

УДК 669.2

DOI: 10.31471/1993-9981-2021-1(46)-125-131

## МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ РОЗРАХУНКУ СТРУКТУРИ РІДИНИ (РОЗПЛАВУ) ІЗ ЗАСТОСУВАННЯМ ФУНКЦІЙ РОЗПОДІЛУ

*Т. О. Ваврик, О. С. Царева, О. Г. Малько, Л. М. Гобир, Н. Д. Подубинська*

*Інститут інформаційних технологій, Івано-Франківський національний технічний університет нафти і газу; 76019, м. Івано-Франківськ, вул. Карпатська, 15; e-mail: pta@nung.edu.ua*

У даній статті розглядається просторово-часове дослідження структури розплавів із застосуванням кореляційних функцій розподілу на основі фізико-хімічного аналізу. Авторами розглянуті властивості металічних розплавів та їх залежність від фізичного стану розплаву. Розглянуто динамічну структуру розплаву, поданої чисельне описання. Виділено бінарну функцію розподілу як таку, що найбільше відповідає структурі рідини. За допомогою функції атомного розподілу, якщо відомі потенціали взаємодії, можна знайти рівняння стану рідини системи, визначити її енергію, стиснення і ряд інших кінетичних і термодинамічних величин. Функція атомного розподілу дозволяє кількісно визначати параметри ближнього порядку в рідині. Авторами зазначено два підходи для теоретичного розрахунку функції атомного розподілу для кількісного визначення параметрів ближнього порядку в рідині, що базовані на інтегро-диференціальних рівняннях, які зв'язують кореляційні функції з потенціалами взаємодії.

Для реальних систем найбільш поширеними методами знаходження функції радіального розподілу є метод дифракції рентгенівських променів, нейронів або електронів. В даній статті представлені результати по дифракції рентгенівських променів розплавами Pb-Cd, розраховані функції радіального розподілу атомної густини представлені основні параметри функції радіального розподілу і результати модельної інтерпретації.

У статті доведено, що реалізація математичної моделі можлива через теоретичний розрахунок функцій розподілу. Автори взяли за основу розв'язок інтегро-диференціальних рівнянь, які включають, як рівняння повної та кореляційної функцій, так і рівняння, що пов'язує функції розподілу з парним потенціалом взаємодії. За допомогою функції радіального розподілу атомної густини на основі фізико-хімічного аналізу реалізовано запропоновану математичну модель. В результаті реалізації отримано залежності процентного вмісту атомів від координаційних чисел, розрахованих двома способами, у графічних результатах.

**Ключові слова:** математична модель, кореляція, структура рідини, інтегро-диференціальні рівняння, бінарна функція, функція атомного розподілу, модельна інтерпретація.

В данной статье рассматривается пространственно-временное исследование структуры расплавов с применением корреляционных функций распределения на основе физико-химического анализа. Авторами рассмотрены свойства металлических расплавов и их зависимость от физического состояния расплава. Рассмотрено динамическую структуру расплава, представленной численное описание. Выделена бинарная функция распределения как наиболее соответствующая структуре жидкости. С помощью функции атомного распределения, если известны потенциалы взаимодействия, можно найти уравнение состояния жидкости системы, определить ее энергию, сжатие и ряд других кинетических и термодинамических величин. Функция атомного распределения позволяет количественно определять параметры ближнего порядка в жидкости. Авторами отмечены два подхода для теоретического расчета функции атомного распределения для количественного определения параметров ближнего порядка в жидкости, основанные на интегро-дифференциальных уравнениях, связывающих корреляционные функции потенциалами взаимодействия.

Для реальных систем наиболее распространенными методами нахождения функции радиального распределения является метод дифракции рентгеновских лучей, нейтронов или электронов. В данной статье представлены результаты по дифракции рентгеновских лучей расплавами Pb-Cd, рассчитанные функции радиального распределения атомной плотности представлены основные параметры функции радиального распределения и результаты модельной интерпретации.

В статье доказано, что реализация математической модели возможна путем теоретического расчета функций распределения. Авторы взяли за основу решение интегро-дифференциальных уравнений, включающих, как уравнение полной и корреляционной функций, так и уравнения, связывающего функции распределения с парным потенциалом взаимодействия. С помощью функции радиального распределения атомной плотности на основе физико-химического анализа реализована предложенная математическая

модель. В результаті реалізації отримані залежності процентного вмісту атомів від координаційних чисел, розрахованих двома способами, в графічних результатах.

**Ключові слова:** математична модель, кореляція, структура рідкого, інтегро-дифференціальні рівняння, бінарна функція, функція атомного розподілу, модельна інтерпретація.

This article considers a spatio-temporal study of the structure of melts using the correlation functions of the distribution of physical and chemical analysis. The authors consider the properties of metallic melts and their dependence on the physical state of the melt. The dynamic structure of the melt is considered, the numerical description is given. The binary distribution function is distinguished as the one that best corresponds to the structure of the fluid. With the help of the atomic distribution function, if the interaction potentials are known, it is possible to find the equation of state of a system fluid, to determine its energy, compression, and a number of other kinetic and thermodynamic quantities. The atomic distribution function allows you to quantify the parameters of the short order in a liquid. The authors indicate two approaches for the theoretical calculation of the atomic distribution function to quantify short-range parameters in a fluid based on integro-differential equations that relate correlation functions to interaction potentials.

For real systems, the most common methods of finding the radial distribution function are the method of diffraction of X-rays, neutrons or electrons. This paper presents the results of X-ray diffraction by Pb-Cd melts, calculated functions of radial distribution of atomic density, presents the main parameters of the radial distribution function and the results of model interpretation.

The article proves that the implementation of the mathematical model is possible through the theoretical calculation of distribution functions. The authors took as a basis the solutions of integro-differential equations, which include both the equation of the complete and correlation functions, and the equation that connects the distribution functions with the even interaction potential. The proposed mathematical model is implemented using the function of radial distribution of atomic density on the basis of physicochemical analysis. As a result of realization, the dependences of the percentage of atoms on the coordination numbers calculated in two ways in the graphical results are obtained.

**Keywords:** mathematical model, correlation, fluid structure, integro-differential equations, binary function, atomic distribution function, model interpretation.

Температурний інтервал існування металічних розплавів, як будь-якої рідини, обмежений точками кристалізації і випаровування. Займаючи проміжне місце між газом і твердим тілом, металічні розплави мають гаму властивостей, характерних як для одного, так і для іншого стану. Питома вага цих властивостей залежить від фізичного стану металічного розплаву.

В області високих температур і великих питомих об'ємів металічний розплав, як і інші рідини, наближається до газів за рядом фізико-хімічних властивостей, а за певних умов (кристалічних умовах) для даної речовини відмінність між рідким і газоподібним станом зникає. Тому при вирішенні багатьох питань в області критичних температур для рідкого стану речовин застосовують квазігазові моделі, які інколи поширюють й на більш низькі температури [1]. Особливо часто їх застосовують для металічних розплавів, в яких зв'язок між частками здійснюється колективізованими валентними електронами.

Він, як і ван-дер-ваальсовий зв'язок, напрямлений і ненасичений [2].

В області низьких температур, особливо при температурах кристалізації, металічний розплав набуває рис подібності з твердим тілом за фізичними властивостями, механізму теплового руху частинок і їх взаємному положенню.

Координаційне число в металічних розплавах залежить від температури. Цю залежність можна пояснити тепловим рухом частинок розплаву. За Я.І. Френкелем у рідині частинки здійснюють коливання такого ж типу, як і в кристалах; але в стані рівноваги, відносно якого відбуваються ці коливання, не залишаються нерухомими, як у кристалах, а з часом змінюються [3]. При тривалому перебуванні частинок у часовому положенні рівноваги визначається формулою:

$$\tau = \tau_0 \exp(U / KT),$$

де

$\tau_0$  – період коливання частинок навколо часового положення рівноваги;

$U$  – енергія активації, яка обумовлена зв'язком розглянутих частинок із своїми сусідами і чисельно дорівнює роботі, які необхідно затратити для переходу із одного стану рівноваги в сусіднє;

$K$  – стала Больцмана.

Зі зростанням температури, час осілого життя частинок у часовому проміжку рівноваги зменшується і при деяких температурах трансляційні і коливальні рухи стають співрозмірними.

### **Аналіз сучасних закордонних і вітчизняних досліджень і публікацій**

Детальне обґрунтування близькості рідкого і твердого стану у межах температури кристалізації вперше було проведено Я. І. Френкелем в 1924 році. Він проаналізував експериментальні дані, які були на той час і загальні теоретичні дослідження таких процесів, як випаровування, дифузія і проходження електричного струму в твердих тілах при високих температурах, Я.І. Френкель зробив наступний висновок [3]:

«Плавлення рідини не глибоко змінює структуру, при плавленні зникає дальній порядок, але зберігається ближній порядок».

Подальші багато чисельні дослідження металічних розплавів [3-6] показали, що:

1) різні рідкі метали можуть мати різне упакування атомів;

2) в рідких металах поблизу температури кристалізації в невеликих областях зберігається певна впорядкованість в розміщенні атомів. При збільшенні температури ця впорядкованість розмивається;

3) в металах, які в твердому стані характеризуються щільною структурою, координаційне число при плавленні майже не змінюється, а при подальшому збільшенні температури воно зменшується;

4) в металах, які в твердому стані мають рихлу структуру, координаційне число при плавленні збільшується. Ущільнення структури ближнього порядку відбувається в деякому температурному інтервалі вище температури плавлення і досягається максимуму при  $T > T_{пл}$ .

Координаційне число з подальшим збільшенням температури зменшується

Загалом, уявлення про структуру металічних розплавів умовно розділяють [5] на дві групи. Розподіл залежить від того, що приймається дослідниками за структурну одиницю рідини: окремих атомів (моделі статистичної теорії рідини за І. З. Фішером [3]) чи деякі угруповання атомів, коли розглядаються цілі мікроугруповання атомів без ігнорування ролі одного атому. До другої групи належать варіанти теорії мікронеоднорідної будови рідини Стюарта [7]. Окрім того, існують дослідження, в основі яких лежить прагнення здійснити аналіз та узагальнення наявних концепцій про будову структури розплавів.

Як зазначено в [5], сучасні уявлення про будову рідких металів базують на результатах рентгеноструктурного, електронно- та нейтрографічного аналізів, досліджень їх фізико-хімічних властивостей, а також на методах машинного моделювання.

Окремо виділяються дослідження застосування функції розподілу. Зокрема, зазначається, що застосування, зокрема, функцій розподілу забезпечує статистичну керованість процесу дослідження в часі [9]. З іншого боку, зазначається [10] необхідність подальшого розвитку і вдосконалення методів математичного моделювання, розробки нових ефективних методів і засобів комп'ютерної реалізації математичних моделей

**Висвітлення невирішених раніше частин загальної проблеми** Пряме дослідження структури розплавів може бути зроблене за допомогою дифракції рентгенівського проміння, електронів або нейтронів.

Фур'є-перетворення експериментальних кривих розсіювання представляється можливістю визначення функції розподілу атомів густини, які описують взаємне розміщення частинок в рідині. Разом із тим математичне моделювання дозволяє зробити теоретичне, статистично кероване дослідження в умовах неможливості проведення експерименту.

**Формулювання цілей статті** Обґрунтувати можливість теоретичного розрахунку структури рідини (розплаву), визначити шляхи реалізації

математичної моделі з застосуванням функцій розподілу.

### Висвітлення основного матеріалу дослідження

При переході речовини із кристалічного стану в рідкий, як було сказано вище, руйнується дальній порядок у розміщенні частинок, з'являються трансляційні складові теплового руху. В рідині встановлюється своєрідна динамічна структура, яка характеризується ближнім порядком в розміщенні її складових частинок. Кількісно структура рідини описується функцією радіального розподілу атомною густиною  $\rho(r)$  або радіальною функцією розподілу  $w(r)$ . Функція  $\rho(r)$  містить основну інформацію про рівновагу структури рідини. Її розрахунок і аналіз – одна із головних задач дифракційних експериментів. Радіальну функцію  $\rho(r)$  можна розрахувати й теоретично, використовуючи кореляційні функції розподілу.

В статистичній теорії просторово-часового розподілу частинок рідини задається набором кореляційних функцій розподілу  $F_s$ , які виражаються ймовірністю конфігурації з однієї, двох, трьох і більше частинок рідини в деякому об'ємі.

За Боголюбовим ймовірність знаходження атомів групи  $S$  в елементах об'єму  $dv_1, dv_2, \dots, dv_s$  на відстані  $r_1, r_2, \dots, r_s$  від фіксованого атома при довільному розподілі останніх  $N-S$  атомів дорівнює:

$$dP(r_1, r_2, \dots, r_s) = F_s(r_1, r_2, \dots, r_s) \cdot \frac{dV_1 dV_2 \dots dV_s}{V^s} \quad (1.1)$$

де  $F_s(r_1, r_2, \dots, r_s)$  – кореляційні функції розподілу, які задовольняють умову нормування:

$$\frac{1}{V^s} \int \dots \int F_s(r_1, r_2, r_3, \dots, r_s) dV_1 dV_2 \dots dV_s = 1 \quad (1.2)$$

і пов'язані з конфігураційною функцією Гіббса [1,2]  $D_N(r_1, r_2, \dots, r_N)$ , яка описує положення всіх атомів системи відношенням:

$$F_s(r_1, r_2, \dots, r_s) = V^s \int \dots \int D_N(r_1, r_2, \dots, r_N) dV_{s+1} \dots dV_N \quad (1.3)$$

Між кореляційними функціями різних порядків існує співвідношення:

$$F_s(r_1, r_2, \dots, r_s) = \frac{1}{V} \int F_{s+1}(r_1, r_2, \dots, r_{s+1}) dV_{s+1} \quad (1.4)$$

згідно нього для обчислення функції  $F_1$  необхідно знати бінарну функцію  $F_2$ , а для визначення  $F_2 - F_3$  і т.д.

Із усіх кореляційних функцій найбільше значення для рідини має бінарна функція розподілу  $F_2(\vec{r}_1 \vec{r}_2)$ , яка представляє собою, згідно (1.2), ймовірність того, що в даний момент часу одна частинка рідини знаходиться в об'ємі  $dV_1$  біля  $\vec{r}_1$ , а інша – в об'ємі  $dV_2$  біля  $\vec{r}_2$ . Для однорідних та ізотропних систем, до яких частково належать гази і більшість рідин, функція  $F_2(\vec{r}_1 \vec{r}_2)$  не залежить від напрямку вектора  $\vec{r}_1$  і  $\vec{r}_2$ . Якщо врахувати, що в даних системах розподілу атомів навколо фіксованого є сферично-симетричним, то  $F_2(\vec{r}_1 \vec{r}_2)$  буде залежати тільки від взаємної відстані між парою асиметричних атомів:

$$F_2(\vec{r}_1 \vec{r}_2) = F_2(|r_1 - r_2|) = F_2(r). \quad (1.5)$$

Бінарна кореляційна функція розподілу  $F_2(r)$  співпадає з функцією радіального розподілу атомів  $w(r)$ , введеною Дебаєм для опису розташування атомів по відношенню до фіксованого.

В дифракційних дослідженнях замість радіальної функції зазвичай використовують функції розподілу атомів густини  $\rho(r)$ , запропоновану Церніком –Прінсом. Ці функції зв'язані між собою відношенням:

$$\rho(r) = \frac{N}{V} w(r) \quad (1.6) \quad (1.1)$$

де  $\frac{N}{V} = \bar{\rho}$  – середня атомна густина речовини.

Добуток  $4\pi \cdot r^2 \rho(r) \cdot d(r) = q(r) d(r)$  визначає середнє число атомів в (1.3) товщиною  $d(r)$ , який знаходиться на відстані  $r$  від фіксованого атома.

$q(r)$  – функція атомного розподілу.

Функція атомного розподілу дозволяє кількісно визначати параметри ближнього порядку в рідині. За положенням максимумів функції  $q(r)$  визначають радіуси координаційних сфер, а за площами під максимумами – середнє координаційне число. За допомогою функції атомного розподілу, якщо відомі потенціали

взаємодії, можна знайти рівняння стану рідини системи, визначити її енергію, стиснення і ряд інших кінетичних і термодинамічних величин. Сама функція атомного розподілу (ФАР) може бути обчислена теоретично або визначена експериментально.

Для теоретичного розрахунку ФАР використовують різноманітні інтегро-диференціальні рівняння, які зв'язують кореляційні функції з потенціалами взаємодії  $\varphi(r)$ . Можна виділити два основних напрямки розвитку цієї теорії [11]. Перший з них зв'язаний з підходом Борна-Гуріна-Івона, Кірквуда і Боголюбова. В даному підході використовується зв'язаний ланцюг рівнянь (1.4), із яких отримують рівняння Боголюбова- Борна-Гуріна-Івона (ББГІ):

$$KT\bar{V}_1 q(12) + q(12)\bar{V}_1 \varphi(12) + \rho \int \bar{V}_1 \varphi(13)q(123)d3 = 0 \quad (1.7)$$

Де  $q(123)$  – трипарна функція розподілу.

При розв'язку рівняння (1.7) частіше всього використовують суперпозицій не наближення Кірквуда, згідно якого трьохчасткова функція розподілу дорівнює добутку парних:

$$q(123) = q(12) \cdot q(23) \cdot q(31) \quad (1.8)$$

Фізично це означає, що в кожній трійці частинок кореляція двох не залежить від наявності третьої частинки.

Суперпозицій не наближення (1.8) дозволяє записати рівняння (1.7) в замкнутому вигляді:

$$KT\bar{V}_1 \ln q(12) + \bar{V}_1 \varphi(12) + \rho \int \bar{V}_1 \varphi(13)q(23)q(31)d3 = 0 \quad (1.9)$$

Другий підхід заснований на фізичному визначенні прямої і непрямої кореляції. Такі кореляції були введені Орнштейном-Церніхе, які запропонували інтегральне рівняння:

$$h(12) = c(12) + \rho \int c(13)h(23)d3 \quad (1.10)$$

де:

$h(12)$  - повна кореляційна функція;

$c(12)$  - пряма кореляційна функція.

Оскільки

$$h(12) = q(12) - 1 \quad (1.11)$$

Тоді формулу (1.10) можна вважати інтегральним рівнянням для парної функції розподілу  $q(r)$ , де також невідома функція  $c(r)$ .

Обидві невідомі функції Перкус –Йевик зв'язав співвідношенням:

$$c(r) = q(r) \cdot [1 - \exp(\varphi(r)/KT)] \quad (1.12)$$

Із рівняння (1.10) з урахуванням (1.12) можна отримати інтегральне рівняння яке зв'язує функцію розподілу з парним потенціалом взаємодії

$$q(12)e^{\varphi(12)/KT} = 1 + \rho \int [q(23) - 1]q(13) \cdot [1 - e^{\varphi(13)/KT}]$$

Рівняння (1.13) включає дві невідомі функції і для його розв'язку необхідні додаткові припущення. Тому для реальних систем найбільш поширеними методами знаходження функції радіального розподілу є метод дифракції рентгенівських променів, нейронів або електронів [12].

В даній статті представлені результати по дифракції рентгенівських променів розплавами Pb-Cd. В даній системі евтектики утворюються при 72 ат.% Pb, а перегин має місце приблизно в області еквіатомного складу. Досліджувались рідкі сплави із вмістом 10: 30: 50:72: і 90 % ат. Pb. Температури дослідження перевершували на 10 К температури ліквідус і представлені в таблиці 1.

Положення основного максимуму кривих інтенсивності (КІ) розплаву (1.8) 10 ат.% Pb відповідає  $2,50 \text{ \AA}^{-1}$  і з подальшим збільшенням вмісту свинцю максимуми КІ зсуваються вліво без будь-яких аномалій. Це свідчить про відсутність суттєвих структурних змін в залежності від концентрації компоненту. Характерною рисою кривих інтенсивності є наявність на деяких із них побічного максимуму у вигляді напливу. Положення такого напливу в найбільшій степені проявляється на КІ для розплавів із вмістом 10;50 і 72 ат. % Pb. Це свідчить про переважання квазіевтектичної структури в цих рідких сплавах. Розплав із вмістом 30 ат.% Pb характеризується більш мікронеординарною структурою як (1.10) середньостатистичними мікрообластями областями, так і з групами атомів одного сорту.

На основі експериментальних КІ розраховані функції радіального розподілу (ФРР) атомної густини. Основні параметри ФРР і результати модельної інтерпретації представлені в таблиці 1

Таблиця 1 – Основні параметри функції розподілу і результати модельної інтерпретації

Ат., % Pb	T, K	$r_l$	Z1	Z2	Z3
10	568	3,10	9,6	8,8	9,6
30	543	3,15	10,2	8,8	10,2
50	533	3,2	10,5	9,2	10,5
72	523	3,30	10,8	9,9	10,8
90	573	3,40	10,9	10,6	10,9

$r_l$  – середня міжатомна відстань, визначена за ФРР;

Z1 – площа під першим координаційним максимумом функції розподілення;

Z2 – координаційне число, розраховане в рамках моделі середньостатистичного розподілу атомів;

Z3 – координаційне число, розраховане в наближенні квазіевтетичного розподілу атомів

Залежності процентного вмісту Pb від координаційного числа, розрахованого в рамках моделі середньостатистичного розподілу атомів (Z2), зображено на рис.1 та процентного вмісту Pb від координаційного числа розрахованого в наближенні квазіевтетичного розподілу атомів (Z3) – на рис.2

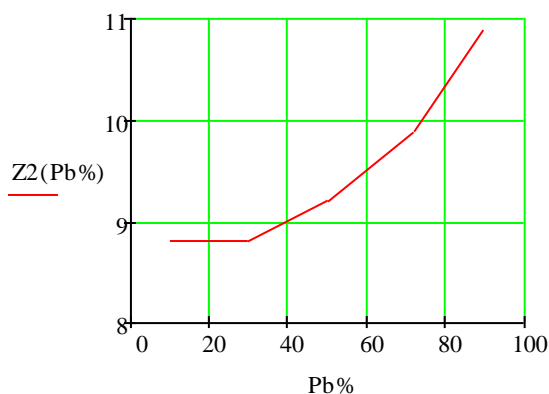


Рисунок 1- Залежність % вмісту Pb від Z2

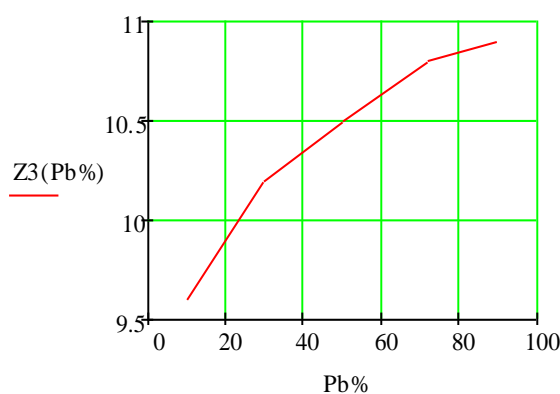


Рисунок 2- Залежність % вмісту Pb від Z3

### Висновок

Таким чином, реалізація математичної моделі можлива через теоретичний розрахунок функцій розподілу. В його основі лежить розв'язок інтегральних рівнянь, які включають, як рівняння повної та кореляційної функцій, так і рівняння, що пов'язує функції розподілу з парним потенціалом взаємодії. За допомогою функції радіального розподілу атомної густини на основі фізико-хімічного аналізу реалізовано запропоновану математичну модель. В результаті отримано залежності процентного вмісту атомів від координаційних чисел, розрахованих двома способами.

### Список використаних джерел

1. Гиршфельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. М., 1961.

2. Бараш Ю. С. Сили Ван-дер-Ваальса. - М.: Наука, 1988. - 344 с.

3. Френкель Я. И. Кинетическая теория жидкостей. Ленинград: Наука, 1975.

4. Ігнатович В. М. Аналіз парадокса Гіббса. Наукові записки АН вищої школи України. 2006. Т1. С. 32-37

5. Штаблавий І. І. Кореляції вільного об'єму та структури ближнього порядку в металевих розплавах з різним ступенем мікронеоднорідності атомного розподілу. дис. на здоб. канд. фіз. наук. Львів, 2020. С. 37

6. Фишер И. З. Статистическая теория жидкостей. М., 1961. 192 с.

7. Stewart G. X-ray differentiation in liquids. Review of Modern Physics. 1930. P. 116-122 режим доступу <https://journals.aps.org/rmp/abstract/10.1103/RevModPhys.2.116>

8. Пригунова А. С., Петров С. С. Будова металевих розплавів і її взаємозв'язок із твердим станом. *Металознавство та обробка металів*. 2016. №2. С. 17-29

9. Віткін Л. М., Ігнаткін В. У. Використання функцій розподілу ймовірностей для контролю статистично керованих процесів. *Збірник наукових праць Харківського університету Повітряних сил імені І. Кожедуба*. 2008. Вип. 2(17). С. 88

10. Ключка М. Особливості застосування інтегро-диференціальних рівнянь для моделювання динаміки електричних кіл. *Вісник ЧДТУ*. 2013. № 4. С. 59

11. Казіміров В. П., Сокольський В. Е., Роїк О. С., Самсоніков О. В. Структура неупорядкованих систем. *Теорія, експериментальні методи, моделювання: Монографія*. 2009. 319 с.

12. Клым Н. М., Мудрий І. С., Петрук А. А. Близний порядок в расплавах системы Pb-Cd. *Физика*. 1982. №8. С. 109-111

8. Prigunova A. S., Petrov S. S. Budova metaleviah rozplaviv i yi yi vzaemozv'yazok iz tverdim stanom. *Metaloznavstvo ta obrobka metalliv*. 2016. #2. P. 17-29

9. Vitkin L. M., Ignatkin V. U. Viktoristannya funktsiy rozpodilu ymovirnostey dlya kontrolyu statistichno kerovanih protsesiv. *Zbirnik naukovih prats Harkivskogo univrsitetu Povitryanih sil Imeni I. Kozheduba*. 2008. Vip. 2(17). P. 88

10. Klyuchka M. Osoblivosti zastosuvannya integro-diferentsialnih rivnyan dlya modelyuvannya dinamiki elektrichnih kil. *Visnik ChDTU*. 2013. # 4. P. 59

11. Kazimirov V. P., Sokolskiy V. E., RoYik O. S., Samsonikov O. V. Struktura neuporyadkovanih sistem. *Teoriya, eksperimentalni metodi, modelyuvannya: Monografiya*. 2009. 319 p.

12. Klyim N. M., Mudryiy I. S., Petruk A. A. Blizhniy poryadok v rasplavah sistemyi Pb-Cd. *Fizika*. 1982. #8. p. 109-111

## References

1. Girshfelder Dzh., Kertiss Ch., Berd R. *Molekulyarnaya teoriya gazov i zhidkostey*. – M., 1961p.

2. Barash Yu. S. *Sili Van-der-Vaalsa*. - M.: Nauka, 1988. - 344 p.

3. Frenkel Ya. I. *Kineticheskaya teoriya zhidkostey/ Ya. I. Frenkel*. Leningrad: Nauka, 1975.

4. Ignatovich V. M. *Analiz paradoksa Gibbsa*. *Naukovi zapiski AN vischoyi shkoli Ukraini*. 2006. T1. p. 32-37

5. Shtablaviy I. I. *Korelyatsiyi vlnogo ob'emu ta strukturi blizhnogo poryadku v metaleviah rozplavah z rlnim stupenem mlkroneodnorodnostI atomnogo rozpodilu*. dis. na zdob. kand. fiz. nauk. Lviv, 2020. P. 37

6. Fisher I. Z. *Statisticheskaya teoriya zhidkostey*. M., 1961. 192 p.

7. Stewart G. X-ray differentiation in liquids. *Review of Modern Physics*. 1930. P. 116-122  
режим доступу  
<https://journals.aps.org/rmp/abstract/10.1103/RevModPhys.2.116>