

УДК 534.1

И.О. Мачихина, В.Е. Холодовский

ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ И ИСПУСКАТЕЛЬНЫЕ СВОЙСТВА ТВЁРДЫХ КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕД В МОДЕЛИ ВАН-ДЕР-ВААЛЬСОВСКИХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ

Исследована динамика моноатомных кубических кристаллических решеток под воздействием межатомных сил, имеющих ван-дер-ваальсовскую природу. Рассчитаны дисперсионные кривые, фононные спектры, температурные зависимости энергии, теплоемкости, среднеквадратичных смещений для кристаллов с ОЦК и ГЦК решетками. Проведены расчеты испускательной способности поверхностного слоя металлов, а также температурных зависимостей энергии, теплоемкости теплового движения центров зарядов внешних электронных оболочек атомов металлов с ОЦК и ГЦК решетками.

Ключевые слова: динамическая модель, кристаллическая решетка, упругие константы, дипольный момент, энергия, теплоемкость, среднеквадратичные смещения, испускательная способность.

Как известно, динамические процессы, происходящие в веществе, так или иначе, определяются тем, каким образом взаимодействуют между собой отдельные атомы. Поэтому при теоретическом исследовании свойств вещества возникает необходимость адекватного описания механизма межатомного взаимодействия, позволяющего построить динамическую модель и выполнить необходимые расчеты.

В настоящее время существуют два подхода к построению такого описания: первопринципный и полуэмпирический. Первый [1] основан на определении волновых функций электронов в кристалле при условии равновесного состояния системы ионных остовов и последующем решении уравнения Шредингера для системы электронов. После решения уравнения для системы электронов считается, что электронная плотность остается статически распределенной, и рассматривается задача о колебаниях ионных остовов в статически распределенной среде электронной плотности. Однако решение подобной задачи осложняется наличием огромного числа взаимодействующих частиц и практически невозможно без каких-либо упрощений и привлечения эмпирических поправок или свободных параметров. Все это, так или иначе, приводит к исчезновению самой сути первопринципного подхода.

Полуэмпирический подход сохраняет свою актуальность и в настоящее время. Традиционные подходы предполагают задание для каждого вещества функций межатомных взаимодействий или функций распределения электронной плотности в кристалле или молекуле. И те и другие определяются исследователем из физических соображений, а входящие в них параметры находятся из условий совпадения рассчитанных и экспериментально измеренных физических характеристик исследуемого вещества. В конечном счете задача сводится к решению уравнения динамики решетки в соответствии с динамической теорией М. Борна.

В обоих подходах предполагается, что движение ионных остовов происходит в потенциальной среде, обеспеченной статически распределенной электронной плотностью. Тем самым выпадает из рассмотрения временная зависимость электронной плотности как реакции на тепловое движение ионных остовов. В результате становится затруднительным определение механизма межатомного взаимодействия, учитывающего временную зависимость электронной плотности, исследование процессов излучения и поглощения отдельно взятого атома, а также определение условий термодинамического равновесия. Возможно, что учет временной зависимости электронной плотности не оказывает существенного влияния на результаты расчетов теплофизических свойств кристаллов ввиду

значительной разницы масс электронов и ионных остовов. Однако при расчете теплофизических свойств электронного газа это обстоятельство может оказаться весомым. Например, формула Ферми, выражающая электронный вклад в удельную теплоемкость металлов, дает существенное занижение по сравнению с экспериментом. Возможным объяснением такого расхождения является пренебрежение тепловым движением электронного газа. Учет теплового движения электронного газа может оказаться полезным при исследовании процессов излучения, поглощения и теплопередачи в металлах.

Таким образом, становится очевидной актуальность построения динамической модели, в которой был бы определен механизм межатомного взаимодействия, позволяющий описать условия термодинамического равновесия, выполнить расчеты теплофизических свойств кристаллов, а также параметров временной зависимости электронной плотности. При определении механизма межатомного взаимодействия важно, чтобы, во-первых, это не приводило к сверхсложным расчетам, а получаемые результаты давали достаточно хорошее совпадение с экспериментом и, во-вторых, не исключалась возможность расчета параметров модели из первых принципов.

В работах [2–5] исследуются колебания моноатомных кубических кристаллических решеток при силовом взаимодействии между отдельными атомами, имеющем ван-дер-ваальсовский характер. Атом кристалла рассматривается как структурированный объект, состоящий из ионного остова и электронов на внешних оболочках. Считается, что остов колеблется как единое целое, а колебания электронов на внешних оболочках сводятся к колебаниям их центра заряда. Исходные предпосылки построения такой модели для металлов излагаются в работе [2].

Положение центра заряда внешних электронных оболочек (ВЭО) атома A определяется взаимным расположением его остова и остовов его соседей, находящихся на первой (для ГЦК решеток) или первой и второй (для ОЦК решеток) координационных сферах, и не обязано совпадать с положением остова атома A . В результате внутри атома наводится дипольный момент, действующий с некоторой силой на его остов. На остов атома действует сила, вызванная излучением диполей остальных атомов решетки, которая, изменяя положение центра заряда ВЭО, наводит в атоме A дополнительный дипольный момент, частично экранирующий эту силу. Атом A , представляющий собой динамический диполь, излучает электромагнитную энергию, которую можно рассматривать как результат работы силы реакции на его излучение. В первом приближении сила реакции пропорциональна плечу диполя [5]. В состоянии термодинамического равновесия на любом временном промежутке средняя энергия, поглощаемая атомом, совпадает со средней энергией, излучаемой им. Данное условие будет выполнено, если считать, что внешняя, частично экранированная кулоновская сила уравнивается силой реакции. Тогда движение остова атома будет происходить лишь под действием силы внутреннего диполя, наведенного соседними атомами и имеющего квантово-механическую природу возникновения.

Пусть рассматриваемый кристалл имеет ОЦК или ГЦК кристаллическую решетку. Будем считать, что он имеет форму куба, содержащего n^3 элементарных кубических ячеек, и обозначим через a параметр решетки. Положим $N = \{1, 2, \dots, 2n\}$. Зададим в пространстве систему кристаллографических координат $Oxyz$ с единичными направляющими векторами e_x, e_y, e_z координатных осей так, чтобы положение каждого узла $P = P_{ijk}$ решетки могло быть задано формулой

$$OP_{ijk} = \mathbf{r} = \frac{a}{2}(ie_x + je_y + ke_z), \quad (1)$$

где $i, j, k \in N$ – некоторый набор чисел. Обозначим через Λ подмножество в N^3 , образованное всеми такими наборами $\xi = (i, j, k)$, для которых формула (1) определяет узел ре-

шетки. Пусть μ – масса остова каждого ее атома, q – заряд остова, $\beta = q^2 / 4\pi\epsilon_0$, a – параметр решетки.

Для каждого $\xi = (i, j, k) \in \Lambda$ через A_ξ обозначается атом решетки, положение равновесия которого определяется формулой (1), через D_ξ – соответствующий узел, а через \mathbf{u}_ξ – смещение остова атома A_ξ из положения равновесия в некоторый момент времени t . Через $S_l(\xi)$ обозначается множество мультииндексов, нумерующих атомы решетки, находящиеся на l -й координационной сфере атома A_ξ , а через $\bar{S}_l(\xi)$ – множество мультииндексов, нумерующих какую-нибудь полусферу l -й координационной сферы.

Для двух соседних атомов A_ξ и $A_{\xi'}$, через $\mathbf{w}_{\xi\xi'} = \mathbf{u}_{\xi'} - \mathbf{u}_\xi$ обозначается вектор относительного перемещения их остовов. Считается, что это перемещение вызывает изменение степени перекрытия орбиталей внешних электронных оболочек атомов A_ξ и $A_{\xi'}$, что приводит к возникновению у них соответствующих дипольных моментов.

В случае ОЦК решетки плечо $\mathbf{p}_{\xi\xi'}$ дипольного момента, наведенного в атоме A_ξ со стороны атома $A_{\xi'}$, лежащего на его первой или второй координационной сфере, соответственно определяется формулами:

$$\mathbf{p}_{\xi\xi'} = \kappa_{1r} \mathbf{r}_{\xi\xi'} + \kappa_{1t} \boldsymbol{\tau}_{\xi\xi'} = (\kappa_{1r} - \kappa_{1t}) \langle \mathbf{e}_{\xi\xi'}, \mathbf{w}_{\xi\xi'} \rangle \mathbf{e}_{\xi\xi'} + \kappa_{1t} \mathbf{w}_{\xi\xi'}, \quad (2)$$

$$\mathbf{p}_{\xi\xi'} = \kappa_{2r} \langle \mathbf{e}_{\xi\xi'}, \mathbf{w}_{\xi\xi'} \rangle \mathbf{e}_{\xi\xi'}, \quad (3)$$

где κ_{1r} , κ_{1t} , κ_{2r} – числовые параметры, постоянные для данного кристалла; $\mathbf{e}_{\xi\xi'}$ – единичный вектор, указывающий направление от узла D_ξ к узлу $D_{\xi'}$; $\mathbf{r}_{\xi\xi'} = \mathbf{e}_{\xi\xi'} \langle \mathbf{e}_{\xi\xi'}, \mathbf{w}_{\xi\xi'} \rangle$ – радиальная, а $\boldsymbol{\tau}_{\xi\xi'} = \mathbf{w}_{\xi\xi'} - \mathbf{r}_{\xi\xi'}$ – тангенциальная составляющие вектора $\mathbf{w}_{\xi\xi'} = -\mathbf{w}_{\xi\xi'}$.

В случае ГЦК решетки, с учетом фактора её плотной упаковки и малого порядка симметрии относительно оси вращения в направлении [110], считается, что перекрытие электронных оболочек возможно лишь между атомами, лежащими друг относительно друга на первой координационной сфере. Причем при тангенциальном относительном перемещении двух соседних атомов степени перекрытия их ВЭО в направлениях [100] и [110] отличаются друг от друга. Соответствующие перемещения обозначаются $\boldsymbol{\tau}_{\xi\xi'}^1$ и $\boldsymbol{\tau}_{\xi\xi'}^2$, а формула, выражающая плечо $\mathbf{p}_{\xi\xi'}$ дипольного момента, наведенного в атоме A_ξ со стороны атома $A_{\xi'}$, лежащего на его первой координационной сфере, имеет вид

$$\mathbf{p}_{\xi\xi'} = \kappa_{1r} \mathbf{r}_{\xi\xi'} + \kappa_{1t} \boldsymbol{\tau}_{\xi\xi'}^1 + \kappa_{2t} \boldsymbol{\tau}_{\xi\xi'}^2, \quad (4)$$

где κ_{1r} , κ_{1t} , κ_{2t} – числовые параметры, постоянные для данного кристалла.

Плечо \mathbf{p}_ξ полного дипольного момента, наведенного в атоме A_ξ со стороны всех его соседей, вычисляется путем суммирования по всем соседним атомам. Для ОЦК и ГЦК решеток соответственно

$$\mathbf{p}_\xi = \sum_{\xi' \in S_1(\xi)} \mathbf{p}_{\xi\xi'} + \sum_{\xi' \in S_2(\xi)} \mathbf{p}_{\xi\xi'}, \quad \mathbf{p}_\xi = \sum_{\xi' \in S_1(\xi)} \mathbf{p}_{\xi\xi'}.$$

На внутриатомный диполь атома A_ξ действует кулоновская сила \mathbf{Q}_ξ со стороны диполей всех остальных атомов решетки, что вызывает некоторое приращение $\Delta \mathbf{p}_\xi$ плеча дипольного момента, которое становится равным $\mathbf{P}_\xi = \mathbf{p}_\xi + \Delta \mathbf{p}_\xi$. Диполь атома A_ξ , излу-

чая электромагнитную энергию, испытывает на себе также действие силы реакции R_ξ на его излучение [6–8]. Показано, что в первом приближении

$$R_\xi = -\frac{2\beta}{3r_{ef}^3} P_\xi,$$

где r_{ef} – вариационный параметр, названный эффективным радиусом атома.

С учетом всех сил уравнение движения остова атома принимает вид [7;8]

$$\mu_o \ddot{u}_\xi = -\frac{\beta}{\alpha} P_\xi + Q_\xi + R_\xi = -\frac{\beta}{\alpha} p_\xi - \frac{\beta}{\alpha} \Delta p_\xi + Q_\xi + R_\xi, \quad \xi \in \Lambda,$$

где α – поляризуемость атома, а μ_o – масса остова атома. Считается, что в состоянии термодинамического равновесия силы, вызванные кулоновским воздействием, уравновешиваются силой реакции, т.е. справедливо равенство

$$0 = F_\xi + R_\xi = Q_\xi - \frac{2\beta}{3r_{ef}^3} p_\xi - \left(\beta/\alpha + \frac{2\beta}{3r_{ef}^3}\right) \Delta p_\xi. \quad (5)$$

Тогда в состоянии термодинамического равновесия уравнение движения остова атома A_ξ может быть записано так:

$$\mu_o \ddot{u}_\xi = -\frac{\beta}{\alpha} p_\xi, \quad \xi \in \Lambda. \quad (6)$$

С учетом выражений (2–4) силовые константы уравнения (6) определяются формулами: $\sigma_{1r} = \beta\kappa_{1r}/\alpha$, $\sigma_{1t} = \beta\kappa_{1t}/\alpha$, $\sigma_{2r} = \beta\kappa_{2r}/\alpha$, $\sigma_{2t} = \beta\kappa_{2t}/\alpha$. Показано, что в континуальном приближении уравнение (5) подобно соответствующему уравнению теории упругости. Это позволяет выразить силовые константы модели через упругие константы рассматриваемых веществ.

В случае ОЦК и ГЦК решеток соответственно справедливы равенства [2;7]:

$$\begin{aligned} \sigma_{1r} &= \frac{a}{2}(C_{12} + 2C_{44}), \quad \sigma_{1t} = \frac{a}{4}(C_{44} - C_{12}), \quad \sigma_{2r} = \frac{a}{2}(C_{11} - C_{44}); \\ \sigma_{1r} &= \frac{a}{4}(C_{11} + C_{12} + C_{44}), \quad \sigma_{1t} = \frac{a}{4}(2C_{44} - C_{11}), \quad \sigma_{2t} = \frac{a}{4}(C_{11} - C_{12} - C_{44}). \end{aligned}$$

Решение уравнения (5) динамики решетки ищется в виде бегущей волны, поляризованной в направлении некоторого единичного вектора $g = g_x e_x + g_y e_y + g_z e_z$, заданной формулой

$$u_{\xi,K}(t) = u_{\xi,K}(t) g, \quad (7)$$

где для $\xi = (i, j, k) \in \Lambda$ положение узла решетки определяется вектором r , заданным формулой (1), а временной множитель берется равным $u_{\xi,K} = A s_{\xi,K} = A \sin(Kr \pm \omega t)$ (или $u_{\xi,K} = A c_{\xi,K} = A \cos(Kr \pm \omega t)$). В условии цикличности Борна-Кармана волновой вектор принимает вид $K = \frac{2\pi}{na}(k_x e_x + k_y e_y + k_z e_z)$, где k_x, k_y, k_z – целые числа, а интервалы их изменения соответствуют первой зоне Бриллюэна.

В результате подстановки (7) в уравнение (6) задача вычисления координат вектора g и частоты бегущей волны сводится к решению системы из трех уравнений следующего вида:

$$\begin{aligned} c_x g_x - b_z g_y - b_y g_z &= (\sigma_0 - \mu\omega^2) g_x, \\ -b_z g_x + c_y g_y - b_x g_z &= (\sigma_0 - \mu\omega^2) g_y, \\ -b_y g_x - b_x g_y + c_z g_z &= (\sigma_0 - \mu\omega^2) g_z. \end{aligned} \quad (8)$$

Решение системы (8) позволило получить дисперсионные соотношения и построить кривые дисперсии, рассчитать и построить кривые плотности распределения фононных спектров, температурные зависимости энергии, теплоемкости, среднеквадратичных смещений для ряда элементов 1 – 5 групп таблицы Д.И. Менделеева. Также были рассчитаны упругие константы и другие теплофизические характеристики для кристаллов инертных газов (КИГ) при различных сжатиях исходя из экспериментальных данных по нейтронному рассеянию. На рис. 1 – 10 приведены кривые, отражающие полученные результаты для Al, Na и Ar (исходные данные для расчета взяты из табл. 1) при температурах 4К, 78К и 0К соответственно. Полученные кривые хорошо согласуются с экспериментальными данными, которые нанесены точками.

Таблица 1

Атомная масса μ , параметр решетки a , упругие константы C_{ij} элементов с ОЦК и ГЦК решетками

Вещество	μ , а.е.	a , Å	T, К	C_{11} , ГПа	C_{12} , ГПа	C_{44} , ГПа
Na	22,9897	4,2906	78	8,2	6,8	5,8
			300	7,3	6,2	4,26
Al	26,98	4,04959	4	122,6	70,8	30,6
			298	107,3	60,9	28,3
Ar	39,948	5,31087	0	4,104	2,152	2,404
			40	3,499	1,764	2,104

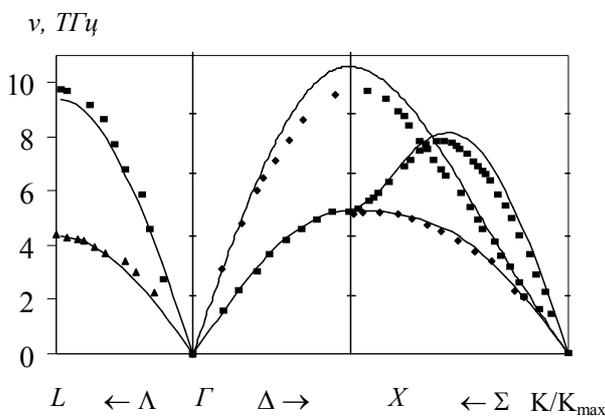


Рис. 1. Кривые дисперсии фононов в Al

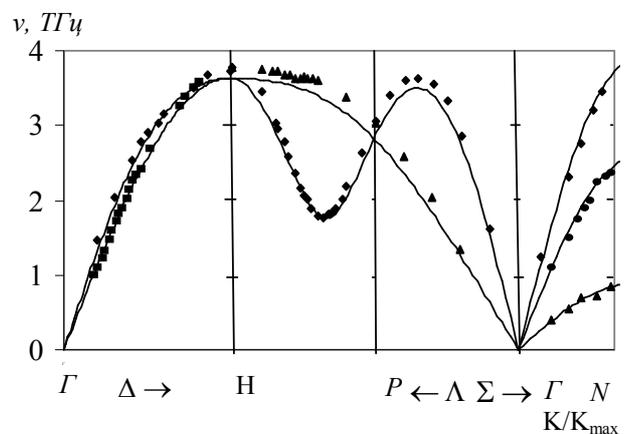


Рис. 2. Кривые дисперсии фононов в Na

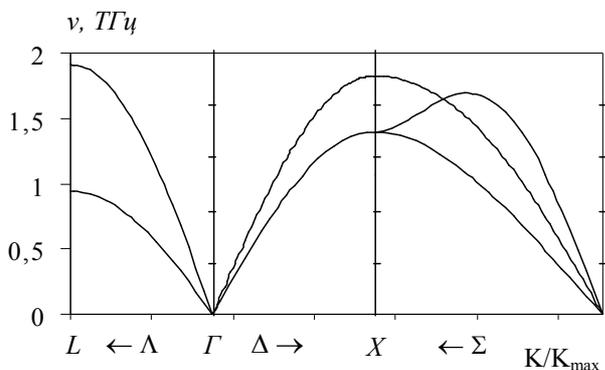


Рис. 3. Кривые дисперсии фононов в Ar

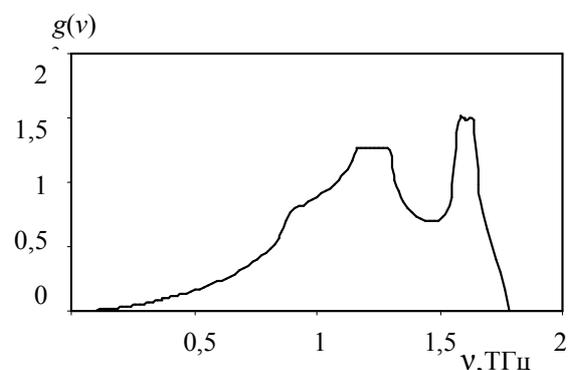


Рис. 4. Фононный спектр Ar

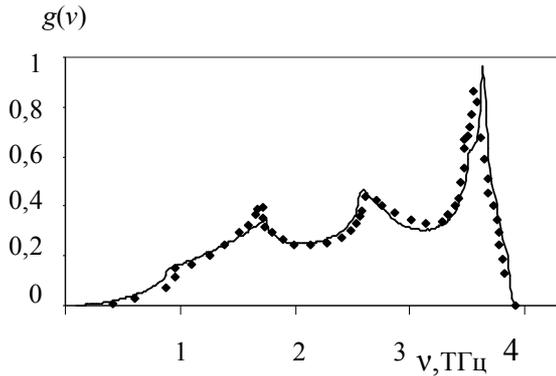


Рис. 5. Фононный спектр Na

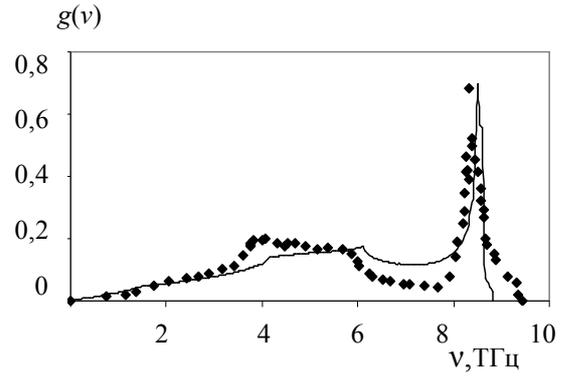


Рис. 6. Фононный спектр Al

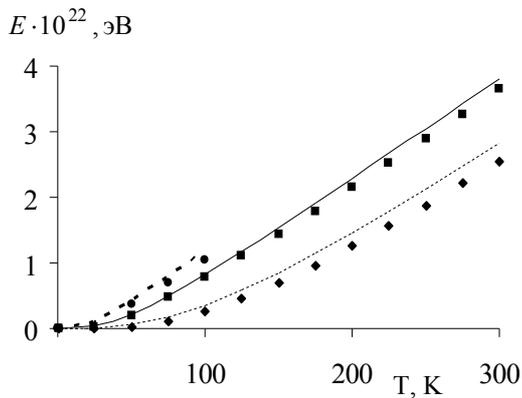


Рис. 7. Температурная зависимость энергии кристалла: — -Na, --- - Al, --- - Ag

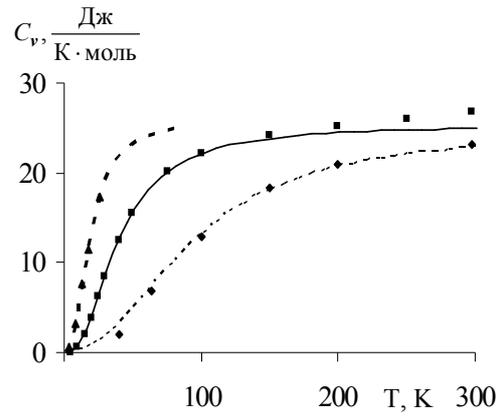


Рис. 8. Температурная зависимость теплоемкости: — -Na, --- - Al, --- - Ag

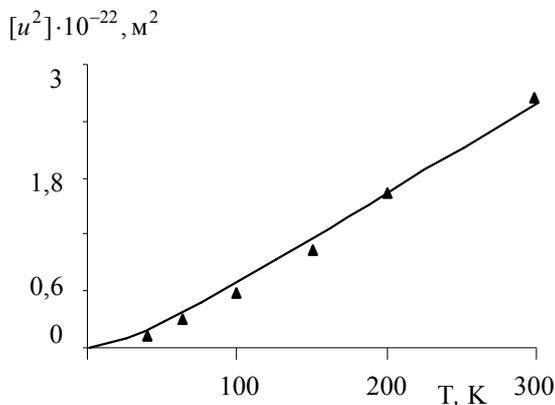


Рис. 9. Среднеквадратичные смещения атомов в Al

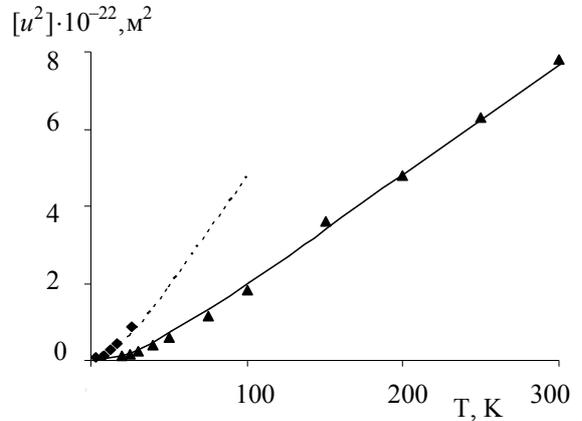


Рис. 10. Среднеквадратичные смещения атомов: — - в Na, --- - в Ag

Общее решение системы (6) представляет собой наложение отдельных колебательных мод, каждая из которых является бегущей волной. Сложив любые две такие бегущие волны, имеющие одну и ту же частоту $\omega_{K,m}$, $m=1,2,3$ и противоположно направленные волновые векторы K и $-K$, мы получим колебание, представляющее стоячую волну вида

$$u_{\xi,K,m}(t) = g_{K,m} B_{\xi,K,m} \sin(\omega_{K,m}t + \varphi_{K,m}),$$

в которой $B_{\xi,K,m} = A_{K,m} \sin(Kr_{\xi} + \psi_{K,m})$, а амплитуда $A_{K,m}$ выражается из известной формулы М. Планка для энергии квантового гармонического осциллятора.

Тогда полное колебание каждого атома решетки представляется так:

$$\mathbf{u}_\xi(t) = \sum_{K,m} \mathbf{g}_{K,m} B_{\xi,K,m} \sin(\omega_{K,m}t + \varphi_{K,m}).$$

Такое представление колебаний удобно при исследовании характеристик, определяемых величиной плеча \mathbf{P}_ξ внутриатомного диполя. Вектор \mathbf{P}_ξ , $\xi \in \Lambda$, находится путем решения системы линейных уравнений, полученной из условия термодинамического равновесия (5):

$$\left(1/\alpha + \frac{2}{3r_{ef}^3}\right)\mathbf{P}_\xi + \sum_{\xi' \neq \xi} \frac{1}{r_{\xi\xi'}^3} (\mathbf{P}_{\xi'} - 3 \langle \mathbf{e}_{\xi\xi'}, \mathbf{P}_{\xi'} \rangle \mathbf{e}_{\xi\xi'}) = \frac{1}{\alpha} \mathbf{p}_\xi = -\frac{\mu_o}{\beta} \ddot{\mathbf{u}}_\xi, \quad (9)$$

где $r_{\xi\xi'}$ – расстояние между узлами D_ξ и $D_{\xi'}$.

Решение уравнения (9) приводит к формуле вида

$$\mathbf{P}_\xi = \sum_{K,m} \sin(\omega_{K,m}t + \varphi_{K,m}) B_{\xi,K,m} \mathbf{d}_{K,m}, \quad (10)$$

где безразмерный вектор $\mathbf{d}_{K,m}$ находится при решении этой системы. Формула (10) представляет собой спектральное разложение плеча внутриатомного диполя как функции времени по гармоническим колебаниям вида

$$\mathbf{P}_{\xi,K,m}(t) = B_{\xi,K,m} \sin(\omega_{K,m}t + \varphi_{K,m}) \mathbf{d}_{K,m}.$$

Обозначим через $\mathbf{d}^2(\omega) = [\mathbf{d}^2(\omega_{K,m})]$ средний квадрат вектора $\mathbf{d}_{K,m}$ по всем значениям \mathbf{K} и m , для которых частота $\omega_{K,m}$ принадлежит единичному интервалу $\omega < \omega_{K,m} < \omega + d\omega$, и пусть $g(\omega)$ – плотность вероятности распределения фононного спектра. Тогда, как было показано, испускательная способность поверхностного слоя в рассматриваемых металлах с ОЦК и ГЦК решетками выражается соответственно формулами [9]:

$$r(\omega, T) = \frac{2\beta \cdot \hbar \omega^3 g(\omega) \mathbf{d}^2(\omega)}{a^2 c^3 \mu_o (e^{\hbar\omega/kT} - 1)},$$

$$r(\omega, T) = \frac{4\beta \cdot \hbar \omega^3 g(\omega) \mathbf{d}^2(\omega)}{a^2 c^3 \mu_o (e^{\hbar\omega/kT} - 1)}.$$

На рис. 11 и 12 представлены испускательные способности для Na и Al при соответствующих температурах [9].

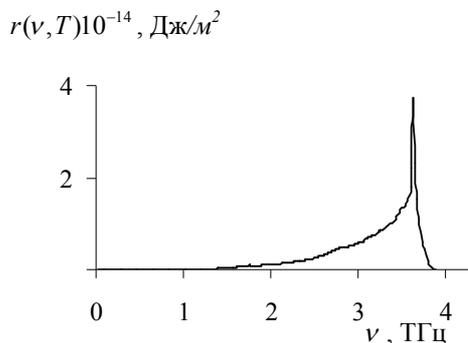


Рис. 11. Испускательная способность кристалла Na

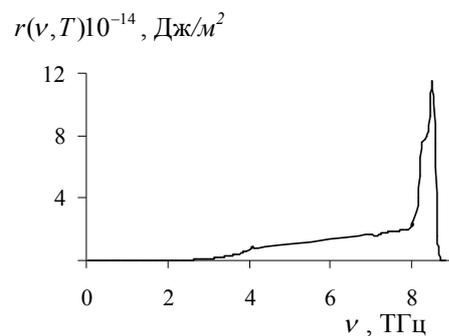


Рис. 12. Испускательная способность кристалла Al

Полученное выражение (10) для плеча \mathbf{P}_ξ внутриатомного диполя позволяет вычислить отклонение \mathbf{v}_ξ из положения равновесия центра заряда ВЭО атома A_ξ , определяемое формулой

$$v_{\xi} = u_{\xi} - P_{\xi}.$$

Показано, что колебание центра заряда ВЭО атома A_{ξ} представляется в виде наложения стоячих волн с определенными амплитудами и направлениями поляризации [7] согласно формуле

$$v_{\xi} = \sum_{K,m} (g_{K,m} - d_{K,m}) B_{\xi,K,m} \sin(\omega_{K,m} t + \varphi_{K,m}). \quad (11)$$

Таблица 2

Удельная электронная теплоемкость кристалла и эффективный радиус атома для элементов с ОЦК и ГЦК решетками

Вещество	T, К	$\gamma_{расч},$ мДж/моль·К ²	$\gamma_{расч},$ мДж/моль·К ² (с учетом поправки)	$\gamma_{эксп},$ мДж/моль·К ²	r_{ef} (в единицах параметра ре- шетки)
Na	78	1,094	1,43	1,39	0,49
Al	298	0,912	1,36	1,35	0,34

На основе формулы (11) рассчитаны тепловая энергия ВЭО атомов кристаллов, поправки на электронный вклад в теплоемкость металлов. Соответствующие величины вычисляются в зависимости от эффективного радиуса r_{ef} атома [8]. Вариационный параметр r_{ef} определяется таким образом, что соответствующая поправка к теоретическим данным по удельной электронной теплоемкости металлов обеспечивает наилучшее приближение к экспериментальным данным (вычисленные данные приведены в табл. 2).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Саврасов, С.Ю. Расчеты динамики решетки кристаллов из первых принципов / С.Ю. Саврасов, Е.Г. Максимов // Успехи физических наук. – 1995. – №7(165). – С.773–797.
2. Холодовский, В.Е. Принцип длинных волн и дисперсионные соотношения для кубических кристаллических решеток в модели диполь-дипольных взаимодействий / В.Е. Холодовский, И.О. Мачихина, Е.А. Кульченков // Изв. СамНЦ РАН. Серия «Физика и электроника». – 2009. – Т. 11. – № 5(31). – С. 49–55.
3. Холодовский, В.Е. Принцип длинных волн и фононные спектры кубических кристаллических решеток / В.Е. Холодовский, И.О. Мачихина // Вестн. ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2009. – Вып.1. – №22. – С.109–116.
4. Холодовский, В.Е. Расчет теплоемкости и среднеквадратичных смещений по фононным спектрам для кристаллов с ОЦК и ГЦК решеткой / В.Е. Холодовский, И.О. Мачихина, Е.А. Кульченков // Вестн. ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2010. – Вып.2. – №9. – С.101–109.
5. Мачихина, И.О. Расчет теплофизических свойств кристаллов инертных газов по упругим константам / И.О. Мачихина, В.Е. Холодовский // Изв. СамНЦ РАН. Серия «Физика и электроника». – 2012. – Т. 14. – № 4. – С. 116–120.
6. Холодовский, В.Е. Поток энергии и сила реакции на излучение внутриатомного диполя / В.Е. Холодовский, А.А. Сидоров // Ученые записки ЗабГГПУ. – 2012. – №3(44). – С. 141–144.
7. Мачихина, И.О. Динамика кубических кристаллов в модели ван-дер-ваальсовских связей: дис....канд. физ.-мат. наук / И.О. Мачихина. – Брянск, 2011. – 198 с.
8. Холодовский, В.Е. Поправка на электронный вклад в теплоемкость металлов в модели ван-дер-ваальсовских взаимодействий / В.Е. Холодовский, И.О. Мачихина, Е.А. Кульченков // Вестн. Брян.гос.техн.ун-та. – 2010. – №4. – С. 115–123.
9. Мачихина, И.О. Динамические и испускательные характеристики внутриатомных диполей металлов в модели ван-дер-ваальсовских взаимодействий / И.О. Мачихина, В.Е. Холодовский // Ученые записки ЗабГУ. Серия «Физика. Математика. Техника. Технология». – 2014. – №3(56). – С. 74–83.

Материал поступил в редколлегию 29.09.14.