УДК 531.19

Г. С. Бокун, доц., канд. физ.-мат. наук;
В. С. Вихренко, проф., д-р физ.-мат. наук
(БГТУ, г. Минск)

УЧЕТ ДАЛЬНОДЕЙСТВУЮЩЕГО И КОРОТКОДЕЙСТВУЮЩЕГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В КОНДЕНСИРОВАННОЙ СРЕДЕ

Разработанные ранее подходы учета дальнодействующего и короткодействующего взаимодействия в конденсированной среде переносятся на описания кристаллических ионных систем и токопроводящих керамик, основные особенности которых можно описать, опираясь на решеточные теории. В связи с тем, что свойства таких систем можно передать, совмещая модель идеального кристалла с групповым разложением по маероподобным функциям, с помощью которых на свойства идеального кристалла накладываются корреляции, представляется оправданным объединить подходы, разработанные ранее для учета эффектов дальнодействия в существенно неоднородных средах, к которым и относятся токопроводящие керамики, являясь ионными системами.

Представляя энергию системы суммой парных взаимодействий $V(i,j)$ и $\Phi(i,j)$ близко- и дальнодействующих потенциалов частиц в i и j положениях, представим конфигурационный интеграл в форме

$$Q_N = Q_N^0 < \exp\left(-\beta\sum_{i-j} V(i,j) \prod_{i=1}^{N}\prod_{j=1}^{N}\left(1+f_{ij}\right)\right) >_0, \tag{6}$$

$$f_{ij} = \exp\left(-\beta\left(\Phi(i,j)\right) - \varphi_j(i) - \varphi_i(j)\right) - 1, \tag{7}$$

где Q_N^0 – конфигурационный интеграл идеального кристалла, выраженный через одночастичные ячеечные потенциалы средних сил $\varphi_j(i)$, f_{ij} – майероподобная функция.

Последующее разложение (1) по функциям (2) позволяет записать систему замкнутых уравнений

$$\exp\left(-\beta\varphi_j(i)\right) = \frac{1}{Q_j}\int_{v_j} g_{i,j} \exp\left(-\beta\Phi(i,j)\right)\cdot\exp\left(-\beta\sum_{k\neq i,j}\varphi_k(j)\right)dj. \tag{8}$$

Система (3) отличается от использованной ранее тем, что ядро этой системы, помимо точечного короткодействующего потенциала, содержит бинарную функцию для кулоновского взаимодействия

$$g_{1,2} = \int_{v_3}\ldots\int_{v_N} \exp\left(-\beta\sum_{e,m=1}^{N} V(e,m)\right) F_0(3), F_0(4)\ldots F_0(N)\cdot d3d4\ldots dN\,.$$