АНОТАЦІЯ
ПРОГРАМИ НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
«МІКРОСТРУКТУРА І МАКРОСКОПІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ НЕВПОРЯДКОВАНИХ ГЕТЕРОГЕННИХ СИСТЕМ І КОМПОЗИТНИХ МАТЕРІАЛІВ»

Рівень вищої освіти: третій (освітньо-науковий) рівень – доктор філософії
Галузь знань 10 – природничі науки
Спеціальність: 104 - фізика та астрономія
Освітня програма: фізика та астрономія
Вид дисципліни: вибіркова
Рік підготовки: 2-ий
Кількість кредитів: 3
Об'єм (у годинах): 90 (лекції – 16, практичні заняття – 14, самостійна робота – 60)
Підсумковий контроль: залік
Факультет: математики, фізики, та інформаційних технологій

Метою викладання навчальної дисципліни є надати майбутнім докторам філософії з фізики та астрономії необхідний мінімум попередніх відомостей про способи моделювання мікроструктури мезоскопічно невпорядкованих систем різної фізичної природи з урахуванням фізико-хімічних процесів у них, методи обчислення ефективних макроскопічних параметрів цих систем та перспективні напрями їх застосування для аналізу та діагностики електрофізичних й оптичних властивостей композитних матеріалів, формування у слухачів відповідної системи компетентностей, включаючи інтегральну, загальні та фахові.

Тематичний план навчальної дисципліни складається з трьох розділів, де у першому розглядаються дві базові теми, в другому і третьому – по три.

У першому розділі «Характеристики мікроструктури гетерогенних систем» вивчаються статистичні методи опису мікроструктури макроскопічних середовищ різної фізичної природи. Він починається з розгляду молекулярних функцій розподілу для груп частинок конденсованого середовища, правил знаходження статистичних середніх через ці функції, системи інтегро-диференціальних рівнянь Боголюбова – Борна – Гріна – Кірквуда – Івона (ББГКІ) та методів її розв'язання, зокрема,

через зведення до замкнутого рівняння для парної кореляційної функції в рамках суперпозиційного наближення. Також окреслюється спосіб побудови інтегральних рівнянь для цієї функції методом функціонального диференціювання, в рамках якого виводиться рівняння Орнштейна – Церніке для парної і прямої кореляційних функцій, будується замкнене інтегральне рівняння для радіальної кореляційної функції в наближенні Перкуса – Йєвіка та описується його точний розв'язок для системи твердих куль. Коротко характеризуються методи молекулярної динаміки й Монте-Карло. Другу частину розділу присвячено опису статистичних характеристик гетерогенних середовищ в термінах *х*арактеристичних функції (дескрипторів) компонентів і статистичних середніх від їх добутків – мікроструктурних кореляційних функцій, що включають *n*-точкові ймовірносні функції фаз, мікроструктурні кореляційні функції поверхонь, лінійних шляхів, розподіли за розмірами відрізків, пор тощо.

Другий розділ «Методи обчислення макроскопічних параметрів невпорядкованих гетерогенних систем» починається з огляду наближення ефективного середовища, постановки задачі гомогенізації, класичних підходів Максвелла-Гарнетта і Бруггемана до її розв'язання, їх модифікацій та застосувань до модельних систем частинок з морфологією ядро – (багатошарова) оболонка, класичних та «поліпшених» меж на значення ефективних характеристик. Далі розглядаються різні типи перколяційних задач – перколяція зв'язків, перколяція вузлів, неперервна перколяція, вводяться поняття перколяційного порогу та критичних індексів, обговорюється проблема їх універсальності. Наводяться результати, здобуті для моделей взаємопроникних куль, Перкуса – Йєвіка, Бакстера для липких куль, числових обчислень для систем з різною розмірністю, ефективність двопоказникового феноменологічного перколяційного рівняння. Завершується розділ аналізом теорії SPFT, у рамках якої гетерогенна система розглядається як середовище із сильно розвинутими локальними флуктуаціями властивостей. Наводяться технічні подробиці побудови

рівняння Дайсона для середнього поля, результати його аналізу в рамках білокального наближення.

У третьому розділі «Метод компактних груп неоднорідностей (МКГ)» викладаються основи цього методу та його практичні застосування до задач електродинамічної гомогенізації і розсіяння світла. Спершу вводиться поняття компактної групи, розглядаються особливості моделювання гетерогенних систем як сукупностей компактних груп неоднорідностей та вводяться певні правила домінування одних областей над іншими в моделях з проникними частинками. Далі розглядається загальна задача про поширення електромагнітних хвиль у модельній гетерогенній системі, аналізується структура сингулярностей пропагатора електромагнітного поля, на основі цього аналізу знаходяться середні значення комплексного поля та комплексного електричного струму/діелектричної індукції. Наводяться аргументи, що дозволяють замкнути процедуру гомогенізації.

У другій частині розділу робиться огляд основних результатів, що були отримані методом МКГ для різних модельних систем та включають обчислення таких ефективних величин: діелектричної проникності/електричної провідності сумішей анізотропних та/чи неоднорідних частинок; провідності дисперсних систем частинок з морфологією тверде ядро – проникна оболонка; діелектричної проникності/електричної провідності полікристалів і пористих середовищ. Наводяться результати порівняння теоретичних результатів з даними числових симуляцій.

Завершується розділ прикладами застосування перелічених результатів МКГ до аналізу електрофізичних параметрів реальних систем: електричної провідності твердих композитних і полімерних композитних електролітів; електричної перколяції в системах типу ізолятор – провідник; електричної провідності суспензій наночастинок. Дається інтерпретація результатів такого застосування. Обговорюється розширення МКГ на задачі розсіяння світла в сильно неоднорідних середовищах (флуктуаційних і суспензіях).