

**КОМПЛЕКСНЫЙ АНГАРМОНИЗМ В ТЕРМОДИНАМИКЕ УСТОЙЧИВОСТИ
ФАЗОВОГО СОСТОЯНИЯ****А.В.Христов, Д.А.Червинский, В.В.Шелест****COMPLEX ANHARMONICITY IN THERMODYNAMICS OF PHASE STABILITY****A.V.Khristov, D.A.Chervinsky, V.V.Shelest***Донецкий физико-технический институт им. А.А.Галкина, efbji@list.ru*

Основываясь на принципах термодинамики устойчивости состояния однородной равновесной системы, в работе продемонстрирована фундаментальная связь между ангармонизмом конденсированного состояния вещества и его физическими свойствами. В данной работе развиты представления, основанные на термодинамике устойчивости однородного состояния системы, с точки зрения ангармонизма. Получены различные формы детерминанта устойчивости в зависимости от коэффициентов устойчивости и параметров, характеризующих ангармонические свойства системы. Определена связь всех калориметрических коэффициентов с комплексным ангармонизмом конденсированного состояния. Получены зависимости детерминанта устойчивости фазового состояния системы от калориметрических коэффициентов.

Ключевые слова: ангармонизм, термодинамические коэффициенты, параметр Грюнайзена, калориметрия, детерминант устойчивости

Для цитирования: Христов А.В., Червинский Д.А., Шелест В.В. Комплексный ангармонизм в термодинамике устойчивости фазового состояния // Вестник НовГУ. Сер.: Технические науки. 2021. №4(125). С.72-76. DOI: [https://doi.org/10.34680/2076-8052.2021.4\(125\).72-76](https://doi.org/10.34680/2076-8052.2021.4(125).72-76)

Based on the principles of thermodynamics of stability of the state of a homogeneous equilibrium system, the study demonstrates the fundamental link between the anharmonicity of the condensed state of matter and its physical properties. In this paper, the concepts based on the thermodynamics of the stability of the homogeneous state of the system have been developed in terms of anharmonism. Various forms of the stability determinant have been obtained depending on the stability coefficients and parameters characterizing the anharmonic properties of the system. The relation of all calorimetric coefficients with the complex anharmonicity of the condensed state has been determined. The dependences of the system phase stability determinant on the calorimetric coefficients have been obtained.

Keywords: anharmonicity, thermodynamics coefficients, Gruneisen parameter, calorimetry, stability determinant

For citation: Khristov A.V., Chervinsky D.A., Shelest V.V. Complex anharmonicity in thermodynamics of phase stability // Vestnik NovSU. Issue: Engineering Sciences. 2021. №4(125). P.72-76. DOI: [https://doi.org/10.34680/2076-8052.2021.4\(125\).72-76](https://doi.org/10.34680/2076-8052.2021.4(125).72-76)

Введение

Развитие нанотехнологий, поиски альтернативных источников энергии, развитие биофизики, физической химии и генетики вызвали интенсивное изучение многокомпонентных систем и высокомолекулярных биологических объектов (миоглобин, геном и т.д.). В связи с этим внимание снова обращено к относительно простым, но эффективным универсальным математическим методам описания свойств вещества, только уже на расширенном базисе и в более продвинутой интерпретации. Такая стратегия теоретического изучения сложных систем в физике конденсированного состояния и химической термодинамике помогает обнаружить общие принципы, скрывающиеся за разнообразием систем и свойств.

С нашей точки зрения, в качестве необходимой предпосылки понимания и решения фундаментальных проблем необходимо с самых общих позиций рассматривать ангармонизм. Существует множество важных физических явлений, которые не могут быть объяснены чисто гармонической теорией, поскольку полностью обусловлены нелинейными членами в разложении энергии взаимодействия атомов/ионов в

окрестности ее равновесного значения. Принципиальной особенностью ангармонизма является связь между частотой колебаний осцилляторов и смещением положения их равновесия, а также их зависимость от температуры [1-3]. С точки зрения термодинамики ангармонизм определяет тепловое расширение тела и связь с ним частотных характеристик осцилляторов.

Важнейшие из явлений, основную роль в которых играет ангармонизм: эффект теплового расширения, зависимость упругих постоянных от объема и температуры, несовпадение адиабатических и изотермических упругих постоянных, отличие удельной теплоемкости при постоянном давлении от аналогичной величины при постоянном объеме. Наиболее важное кинетическое свойство, определяемое ангармонизмом — теплопроводность. Целесообразность изучения явления ангармонизма обусловлена тем обстоятельством, что в подавляющем большинстве вопросов физики твердого тела наиболее существенные эффекты связаны с колебаниями (решетки, отдельных блоков и т.д.), отклоняющимися от гармонического приближения. С этой точки зрения эффекты, обусловленные электрон-фононным взаимодействием, предопределяют многие особенности вещества, включая динамику

кристаллической решетки, спектроскопию и фазовые превращения. Роль ангармонизма существенна во всех процессах передачи энергии колебаниями решетки.

Принципиальным положением при учете ангармонизма является то, что ангармонизм как явление неразрывно связан с устойчивостью равновесного состояния системы. При этом ангармонизм должен быть комплексным, т. е. наряду с гармонической частью гамильтониан осциллятора содержит как линейный член, так и нелинейные составляющие. Более того, линейная часть должна присутствовать обязательно, а нелинейные, по крайней мере, должны быть третьей и четвертой степеней [1,4,5].

Комплексный ангармонизм системы в термодинамическом представлении характеризуется коэффициентами объемного расширения при постоянном давлении (α_P) и при адиабатных изменениях (α_S), коэффициентом Грюнайзена (γ_G):

$$\alpha_P = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P, \quad \alpha_S = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_S, \quad \gamma_G = V \left(\frac{\partial P}{\partial U} \right)_V.$$

Физическая взаимообусловленность параметров связана с комплексным ангармонизмом и выражается через соотношение Грюнайзена, записанное в разных формах [6-8]:

$$\gamma_G = \frac{V}{C_V} \alpha_P K_T = -\frac{1}{T \alpha_S} = \frac{P V}{C_V} \beta_V,$$

где $K_T = -V(\partial P / \partial V)_T$ — изотермический коэффициент упругости, а $\beta_V = P^{-1}(\partial P / \partial T)_V$ — изохорический коэффициент изменения давления при термическом процессе. Соотношение Грюнайзена дает следующую связь между теплоемкостями — $C_P = C_V(1 + \gamma_G \alpha_P T)$, всецело определяемую ангармонизмом макросистемы (в гармоническом приближении имеем $C_P = C_V$) [9].

Продвинутом методом описания фазовых переходов (ФП) является теория, называемая термодинамикой устойчивости фазового состояния [10,11]. В общепринятом смысле ФП — это коллективное явление, происходящее в системе при строго определенных значениях T , P и других величин, тогда как в реальности часто встречаются ФП, протекающие на конечном интервале изменения термодинамических сил (ΔT , ΔP). Формализм термодинамики устойчивости фазового состояния, описывая классические ФП I и II родов, предоставляет мощный аппарат описания ФП, называемых разными авторами «смешанным типом» [12,13], «размытым типом» [1, 14-16], «переходом типа смещение» [12-14,17].

Наиболее общий подход к изучению особенностей вещества, используемый авторами, формулируется следующим образом. За основу берется такая наиболее универсальная характеристика термодинамической системы, как матрица термодинамической устойчивости [10,11,15,16], которая в частном варианте сводится к детерминанту устойчивости фазы (D_{st}). Этот параметр может быть выражен через коэффициенты устойчивости (КУ), которые описывают тепловые и механические свойства среды. КУ могут быть переопределены в терминах комплексного ангармонизма. Таким же образом можно извлечь информацию о связи калориметрических коэффициен-

тов с комплексным ангармонизмом и о непосредственном их влиянии на устойчивость системы.

В отличие от базовой теории термодинамики устойчивости равновесного фазового состояния системы [10,11] такие параметры как D_{st} и КУ выражаются через параметры калориметрии и комплексного ангармонизма. При этом рассмотрение калориметрических свойств системы проводится в полном объеме, не ограничиваясь традиционными величинами — теплоемкостями C_P и C_V . Связь калориметрических коэффициентов с ангармонизмом, их роль в формировании устойчивости равновесного фазового состояния системы и рассматривается в статье, что, по мнению авторов, позволит делать фундаментальные выводы и прогнозы в отношении ФП в веществе.

Определение калориметрических величин и их связь с комплексным ангармонизмом

Наиболее употребляемые в теории и измеряемые в эксперименте — это теплоемкости $C_P(T, P)$ и $C_V(T, V)$, которые, выражаемые соответственно через производные $\left(\frac{\partial Q}{\partial T} \right)_P^{(V)}$ и $\left(\frac{\partial Q}{\partial T} \right)_V^{(P)}$, определяются каждая на множестве (T, P) и (T, V) . Здесь верхний индекс обозначает тип калориметрического процесса (T — термический, V — хорический и P — барический). Изохорическая и изобарическая теплоемкости записываются как

$$C_V(T, V) = \left(\frac{\partial Q}{\partial T} \right)_V = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_V = TV \frac{\alpha_P^2 K_T^2}{K_S - K_T}, \quad (1)$$

$$C_P(T, P) = \left(\frac{\partial Q}{\partial T} \right)_P = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_P = TV \frac{\alpha_P^2 K_T K_S}{K_S - K_T}, \quad (2)$$

где K_T , K_S — изотермический и адиабатический коэффициенты упругости соответственно.

Для CV при переходе к термодинамическим коэффициентам получаем:

$$C_V = -TV K_T \alpha_S \alpha_P = -TV P \alpha_S \beta_V. \quad (3)$$

В развиваемой теории также можно использовать безразмерный параметр, в случае конденсированной среды связанный с ангармонизмом [9,10,18],

$$\gamma = C_P / C_V, \quad (4)$$

который может быть преобразован к виду

$$\gamma = 1 + \gamma_G \alpha_P T. \quad (5)$$

Менее употребляемые калориметрические коэффициенты $\left(\frac{\partial Q}{\partial T} \right)_T^{(P)} = I_T^{(P)}$ (изотермическая величина, характеризующая поглощение/выделение теплоты при изменении объема системы в барических процессах), $\left(\frac{\partial Q}{\partial P} \right)_T^{(V)} = I_T^{(V)}$ (подобная величина для хорического процесса) являются соответственно функциями от (T, V) и (T, P) и согласно [19] выражаются через коэффициенты комплексного ангармонизма следующим образом:

$$I_T^{(P)} = \left(\frac{T}{V} \right) C_V \gamma_G, \quad (6)$$

$$I_T^{(V)} = -TV \alpha_P. \quad (7)$$

Наименее употребляемые калориметрические коэффициенты $\left(\frac{\partial Q}{\partial V}\right)_P^{(T)} = m_P^{(T)}$, $\left(\frac{\partial Q}{\partial P}\right)_V^{(T)} = m_V^{(T)}$, являющиеся функциями переменных (P, V) и характеризующие соответственно процессы изменения теплоты в результате изотермического сдвигания (m_V) и изобарического расширения (m_P), можно выразить через коэффициенты комплексного ангармонизма следующим способом [7]:

$$m_P^{(T)} = \frac{1}{V} \frac{C_P}{\alpha_P}, \quad (8)$$

$$m_V^{(T)} = \frac{V}{\gamma_G}. \quad (9)$$

Эти коэффициенты также выражаются формулами [19]:

$$m_V^{(T)}(P, V) = \left(\frac{\partial Q}{\partial P}\right)_V = T \left(\frac{\partial S}{\partial P}\right)_V = -TV\alpha_S = \frac{C_V}{P\beta_V}, \quad (10)$$

$$m_P^{(T)}(P, V) = \left(\frac{\partial Q}{\partial V}\right)_P = T \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_P = \frac{C_P}{C_V} \cdot \frac{K_T}{\gamma_G} \quad (11)$$

Коэффициенты, характеризующие соответственно теплоту изотермического сдвигания и изотермического расширения [19], имеют вид:

$$l_T^{(V)}(T, P) = T \left(\frac{\partial S}{\partial P}\right)_T = -T\gamma_G \frac{C_V}{K_T} = \frac{C_V}{K_T \alpha_S}, \quad (12)$$

$$l_T^{(P)}(T, V) = T \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T = TP\beta_V. \quad (13)$$

Термодинамика устойчивости фазы

Согласно термодинамике устойчивости необходимым условием устойчивости фазы является положительность второй вариации энергии Гиббса $\delta^2 G > 0$, что влечет положительность детерминанта устойчивости D_{st} :

$$D_{st} = \begin{vmatrix} \frac{\partial^2 U}{\partial S^2} & \frac{\partial^2 U}{\partial V \partial S} \\ \frac{\partial^2 U}{\partial S \partial V} & \frac{\partial^2 U}{\partial V^2} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \left(\frac{\partial T}{\partial S}\right)_V & \left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_S \\ -\left(\frac{\partial P}{\partial S}\right)_V & -\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_S \end{vmatrix} = \frac{\partial(T, -P)}{\partial(S, V)} > 0, \quad (14)$$

и

$$\left(\frac{\partial T}{\partial S}\right)_V = \frac{T}{C_V} > 0, \quad \left(-\frac{\partial P}{\partial V}\right)_S > 0. \quad (15)$$

Условия $0 \leq D_{st} \leq \infty$ и $D_{st} = 0$ определяют границу устойчивости фазы.

Преобразуем D_{st} к диагональной форме, принимая вид произведения соответствующих КУ. В одном случае получаем [20]:

$$\begin{aligned} D_{st} &= \frac{\partial(T, -P)}{\partial(S, V)} = \frac{\partial(T, -P)}{\partial(S, -P)} \cdot \frac{\partial(S, -P)}{\partial(S, V)} = \\ &= \left(\frac{\partial T}{\partial S}\right)_P \cdot \left(-\frac{\partial P}{\partial V}\right)_S = \left(\frac{T}{C_P}\right) \cdot \left(\frac{K_S}{V}\right). \end{aligned} \quad (16)$$

В другом случае аналогично получается D_{st} вида

$$\begin{aligned} D_{st} &= \frac{\partial(T, -P)}{\partial(S, V)} = \frac{\partial(T, -P)}{\partial(T, V)} \cdot \frac{\partial(T, V)}{\partial(S, V)} = \\ &= \left(\frac{\partial T}{\partial S}\right)_V \cdot \left(-\frac{\partial P}{\partial V}\right)_T = \left(\frac{T}{C_V}\right) \cdot \left(\frac{K_T}{V}\right). \end{aligned} \quad (17)$$

Отметим, что стандартное определение D_{st} [10, 11], отраженное в формулах (16) и (17), выступает

в виде двух сомножителей, один из которых как КУ характеризует термические свойства вещества, а другой — упругие. При этом при наличии в обоих случаях зависимости от объема в (16) ангармонизм в основном проявляется в термической составляющей (C_P), а в (17) — через механическую (K_T).

Опираясь на такие параметры ангармонизма, как изобарический коэффициент теплового расширения и параметр Грюнайзена, D_{st} выражается через параметры ангармоничности в следующих альтернативных формах [7, 20]:

$$D_{st} = T\gamma_G / (V^2 \alpha_P),$$

$$D_{st} = (\gamma - 1) / (V^2 \alpha_P^2), \quad (18)$$

$$D_{st} = -1 / (V^2 \alpha_P \alpha_S).$$

Параметры в (18), вообще говоря, зависят от термодинамических переменных, в частности от температуры: $\gamma = \gamma(T)$, $V = V(T)$, $\alpha_P = \alpha_P(T)$, $\gamma_G = \gamma_G(T)$. Таким образом, соотношения (18) демонстрируют нелинейную температурную зависимость КУ и D_{st} , что подтверждается работами [11, 21]. Более того, все эти величины, как следует из предлагаемой теории, могут также зависеть от давления и объема.

Связь детерминанта устойчивости с калориметрическими коэффициентами

Термодинамика устойчивости позволяет найти и альтернативные соотношения, используя калориметрические коэффициенты. Опираясь на (8), (9) и (18) и учитывая теплоту изобарического расширения $m_P^{(T)}$ и теплоту изохорического сдвигания $m_V^{(T)}$ на множестве (P, V) , детерминант устойчивости выглядит так:

$$D_{st} = \frac{T}{C_P} \frac{m_P^{(T)}}{m_V^{(T)}}. \quad (19)$$

Используя определение детерминанта устойчивости в виде (18), из формул (6) и (7) получаем

$$D_{st} = -\frac{T}{C_V} \frac{l_T^{(P)}}{l_T^{(V)}}. \quad (20)$$

Исходя из эквивалентных формулировок (19), (20) и связи (5) легко определяется следующее нетривиальное соотношение, связывающее в единой формуле все шесть калориметрических коэффициентов,

$$\gamma = -\frac{m_P^{(T)}}{m_V^{(T)}} \frac{l_T^{(V)}}{l_T^{(P)}}. \quad (21)$$

Выводы

Наиболее контрастно ангармонизм как комплексное явление проявляется в твердом теле при колебаниях решетки и составляющих ее элементов, особенно в так называемых молекулярных кристаллах, где структурными элементами решетки выступают макромолекулы. Примерами таких структур и связанных с ними физических эффектов служат металлоорганические комплексные соединения, обнаруживающие термически- и пьезоиндуцированные фазовые превращения типа низкий спин — высокий спин [1, 15, 16, 20–24].

Негармонические эффекты проявляются двумя путями. Первый связан с расширением решетки. Вследствие изменения объема процесс сопровождается изменением энергии мод колебаний, оставляя их независимыми. В результате изменяются их частоты. Параболы адиабатических потенциалов, отражающие движение гипотетических осцилляторов, могут сдвигаться относительно друг друга, изменять наклон своих ветвей, в результате чего эти ветви сближаются или, наоборот, раздвигаются — этому соответствует изменение частот [1,22]. А кроме того, в твердом теле ветви парабол могут симметрично или несимметрично деформироваться (добавляются нелинейные эффекты).

Как показывает теория [1-5,9-11,25-28], колебания решетки твердого тела — это кооперативный процесс с ангармоническими эффектами комплексного характера. Именно такое поведение конденсированной среды и отражает теория термодинамической устойчивости. В нашей работе это подтверждено выведенными формулами, описывающими влияние комплексного ангармонизма на калориметрические коэффициенты, коэффициенты устойчивости термодинамической фазы, детерминант устойчивости. Подчеркнем, что в нашей работе выполнены две важные задачи: определены калориметрические коэффициенты и выяснено их влияние на устойчивое состояние равновесия термодинамической системы. В итоге был получен ряд нетривиальных термодинамических соотношений, которые классическая литература не рассматривает. Используя общепринятый тезис о связи тепловых и механических свойств системы, мы убедительно раскрываем более чем тесную связь этих свойств.

Предлагаемый подход обеспечивает правильное понимание степени устойчивости термодинамической фазы системы, а в конечном счете — позволяет осознать физические основы фазовой устойчивости и, соответственно, фазовых превращений.

1. Шелест В.В., Христов А.В., Левченко Г.Г. Роль ангармонизма в системах со спиновым кроссовером // ФНТ. 2016. Т.42. №6. С.644-654.
2. Берсукер И.Б. Эффект Яна-Теллера и вибронные взаимодействия в современной химии. М.: Наука, 1987. 344 с.
3. Берсукер И.Б. Электронное строение и свойства координационных соединений. Л.: Химия, 1976. 352 с.
4. Ашкрофт Н., Мермин Н. Физика твердого тела, Т.2. М.: Мир, 1979. 486 с.
5. Фейнман Р. Статистическая механика. М.: Мир, 1978. 408 с.
6. Шелест В.В., Червинский Д.А. Основы и особенности применения внешних дифференциальных форм в физике конденсированной среды на примере термодинамики // Труды VIII Междунар. науч. конференции «Актуальные проблемы физики твердого тела». Минск, 2018. Т.2. С.110-112.
7. Шелест В.В., Христов А.В. Связь калориметрических коэффициентов с комплексным ангармонизмом и их роль в термодинамике устойчивости равновесного фазового состояния системы // ФТВД. 2019. Т.29. №4. С.73.
8. Шелест В.В., Червинский Д.А. Применение исчисления дифференциальных форм в термодинамике. V. Аспекты применения внешних дифференциальных форм к системам с переменным числом частиц // ФТВД. 2020. Т.30. №2. С.5-38.

9. Жирифалько Л. Статистическая физика твердого тела. М.: Мир, 1975. 372 с.
10. Базаров И.П. Термодинамика. М.: Высшая школа, 1991. 376 с.
11. Семенченко В.К. Избранные главы теоретической физики. М.: Просвещение, 1966. 396 с.
12. Ормонт Б.Ф. Введение в физическую химию и кристаллохимию полупроводников. М.: Высшая школа, 1973. 656 с.
13. Пенкаля Т. Очерки кристаллохимии. Л.: Химия, 1974. 496 с.
14. Кацнельсон А.А. Введение в физику твердого тела. М.: Изд-во МГУ, 1984. 293 с.
15. Levchenko G., Khristov A., Kuznetsova V., Shelest V.I. Pressure and temperature induced high spin-low spin phase transition: macroscopic and microscopic consideration // Phys. Chem. Solids. 2014. Vol.75. №8. P.966-971.
16. Shelest V.V., Hristov A.V., Prokhorov A.Yu., Chervinskii D.A. Non-conventional standpoint on spin crossovers in the organometallic compounds of iron group // JPMT. 2015 Vol.1(2). P.40-45. DOI: <https://doi.org/10.11648/j.jmpt.20150102.14>
17. Вакс В.Г. Введение в микроскопическую теорию сегнетоэлектриков. М.: Наука, 1973. 328 с.
18. Румер Ю.Б., Рывкин М.Ш. Термодинамика, статистическая физика и кинетика. М.: Наука, 1972. 400 с.
19. Шелест В.В., Христов А.В., Червинский Д.А. Влияние комплексного ангармонизма на дилатометрические и калориметрические свойства конденсированных систем в формализме термодинамики устойчивости равновесного фазового состояния // ФТВД. 2020. Т.30. №4. С.18-33.
20. Шелест В.В., Христов А.В., Червинский Д.А. Особенности влияния ангармонизма на устойчивость равновесного состояния однородной системы в концепции термодинамики // ФТВД. 2018. Т.28. №3. С.54-64.
21. Шелест В.В., Червинский Д.А., Христов А.В. О некоторых принципиальных особенностях механизма спиновой поляризации и термических фазовых превращений низкий спин-высокий спин в комплексных соединениях, содержащих двухвалентные ионы переходных металлов группы железа // ФТВД. 2017. Т.27. №1. С.117-136.
22. Shelest V., Hristov A., Chervinskii D., Rummyantsev V. Thermodynamic potentials theory aspects in external differential forms calculus representation // J. Photonic Mat. Tech. 2017. Vol.3(2). P.6-13. DOI: <https://doi.org/10.11648/j.jmpt.20170302.11>
23. Шелест В.В., Христов А.В., Червинский Д.А. О принципиальных особенностях механизма локального спинового распределения и термических фазовых превращений типа низкий спин - высокий спин в комплексных соединениях, содержащих координированные двухвалентные ионы переходных металлов группы железа // Вестник Луганского национального ун-та им. В.Даля. 2018. Т.5. №11. С.144-146.
24. Шелест В.В., Христов А.В. Особая роль комплексного ангармонизма в устойчивости равновесного фазового состояния конденсированной среды // Вестник Луганского национального ун-та им. В.Даля. 2019. Т.7. №25. С.131-134.
25. Бетгер Х. Принципы динамической теории решетки. М.: Мир, 1986. 392 с.
26. Рейсленд Дж. Физика фононов. М.: Мир, 1975. 367 с.
27. Толпыго К.Б. Физические свойства решетки типа каменной соли, построенной из деформируемых ионов // ЖЭТФ. 1950. Т.20. Вып.6. С.497-509.
28. Толпыго К.Б. Динамика кристаллической решетки, построенной из деформированных ионов: матем. сборник. Киев: Труды КГУ, 1951.

References

1. Shelest V.V., Hristov A.V., Levchenko G.G. Rol' angarnonizma v sistemakh so spinovym krossoverom [The role of anharmonicity in systems with a spin crossover]. Fizika nizkikh temperatur – Low Temperature Physics, 2016, vol. 42, no. 6, pp. 644-654.
2. Bersuker I.B. Jeffekt Jana-Tellera i vibronnye vzaimodejstviya v sovremennoj himii [The Jahn-Teller effect and

- vibronic interactions in modern chemistry]. Moscow, Nauka Publ., 1987. 344 p.
3. Bersuker I.B. Elektronnoye stroeniye i svoystva koordinatsionnykh soyedineniy [Electronic structure and properties of coordination compounds]. Leningrad, Khimiya Publ., 1976. 352 p.
 4. Ashcroft N, Mermin N, Solid State Physics. Vol. 2, 1976, 1, New York: Holt, Rinehart and Winston. 826 p. (Russ. ed.: Ashcroft N., Mermin N. Fizika tverdogo tela. T. 2. Moscow, Mir Publ., 1979. 486 p.).
 5. Feynman R. Statistical Mechanics. Massachusetts: W.A. Benjamin Inc., 1972. (Russ ed.: Feynman R. Statisticheskaya mehanika. Moscow, Mir Publ., 1978. 408 p.).
 6. Shelest V.V., Hristov A.V., Chervinsky D.A. Osnovy i osobennosti primeneniya vneshnikh differentsial'nykh form v fizike kondensirovannoy sredy na primere termodinamiki [Fundamentals and features of the application of external differential forms in condensed matter physics on the example of thermodynamics]. Trudy VIII Mezhdunar. nauch. konferentsii "Aktual'nyye problemy fiziki tverdogo tela" [Proc. the VIII Intern. scientific. conference "Actual problems of solid state physics"]. Minsk, 2018, pp. 110-112.
 7. Shelest V.V., Hristov A.V. Svyaz' kalorimetricheskikh koefitsiyentov s kompleksnym angarnonizmom i ikh rol' v termodinamike ustoychivosti ravnovesnogo fazovogo sostoyaniya sistemy [Relationship between calorimetric coefficients and complex anharmonicity and their role in the thermodynamics of stability of the equilibrium phase state of the system]. Fizika i tekhnika vysokikh davleniy – Physics and technology of high pressures, 2019, vol. 29, no. 4, 73 p.
 8. Shelest V.V., Chervinsky D.A. Primeneniye ischisleniya differentsial'nykh form v termodinamike. V. Aspekty primeneniya vneshnikh differentsial'nykh form k sistemam s peryemnym chislom chastits [Application of calculus of differential forms in thermodynamics. V. Aspects of the application of external differential forms to systems with a variable number of particles]. Fizika i tekhnika vysokikh davleniy – Physics and technology of high pressures, 2020, vol. 30, no. 2, pp. 5-38.
 9. Zhirifalko L. Statistical Physics of Materials. New York: Wiley, New York, 1973. (Russ. ed.: Zhirifalko L. Statisticheskaya fizika tverdogo tela Moscow, Mir Publ., 1975. 372 p.).
 10. Bazarov I.P. Termodinamika [Thermodynamics]. Moscow, Vysshaya shkola Publ., 1991. 376 p.
 11. Semenchenko V.K. Izbrannye glavy teoreticheskoy fiziki [Selected chapters of theoretical physics]. Moscow, Prosveshchenie Publ., 1966. 396 p.
 12. Ormont B.F. Vvedeniye v fizicheskuyu khimiyu i kristallogimiyu poluprovodnikov [Introduction to physical chemistry and crystal chemistry of semiconductors]. Moscow, Vysshaya shkola Publ., 1973. 656 p.
 13. Penkala T. Ocherki kristallogimii [Essays on crystal chemistry]. Leningrad, Khimiya Publ., 1974. 496 p.
 14. Katsnelson A.A. Vvedeniye v fiziku tverdogo tela [Introduction to solid state physics]. Moscow, MGU Publ., 1984. 293 p.
 15. Levchenko G., Khristov A., Kuznetsova V., Shelest V. J. Pressure and temperature induced high spin-low spin phase transition: macroscopic and microscopic consideration. Journal of Physics and Chemistry of Solids, 2014, vol. 75, no. 8, pp. 966-971.
 16. Shelest V.V., Hristov A.V., Prokhorov A.Yu., Chervinskii D.A. Non-conventional standpoint on spin crossovers in the organometallic compounds of iron group. Journal of Photonic Materials and Technology, 2015, vol. 1(2), pp. 40-45. doi: <https://doi.org/10.11648/j.jmpt.20150102.14>
 17. Vaks V.G. Vvedeniye v mikroskopicheskuyu teoriyu segnetoelektrikov [Introduction to the microscopic theory of ferroelectrics]. Moscow: Nauka Publ., 1973. 328 p.
 18. Rumer Ju.B., Rytkin M.Sh. Termodinamika, statisticheskaya fizika i kinetika [Thermodynamics, statistical physics and kinetics]. Moscow, Nauka Publ., 1972. 400 p.
 19. Shelest V.V., Hristov A.V., Chervinsky D.A. Vliyaniye kompleksnogo angarnonizma na dilatometricheskiye i kalorimetricheskiye svoystva kondensirovannykh sistem v formalizme termodinamiki ustoychivosti ravnovesnogo fazovogo sostoyaniya [Influence of complex anharmonicity on dilatometric and calorimetric properties of condensed systems in the formalism of thermodynamics of stability of an equilibrium phase state]. Fizika i tekhnika vysokikh davleniy – Physics and technology of high pressures, 2020, vol. 30, no. 4, pp.18-33.
 20. Shelest V.V., Hristov A.V., Chervinsky D.A. Osobennosti vliyaniya angarnonizma na ustoychivost' ravnovesnogo sostoyaniya odnorodnoy sistemy v kontseptsii termodinamiki [Features of the influence of anharmonicity on the stability of the equilibrium state of a homogeneous system in the concept of thermodynamics]. Fizika i tekhnika vysokikh davleniy – Physics and technology of high pressures, 2018, vol. 28, no. 3, pp. 54-64.
 21. Shelest V.V., Chervinsky D.A., Hristov A.V. O nekotorykh printsipial'nykh osobennostyakh mekhanizma spinovoy polarizatsii i termicheskikh fazovykh prevrashcheniy nizkiy spin-vysokiy spin v kompleksnykh soyedineniyakh, soderzhashchikh dvukhvalentnyye iony perekhodnykh metallov gruppy zheleza [On some fundamental features of the mechanism of spin polarization and thermal phase transformations low spin-high spin in complex compounds containing divalent ions of transition metals of the iron group]. Fizika i tekhnika vysokikh davleniy – Physics and technology of high pressures, 2017, vol. 27, no. 1, pp. 117-136.
 22. Shelest V.V., Hristov A.V., Chervinsky D.A., Rummyantsev V. Thermodynamic potentials theory aspects in external differential forms calculus representation. Journal of Photonic Materials and Technology, 2017, vol. 3(2), pp. 6-13. doi: <https://doi.org/10.11648/j.jmpt.20170302.11>
 23. Shelest V.V., Hristov A.V., Chervinsky D.A. O printsipial'nykh osobennostyakh mekhanizma lokal'nogo spinovogo raspredeleniya i termicheskikh fazovykh prevrashcheniy tipa nizkiy spin - vysokiy spin v kompleksnykh soyedineniyakh, soderzhashchikh koordinirovannyye dvukhvalentnyye iony perekhodnykh metallov gruppy zheleza [On the fundamental features of the mechanism of local spin distribution and thermal phase transformations of the low spin - high spin type in complex compounds containing coordinated divalent ions of transition metals of the iron group]. Vestnik Luganskogo Nacional'nogo Universiteta im. V.Dalja – Bulletin of Volodymyr Dahl East Ukrainian National University, 2018, vol. 5, no. 11, pp. 144-146.
 24. Shelest V.V., Hristov A.V. Osobaya rol' kompleksnogo angarnonizma v ustoychivosti ravnovesnogo fazovogo sostoyaniya kondensirovannoy sredy [The special role of complex anharmonicity in the stability of the equilibrium phase state of a condensed medium]. Vestnik Luganskogo Nacional'nogo Universiteta im. V.Dalja – Bulletin of Volodymyr Dahl East Ukrainian National University, 2019, vol. 7, no. 25, p. 131-134.
 25. Bottger H. Principles of the theory of lattice dynamics. Weinheim: Physik-Verlag, 1983. 332 p. (Russ. ed.: Bottger H. Printsipy dinamicheskoy teorii reshetki. Moscow, Mir Publ., 1986. 392 p.).
 26. Reissland J.A. The physics of phonons. N.Y.: Wiley, 1973. 319 p. (Russ. ed.: Reissland J. Fizika fononov. Moscow, Mir Publ., 1975. 367 p.).
 27. Tolpygo K.B. Fizicheskiye svoystva reshetki tipa kamennoy soli, postroyennoy iz deformiruyemykh ionov [Physical properties of a rock salt-type lattice built from deformable ions]. Journal of Experimental and Theoretical Physics, 1950, vol. 20, no. 6, pp. 497-509.
 28. Tolpygo K.B. Dinamika kristallicheskoy reshetki, postroyennoy iz deformirovannykh ionov: matem. sbornik [Dynamics of a crystal lattice built from deformed ions: math collection]. Trudy KGU – Proceedings of KSU, 1951.