

УДК 531.19

**Г. С. Бокун<sup>1</sup>, М. Ф. Головко<sup>2</sup>, В. С. Вихренко<sup>1</sup>**<sup>1</sup>Белорусский государственный технологический университет<sup>2</sup>Институт физики конденсированных систем НАН Украины (г. Львов, Украина)**РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПОТЕНЦИАЛА В ТВЕРДОМ ЭЛЕКТРОЛИТЕ  
МЕЖДУ ПЛОСКИМИ ЭЛЕКТРОДАМИ**

Для вычисления распределения электрического потенциала использовано его представление через бинарную функцию распределения, позволившее выделить коррелированную и некоррелированную его составляющие. Некоррелированная составляющая определена через напряженность электрического поля, которая, в свою очередь, была выражена через интеграл от распределения плотности заряда по пространственной переменной. Это позволило представить некоррелированную часть энергии взаимодействия зарядов через интеграл от квадрата градиента соответствующей части потенциала. Для нахождения коррелированной составляющей использована аппроксимация бинарной функции распределения, широко применяемая для расчетов в рамках среднесферического приближения, а также модифицированное выражение для радиуса Дебая. В Фурье-пространстве получено линейное соотношение между вариациями плотности распределения заряда и электрического потенциала с коэффициентом, зависящим от волнового вектора. В длинноволновом приближении это соотношение переходит в уравнение Пуассона. При включении внешнего поля сформулировано выражение для электрохимического потенциала, приводящее к уравнению для распределения плотности заряда по объему системы.

**Ключевые слова:** твердый электролит, неоднородная система, электрический потенциал, электрохимический потенциал, распределение заряда, корреляционные функции, кулоновское взаимодействие.

**G. S. Bokun<sup>1</sup>, M. F. Holovko<sup>2</sup>, V. S. Vikhrenko<sup>1</sup>**<sup>1</sup>Belarusian State Technological University<sup>2</sup>Institute for Condensed Matter Physics of NAS of Ukraine (Lviv, Ukraine)**POTENTIAL DISTRIBUTION IN SOLID ELECTROLYTE  
BETWEEN FLAT ELECTRODES**

The electric potential is represented through a binary distribution function that made it possible to separate correlated and uncorrelated components of it. The uncorrelated component is determined through the electric field strength, which, in turn, was expressed in terms of the integral of the charge density distribution over the spatial variable. This made it possible to represent the uncorrelated part of the interaction energy of charges through the integral of the square of the gradient of the corresponding part of the potential. To find the correlated component, the approximation of the binary distribution function, which is widely used for calculations within the framework of the mean-spherical approximation, is used, as well as a modified expression for the Debye radius. In Fourier space, a linear relationship is obtained between the variations of the charge density distribution and the electric potential with a coefficient that depends on the wave vector. In the long-wavelength approximation this relation reproduces the Poisson equation. When the external field is turned on, an expression for the electrochemical potential is formulated, resulting in an equation for the charge density distribution over the volume of the system.

**Key words:** solid electrolyte, nonhomogeneous system, electric potential, electrochemical potential, charge distribution, correlation functions, Coulomb interaction.

**Введение.** Керамические электролиты и ионтеркаляционные соединения представляют собой класс технологически важных материалов, которые широко используются в устройствах хранения и преобразования энергии, электрохимических датчиках и других подобных системах [1–5]. Эти электролиты являются сложными объектами для понимания процессов хранения и переноса заряда на атомарном уровне ввиду наличия дальнедействующих кулоновских взаимодействий, высокодефектной кристаллической структуры и неоднородностей

из-за присутствия зерен, межзеренных прослоек и электродов.

Широкий спектр теоретических методов исследования ионных систем включает в себя различные модификации уравнения Пуассона – Больцмана [6, 7], теории функционала плотности [8, 9], метода коллективных переменных [10], теоретико-полевых подходов [11]. Наиболее популярными являются методы, основанные на приближении среднего поля, поскольку позволяют анализировать окончательные результаты в аналитическом виде [12]. Вместе с

тем, необходимо понимание границ применимости теорий среднего поля и иметь возможность исследовать эффекты межчастичных корреляций в случаях, когда они существенны. Настоящая работа посвящена учету корреляций в неоднородных твердоэлектролитных системах.

**Представление электрического потенциала суммой коррелированной и некоррелированной составляющих.** Потенциал, действующий на  $i$ -ю частицу и создаваемый носителями заряда того же знака в пространстве ионного кристаллического проводника, определяется выражением

$$r_B \sum_{j \neq i} \int_{V_j} \frac{1}{|\mathbf{q}_j - \mathbf{q}_i|} F_1(\mathbf{q}_j) d\mathbf{q}_j + r_B \sum_{j \neq i} \int_{V_j} \frac{h_2(\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_j)}{|\mathbf{q}_j - \mathbf{q}_i|} F_1(\mathbf{q}_j) d\mathbf{q}_j, \quad (1)$$

где  $r_B = \beta e^2 / 4\pi\epsilon\epsilon_0$  – радиус Бьеррума;  $e$  – заряд частиц;  $\epsilon$  и  $\epsilon_0$  – диэлектрическая и электрическая постоянные соответственно;  $F_1(\mathbf{q}_j)$  – унарная,  $h_2(\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_j)$  – корреляционная функции;

$$h_2(\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_j) = [F_2(\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_j) / F_1(\mathbf{q}_j)F_1(\mathbf{q}_i)] - 1, \quad (2)$$

$F_2(\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_j)$  – бинарная функция распределения.

Распределение частиц с противоположным знаком заряда характеризуется только унарной функцией, которая задается свойствами и структурой кристалла, и можно предположить, что их вклад в суммарный потенциал полностью компенсирует первое слагаемое в квадратных скобках уравнения (1), так что для расчета суммарного потенциала применимо выражение

$$\psi(\mathbf{q}_i) = r_B \sum_{j \neq i} \int_{V_j} \frac{F_1(\mathbf{q}_j)}{|\mathbf{q}_j - \mathbf{q}_i|} h_2(\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_j) d\mathbf{q}_j. \quad (3)$$

В связи с тем, что  $F_1(\mathbf{q}_j)$  в однородной кристаллической среде – периодическая функция,  $\psi(\mathbf{q}_i)$  также будет представлять собой периодическую функцию.

Рассмотрим трансформацию уравнений (1)–(3) при наложении внешнего поля вдоль выделенного ося  $z$  направления. Основное влияние на электрический потенциал будет оказывать перераспределение плотности мобильных частиц, так что в первом приближении можно принять

$$\delta F_1(\mathbf{q}_i) \neq 0, \quad \delta h_2(\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_j) \approx 0, \quad (4)$$

пренебрегая при этом изменением симметрии одночастичной функции распределения и вариациями двухчастичной корреляционной функ-

ции. Условия (4) могут быть в дальнейшем уточнены учетом изменения симметрии функций распределения.

Принимая за основу соотношения (4), запишем в соответствии с выражениями (1) и (3) изменение электрического потенциала, обусловленное перераспределением подвижных носителей заряда

$$\delta\psi(\mathbf{q}_i) = \delta\psi_1(\mathbf{q}_i) + \delta\psi_2(\mathbf{q}_i), \quad (5)$$

где

$$\delta\psi_1(\mathbf{q}_i) = r_B \sum_{j \neq i} \int_{V_j} \frac{\delta F_1(\mathbf{q}_j)}{|\mathbf{q}_j - \mathbf{q}_i|} d\mathbf{q}_j, \quad (6)$$

$$\delta\psi_2(\mathbf{q}_i) = r_B \sum_{j \neq i} \int_{V_j} \frac{\delta F_1(\mathbf{q}_j)}{|\mathbf{q}_j - \mathbf{q}_i|} h_2(\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_j) d\mathbf{q}_j. \quad (7)$$

В соотношениях (6) и (7) суммирование осуществляется в первом случае по всем ячейкам за исключением  $i$ -й, а во втором – только по ближайшему окружению ( $z$  ближайших ячеек) выделенной  $i$ -й ячейки.

Некоррелированная составляющая электрического потенциала. Рассмотрим отдельно расчет слагаемых в (6) и (7). В соответствии с выражением (6) можно записать:

$$\delta\psi_1(\mathbf{q}_i) = \sum_{j \neq i}^M \psi_{1j}(\mathbf{q}_i), \quad (8)$$

где парциальный потенциал

$$\psi_{1j}(\mathbf{q}_i) = r_B \int_{V_j} \frac{\delta F_1(\mathbf{q}_j)}{|\mathbf{q}_j - \mathbf{q}_i|} d\mathbf{q}_j. \quad (9)$$

Для вычисления парциального потенциала используем теорему Гаусса. Полагая в соответствии со сказанным выше, что распределение  $\delta F_1(\mathbf{q}_j)$  центрально-симметрично относительно  $j$ -узла, используя известное выражение для потенциала однородно заряженной сферы, после разбиения объема ячейки на бесконечно тонкие сферические концентрические слои и суммирования по ним найдем

$$\psi_{1j}(\mathbf{q}_i) = r_B \frac{\delta\rho_j}{|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_{0j}|}, \quad (10)$$

где  $\mathbf{q}_{0j}$  обозначает положение центра ячейки с номером  $j$ , а  $\delta\rho_j$  – величина заряда в  $j$ -й ячейке

$$\delta\rho_j = \int_{V_j} \delta F_1(\mathbf{q}_j) d\mathbf{q}_j. \quad (11)$$

Тогда в соответствии с соотношением (6) запишем

$$\delta\psi_1(\mathbf{q}_i) = r_B \sum_{j \neq i}^M \frac{\delta\rho_j}{|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_{0j}|}. \quad (12)$$

Полученная формула (12) показывает, что  $\delta\psi_1(\mathbf{q}_i)$  не зависит от характера распределения частиц внутри ячеек, передаваемого функцией  $F_1(\mathbf{q}_j)$ , а определяется лишь нормировкой последней  $\delta\rho_j$ , равной отклонению среднего числа заполнения  $j$  узла от его значения при отсутствии внешнего поля. Следовательно, для расчета  $\delta\psi_1(\mathbf{q}_i)$  можно перейти к решеточной модели, полагая, что в  $j$ -м узле решетки находится точечный заряд величиной  $\delta\rho_j$ . Система этих точечных зарядов, фиксированных в точках  $\mathbf{q}_{0j}$ , создает кристаллический потенциал (12).

Сходимость суммы в физических задачах обеспечивается условиями электронейтральности и ослабления корреляции:

$$\sum_{j=1}^M \delta\rho_j = 0, \quad \lim_{|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_{0j}| \rightarrow \infty} \delta\rho_j = 0. \quad (13)$$

Рассмотрим применение полученных результатов к твердому электролиту, который находится между параллельными плоскими электродами, перпендикулярными оси аксиальной симметрии  $z$  кристалла.

В силу отмеченной симметрии все  $\delta\rho_j$ , расположенные в плоскости, перпендикулярной оси  $z$ , равны между собой. В результате система моделируется множеством конденсаторных плоскостей. Не нарушая общности, для каждой плоскости можно ввести поверхностную плотность заряда

$$\sigma_j = \frac{\delta\rho_j}{b^2}, \quad (14)$$

где  $b$  – параметр решетки, тогда при расчете согласно уравнению (12) дискретное суммирование заменим интегрированием по плотности, обозначив переменной  $z$  расстояние от точки  $\mathbf{q}_i$  до  $j$ -й плоскости.

Выполняя интегрирование в каждой плоскости с последующим суммированием по плоскостям, перепишем уравнение (6) в виде

$$\delta\psi_1(\mathbf{q}_i) = \sum_z \psi_{1z}(\mathbf{q}_i). \quad (15)$$

В соотношении (15) шаг изменения переменной  $z$  совпадает с периодом решетки. Соответственно

$$\begin{aligned} \psi_{10}(z) &= \sigma(0)r_B \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^R \frac{u du}{\sqrt{z^2 + u^2}} = \\ &= 2\pi\sigma(0)r_B (\sqrt{R^2 + z^2} - z - R), \end{aligned} \quad (16)$$

где  $R$  – радиус, характеризующий переменный размер конденсаторной пластины и вычитание  $R$  в скобках в выражении (16) использовано для перенормировки потенциала, обеспечивающего его нулевое значение при  $R \rightarrow \infty$ . Для напряженности поля  $E(z)$  будет иметь место результат

$$E_{10}(z) = -\frac{\partial\psi(z)}{\partial z} = \frac{\sigma(0)r_B}{2} \left( 1 - \frac{z}{\sqrt{R^2 + z^2}} \right), \quad (17)$$

что в пределе больших  $R$  позволяет записать

$$\psi_{10}(z) = 2\pi\sigma(0)r_B z. \quad (18)$$

Таким образом, изменение поля в заданной точке  $z$  следует находить по формуле

$$E_1(z_k) = \frac{2\pi r_B}{h^2} \left( \sum_{i=0}^{k-1} \delta\rho_i - \sum_{i=k+1}^N \delta\rho_i \right). \quad (19)$$

В формуле (19) имеется в виду, что все межэлектродное пространство представлено плоскостями, перпендикулярными оси  $z$ ; положение  $k$ -й плоскости характеризуется координатой  $z_k$ .

Переходя к представлению непрерывной среды, находим, что напряженность в текущей точке  $z$ , расположенной между электродными пластинами, и учитывая, что из условия симметрии  $E(0) = 0$ , определяется выражением

$$E(x) = -\frac{4\pi r_B}{h^3} \int_z^{L/2} \delta\rho(u) du. \quad (20)$$

Формула (20) записана для случая антисимметричного распределения заряда относительно пластин, расстояние между которыми равно  $L$ . Начало отсчета совмещено с центром симметрии системы. Тогда для электрического потенциала получим

$$\delta\psi_1(s) = \frac{4\pi r_B}{h^3} \int_0^s dz \int_z^{L/2} \delta\rho(u) du. \quad (21)$$

После изменения порядка интегрирования приходим к более удобному результату

$$\delta\psi_1(s) = \frac{4\pi r_B}{h^3} \left( \int_0^s z \delta\rho(z) dz + \int_s^L \delta\rho(z) dz \right), \quad (22)$$

который может быть использован, в том числе и в дискретном варианте.

Отметим, что  $\delta\psi_1(s)$  определяет некоррелированную часть энергии кулоновского взаимодействия в соответствии с выражением

$$U = \frac{1}{2\beta} \sum_{i=1}^M \int_{v_i} \delta\psi_1(\mathbf{q}_i) \delta F(\mathbf{q}_i) d\mathbf{q}_i. \quad (23)$$

Множитель  $1/2$  в формуле (23) обусловлен тем, что имеется в виду энергия межчастичного взаимодействия, а не энергия, создаваемая внешними источниками.

Принимая во внимание уравнение Пуассона

$$\Delta\psi(\mathbf{q}) = -4\pi r_B \delta F_1(\mathbf{q}), \quad (24)$$

после подстановки в выражение (23) и интегрирования по частям представим рассматриваемую энергию через ее плотность

$$U = \frac{1}{2\beta r_B} \sum_{i=1}^M \int_{V_i} (\nabla \delta\psi_1(\mathbf{q}_i))^2 d\mathbf{q}_i. \quad (25)$$

Для нахождения коррелированной составляющей потенциала рассмотрим расчет слагаемого  $\delta\psi_2(\mathbf{q}_i)$ , входящего в суммарный потенциал (5). При вычислении  $\delta\psi_2(\mathbf{q}_i)$  согласно соотношению (7) следует учесть, что в него входит обрезанный множитель – корреляционная функция  $h_2(\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_j)$ , экспоненциально стремящаяся к нулю с увеличением расстояния  $|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j|$ , что исключает проблему расходимости, обусловленную дальнедействием кулоновского потенциала. Полагая, что  $h_2(\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_j)$  является сферически симметричной функцией межчастичного расстояния  $|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j|$ , запишем Фурье-преобразование соотношения (7):

$$\delta\psi_2(k) = r_B (2\pi)^{3/2} \tilde{h}_2(k) \delta F_1(k), \quad (26)$$

где  $\tilde{h}_2(k)$  – Фурье-образ функции

$$\tilde{h}_2(\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_j) = \tilde{h}_2(r) = h_2(r) / r, \quad r = |\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j|. \quad (27)$$

Для системы с кулоновским отталкиванием эта функция в простейшей аппроксимации может быть задана соотношением [13, 14]:

$$h_2(r) = \begin{cases} -1, & r < d, \\ -\beta U(r), & r > d, \end{cases} \quad (28)$$

$$U(r) = \frac{r_B}{r} \exp(-vr), \quad v = r_D^{-1},$$

где  $d$  – эффективный диаметр частицы,  $r_D$  – модифицированный радиус Дебая, определяемый в случае неоднородной среды выражением [15, 16]:

$$r_D = \sqrt{\frac{\epsilon \epsilon_0 \hbar^3}{\beta e^2 [c_i(1-c_i)c_j(1-c_j)]^{1/2}}}. \quad (29)$$

С учетом аппроксимации (28) для Фурье-образа переопределенной корреляционной функции запишем

$$\tilde{h}_2(k) = \tilde{h}_2^{(1)}(k) + \tilde{h}_2^{(2)}(k), \quad (30)$$

где

$$\begin{aligned} \tilde{h}_2^{(1)}(k) &= \frac{-1}{(2\pi)^{3/2}} \int_0^d \frac{2\pi r^2 dr}{r} \int_{-1}^1 e^{ikr \cos \theta} d(\cos \theta) = \\ &= -\frac{1}{k^2} \sqrt{\frac{2}{\pi}} (1 - \cos kd), \end{aligned} \quad (31)$$

$$\begin{aligned} \tilde{h}_2^{(2)}(k) &= \frac{-r_B}{(2\pi)^{3/2}} \int_d^\infty 2\pi r e^{-vr} dr \int_{-1}^1 e^{ikr \cos \theta} d(\cos \theta) = \\ &= -\frac{4\pi r_B}{(2\pi)^{3/2}} \int_d^\infty \frac{\sin(kr)}{kr} \exp(-vr) dr. \end{aligned} \quad (32)$$

В результате Фурье-образ корреляционной функции

$$\tilde{h}_2(k) = -\frac{4\pi}{(2\pi)^{3/2}} S(k) \quad (33)$$

выражается через специфический структурный фактор системы

$$S(k) = \frac{(1 - \cos(kd))}{2k^2} + r_B \int_d^\infty \frac{\sin(kr)}{kr} e^{-vr} dr. \quad (34)$$

Таким образом, согласно определению (26) Фурье-образ корреляционной составляющей потенциала пропорционален Фурье-образу флуктуаций плотности

$$\delta\psi_2(k) = -r_B S(k) \delta F_1(k). \quad (35)$$

**Соотношение между вариациями плотности и электрического потенциала.** Для некоррелированной составляющей согласно соотношению (24) будем иметь

$$k^2 \delta\psi_1(k) = 4\pi r_B \delta F_1(k). \quad (36)$$

Следовательно, в Фурье-пространстве суммарный потенциал и плотность заряда связаны соотношением

$$\delta F_1(k) = \frac{k^2 \delta\psi(k)}{4\pi r_B (1 - S(k)k^2)}, \quad (37)$$

числитель которого соответствует уравнению Пуассона.

При малых волновых векторах выражение (37) аппроксимируется соотношением

$$\delta F_1(k) = \frac{k^2 \delta\psi(k)}{4\pi r_B} (1 + S_0 k^2), \quad (38)$$

где согласно (34)

$$S_0 = \frac{d^2}{4} + 4\pi r_B r_D e^{-vd}. \quad (39)$$

Для установления распределения электрического потенциала, индуцированного внешним воздействием  $\delta\psi^{\text{ext}}(z)$ , уравнение (38) необходимо замкнуть условием постоянства электрохимического потенциала. При достаточно малых внешних полях для последнего можно записать линейное представление

$$\beta\mu = \beta\mu_{\text{ch}} + \beta\gamma\delta\rho(z) + \delta\psi(z) + \delta\psi^{\text{ext}}(z), \quad (40)$$

где  $\beta\mu_{\text{ch}}$  – безразмерное значение химического потенциала в однородной среде в отсутствие внешнего поля;  $\gamma$  – термодинамический фактор.

Из условия постоянства химического потенциала в состоянии равновесия вытекает уравнение

$$\beta\gamma\delta\rho(z) + \delta\psi(z) + \delta\psi^{\text{ext}}(z) = 0, \quad (41)$$

которое с учетом (24) замыкает уравнение (37).

**Заключение.** Нахождение распределения концентрации заряженных частиц в системе, неоднородность которой обусловлена наличием границ, на которых могут быть приложены внешние воздействия, должно базироваться на условии постоянства электрохимического потенциала во всем объеме системы. Для вычисления распределения электрического потенциала использовано его представление через бинарную функцию распределения, позволившее выделить коррелированную и некоррелированную его составляющие.

Некоррелированная составляющая определена через напряженность электрического поля,

которая, в свою очередь, была выражена через интеграл от распределения плотности заряда по пространственной переменной. Это позволило представить некоррелированную часть энергии взаимодействия зарядов через интеграл от квадрата градиента соответствующей части потенциала.

Для нахождения коррелированной составляющей использована аппроксимация бинарной функции распределения, широко применяемая для расчетов в рамках среднесферического приближения, а также модифицированное выражение для радиуса Дебая. В результате в Фурье-пространстве получено линейное соотношение между вариациями плотности распределения заряда и электрического потенциала с коэффициентом, зависящим от волнового вектора. В длинноволновом приближении это соотношение переходит в уравнение Пуассона. При включении внешнего поля сформулировано выражение для электрохимического потенциала, приводящее к уравнению для распределения плотности заряда по объему системы.

Публикация содержит результаты исследований, выполненных при грантовой поддержке Фонда фундаментальных исследований Беларуси (конкурсный проект № Ф16К-614) и Государственного фонда фундаментальных исследований Украины (конкурсный проект № Ф73/113-2017), а также научной программы Евросоюза HORIZON-2020 (проект AMD-734276-CONIN) и Министерства образования Беларуси.

### Литература

1. Lu M., Beguin F., Frackowiak E. Supercapacitors: Materials, Systems and Applications. New Jersey: John Wiley & Sons, 2013. 539 p.
2. Progress in material selection for solid oxide fuel cell technology: A review / N. Mahato [et al.] // Progr. Mater. Sci. 2015. Vol. 72. P. 141–337.
3. Canchaya J. G. S., Furtado N. C., Taft C. A. Graphene and its applications in lithium ion batteries // Current Phys. Chem. 2015. Vol. 5. P. 223–254.
4. A review of lithium and non-lithium based solid state batteries / J. G. Kim [et al.] // Journ. Power Sources. 2015. Vol. 282. P. 299–322.
5. A review of high-temperature electrochemical sensors based on stabilized zirconia / T. Liu [et al.] // Solid State Ionics. 2015. Vol. 283. P. 91–102.
6. Towards an understanding of induced-charge electrokinetics at large applied voltages in concentrated solutions / M. Z. Bazant [et al.] // Adv. Colloid Interface Sci. 2009. Vol. 152. P. 48–131.
7. Sugioka H. Ion-Conserving Modified Poisson–Boltzmann Theory Considering a Steric Effect in an Electrolyte // Journ. Phys. Soc. Japan. 2016. Vol. 85. Art. no. 124006.
8. Evans R. Density functionals in the theory of nonuniform fluids. In: Fundamentals of inhomogeneous fluids. New York: Marcel Dekker, 1992. P. 85–175.
9. Forsman J., Woodward C. E., Szparaga R. Classical Density Functional Theory of Ionic Solutions. In: Computational Electrostatics for Biological Applications. Switzerland: Springer International Publishing, 2015. P. 17–38.
10. Юхновский И. Р., Головки М. Ф. Статистическая теория классических равновесных систем. Киев: Наукова думка, 1980. 372 с.
11. Caprio D. di, Stafiej J., Badiali J. P. Field theory for ionic systems. From fluctuations and structure at a hard wall to thermodynamics // Electrochim. Acta. 2003. Vol. 48. P. 2967–2974.

12. Fifty years of liquid state physics / A. Ciach [et al.] // *Journ. Phys.: Condens. Matter*. 2016. Vol. 28, Art. no. 410301.
13. Blum L. Mean spherical model for asymmetric electrolytes. I. Method of solution // *Mol. Phys.* 1975. Vol. 30. P. 1529–1535.
14. Blum L., Hoyer J. S. Mean Spherical Model for Asymmetric Electrolytes. 2. Thermodynamic Properties and the Pair Correlation Function // *Journ. Chem. Phys.* 1977. Vol. 81. P. 1311–1316.
15. Бокун Г. С., Головка М. Ф., Вихренко В. С. Экранирование кулоновского взаимодействия в кристаллических материалах // *Труды БГТУ. Сер. 3, Физ.-мат. науки и информатика*. 2017. № 2. С. 50–55.
16. Chemical Potential Distribution of Nonhomogeneous Solid Electrolyte / G. Bokun [et al.] // *Proc. 2017 IEEE 7<sup>th</sup> Internat. Conf. Nanomat.: Applications & Properties (NAP-2017)*. Part 3. Paper 03NE16. C. 1–16.

### References

1. Lu M., Beguin F., Frackowiak E. *Supercapacitors: Materials, Systems and Applications*. New Jersey: John Wiley & Sons, 2013. 539 p.
2. Mahato N., Banerjee A., Gupta A., Omar Sh., Balani K. Progress in material selection for solid oxide fuel cell technology: A review. *Progr. Mater. Sci.*, 2015, vol. 72, pp. 141–337.
3. Canchaya J. G. S., Furtado N. C., Taft C. A. Graphene and its applications in lithium ion batteries. *Current Phys. Chem.*, 2015, vol. 5, pp. 223–254.
4. Kim J. G., Mukherjee S., Son B., Park S., Bates A., Choi M. J., Shuppert N. D., Kwon O., Chung H. Y. A review of lithium and non-lithium based solid state batteries. *Journ. Power Sources*, 2015, vol. 282, pp. 299–322.
5. Liu T., Zhang X., Yuan L., Yu J. A review of high-temperature electrochemical sensors based on stabilized zirconia. *Solid State Ionics*, 2015, vol. 283, pp. 91–102.
6. Bazant M. Z., Kilic M. S., Storey B. D., Ajari A. Towards an understanding of induced-charge electrokinetics at large applied voltages in concentrated solutions. *Adv. Colloid Interface Sci.*, 2009, vol. 152, pp. 48–131.
7. Sugioka H. Ion-Conserving Modified Poisson–Boltzmann Theory Considering a Steric Effect in an Electrolyte. *Journ. Phys. Soc. Japan*, 2016, vol. 85, art. no. 124006.
8. Evans R. Density functionals in the theory of nonuniform fluids. In: *Fundamentals of inhomogeneous fluids*. New York: Marcel Dekker, 1992, pp. 85–175.
9. Forsman J., Woodward C. E., Szparaga R. Classical Density Functional Theory of Ionic Solutions. In: *Computational Electrostatics for Biological Applications*. Switzerland: Springer International Publishing, 2015. Pp. 17–38.
10. Yukhnovskii I. R., Holovko M. F. *Statisticheskaya teoriya klassicheskikh ravnovesnykh system* [Statistical Theory of Classical Equilibrium Systems]. Kiev, Naukova Dumka Publ., 1980. 372 p.
11. Caprio D. di, Stafiej J., Badiali J. P. Field theory for ionic systems. From fluctuations and structure at a hard wall to thermodynamics. *Electrochim. Acta*, 2003, vol. 48, pp. 2967–2974.
12. Ciach A., Hall C. K., Kahl G., Lomba E. Fifty years of liquid state physics. *Journ. Phys.: Condens. Matter*, 2016, vol. 28, art. no. 410301.
13. Blum L. Mean spherical model for asymmetric electrolytes. I. Method of solution. *Mol. Phys.* 1975, vol. 30, pp. 1529–1535.
14. Blum L., Hoyer J. S. Mean Spherical Model for Asymmetric Electrolytes. 2. Thermodynamic Properties and the Pair Correlation Function. *Journ. Chem. Phys.*, 1977, vol. 81, pp. 1311–1316.
15. Bokun G. S., Holovko M. F., Vihrenko V. S. Screening of the coulomb interaction in crystalline materials. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], series 3, Physics and mathematics. Informatics, 2017, no. 2, pp. 50–55 (In Russian).
16. Bokun G. S., Groda Ya. G., Lasovsky R. N., Vihrenko V. S. Chemical Potential Distribution of Nonhomogeneous Solid Electrolyte. *Proc. 2017 IEEE 7<sup>th</sup> Internat. Conf. Nanomat.: Applications & Properties (NAP-2017)*, part 3, paper 03NE16, pp. 1–5.

### Информация об авторах

**Бокун Георгий Станиславович** – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры механики и конструирования. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: gBokun@mail.ru

**Головка Мирослав Федорович** – доктор физико-математических наук, член-корреспондент НАН Украины, профессор, главный научный сотрудник отдела теории мягкой материи. Институт

физики конденсированных систем НАН Украины (79011, г. Львов, ул. Свенцицкого, 1, Украина). E-mail: holovko@icmp.lviv.ua

**Вихренко Вячеслав Степанович** – доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры теоретической механики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: vvikhre@mail.ru

#### **Information about the authors**

**Bokun Georgii Stanislavovich** – PhD (Physics and Mathematics), Associate Professor, Assistant Professor, the Department of Mechanics and Design. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: gBokun@mail.ru

**Holovko Myroslav Fedorovich** – DSc (Physics and Mathematics), Corresponding Member of the NAS of Ukraine, Professor, Chief Researcher, the Department of Soft Matter Theory. Institute for Condensed Matter Physics of the NAS of Ukraine (1, Svientsitskiy str., 79011, Lviv, Ukraine). E-mail: holovko@icmp.lviv.ua

**Vikhrenko Vyacheslav Stepanovich** – DSc (Physics and Mathematics), Professor, Professor, the Department of Theoretical Mechanics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: vvikhre@mail.ru

*Поступила 28.11.2017*