (r - R_1)/R_1$, а δ_M відповідає зовнішній границі оболонки. Для однорідної оболонки ($\Delta\hat{\varepsilon}_2(u)$ = 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 $\hat{\varepsilon}_{\mathrm{eff}}$ в рамках моделей з однорідною та кусково-гладкою радіально-симетричною неоднорідною оболонками, відповідно:

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

$$(1-\phi)\frac{\hat{\varepsilon}_0 - \hat{\varepsilon}_{\mathrm{eff}}}{2\hat{\varepsilon}_{\mathrm{eff}} + \hat{\varepsilon}_0} + c\frac{\hat{\varepsilon}_1 - \hat{\varepsilon}_{\mathrm{eff}}}{2\hat{\varepsilon}_{\mathrm{eff}} + \hat{\varepsilon}_1} + \int\limits_0^{\delta_M} \frac{\partial\phi(c,u)}{\partial u}\frac{\hat{\varepsilon}_2(u) - \hat{\varepsilon}_{\mathrm{eff}}}{2\hat{\varepsilon}_{\mathrm{eff}} + \hat{\varepsilon}_2(u)} du = 0. \qquad (17)$$

Зазначимо, що форма частинок грала 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:

$$(1-\phi)\frac{\sigma_0 - \sigma_{\mathrm{eff}}}{2\sigma_{\mathrm{eff}} + \sigma_0} + c\frac{\sigma_1 - \sigma_{\mathrm{eff}}}{2\sigma_{\mathrm{eff}} + \sigma_1} + (\phi - c)\frac{\sigma_2 - \sigma_{\mathrm{eff}}}{2\sigma_{\mathrm{eff}} + \sigma_2} = 0, \qquad (18а)$$

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

$$(1-\phi)\frac{\sigma_0-\sigma_{\text{eff}}}{2\sigma_{\text{eff}}+\sigma_0}+c\frac{\sigma_1-\sigma_{\text{eff}}}{2\sigma_{\text{eff}}+\sigma_1}+\int\limits_0^{\delta_M}\frac{\partial\phi(c,u)}{\partial u}\frac{\sigma_2(u)-\sigma_{\text{eff}}}{2\sigma_{\text{eff}}+\sigma_2(u)}du=0, \tag{19а}$$

$$(1-\phi)\frac{\varepsilon_0\sigma_{\text{eff}}-\varepsilon_{\text{eff}}\sigma_0}{(2\sigma_{\text{eff}}+\sigma_0)^2}+c\frac{\varepsilon_1\sigma_{\text{eff}}-\varepsilon_{\text{eff}}\sigma_1}{(2\sigma_{\text{eff}}+\sigma_1)^2}+\int\limits_0^{\delta_M}\frac{\partial\phi(c,u)}{\partial u}\frac{\varepsilon_2(u)\sigma_{\text{eff}}-\varepsilon_{\text{eff}}\sigma_2(u)}{(2\sigma_{\text{eff}}+\sigma_2(u))^2}du=0. \tag{19б}$$

за умови

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

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

В **розділі 3** розроблена модель застосовується та аналізується для невпорядкованих 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 ($\sigma_2(u) = const$) у наближенні $\sigma_1 \to 0$.

ВИСНОВКИ

У дисертаційний 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 невпорядкованих систем частинок з морфологією тверде ядро–проникна оболонка, 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 диспесних 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 дісперсноподібних 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 metalic 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] Chiteme, C. ac and dc conductivity, magnetoresistance, and scaling in cellular percolation systems / C. Chiteme, 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. Spacal dispersion of inhomogeneous media / Yu. A. Ryzhov, V. V. Tamoĭkin, V. I. Tatarskiĭ // 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.

АННОТАЦІЯ

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.

Теоретичне вивчення електрофізичних властивостей статистично однорідних та ізотропних багатофазних дисперсних систем є нетривіальною та далекою від свого точного розв'язання задачею, оскільки характеристики таких систем, як правило, є результатом дії різних структурних та фізико-хімічних факторів і механізмів. Типовими прикладами останніх є: нерегулярність форми диспергованих частинок та їх дисперсія за розмірами; утворення областей просторового заряду навколо частинок (області високої концентрації дислокацій в твердих композитних електролітах; області аморфного полімеру в полімерних композитних електролітах; подвійний електричний шар в колоїдах); формування міжфазних шарів (оксидні оболонки на поверхні металевих частинок); неконтрольоване легування матриці 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.

Існуючи методи вирішення таких задач можна умовно розділити на три класи: 1) числові симуляції; 2) математичні підходи; 3) методи, що базуються на класичних фізичних підходах. Числові методи дозволяють дуже

В даній роботі представлено замкнений теоретичний підхід [1] до опису квазістатичних коефіцієнтів провідності , діелектричної проникності та діелектричних втрат дисперсних систем із твердою матрицею. Мезоструктура системи моделюється в термінах моделі частинок з морфологією тверде ядро – проникна оболонка, диспергованих в однорідну матрицю. Оболонки є, у загальному випадку, електрично неоднорідними та підкоряються певним правилам домінування, що визначають локальні значення електричних параметрів у системі після перекривання оболонок з ядрами та матрицею. Властивості різних частин оболонок ефективно проявляються в різних концентраційних інтервалах, що дозволяє ефективно відобразити через них роль відповідних механізмів у формуванні перелічених коефіцієнтів на цих інтервалах. Електродинамічна гомогенізація моделі здійснюється в рамках методу компактних груп неоднорідностей (див., наприклад, [2]) без модельної деталізації поляризаційних і кореляційних процесів.

We present results [1-3], derived within the compact group approach (CGA) which effectively incorporates many-particle polarization and correlation effects, for the effective quasistatic dielectric constant/electrical conductivity of model dispersions of hard-core–penetrable-shell particles embedded in a continuous matrix. Both the cores and shells are characterized by radially symmetrical distributions of their electric parameters. The local properties of overlapping constituents are governed by the distance from a given point to the nearest particle.

Let x be an electric parameter of a system $\mathcal{D}$ and x_{eff} its effective value. The key points behind [1-3] are as follows:

(1) $\mathcal{D}$ is electrically equivalent to an auxiliary system $\mathcal{S}$ formed by embedding $\mathcal{D}$'s constituents into a uniform host with $x = x_{\text{f}}$. $\mathcal{S}$ is a set of macroscopic regions (compact groups) large enough to have the properties of the entire $\mathcal{S}$, but point-like relative to the probing field;

(2) x_{eff} is found as the proportionality coefficient in the relevant constitutive relation between the averaged induction/current and field. These averages are expressed through the statistical moments $\langle (x - x_{\text{f}})^n \rangle$;

(3) Combining the CGA with the Hashin-Shtrikman variational theorem or the boundary conditions for electric fields, x_{f} is proven to equal x_{eff}. This result makes the homogenization procedure internally closed;

(4) Finally, x_{eff}, as a functional of $\mathcal{D}$'s constituents? conductivities and volume concentrations, is shown to obey an integral relation, rigorous in the quasistatic limit.

We demonstrate the validity of our results by: (a) contrasting them with analytical and numerical results for dispersions of graded dielectric spheres with power-law permittivity profiles; (b) mapping them onto extensive random resistor network simulation data for composite polymer electrolytes; and (c) applying them to real composite electrolytes.

Ефективність підходу демонструється порівнянням його результатів з даними симуляцій для композитних полімерних електролітів та експериментальними даними для , , композитів, утворених частинками терміграфіту, CuO, Fe2O3, Fe та Al в парафіні.

які перспективи

We present the basic ideas and further developments of a new many-particle homogenization theory [1] for the electrical parameters (quasistatic conductivity, dielectric permittivity, and dielectric loss coefficient) of statistically homogeneous and isotropic particulate systems. The system's microstructure is formulated in terms of the model of hard-core–penetrable-shell spheres. The cores are associated with particles. The shells account for different types of interfacial and matrix effects and are in general inhomogeneous. The desired parameters are calculated using the compact groups approach (CGA) [2] and internally-closed homogenization procedure. The former allows one to efficiently estimate many-particle polarization and correlation contributions without explicit detailing of the processes involved. The latter follows immediately from the requirement that the CGA and the boundary conditions for the complex electric field be consistent. The theory has been used to process experimental data [3] for paraffin-based dispersed systems with embedded semiconductor (Fe2O3, CuO) or conductor (thermographite, Fe, Al) filler particles. It proves to describe the experiment surprisingly well in the entire range of filler particle concentrations. The physical nature of the effects incorporated by the shells is discussed. These may include: irregularities of particles' shapes; contact resistance; formation and destruction of oxide layers; impurification of the host in the course of sample preparation; and others.

It has been shown numerically [1] that the effective electrical conductivity of composite polymer electrolytes can be adequately described by considering such systems as dispersions of hard-core–penetrable-shell particles. The shells are introduced to account for the formation of highly conductive amorphous (with a decreased degree of crystallinity) regions around the filler particles. We use the compact-group approach [2,3] to give a self-consistent analytical solution to this model in the case where (a) the shells are inhomogeneous and characterized by an isotropic conductivity profile, and (b) the local value of the conductivity in the system is determined by the shortest distance from the point of interest to the nearest particle. The effective conductivity is expressed in terms of the constituents' conductivities and volume concentrations; the latter are determined by the statistical microstructure of the system. Our theory effectively incorporates many-particle effects and is expected to be rigorous in the quasistatic limit. Using the well-tested statistical physics results for the shell volume concentration, we support this conclusion by mapping our solution on 3D random resistor network simulations [1]. Finally, we apply our theory to a number of real PEO- and OMPEO-based polymer electrolytes to describe the nontrivial behavior of their effective conductivities as functions of the filler concentration and temperature.

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

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.

Manyphase disperse systems are macroscopic

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.