

УДК 531.19+541.64

Г. С. Бокун, доц., канд. физ.-мат. наук (БГТУ, г. Минск)
Д. ди Каприо, научн. сотр., д-р философии;
(Высшая национальная школа химии Парижа, Франция)

СТРУКТУРИЗАЦИЯ ПРИЭЛЕКТРОДНОЙ ОБЛАСТИ В ТВЕРДОЭЛЕКТРОЛИТНОЙ СИСТЕМЕ С ПОДВИЖНОСТЬЮ ЗАРЯДОВ ОДНОГО ЗНАКА

Предложенные ранее подходы к учету как короткодействующих, так и дальнедействующих взаимодействий в конденсированных средах использованы для описания кристаллических ионных систем и токопроводящих керамик, основные особенности которых достаточно хорошо воспроизводятся решеточной теорией, к которой можно при соответствующих аппроксимациях свести двухуровневый молекулярно-статистический подход к описанию неоднородных систем. Статистически изучаются равновесные характеристики подсистемы подвижных зарядов одного сорта с учетом наличия подсистемы неподвижных зарядов противоположного знака, создающих компенсирующий электрический фон. Распределение этих зарядов под воздействием внешнего поля не изменяется.

Для представления свободной энергии подсистемы подвижных зарядов в виде функционала их плотности и вычисления ячеечных потенциалов средних сил метода условных распределений использовано кумулянтное разложение по перенормированным майеровским функциям. Для учета эффектов экранирования использованы результаты метода коллективных переменных. Получена система интегральных уравнений для потенциалов средних сил с учетом эффектов близко- и дальнедействия, с помощью которой проведены расчеты в решеточном приближении. В выражении для бинарной функции распределения выделена корреляционная составляющая, что позволило рассчитать коррелированную и некоррелированную части электрического потенциала, используя уравнение Пуассона. Рассматривается случай достаточно малых электрических полей, допускающий линейное разложение химического потенциала по отклонению концентрации зарядов от однородного распределения.

В окончательных расчетах корреляция между частицами учитывается в приближении первых соседей. В этом приближении распределение потенциала и концентрации заряда описывается линейным дифференциальным уравнением четвертого порядка. В работе выполнен анализ результатов его аналитического решения и последующих численных расчетов характеристик твердого электролита.