

Одеський національний університет імені І.І.Мечникова
Кафедра теоретичної фізики та астрономії



“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Проректор з науково-педагогічної роботи
має О.В.Запорожченко
_____ 2020 р.

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

МІКРОСТРУКТУРА І МАКРОСКОПІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ НЕВПОРЯДКОВАНИХ ГЕТЕРОГЕННИХ СИСТЕМ І КОМПОЗИТНИХ МАТЕРІАЛІВ

(назва навчальної дисципліни)

Рівень вищої освіти третій (освітньо-науковий) рівень – доктор філософії

Галузь знань 10 – природничі науки

(шифр і назва)

Спеціальність 104 - фізика та астрономія

(шифр і назва)

Освітня програма фізика та астрономія

Вид дисципліни вибіркова

Факультет математики, фізики, та інформаційних технологій

(назва факультету)

2020 / 2021 навчальний рік

Програму рекомендовано до затвердження Вченою Радою факультету математики, фізики та інформаційних технологій «3» вересня 2020 року, Протокол №1

Розробники програми:

кандидат фізико-математичних наук, доцент Сушко М.Я.

Навчальна програма затверджена на засіданні кафедри теоретичної фізики та астрономії Протокол № 1 від “31” серпня 2020 року

Завідувач кафедри

(підпис)

Адамян В. М.

(прізвище та ініціали)

Програму погоджено навчально-методичною комісією (НМК) ФМФІТ:

Протокол № 1 від “ 3 ” вересня _____ 2020 року

Голова НМК

(підпис)

Ніцук Ю.А.

(прізвище та ініціали)

ВСТУП

Програма навчальної дисципліни «Мікроструктура і макроскопічні властивості неупорядкованих гетерогенних систем і композитних матеріалів» складена відповідно до освітньо-наукової програми підготовки третього (освітньо-наукового) рівня вищої освіти (доктор філософії). Галузь знань: 10 – «Природничі науки». Спеціальність: 104 – «Фізика та астрономія».

Освітньо-наукова програма: « Фізика та астрономія».

1. Опис навчальної дисципліни

1.1. Метою викладання навчальної дисципліни є:

надати майбутнім докторам філософії з фізики та астрономії необхідний мінімум попередніх відомостей про способи моделювання мікроструктури мезоскопічно неупорядкованих 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.

Засвоєння фундаментальних фізичних основ моделювання систем зі складною мікроструктурою, ознайомлення із сучасними теоретичними методами дослідження цих моделей та оволодіння навичками їх практичного застосування, які всі здійснюються в межах дисципліни «Мікроструктура і макроскопічні властивості неупорядкованих гетерогенних систем і композитних матеріалів», є умовами для подальшого засвоєння дисциплін за вибором з циклу професійної підготовки та успішного виконання теоретичної наукової роботи.

1.2. Основними завданнями вивчення дисципліни є:

засвоєння аспірантами базових елементів теоретичного опису мікроструктури неупорядкованих гетерогенних систем за допомогою кореляційних функцій, основних методів теорії гомогенізації, многократного розсіяння та узагальнених функцій для знаходження ефективних характеристик таких систем.

Інтегральна компетентність (ІК) – здатність розв'язувати комплексні проблеми в галузі професійної та/або дослідницько інноваційної діяльності, що передбачає глибоке переосмислення наявних та створення нових цілісних знань та/або професійної практики.

Загальні компетентності:

- Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу (ЗК1),
- Здатність управління інформацією (пошук, оброблення та аналіз інформації з різних джерел) (ЗК2),
- Здатність проведення самостійних досліджень (ЗК 9),

Фахові компетентності:

- Здатність застосовувати сучасні експериментальні методи дослідження та діагностики нанорозмірних систем, володіння принципами структурної будови нанорозмірних систем (ФК3),
- Здатність застосовувати знання статистичної теорії багаточастинкових систем та макроскопічної гомогенізації для дослідження ефективних властивостей макроскопічних систем (ФК7),
- Усвідомлення мети й завдань сучасної фізики та астрономії, здатність вирішувати проблеми й задачі інноваційного характеру в одній із галузей фізики або астрономії (ФК9).

1.3. Кількість кредитів 3

1.4. Загальна кількість годин 90

1.5. Характеристика навчальної дисципліни
Нормативна/ <u>за вибором</u>
Денна форма навчання
Рік підготовки
2-й
Лекції
16 год.
Практичні/семінарські
14 год.
Лабораторні
-
Самостійна робота
60 год.
У тому числі індивідуальні завдання
-

1.6. Заплановані результати навчання:

Згідно з освітньо-науковою програмою «Фізика та астрономія» спеціальності 104 – «Фізика та астрономія» аспіранти можуть досягти наступних результатів навчання:
– Вміти розв'язувати задачі з фізики конденсованого середовища різними методами.

2. Тематичний план навчальної дисципліни

2 рік

Розділ 1. Характеристики мікроструктури гетерогенних систем

Тема 1. Кореляційні функції груп молекул. Означення, загальні властивості. Вирази для статистичних середніх через кореляційні функції. Рівняння Боголюбова – Борна – Гріна – Кірквуда – Івона (ББГКІ). Радіальна функція розподілу. Функціональні похідні від конфігураційного інтеграла. Пряма кореляційна функція. Рівняння Орнштейна – Церніке. Рівняння для радіальної кореляційної функції в наближенні Перкуса – Йєвіка, його розв'язок для твердих куль. Суперпозиційне наближення. Методи молекулярної динаміки й Монте-Карло.

Тема 2. Мікроструктурні кореляційні функції. Характеристичні функції (дескриптори) компонентів, середні їх добутків, n -точкові ймовірносні функції фаз. Статистична однорідність, ергодична гіпотеза. Асимптотичні властивості ймовірносних функцій. Властивості одно- та двоточкових ймовірносних функцій. Мікроструктурні кореляційні функції поверхонь, лінійних шляхів, розподіли за розмірами відрізків і пор. Функції найближчих сусідів для систем сферичних частинок.

Розділ 2. Методи обчислення макроскопічних параметрів неупорядкованих гетерогенних систем

Тема 3. Наближення ефективного середовища. Постановка задачі гомогенізації. Класичні підходи Максвелла-Гарнетта, Бруггемана, їх модифікації. Класичні та «поліпшені» межі на значення ефективних характеристик. Модельні системи частинок з морфологією ядро – оболонка. Строго розв'язувані моделі для ефективних характеристик спеціально побудованих систем багатощарових частинок.

Тема 4. Теорія перколяції. Типи перколяційних задач: перколяція зв'язків, перколяція вузлів, неперервна перколяція. Перколяційний поріг, критичні індекси, проблема їх універсальності. Перколяція в моделях взаємопроникних куль (строгі результати),

Перкуса – Йєвіка та Бакстера для липких куль. Результати числових обчислень для систем з різною розмірністю. Двопоказникове феноменологічне перколяційне рівняння.

Тема 5. Теорія SPFT Аналіз гетерогенної системи як середовища із сильно розвинутими локальними флуктуаціями властивостей. Усунення сингулярностей і рівняння Дайсона для середнього поля. Білокальне наближення, вибір парної кореляційної функції. Основні результати теорії SPFT.

Розділ 3. Метод компактних груп неоднорідностей (МКГ)

Тема 6. Основи методу МКГ. Поняття компактної групи. Моделювання гетерогенної системи як сукупності компактних груп неоднорідностей. Правила домінування. Задача про поширення електромагнітних хвиль у модельній гетерогенній системі. Структура сингулярностей пропагатора електромагнітного поля. Середні значення комплексного поля та комплексного електричного струму/діелектричної індукції. Замикання процедури гомогенізації.

Тема 7. Основні результати МКГ. Діелектрична проникність/електрична провідність сумішей анізотропних та/чи неоднорідних частинок. Провідність дисперсних систем частинок з морфологією тверде ядро – проникна оболонка. Діелектрична проникність/електрична провідність полікристалів і пористих середовищ. Порівняння результатів з даними числових симуляцій.

Тема 8. Застосування результатів МКГ до аналізу електрофізичних параметрів реальних систем. Електрична провідність твердих композитних та полімерних композитних електродитів. Електрична перколяція в системах типу ізолятор – провідник. Електрична провідність суспензій наночастинок. Інтерпретація результатів. Розширення МКГ на задачі розсіяння світла в сильно неоднорідних середовищах.

3. Структура навчальної дисципліни

Тема	Кількість годин					
	Усього	Лек.	Пр.	Лаб.	Інд.	СР
1	2	3	4	5	6	7
Розділ 1. Моделювання мікроструктури гетерогенних систем						
Тема 1. Кореляційні функції груп молекул.	32	2	2			28
Тема 2. Мікроструктурні кореляційні функції.	10	2	2			6
Розділ 2. Методи обчислення макроскопічних параметрів неупорядкованих гетерогенних систем						
Тема 3. Наближення ефективного середовища.	12	2	2			8
Тема 4. Теорія перколяції.	9	2				7
Тема 5. Теорія SPFT.	10	2	2			6
Розділ 3. Метод компактних груп неоднорідностей (МКГ)						
Тема 6. Основні положення МКГ.	4	2	2			

Тема 7. Основні результати МКГ.	4	2	2			
Тема 8. Застосування результатів МКГ до аналізу реальних систем.	9	2	2			5
Усього годин	90	16	14			60

4. Теми практичних занять

№	Назва теми	Кількість годин
1	Рівняння Перкуса – Йєвіка. Строгий розв'язок для системи твердих куль. Ізотермічна стисливість і тиск системи.	2
2	Модель неупорядкованої системи частинок з морфологією тверде ядро – проникна оболонка. Наближення масштабованих частинок. Пористість системи.	2
3	Наближення Максвелла – Гарнетта та Бруггемана для двофазних системи. Їх узагальнення на системи шаруватих частинок.	2
4	Середнє електричне поле в середовищі із сильно розвинутими локальними флуктуаціями діелектричної проникності. Структура сингулярностей електромагнітного тензора Гріна та їх усунення в рамках SPFT.	2
5	Аналіз задачі про поширення електромагнітних хвиль у рамках МКГ. Задача гомогенізації і її замикання. Загальні співвідношення для ефективних електричної провідності та діелектричної проникності.	2
6	Ефективні електричні параметри неупорядкованих систем частинок з морфологією тверде ядро – неоднорідна проникна оболонка в рамках МКГ.	2
7	Особливості електричної перколяції в системах частинок з морфологією тверде ядро – проникна оболонка.	2
	РАЗОМ	14

5. Завдання для самостійної роботи

№	Назва теми	Кількість годин
1	Рівняння Боголюбова – Борна – Гріна – Кірквуда – Івона (ББГКІ). Вимоги до кореляційних функцій: симетрія щодо аргументів, умови нормування, асимптотична поведінка.	6
2	Розв'язання рівнянь ББГКІ для газу з короткосяжною взаємодією	8
3	Функціональне диференціювання. Рівняння Орнштейна –Церніке. Рівняння Перкуса – Йєвіка. Гіперланцюгове рівняння	8
4	Суперпозиційне наближення Кірквуда. Рівняння Боголюбова, його розв'язок.	6
5	Результати обчислень мікροструктурних кореляційних функцій для систем твердих та проникних куль.	6
6	Варіаційні теореми макроскопічної електродинаміки та межі Хашина – Штрікмана. «Покращені» межі на значення ефективних параметрів.	4

7	Строго розв'язувані моделі для ефективних характеристик спеціально побудованих систем багаточастотних частин.	4
8	Перколяція в моделях взаємопроникних куль (строгі результати), Перкуса – Йєвіка та Бакстера для липких куль.	4
9	Результати числового аналізу перколяції в систем з різною розмірністю.	3
10	Поширення хвиль у флуктуаційно неоднорідному середовищі. Рівняння Дайсона.	6
11	Електричні властивості твердих композитних та полімерних композитних електролітів: фізико-хімічні механізми та їх моделювання.	5
	РАЗОМ	60

6. Індивідуальні завдання

Не передбачено навчальним і робочим планом

7. Методи навчання

При викладанні дисципліни використовуються наступні форми навчального заняття: лекції, практичні заняття, самостійна робота. Під час проведення лекцій застосовуються пояснювально-ілюстративний, евристичний, репродуктивний методи навчання та метод проблемного викладення. Під час практичних занять використовуються репродуктивний та частково-пошуковий методи навчання. Під час самостійної роботи використовується дослідницький метод навчання.

8. Методи контролю

Формами контролю навчальних здобутків аспірантів є поточний контроль, що включає аудиторне опитування, перевірку конспекту лекцій; оцінку активності роботи на заняттях, оцінку самостійної роботи, та підсумковий семестровий контроль (залік).

Підсумкові бали для оцінки знань студентів за тему розраховуються таким чином:

№	Вид роботи	Форма контролю	Максимальне число балів
1.	Відвідування занять	Конспект	1
2	Аудиторна активність студента		1
3	Виконання домашніх завдань, самостійної роботи	Письмові розв'язки, усні відповіді	3
4	Сума		5

10. Схема нарахування балів

Поточний контроль аудиторної і самостійної робіт			Підсумкова контрольна робота (залік)	Підсумковий бал
Розділ 1	Розділ 2	Розділ 3		
10	15	15	60	100

9. Критерії оцінювання навчальних досягнень

Підсумковий семестровий контроль (залік) проводиться в письмовій формі. Екзаменаційний білет містить два теоретичних питання, кожне з яких оцінюється окремо за 30 бальною шкалою. Критерії оцінювання теоретичного питання:

- повна розгорнута відповідь – 30 балів;
- повна, але не розгорнута відповідь – 25 балів;
- повна, але не розгорнута відповідь, яка містить незначну помилку чи суперечність – 23 бали. За кожну наступну незначну помилку чи суперечність знімається 1 бал;
- неповна відповідь, яка не містить критичних помилок чи суперечностей – 20 балів. За кожну наступну незначну помилку чи суперечність знімається 1 бал;
- відповідь, що містить критичну помилку чи неточність, або відсутність відповіді оцінюється в 0 балів.

Кількість балів, що аспірант отримує на заліку, є сумою балів, отриманих за кожне завдання залікового білету.

Підсумкова оцінка виставляється за сумою балів поточного та підсумкового контролів за шкалою, що наведена нижче.

Шкала оцінювання

Сума балів за всі види навчальної діяльності протягом семестру	Оцінка		
	За шкалою ЄКТС	Для чотирирівневої шкали оцінювання	для дворівневої шкали оцінювання
90 – 100	A	Відмінно	зараховано
85-89	B	Добре	
75-84	C		
70-74	D		
60-69	E	Задовільно	не зараховано
35-59	FX	Незадовільно	
1-34	F		

10. Рекомендована література Перелік навчально-методичної літератури

1. Основна література

1. Боголюбов М. М. Проблемы динамической теории в статистической физике. У книзі: Боголюбов Н. Н. Избранные труды в трех томах. Т. 2. – К.: Наукова думка, 1970, с. 99–196.
2. И. З. Фишер. Статистическая теория жидкостей. – М. ГИФМЛ. – 1961, 280 с.
3. Н. П. Коваленко, И. З. Фишер. Метод интегральных уравнений в статистической теории жидкостей. УФН, **108**, 209–239, 1972.
4. Р. Балеску. Равновесная и неравновесная статистическая механика. Т. 1. – М.: Мир, 1978, 406 с.
5. К. Крокстон. Физика жидкого состояния. Статистическое введение. М.: Мир, 1978, 400 с.

6. S. Torquato. Random heterogeneous materials: Microstructure and macroscopic properties. – New York, Springer Science+Business Media. – 2002, 701 pp.
7. P. A. Rikvold, G. Stell. *D*-Dimensional interpenetrable-sphere models of random two-phase media: Microstructure and an application to chromatography. *J. Colloid. Interface Sci.*, **108**, 158–173, 1985.
8. Т. Л. Челидзе, А. И. Деревянко, О. Д. Куриленко. Электрическая спектроскопия гетерогенных систем. – К.: Наукова думка, 1977, 231 с.
9. D. G. Bergman, D. Stroud. Physical properties of macroscopically inhomogeneous media. *Solid State Physics*, **46**, 147–260, 1992.
10. C-W. Nan. Physics of inhomogeneous inorganic materials. *Progr. Mater. Sci.* **37**, 1–116, 1992.
11. A. Sihvola, *Electromagnetic mixing formulas and applications*. – London, Institution of Engineering and Technology. – 1999, 284 pp.
12. G.W. Milton, *The theory of composites*. Cambridge, Cambridge University Press. –2004, 719 pp.
13. S. Kirkpatrick. Percolation and conduction. *Rev. Mod. Phys.*, **45**, 574–588, 1973.
14. D. Stauffer, A. Aharony. *Introduction to percolation theory*. London, Taylor & Francis. – 2003, 181 pp.
15. D. S. McLachlan, G. Sauti. The AC and DC conductivity of nanocomposites. *J. Nanomaterials*, 2007, 30389 (9 pp), 2007.
16. Yu. A. Ryzov, V. V. Tamoikin. Radiation and propagation of electromagnetic waves in randomly inhomogeneous media (review). *Radiophys. Quantum Electron.*, **13**, 273–300, 1970.
17. L. Tsang, J. A. Kong. Scattering of electromagnetic waves from random media with strong permittivity fluctuations. *Radio Sci.*, **16**, 303–320, 1981
18. W. Wiczorek and M. Siekierski. Composite Polymeric Electrolytes. In *Nanocomposites, Ionic conducting materials and structural spectroscopies*, edited by P. Knauth and J. Schoonman. – New York, Springer. – 2008, pp. 1–70.
19. М. Я. Сущко, Effective dielectric response of dispersions of graded particles, *Phys. Rev. E*, **96**, 062121 (8 pp), 2017.
20. М. Я. Сущко and А. К. Семенов. Rigorously solvable model for the electrical conductivity of dispersions of hard-core–penetrable-shell particles and its applications. *Phys. Rev. E*, **100**, 052601 (14 pp), 2019.

2. Додаткова література

21. W. Weiglhofer. Delta-function identities and electromagnetic field singularities. *Am. J. Phys.* **57**, 455–456, 1989.
22. D. Dence, J. E. Spence. Wave propagation in random anisotropic media In *Probabilistic methods in applied mathematics*, v. 3, edited by A. T. Bharucha-Reid. – New York, Academic Press. – 1973, pp. 121–181.
23. T. G. Mackey, A. Lakhtakia, W. S. Weiglhofer. Third-order implementation and convergence of the strong-property-fluctuation theory in electromagnetic homogenization. *Phys. Rev. E*, **64**, 066616 (9 pp), 2001.
24. М. Я. Сушко. О диэлектрической проницаемости суспензий, *ЖЭТФ*, **132**, 478–484, 2007.
25. М. Я. Сущко. Effective permittivity of mixtures of anisotropic particles, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **42**, 155410 (9pp), 2009.

11. Посилання на інформаційні ресурси в Інтернеті

1. <http://arxiv.org/>
2. Wikipedia: <http://en.wikipedia.org/>