

Статистикалық термодинамика көзқарасынан сұйық күйдің жалпы теориялық тұжырымдамалары

ШАИХОВА Гүлназира Серікқызы, т.ғ.к., доцент м.а., shaikhova_2011@mail.ru,
«Әбілқас Сағынов атындағы Қарағанды техникалық университеті» КеАҚ, Қазақстан, Қарағанды,
Н. Назарбаев даңғылы, 56.

Аңдатпа. Статистикалық термодинамика көзқарасынан сұйық күйдің жалпы теориялық тұжырымдамалары, сондай-ақ сұйық күйдің динамикалық қасиеттерін компьютерлік модельдеу келтірілген. Балқытпаларда оның бөлшектерінің жоғары жылжымалылығынан және алыс реттің жоқтығы салдарынан (Кристалл тордағы сияқты) әртүрлі атомдардың немесе молекулалардың жақын қоршаулары көршілерінің саны бойынша да, олардың кеңістіктік орналасуы бойынша да айтарлықтай ерекшелінуі мүмкін екені көрсетілген. Осыған байланысты корреляциялық функцияларды молекулалық динамика әдісімен және радиалды үлестіру функциясын есептеу жүргізілді. Балқытпалардың құрылымын модельдеу бойынша, сондай-ақ кластерлік құрылымдардың геометриясын құру үшін машиналық эксперимент сипатталған. Оларды жүзеге асырудың нақты алгоритмдері қарастырылды. Борн-Карман цикльдік шекаралық шарттары енгізілген, базалық ұяшық меншікті ескертпелермен қоршалады, және әрбір осындай ескертпе базалық тордың микрокүйін дәл қайталайды. Мақалада компьютерлік программалардың көмегімен Воронной көпжақта-рын салудың жалпы алгоритмі келтірілген.

Кілт сөздер: жұптық потенциалдар, атомдардың үлестірім функциясы, жартылай өткізгіштік, функционал тығыздығы, құрылымдық фактор, атомдар, молекулалық динамика, кластерлік құрылым, балқытпа, радиал үлестірім, корреляциялық функция.

Кіріспе

Сұйықтықтар теориясының дамуын қиындатқан маңызды жағдай, объектінің, яғни балқытпаның өзінің ерекшеліктерімен байланысты осы теорияның тым күрделілігі болып шықты.

Балқытпалар теориясының есептерін қандай да бір дәрежеде шешу термодинамикадағы статистикалық әдісті береді. Осы бағытта М. Борнның, Г. Гриннің, Дж. Криквудтың, Н.Н. Боголюбовтың және т.б. жұмыстарында ең үлкен табыстарға қол жеткізілген байқау қажет. Және де балқытпалардың мұндай статистикалық теориясының негізгі міндеті молекулалар мен атом аралық потенциал арасындағы, сондай-ақ балқытылған жүйенің термодинамикалық және кинетикалық қасиеттері арасындағы байланысты орнату болып табылады [1, 3, 5].

Зерттеу әдістемесі

Балқытпа қасиеттерін зерттеу кезінде физикалық шамаларды орташалаңдандырудың қандай бөлшектер жинағы бойынша жүргізілетінін ескеру қажет. Кристалл жағдайында, мысалы, жалғыз ғана дислокацияға қатысты ақпаратты алуға болатыны, бірақ қоспаның бір атомының қозғалысын қадағалауға болмайтыны белгілі.

Ал балқытпаларда оның бөлшектерінің жоғары жылжымалылығынан және алыс реттің жоқтығы

салдарынан (кристалл тордағы сияқты) әр түрлі атомдардың немесе молекулалардың жақын қоршаулары көршілерінің саны бойынша да, олардың кеңістіктік орналасуы бойынша да тым қатты ерекшеленуі мүмкін. Жеке атомның немесе кластерлер деп аталатын, атомдар тобының тәртібін қадағалау мүмкіндігінің жоқтығынан, сұйықтықтың кез келген қасиетін өлшеу нәтижелерін атомдардың үлкен саны бойынша орташаланған болып шығады.

Берілген атомның жақын көршілерінің бұрыштық бағдарлануына (кеңістікте) тәуелсіз қасиет зерделенгенде, онда әр түрлі атомдар бойынша орташалаңдандыру кезінде мұндай бағдарлау өлшеу нәтижесінде сипаттала алмайды, сондықтан берілген атомнан белгілі ара қашықтықта орналасқан атомдардың жалпы саны ғана елеулі болып қалады. Берілген фактіні сипаттау үшін қарапайым сұйықтықтың (тек бір элементтің ғана атомдары бар қарапайымдылық үшін) ерікті бөлшегі ядросында центрі бар, ішкі радиусы және сыртқы радиусы $r + dr$ шар қабатын таңдаймыз. Бұл жағдайда осы шар қабатында болатын атомдардың орта саны, қабаттың көлеміне пропорционал болады $4\pi r^2 dr$ және $R(r)$ радиал үлестірімнің жұптық функциясы деп аталатын ара қатыспен анықталады. $R(r)$ функциясы өзінің физикалық мағынасы бойынша бөлшектер санының орташа емес, коор-

динаталар басы ретінде таңдалған қандай да бір ерікті атомға қатысты төңіректік тығыздығы болып табылады.

r ара қашықтығы r_0 атом аралық ара қашықтығымен салыстырғанда айтарлықтай үлкен болған жағдайда, онда жеке атомдардың орталық бөлшек әсеріне ұшырамауы мүмкін, және сондықтан, оған тәуелсіз орналасатын болады. Бұл жағдайда бізде $R(r)$ орнына кәдімгі орташа тығыздық болады:

$$R(r \rightarrow \infty) = R_0.$$

Берілген атомның центрінен r ара қашықтығы тым аз болған жағдайда (атомның диаметрінен кіші болғанда), онда шар қабатына бөлшектің бір де бір ядросы түспейді. Берілген факт кіші ара қашықтықтарда $R(r) = 0$ болатынын білдіреді.

$R(r)$ функциясының r шағын ара қашықтықта-рында тербелуші сипаты болады. Тура осындай тәртіп балқытпа құрылымына сәйкес келеді, өйткені оларда одан берілген балқытпа құрылған кристалға тән реттеудің кейбір ерекшеліктері айқындалу керек. Сөйтіп, жақын көршілердің арасында кристалдағы атом аралық ара қашықтыққа ұқсас басым ара қашықтық, жақын көршілердің тордағы координациялық санға ұқсас орташа саны және т.с.с. болу керек. Сұйықтықта ақырында, молекулалардың меншікті көлемімен және атом аралық потенциалдың ерекшеліктерімен қамтамасыз етілген реттеу элементтерінің бар болуы жақын рет терминімен анықталады (кристалдардағы алыс реттен ерекшелігінде).

Егер де біз идеал газды қарастырсақ, онда $R(r)$ радиал үлестіру функциясы тұрақты және R_0 орташа тығыздығына тең болар еді, өйткені идеал газдың бөлшектері өзара әрекеттеспейді және нөлдік меншікті көлемі болады.

$R(r)$ функциясының өзінен басқа мына шаманы жиі қарастыратынын байқаймыз [2, 6]:

$$\frac{dn(r)}{d}r = 4\pi r^2 R(r). \quad (1)$$

Бұрын [2, 3] жұмыста сұйықтық бөлшектерінің қандай да бір ерікті атомның маңында орташа орналасуын сипаттайтын, $R(r)$ жұптық радиал үлестірім функциясы анықталған болатын. Енді мұны бізді атомдардың N санының өзара орналасуы қызықтыратын жағдайға жалпылау қажет. Ол үшін сұйықтықта dV көлемін таңдаймыз. Бұл көлемдегі бөлшектердің орташа саны $dn = R_0 dV$ тең болсын, мұнда R_0 – бөлшектер санының тығыздығы. Егер dV айтарлықтай кіші деп санасақ, онда dn бірден біршама кем болады. Осының салдарынан $R_0 dV$ көбейтіндісін dV көлемінде сұйықтық бөлшегінің байқалу ықтималдығы ретінде қарастыруға болады:

$$dW_1 = R_0 dV. \quad (2)$$

Сұйықтықта радиус-векторлары r_1 және r_2 нүктелердің жанындағы көлемі dV_1 және dV_2 келесі элементтерді атап көрсетеміз. dV_1 және dV_2

көлемдерінде бір мезгілде екі бөлшек болу ықтималдығын анықтаймыз. Сонда бұл ықтималдық көлемдердің өздерінің көбейтіндісіне пропорционал болу керек, яғни:

$$dW_{1,2} = R_2(r_1, r_2) dV_1 dV_2, \quad (3)$$

мұнда $R_2(r_1, r_2)$ функциясы – бинарлы корреляциялық функция.

Егер dV_1 және dV_2 көлемдері бір-бірінен алыс орналасқан деп болжасақ, онда бөлшектердің бұл көлемдерге түсу ықтималдығы тәуелсіз болады және ықтималдықтарды көбейту туралы теорема бойынша былай жазуға болады:

$$dW_{1,2} = dW_1 dW_2 = R_0^2 dV_1 dV_2.$$

Берілген ара қатыс барлық n бөлшектер координаталарының функциясы болып табылады және бұл n -ші ретті корреляциялық функция деп аталады. Бұрынғыдай, әрбір екі көлем арасындағы ара қашықтық ұлғайғанда, әрбір көлемде бөлшектерді табу ықтималдықтары тәуелсіз болады, яғни $|r_i - r_k| \rightarrow \infty$ болғанда. $R_1 = R_0$ болатыны анық. n -ші ретті корреляциялық функцияның жеке жағдайы – бұл $n=3$ болғанда, $R_3(r_1, r_2, r_3)$ тернарлық корреляциялық функция екенін атап кету керек [4].

Жоғарыда енгізілген dW ықтималдықтары, келесі түрде нормалануы мүмкін:

$$\int dW_1 = \int_V R_0 dV_1 = R_0 V = N, \quad (4)$$

мұнда N – сұйықтық бөлшектерінің толық саны:

$$\int dW_2 = \int_V \int_V R_2(r_1, r_2) dV_1 dV_2 = N(N-1). \quad (5)$$

Практикада есептеулердің ыңғайлылығы үшін корреляциялық функциялар мен ықтималдықтарды, біріншілері өлшемсіз болатындай, және нормалау интегралдары бірге теңелетіндей түрде қайта құру мақсатқа сәйкес болады. Ол үшін сұйықтықтың n бөлшектерінің берілген пішін үйлесімінің жаңа ықтималдықтарын енгіземіз:

$$dW_n = \frac{1}{V^n} F_n(r_1, r_2, \dots, r_n) dV_1 dV_2 \dots dV_n, \quad (6)$$

мұнда $dV_i = dx_i dy_i dz_i$ – i -ші бөлшектің координаталары.

Осы түрде анықталған корреляциялық функция, әрине, өлшемсіз болып табылады. Әрі қарай жаңа ықтималдықтың $\int dW_n = 1$ бірлігіне нормалануын талап етуге болады.

Бұл теңдеулерден шығатыны:

$$dW_n = \frac{N!}{(N-n)!} dW_n.$$

Соңғы теңдеу берілген көлемдердің пішін үйлесіміне жататын сияқты, қашан болмашы болып табылады, дәл қай бөлшектер бұл көлемдерді алып жатыр дегендей, dW_n ықтималдықтарын дұрыс түсіндіреді. Керісінше, ықтималдық N бөл-

шектердің кез келгеніне, ал $dV_1, dV_2, \dots$, көлемдері қалған $N-1$ бөлшектердің кез келгеніне жатады және т.с.с.

Енді сұйықтықтың барлық бөлшектерінің координаталарына тәуелді болатын, $U(r_1, r_2, \dots, r_n)$ жүйесінің толық потенциалдық энергиясын енгіземіз. Осы себепті, Больцман-Гиббс статистикасына сәйкес, бөлшектердің берілген пішін үйлесімінің ықтималдығы $\exp(-U/kT)$ факторына пропорционал. Осыдан:

$$dW_n = A \exp\left[-\frac{U(r_1, r_2, \dots, r_n)}{kT}\right] dV_1 dV_2 \dots dV_n. \quad (7)$$

Сөйтіп, F_n корреляциялық функциясы жүйенің потенциалдық энергиясымен анықталады. Сонымен, төмен ретті корреляциялық функцияларды табуға мүмкіндік беретін, [2, 7] жұмыста келтірілген, рекурренттік ара қатыстарды құруға болады.

Қазіргі уақытта аталған интегралдарды есептеп шығару әзірше тек бөлшектерінің тығыздығы аз газдар үшін ғана оңай жүргізілуі мүмкін. Ал статистикалық механиканың көмегімен сұйықтықтың корреляциялық функцияларын тікелей анықтауды орындау тым қиын. Мұндай жағдайларда берілген жұмыстың келесі бөлімдерінде көрсетілген, компьютерлік техниканың мүмкіндіктерін пайдаланып, Монте-Карло әдісі немесе молекулалық динамика әдісі сияқты сандық әдістерге жүгінеді.

Алайда, мұның жүйенің потенциалдық энергиясы жұптық өзара әрекеттесулер энергияларының қосындысы түрінде берілуі мүмкін болған жағдай үшін қолданылатынын, яғни аддитивті екенін атап кету керек. Қатаң айтқанда, мұндай шарт тек молекулалық сұйықтықтар (төрт хлорлы көміртек, бензол және т.с.с.) үшін ғана орындалады, бірақ сұйық металдар үшін емес, өйткені электрондық газдың энергиясы жұптық өзара әрекеттесулер үлестерінің қосындысымен беріле алмайды. Жоғарыда алынған теңдеулерді қандай да бір жуықтаулармен балқытылған металдарға да қолдануға болатынын, сонымен бірге электрондық газдың ерекшеліктерін және металл иондарына қатысты оның экрандаушы әрекетін ескеретін, атом аралық өзара әрекеттесудің әлдебір тиімді потенциалын пайдалану қажет екенін баса айту керек.

Сұйықтықтың макроскопиялық қасиеттерінің радиал үлестірім функциясымен және атом аралық өзара әрекеттесу потенциалымен байланысы.

Теңдеуді қолданудың маңызды мысалы жүйенің потенциалдық энергиясының бөлшектердің жұптық өзара әрекеттесуі энергияларының қосындысы түрінде берілуі мүмкін болғанда, сұйықтықтың толық энергиясын жуықтауда есептеп шығару болып табылады. Егер жұптық потенциалды $\varphi(r)$ арқылы белгілесе және бір атомды бөлшектің орташа кинетикалық энергиясы $\frac{3}{2}kT$ тең екенін ескерсе, онда толық энергия үшін келесі

ара қатыстар дұрыс болады:

$$U = \frac{3}{2}NkT + 2\pi N \int_0^\infty \varphi(r)R(r)r^2 dr, \quad (8)$$

$$\text{немесе } U = \frac{3}{2}WkT + \frac{2\pi N^2}{V} \int_0^\infty \varphi(r)q(r)r^2 dr,$$

$$\text{мұнда } q(r) = \frac{V}{N}R(r).$$

Алынған теңдеулер (8) сұйықтық энергиясы, қысым, $\varphi(r)$ жұптық потенциал және радиал үлестірім функциясы арасындағы байланысты сипаттайды, және термодинамикалық (энтропия, еркін энергия, беттік тартылу және т.с.с.) және кинетикалық (тұтқырлық, өздік диффузия коэффициенті және т.с.с.) сияқты сұйықтықтың басқа қасиеттерін анықтау үшін өте пайдалы болып табылады.

Жоғарыда келтірілген ара қатыстар теңдеуге байланыстырушы корреляциялық функцияларды енгізуге мүмкіндік береді.

Қорытынды

Жоғарыда сипатталған нәтижелер, корреляциялық функцияларды білудің сұйықтықтың бірқатар термодинамикалық қасиеттерін есептеу үшін қажет екенін көрсетеді. Төменде бірқатар жағдайларда сұйықтықтардың кинетикалық қасиеттерінің де әр түрлі корреляциялық функциялары бар интегралдар арқылы өрнектелетіні көрсетілген. Сондықтан $\varphi(r)$ белгілі атом аралық өзара әрекеттесу потенциалдары арқылы төмен ретті корреляциялық функцияларды есептеп шығару туралы міндетті қою мақсатқа сәйкес болады. Бұл міндетті бірқатар ғалымдар: М. Борн, Г. Грин, Дж. Криквуд, Н.Н. Боголюбов және т.б. шешті. Нәтижесінде $\varphi(r)$ және $R(r)$ функцияларын байланыстыратын, тым күрделі интеграл-дифференциалдық теңдеулер алынды.

[3, 8] жұмысқа негізделіп, Боголюбов-Борн-Грин теңдеуін мына түрде жаза аламыз:

$$kT \ln q(r) + \varphi(r) + \frac{2\pi N}{rV} \times \times \int_0^\infty [q(\rho) - 1] \left\{ \int_{r-\rho}^{r+\rho} E(x) x dx \right\} \rho d\rho = 0 \quad (9)$$

Боголюбов-Борн-Грин теңдеулері айтарлықтай күрделі және оларды шешудің ортақ әдісі әзірше жоқ. Табысты нәтижелер тек қарапайым міндеттер үшін ғана: тығыздығы аз жүйелер үшін (яғни реал газ үшін), Кулон заңы бойынша өзара әрекеттесетін бөлшектер жүйесі үшін және кейбір басқа жағдайлар үшін. Егер қандай да бір F_s функциясын нөмірлері кіші F_n функциялары арқылы өрнектеуге болса, айтарлықтай дәл шешім алуға болады. Сонда (9) теңдеулердің шексіз жүйесін «үзуге» және $F_1, F_2, \dots, F_n$ корреляциялық функцияларын, мысалы, тізбекті жуықтаулар әдісімен табуға болар еді. Боголюбов-Борн-Грин теңдеулерін жуықталған интегралдау әдістерінің бірін Дж. Криквуд ұсынды; бұл әдіс суперпозициялық

жуықтау деп аталады. Дж. Криквуд тернарлық корреляциялық функция үшін келесі ара қатысты жуықтап жазуға болатынын жорамалдады:

$$R_3(r_1, r_2, r_3) = \frac{1}{R_0^3} R_2(r_1, r_2) R_2(r_1, r_3) R_2(r_2, r_3). \quad (10)$$

Басқаша айтқанда, үш бөлшектің салыстырмалы орналасу ықтималдығы осы бөлшектер-

ден жекелеген жұптардың орналасуының сәйкес ықтималдықтарының көбейтіндісі болып табылады. Қорытындылай келе корреляциялық функцияларды білу сұйықтықтың бірқатар термодинамикалық қасиеттерін және сұйықтықтардың кинетикалық қасиеттерінің де әр түрлі корреляциялық функциялары бар интегралдар арқылы өрнектелетінін көрсетеді.

ӘДЕБИЕТТЕР ТІЗІМІ

1. Полухин И.Ф., Ухов В.Ф., Дзугутов М.М. Компьютерное моделирование динамики и структуры жидких металлов. – М.: Изд-во «Наука», 2010. – С. 324.
2. Ватолин Н.А. Структурное исследование металлических расплавов. – М.: ИКЦ «Академкнига», 2002. – С. 189-201.
3. Бернал Дж. Д. Геометрический подход к структуре жидкостей // Успехи химии. Т. 30. Вып. 10. 2006. – С. 1312-1323.
4. Issagulov A.S., Kazhikenova S.Sh., Shaikhova G.S., Mahmetova G.Sh., Kasymova L.G. Evaluation of pressure and volumetric modules in melted systems // Серия химия. Вестник Карагандинского университета. 2018. 2 (90).
5. Issagulov A.Z., Belomestny D., Shaikhova G.S., Zhurov V.V., Kasymova L.Zh., Zhetimekova G.Zh. «Functions of atoms radial distribution and pair potential of some semiconductors melts» // The Bulletin the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan. July-August 2019. Almaty, NAS RK. No. 4.
6. Shaikhova G.S., Shaikhova G.N. Traveling wave solutions for the two-dimensional. Zakharov-Kuznetsov-Burgers equation In // Серия математика. Вестник Карагандинского университета. 2018. № 4 (92).
7. Kazhikenova S.Sh., Ramazanov M.I., Khairkulova A.A., Shaikhova G.S. ε-Approximation of the temperatures model of inhomogeneous melts with allowance for energy dissipation // Серия математика. Вестник Карагандинского университета. 2018. № 2 (90).
8. Shaikhova G.S. Explanation Of The Cluster Structures Melting Mechanism And Their Influence On The Molten State's Physical And Chemical Nature. Complex Use Of Mineral Resources. No. 1 (313), 2021.

Общие теоретические концепции жидкого состояния с точки зрения статистической термодинамики

ШАИХОВА Гульназира Сериковна, к.т.н., и.о. доцента, shaikhova_2011@mail.ru,

НАО «Карагандинский технический университет имени Абылкаса Сагинова», Казахстан, Караганда, пр. Н. Назарбаева, 56.

Аннотация. Приведены общетеоретические концепции жидкого состояния с точки зрения статистической термодинамики, а также компьютерное моделирование динамических свойств жидкого состояния. Показано, что в расплавах из-за высокой подвижности его частиц и вследствие отсутствия дальнего порядка (как в кристаллической решетке) ближайшие окружения различных атомов или молекул могут различаться довольно сильно как по числу соседей, так и по их пространственному расположению. В этой связи произведен расчет корреляционных функций методом молекулярной динамики и функций радиального распределения. Охарактеризован машинный эксперимент по моделированию структуры расплавов, а также для построения геометрии кластерных структур. Рассмотрены конкретные алгоритмы их осуществления. Введены циклические граничные условия Борна-Кармана, базовая ячейка окружается собственными репликами, причем каждая такая реплика в точности повторяет микросостояния базовой решетки. Приведен общий алгоритм построения многогранников Вороного с помощью компьютерных программ.

Ключевые слова: парные потенциалы, радиальное распределение атомов, полупроводник, функционал плотности, структурный фактор, атомы, молекулярная динамика, кластерная структура, расплав, радиальное распределение, корреляционная функция.

General Theoretical Concepts of the Liquid State from the Point of View of Statistical Thermodynamics

SHAIKHOVA Gulnazira, Cand. Tech. Sci., Acting Associate Professor, shaikhova_2011@mail.ru,

NPJSC «Abylkas Saginov Karaganda Technical University», Kazakhstan, Karaganda, N. Nazarbayev Avenue, 56.

Abstract. The article presents General theoretical concepts of the liquid state from the point of view of statistical thermodynamics, as well as computer modeling of the dynamic properties of the liquid state. It is shown that in melts, due to the high mobility of its particles and the absence of a long-range order (as in a crystal lattice), the nearest surroundings of different atoms or molecules can differ quite significantly both in the number of neighbors and in their spatial location. In this regard, the correlation function was calculated using the molecular dynamics method and the radial distribution function. A machine experiment for modeling the structure of melts, as well as for constructing the geometry of cluster structures, is characterized. Specific algorithms for their implementation are considered. Cyclic Born-Karman boundary conditions are introduced, the base cell is surrounded by its own replicas, and each such replica exactly

repeats the microstates of the base lattice. A General algorithm for constructing Voronoi polyhedra using computer programs is given.

Keywords: *pair potentials, radial distribution of atoms, semiconductor, density function, structural factor, atoms, molecular dynamics, cluster structure, melt, radial distribution, correlation function.*

REFERENCES

1. Poluhin I.F., Uhov V.F., Dzugutov M.M. Komp'yuternoe modelirovanie dinamiki i struktury zhidkih metallov. – Moscow: Publ. «Nauka», 2010. – P. 324.
2. Vatolin N.A. Strukturnoe issledovanie metallicheskih rasplavov. – Moscow: IKC «Akademkniga», 2002. – Pp. 189-201.
3. Bernal Dzh. D. Geometricheskij podhod k strukture zhidkostej // Uspehi himii. T. 30, Vyp. 10. 2006. – Pp. 1312-1323.
4. Issagulov A.S., Kazhikenova S.Sh., Shaikhova G.S., Mahmetova G.Sh., Kasymova L.G. Evaluation of pressure and volumetric modules in melted systems // Serija himija. Vestnik Karagandinskogo universiteta. 2018. 2 (90).
5. Issagulov A.Z., Belomestny D., Shaikhova G.S., Zhurov V.V., Kasymova L.Zh., Zhetimekova G.Zh. «Functions of atoms radial distribution and pair potential of some semiconductors melts» // The Bulletin the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan. July-August 2019. Almaty, NAS RK. No. 4.
6. Shaikhova G.S., Shaikhova G.N. Traveling wave solutions for the two-dimensional. Zakharov-Kuznetsov-Burgers equation In. Serija matematika. Vestnik Karagandinskogo universiteta. 2018. No. 4 (92).
7. Kazhikenova S.Sh., Ramazanov M.I., Khairkulova A.A., Shaikhova G.S. ε -Approximation of the temperatures model of inhomogeneous melts with allowance for energy dissipation // Serija matematika. Vestnik Karagandinskogo universiteta. 2018. No. 2 (90).
8. Shaikhova G.S. Explanation Of The Cluster Structures Melting Mechanism And Their Influence On The Molten State's Physical And Chemical Nature. Complex Use of Mineral Resources. No. 1 (313), 2021.