

УДК 531.19+541.64

В. С. Вихренко, проф., д-р физ.-мат. наук;  
 Д. В. Гапанюк, зам. декана ф-та ХТиГ, канд. физ.-мат. наук  
 (БГТУ, г. Минск);  
 М. Ф. Головки, гл. научн. сотр., чл.-корр. НАНУ, д-р физ.-мат. наук;  
 (ИФКС, г. Львов, Украина)

## ЭКРАНИРОВАНИЕ ЗАРЯДОВ В ТВЕРДЫХ ЭЛЕКТРОЛИТАХ

Предложена модель решеточного флюида для системы с дальнедействующими кулоновскими и короткодействующими взаимодействиями. Система подвижных ионов одного знака движется на нейтрализующем фоне неподвижных противоионов и в поле кристаллического потенциала, создаваемого базовой подсистемой. В рамках метода коллективных переменных [1] рассматривается экранирование кулоновских взаимодействий в объеме и на плоской границе, и показано, что дебаевская длина  $r_D$  включает дополнительную концентрационную зависимость, обратно пропорциональную квадратному корню из средней концентрации вакантных узлов:

$$r_D = \sqrt{\frac{\epsilon\epsilon_0 b^3}{\beta c(1-c)e^2}}, \quad \frac{N}{V} = \frac{Mc}{V} = \frac{c}{b^3},$$

где  $\epsilon$  и  $\epsilon_0$  – относительная диэлектрическая проницаемость среды и электрическая постоянная, соответственно;  $b$  – параметр решетки (в случае простой кубической решетки);  $\beta=1/(k_B T)$  – обратная температура  $c$  и  $(1-c)$  – концентрация подвижных ионов и вакансий, соответственно;  $e$  – заряд подвижных ионов;  $M$ ,  $N$  и  $V$  – число частиц, узлов решетки и объем системы, соответственно.

Вклад кулоновского взаимодействия в свободную энергию системы вычисляется в приближении, близком к среднему сферическому, и дается в аналитической форме:

$$A_c = -\frac{2\pi c^2 r_B d^2}{\beta v} - \frac{8\pi c^2 r_B^2}{\kappa^4 v d^3} (2 - e^{-\kappa d} (1 + (1 + \kappa d)^2)), \quad v = b^3, \quad \kappa = 1/r_D,$$

где  $r_B = \beta e^2 / 4\pi\epsilon\epsilon_0$  – радиус Бьеррума,  $d$  – диаметр жесткой сердцевины иона.

### ЛИТЕРАТУРА

1. Юхновский И.Р., Головки М.Ф. Статистическая теория классических равновесных систем. – Киев: Наукова думка, 1980. – 372 с.