

Г.С. Бокун, доц., канд. физ.-мат. наук (БГТУ, г. Минск)

Д. Ди. Каприо, проф., д-р физ.-мат. наук (Высшая школа химии, г. Париж)

## **ОСОБЕННОСТИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОПОТЕНЦИАЛА В СИСТЕМЕ С ПРИТЯЖЕНИЕМ ПЕРВЫХ, ОТТАЛКИВАНИЕМ ВТОРЫХ И ТРЕТЬИХ СОСЕДЕЙ**

Твердотельный электролит рассматривается как подсистема подвижных зарядов одного сорта с учетом наличия подсистемы неподвижных зарядов противоположного знака, создающих компенсирующий электрический фон. Распределение неподвижных зарядов под воздействием внешнего поля не изменяется. Неоднородное состояние создается перераспределением подвижных зарядов в приэлектродной области. Модель применяется для статистико-механического описания высокотемпературных ионных проводников и источников тока. Для получения функционала свободной энергии подсистемы подвижных зарядов в зависимости от распределения их плотности использована схема кластерного разложения по перенормированным майеровским функциям.

В качестве базисного использован гамильтониан системы, состоящей из электрических зарядов, движущихся в поле одночастичных ячеечных потенциалов средних сил. Бинарная функция базисной системы на основании результатов метода коллективных переменных выражена через экранированный потенциал и потенциалы средних сил. Найден функционал свободной энергии, из условия экстремальности которого найдено распределение плотности числа подвижных частиц и электрического потенциала в приграничной области электролита. Рассмотрено решение системы интегральных уравнений для потенциалов средних сил с учетом близко- и дальнего действия 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. Распределение потенциала и концентрации заряда описывается линейным дифференциальным уравнением четвертого порядка с комплексными значениями корней характеристического уравнения.