УДК 531.19

Г.С. Бокун, доц., канд. физ.-мат. наук (БГТУ, г. Минск);
М. Ф. Головко, член-корр. НАН Украины, проф., д-р физ.-мат. наук (ИФКС, г. Львов)

КЛАСТЕРНОЕ РАЗЛОЖЕНИЕ ДЛЯ ОПИСАНИЯ ИОННЫХ СИСТЕМ

Для описания ионных систем в конденсированном состоянии применяется кластерное разложение по модифицированным с помощью одно частичных потенциалов средних сил майеровским функциям. В качестве базисной используется система с дальнодействующим кулоновским взаимодействием частиц, находящихся во внешнем поле, создаваемым одно частичными потенциалами средних сил. Ранее базис включал только одно частичные потенциалы средних сил. Внесенные изменения позволяют существенно повысить точность описания изучаемых систем. Кроме отмеченного уточнено выражение для бинарной функции базисной системы.

Усовершенствованная функция удовлетворяет ряду дополнительных необходимых условий нормировки, что приводит к появлению требуемой симметрий свойств конденсированной ионной системы. На этой основе статистически изучаются равновесные характеристики подсистемы подвижных зарядов одного сорта с учетом наличия подсистемы неподвижных зарядов противоположного знака, создающих компенсирующий электрический фон.

Рассчитан химический потенциал системы, показано его симметрия относительно срединной концентрации.

Вычисления при различных температурах позволили определить область стабильности системы в зависимости от соотношения между энергиями коротко и дальнего действия.