
DOI: 10.63527/1607-8829-2025-3-29-36

Рибчаков Д.Є.^{1,2} (<https://orcid.org/0009-0002-2891-2258>),
Маник О.М.¹ (<https://orcid.org/0000-0003-2525-5280>),
Разіньков В.В.² (<https://orcid.org/0009-0004-2882-5466>)

¹Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича,
вул. Коцюбинського 2, Чернівці, 58012, Україна;

²Інститут термоелектрики НАН і МОН України,
вул. Науки, 1, Чернівці, 58029, Україна

Автор-кореспондент: Маник О.М., e-mail: o.manyk@chnu.edu.ua

Молекулярні аспекти механічної активації хімічних процесів четверних систем перспективних термоелектричних матеріалів розчинами галогенів

Розроблено теоретичні моделі механоактиваційних процесів порошкової технології отримання термоелектричних матеріалів четверних систем Bi-Sb-Se-Te з використанням розчинів йоду. Проведено розрахунки ефективних радіусів, перерозподілу електронної густини та енергії, дисоціації нееквівалентних гібридних орбіталей в залежності від міжатомних відстаней Bi-I; Sb-I; Se-I; Te-I. Показано, що за певних умов перерозподіл електронної густини міняє знак. Це означає, що хімічні зв'язки можуть бути як донорними, так і акцепторними Бібл. 8. Табл. 5.

Ключові слова: термоелектричний матеріал, хімічний зв'язок, порошкова технологія, механохімія, механоактиваційні методи, багатокомпонентні системи, ефективні радіуси, електронна густина, донори, акцептори, нееквівалентні гібридні орбіталі, енергія дисоціації.

Вступ

Технологічні аспекти отримання термоелектричних матеріалів потрібних та четверних систем халькогенідів вісмуту та сурьми методами порошкової металургії потребують подальшого комплексного дослідження. Це зумовлено наявністю ряду особливостей в таких системах:

- утворення твердих фаз змінного складу;
- зміна хімічного зв'язку від металевого (у вихідних компонентів) до ковалентного (в сполуках) та проміжного (в твердих розчинах).

Цитування: Рибчаков Д.Є., Маник О.М., Разіньков В.В. (2025). Молекулярні аспекти механічної активації хімічних процесів четверних систем перспективних термоелектричних матеріалів розчинами галогенів. Термоелектрика, (3), 30–37. <https://doi.org/10.63527/1607-8829-2025-3-29-36>

Вказані особливості приводять до фазових перетворень процесів упорядкування в розчинах і сплавах, що формують фізико-хімічні властивості термоелектричних матеріалів. Послідовної теорії фазових перетворення з позиції хімічного зв'язку [1] для таких матеріалів ще немає. При цьому основні технологічні питання створення екструдованих та пресованих термоелектричних матеріалів доводиться розв'язувати експериментально [2].

Для подальшого розвитку технологічних методів порошкової металургії отримання високоякісних термомелектричних матеріалів на основі Ві-Те постає задача розробки теоретичних моделей, які дозволять узагальнити можливості вже існуючих методів шляхом об'єднання термодинамічного, статистичного, квантового та механічного підходів з урахуванням хімічного зв'язку.

Відбувається пошук нових способів і підходів до вирішення подібних задач [3]. Особливу значимість набуває питання, яким чином загальні принципи можна плідно використати для розв'язання поставлених нелінійних задач? Відповідь на це питання пов'язана з багат шаровою структурою теоретичних знань з різних областей, які мають справу з нелінійними системами. Пізнання їх можливе шляхом міждисциплінарного синтезу. Основою такого синтезу, згідно [1], є енергетичний підхід. При цьому енергія, як загальна міра різних видів взаємодії, розглядається як зі сторони її організаційної структури, так і функції стану. Об'єднання електронної, коливної та конфігураційної складової енергії дало можливість провести розрахунки процесів упорядкування в сплавах статистичними методами [4], закономірностей формування ближнього порядку хімічного зв'язку в розплавах квантово-хімічними методами [5], перерозподілу електронної густини та енергії дисоціації нееквівалентних хімічних зв'язків в потрійних системах – методами мікроскопічної теорії з використанням розв'язків, обернених задач та молекулярних моделей [6].

Дана робота є продовженням комплексних досліджень [4-6] і присвячена побудові теоретичних моделей активації хімічного зв'язку четверних системах Ві-Sb-Se-Те підданих попередній механічній обробці з використанням розчинів галогенів.

Теоретичні моделі механічної активації хімічного зв'язку

Хімічний склад матеріалів впливає на їх фазовий стан, який в свою чергу залежить від зовнішньої дії (нагріву, охолодження, деформації, опромінення) котра призводить до відхилення від рівноважного стану системи. При такому підході різний ступінь відхилення від стехіометричного та рівноважного стану системи елементів, об'єднаних певними хімічними законами, також дає можливість отримання нових матеріалів. При цьому фізичне матеріалознавство - наукові дисципліни, котрі вивчають закономірності утворення металевих та напівпровідникових фаз (елементарних речовин, розчинів, сплавів, сполук) в рівноважних та нерівноважних умовах впливу хімічного і фазового складу, атомної структури і структурних дефектів на властивості матеріалів, тісно переплітаються і продовжуються в механохімії.

Термін “механохімія” був введений В. Оствальдом в підручнику загальної хімії [7], в якому він, зокрема, розглядав різні види стимулювання хімічних процесів. Даний термін відноситься до хімічних реакцій з реагентами в усіх агрегатних станах [8].

Однак найчастіше його використовують при дослідженні твердофазних процесів реакцій попередньо підданих механічній обробці, що зазвичай представляє собою комбінацію тиску і зсуву, тому важливо виявити роль кожного із цих компонентів в зміні фізико-хімічних властивостей речовин, що піддавалися механічній обробці.

Слід також відзначити, що вплив тиску на перебіг хімічних реакцій в твердих тілах вивчено значно в меншій мірі аніж вплив температури. Причиною цьому є труднощі пов'язані з технікою експерименту і складністю спостереження за перебігом процесу при високих тисках. Можна виділити наступні основні напрямки, де високий тиск проявляє вплив на перебіг хімічних реакцій в твердій фазі:

-вплив на міжгранулярні взаємодії в сумішах твердих речовин, що вступають в твердофазну реакцію за рахунок збільшення площі контактів реагуючих частинок і покращенням умов для дифузії вздовж міжфазових поверхонь;

-зміни всередині частинок твердих речовин пов'язані з змінами їх реальної структури, концентрації дефектів, змінами міжатомних віддалей. В результаті це призводить до зменшення ширини забороненої зони і діелектрик починає проявляти напівпровідникові властивості.

В даний час таку класифікацію не можна вважати повною, оскільки вона не охоплює весь нагромаджений матеріал. Однак її можна взяти за основу при розгляді в першому наближенні рівномірного, розподіленого тиску по всіх напрямках (гідростатичного тиску) і розширювати коло явищ, присвячених впливу тиску на фізико-хімічні властивості анізотропних твердих тіл, молекулярних кристалів, міжмолекулярних взаємодій біологічних об'єктів. Таким чином, дослідження поведінки твердих тіл під дією тиску не лише необхідне для розуміння механізмів механохімічних процесів, але й перспективні як метод вивчення структурних і міжмолекулярних взаємодій. Такий підхід, дає можливість розв'язувати ряд задач фізики, хімії, математики, які поєднують аналітичні та топологічні підходи з розрахунками енергії взаємодії компонентів в різних фазах і підвищують роль теоретичних розрахунків при розв'язанні складних нелінійних задач. В якості прикладу розв'язання таких задач в даній роботі приведено результати розрахунків впливу галогенів на формування хімічного зв'язку порошкових матеріалів четверних систем. Представником четверних систем був вибраний Bi-Sb-Se-Te, а з галогенів - розчин йоду. Були проведені розрахунки енергій дисоціації Bi-I; Sb-I; Se-I; та Te-I.

Теоретичний аналіз емпіричних залежностей процесів кристалізації пов'язаний з переглядом поглядів на проблеми міжатомної взаємодії. Так наприклад розподіл електронної густини навколо ізольованого атома має сферичну симетрію, а утворення хімічного зв'язку супроводжуються перебудовою валентних оболонок взаємодіючих атомів та перерозподілом електронної густини вздовж хімічних зв'язків. Узагальнення емпіричні інформації про властивості атомів та іонів на основі кристалохімічного

підходу призвело до появи ефективних зарядів Δq_i ефективних іонних радіусів R_u енергії дисоціації D_i окремих хімічних зв'язків [6].

Найбільш ефективними при пошуках форми графічного розв'язку задачі про зв'язок R_u із числом електронів на зовнішній оболонці атомів n виявились чисельні значення, електронегативності. Взаємозв'язок $\text{tg}\alpha = \frac{\Delta \lg R_u}{\Delta n}$ і електронегативності дає можливість фіксувати положення появи цих залежностей в координат $\lg R_u = f(n)$. Добре узгодження комплексу досліджених даних про різні фізико-хімічні властивості атомів та їх іонів з R_u та $\text{tg}\alpha$ дає постульована залежність

$$\lg R_{UA}^x = \lg R_{UA}^{(0)} - x \text{tg}\alpha, \quad (1)$$

де $R_U^{(0)}$ радіус атомів в незбудженому стані, x – валентність.

Оскільки рівняння (1) описує зміни R_u атомів А і В при зміні числа електронів на орбіталях кожного, то допускаючи рівність абсолютних значень зарядів взаємодіючих атомів, залежність (1) приймає вигляд системи рівнянь [5–6]:

$$\lg R_{UA}^{+x} = \lg R_{UA}^{(0)} - x \text{tg}\alpha_A, \quad (2)$$

$$\lg R_{UB}^{-x} = \lg R_{UB}^{(0)} + x \text{tg}\alpha_B, \quad (3)$$

$$d_{min} = R_{UA}^{+x} + R_{UB}^{-x}, \quad (4)$$

де d_{min} найменша міжатомна відстань між взаємодіючими атомами.

Основним недоліком такого підходу є те, що в багатьох випадках міжядерні відстані $A-B$ в молекулярних і кристалічних сполуках і сплавах d менші від d_{min} і подолати труднощі можна лише відмовившись від спроби трактування розв'язку системи (2–4) з позиції кристалохімічного підходу. Необхідні додаткові критерії що дозволяють кристалохімічну систему (2–4) перевести на мову квантової хімії. Необхідно врахувати, що утворення хімічних зв'язків $A-B$ супроводжується переходом електронів на інші напрямки міжатомної взаємодії і цей зв'язок стає донорним. Ця умова виконується, якщо виділення $(+\Delta e)$ електронів, чи їх локалізація $(-\Delta e)$ на даному напрямку, однаково змінюють значення зарядів, які має дана пара при $d < d_{min}$ тобто $z_{eф}A(B) = z_{min}A(B) - \left(\frac{\Delta e}{z}\right)$. Розраховані таким чином $z_{eф}A(B)$ та R_u характеризують умови збереження неперервності хвильової функції в зоні взаємодіючих атомів для довільного d_i і ці умови описується системою рівнянь:

$$d_i = R_{UA}^{zx} + R_{UB}^{zx}, \quad (5)$$

$$\lg R_{UA}^{zA} = \lg R_{UA}^{(0)} - (z_{minA} + \frac{\Delta e}{z}) \text{tg}\alpha_A, \quad (6)$$

$$\lg R_{UB}^{zB} = \lg R_{UB}^{(0)} + (z_{minA} + \frac{\Delta e}{z}) \text{tg}\alpha_B, \quad (7)$$

Зовні рівняння (2)–(4) і (5)–(7) подібні але в дійсності заміна x на $(z_{minA} + \frac{\Delta e}{z})$ змінює їх фізичний зміст. Функція $d = f(z_{eф})$ розраховується у відповідності кристалохімічного підходу для $(Z_A = -Z_B)$, коректна з квантовомолекулярної точки зору лише при $d = d_{min}$ але цього виявилось достатньо, щоб система, (5)–(7) розв'язались при

відому d . При такому підході система (5)–(7) дозволяє не лише узгодити теоретичну частину з експериментальною, але і зробити прогноз, коли відповідні зв'язки можуть стати донорними, акцепторними і міняти фізичні властивості. Таким чином, в результаті врахування квантової інтерпретації емпіричного матеріалу вираз для енергії хімічних зв'язків набуває виду:

$$D_{A-B}^{(i)} = \frac{c_i(R_{UA}^{(0)} + R_{UB}^{(0)})}{\text{tg}\alpha_A + \text{tg}\alpha_B} \left[\frac{c_2 d_i}{d_i^2 - R_{UA} R_{UB}} - \frac{1}{d_i} \right], \quad (8)$$

де $R_{UA(B)}^{(0)}$ і $\text{tg}\alpha_{A(B)}$ коефіцієнти рівнянь (2)–(4) для атомів А і В, R_{UA} і R_{UB} ефективні радіуси іонів в зв'язках А і В, довжиною d_i , i – кількість нееквівалентних відстаней в розглянутих сполуках; C_1 – коефіцієнти, що відображає взаємозв'язок розмірних і енергетичних характеристик міжатомної взаємодії (вимірюється в електронвольтах); C_2 – коефіцієнт, залежний від типу кристалічної структури та хімічного зв'язку вибирається безрозмірним.

Приведенні рівняння були використані при розрахунках ефективних зарядів, ефективних радіусів і енергії дисоціації нееквівалентних хімічних зв'язків, що входять до складу четверної системи. Результати розрахунків коефіцієнтів рівнянь (2)–(4) $R_U^{(0)}$ і $\text{tg}\alpha$ вихідних компонентів приведені в табл. 1.

Таблиця 1

Коефіцієнти рівнянь вихідних компонентів

Z	Елемент	$R_U^{(0)}(A)$	$\text{tg}\alpha$
34	Se	1.35 A	0.088
51	Sb	1.45 A	0.074
52	Te	1.57 A	0.076
54	I	1.815 A	0.078
88	Bi	1.63 A	0.068

Таблиця 2

Ефективні заряди Δq_i , ефективні радіуси R_{Uj} і енергії дисоціації хімічних зв'язків φ_i для найближчих сусідів на нееквівалентних віддальх d_i структурних різновидів I-Vi

φ_i	φ_1	φ_2	φ_3	φ_4	φ_5	φ_6	φ_7	φ_8	φ_9	φ_{10}	φ_{11}	φ_{12}
$d_i(A)$	2.5	2.6	2.7	2.8	2.9	3.0	3.1	3.2	3.3	3.4	3.445	3.5
$R_{Uj}^I(A)$	1.317	1.370	1.423	1.475	1.528	1.581	1.633	1.686	1.739	1.791	1.815	1.844
$R_{Uj}^{La}(A)$	1.183	1.230	1.271	1.325	1.372	1.419	1.467	1.514	1.561	1.609	1.63	1.656
$\Delta q(\varphi_i)$	1.916	1.682	1.456	1.239	1.029	0.827	0.631	0.441	0.257	0.078	0	-0.095
$D_i(eV)$	3.134	3.014	2.903	2.798	2.718	2.613	2.551	2.448	2.374	2.304	2.28	2.27

Таблиця 3

Ефективні заряди Δq_i , ефективні радіуси R_{U_i} і енергії дисоціації хімічних зв'язків φ_i для найближчих сусідів на нееквівалентних віддалях d_i структурних різновидів I-Se

φ_i	φ_1	φ_2	φ_3	φ_4	φ_5	φ_6	φ_7	φ_8	φ_9	φ_{10}	φ_{11}	φ_{12}
$d_i(A)$	2.5	2.6	2.7	2.8	2.9	3.0	3.1	3.165	3.2	3.3	3.4	3.5
$R_{U_i}^l(A)$	1.434	1.491	1.538	1.606	1.663	1.72	1.778	1.815	1.835	1.892	1.95	2.007
$R_{U_i}^{La}(A)$	1.066	1.109	1.162	1.194	1.237	1.28	1.322	1.35	1.365	1.408	1.45	1.493
$\Delta q(\varphi_i)$	1.239	1.033	0.834	0.643	0.459	0.281	0.109	0	-0058	-0.219	-0.376	-0.528
$D_i(ev)$	2.469	2.375	2.293	2.205	2.142	2.059	2.01	1.95	1.93	1.87	1.816	1.764

Таблиця 4

Ефективні заряди Δq_i , ефективні радіуси R_{U_i} і енергії дисоціації хімічних зв'язків φ_i для найближчих сусідів на нееквівалентних віддалях d_i структурних різновидів I-Sb

φ_i	φ_1	φ_2	φ_3	φ_4	φ_5	φ_6	φ_7	φ_8	φ_9	φ_{10}	φ_{11}	φ_{12}
$d_i(A)$	2.5	2.6	2.7	2.8	2.9	3.0	3.1	3.2	3.265	3.3	3.4	3.5
$R_{U_i}^l(A)$	1.39	1.445	1.50	1.557	1.612	1.668	1.723	1.779	1.815	1.834	1.89	1.946
$R_{U_i}^{La}(A)$	1.11	1.155	1.20	1.243	1.288	1.332	1.377	1.421	1.45	1.466	1.51	1.554
$\Delta q(\varphi_i)$	1.527	1.302	1.087	0.879	0.678	0.485	0.297	0.23	0	-0.23	-0.238	-0.397
$D_i(ev)$	2.816	2.709	2.608	2.515	2.444	2.348	2.294	2.20	2.157	2.134	2.071	2.012

Таблиця 5

Ефективні заряди Δq_i , ефективні радіуси R_{U_i} і енергії дисоціації хімічних зв'язків φ_i для найближчих сусідів на нееквівалентних віддалях d_i структурних різновидів I-Te

φ_i	φ_1	φ_2	φ_3	φ_4	φ_5	φ_6	φ_7	φ_8	φ_9	φ_{10}	φ_{11}	φ_{12}
$d_i(A)$	2.5	2.6	2.7	2.8	2.9	3.0	3.1	3.2	3.3	3.385	3.4	3.5
$R_{U_i}^l(A)$	1.33	1.394	1.448	1.501	1.555	1.609	1.662	1.71	1.769	1.815	1.823	1.877
$R_{U_i}^{La}(A)$	1.17	1.206	1.252	1.299	1.345	1.391	1.438	1.49	1.531	1.57	1.577	1.623
$\Delta q(\varphi_i)$	1.71	1.488	1.275	1.07	0.872	0.681	0.496	0.317	0.143	0	-0.025	-0.188
$D_i(ev)$	2.859	2.745	2.643	2.549	2.461	2.379	2.323	2.323	2.163	2.108	2.099	2.039

В таблицях (2)–(5) приведені результати розрахунків впливу розчинів йоду на формування хімічного зв'язку вихідних компонентів. При цьому враховано, що отримання нових матеріалів методом пресування та екструзії приводить до зміни міжатомних відстаней. Ці зміни можуть відбуватися як за рахунок зміни тиску, так і температури. При цьому, щоб оцінити вклад кожного фактора, в даній роботі була розв'язана обернена задача, суть якої полягає в тому, що при розв'язанні прямої задачі з позиції кристалохімічного підходу (система (2)–(4)) функція $d = f(z_{e\phi})$ коректна лише при $d = d_{min}$ і це є недоліком цієї системи, коли міжядерні відстані менші за d_{min} , але цього

досить, щоб система (5)–(7) розв'язувалась при відомому d_i і були знайдені ефективні радіуси R_u , перерозподіл електронної густини і енергії дисоціації. В даній роботі міжядерній відстані задавались через кожні 0.1 Å в інтервалі $2.5 \leq d_i \leq 3.5$ (Å) для кожної нееквівалентної гібридної орбіталі хімічного зв'язку Bi-I; Sb-I; Se-I; Te-I.

Висновки

Аналіз отриманих результатів, приведених в таблицях (1)–(5) дозволяє описати процеси формування міжатомної взаємодії на різних технологічних рівнях з позиції хімічного зв'язку. Це, насамперед, формування кристалічної структури на основі вихідних елементів [5], де була врахована інформація про фізико-хімічні властивості та хімічний зв'язок вихідних елементів бінарних сполук. Новим в даній роботі було те, що вплив розчинів йоду на формування структури і властивостей отриманих матеріалів проводився шляхом розрахунку ефективних радіусів, перерозподілу електронної густини, енергії дисоціації бінарних сполук вихідних компонентів та йоду, для різних міжатомних віддалей в інтервалі $2.5 \leq d_i \leq 3.5$ Å. Порівняння отриманих в даній роботі результатів показало, що зміна знаку перерозподілу електронної густини на зв'язках Bi-Bi настає в інтервалі 2.7–2.8 Å а енергія зв'язку складає $D_{Bi-Bi}^{d_i=2.7\text{Å}} = 2.96$ eV в той час як на зв'язку Bi-I зміна знаку настає в інтервалі 3.4–3.5 Å а енергія зв'язку $D_{Bi-I}^{d_i=2.7\text{Å}} = 2.903$ eV дещо спадає.

Аналогічно для зв'язків Se-Se перерозподіл електронної густини настає в інтервалі 2.7–2.8 Å, а енергія зв'язку складає $D_{Se-Se}^{d_i=2.7\text{Å}} = 1.894$ eV, а на зв'язках Se-I зміна знаку настає в інтервалі 3.1–3.2 Å, а енергія зв'язку зростає до $D_{Se-I}^{d_i=2.7\text{Å}} = 2.293$ eV.

Повністю аналогічно ведуть себе зв'язки Sb-Sb та Sb-I і Te-Te та Te-I.

Отримані результати узгоджуються з термічним перегрупуванням атомів при формування ближнього порядку хімічного зв'язку в системі Bi-Sb-Se-Te, і розширюють технологічні можливості при розгляді фазових перетворень: впливу тиску на температури фазових перетворень та формування фізичних властивостей методами пресування та екструзії.

Інформація про авторів

Рибчаков Д.Є. – Аспірант.

Маник О.М. – Кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри термоелектрики та медичної фізики.

Разіньков В.В. – Кандидат фізико-математичних наук, заступник директора з наукової роботи.

Література

1. Manyk O.M. (1999). *Multi-factor approach in theoretical material science*. Ukraine, Chernivtsi: Prut.

2. Keshavarz M.K., Vasileskiy D., Masut R.A., Turenne S. *P*-type bismuth telluride -based composite thermoelectric materials produced by mechanical alloying and hot extrusion. *Journal Electronical Materials*. doi:10.1007/s11664-012-2284-2.
3. Barchii I.E., Peresh E.Yu., Rizak V.M., Khudolii V.O. (2003). Heterogeneous equilibria. Uzhhorod: Zakarpattia.
4. Manyk O.M., Manyk T.O., Bilynskiy-Slotylo V.R. (2017). Crystalline structure and chemical bond of Cd-Zn-Sb. *J. Thermoelectricity*, 5, 32–38.
5. Manyk O.M., Manyk T.O., Bilynskiy-Slotylo V.R. (2023). Theoretical models of ordered alloys of thermoelectric materials based on Bi-Sb-Te. *J. Thermoelectricity*, 4, 5–16.
6. Manyk O.M., Manyk T.O., Bilynskiy-Slotylo V.R. (2023). Theoretical models of ordered alloys of ternary systems of thermoelectric materials. 5. Chemical bond and state diagrams of *Cd-Sb-Te*. *J. Thermoelectricity*, 3, 5–18.
7. Ostwald W. (1891). *Lehrbuch der allgemeinen Chemie. Bd.2. Stochiometrie*. Leipzig: Engelmann.
8. Hihara G., Satoh M., Uchida T., Ohtsuki T., Miyama K. (2004). *Solid State Ionics*, 172, 221.

Submitted: 14.08.2025

D.E. Rybchakov^{1,2} (<https://orcid.org/0009-0002-2891-2258>),

O.M. Manyk¹ (<https://orcid.org/0000-0003-2525-5280>),

V.V. Razinkov² (<https://orcid.org/0009-0004-2882-5466>)

¹Yuriy Fedkovych Chernivtsi National University,
2 Kotsiubynskiy str., Chernivtsi, 58012, Ukraine;

²Institute of Thermoelectricity of the NAS and MES of Ukraine,
1 Nauky str., Chernivtsi, 58029, Ukraine

Molecular Aspects of Mechanical Activation of Chemical Processes of Quaternary Systems of Promising Thermoelectric Materials by Halogen Solutions

Theoretical models of mechanical activation processes of powder technology for obtaining thermoelectric materials of the Bi-Sb-Se-Te quaternary systems using iodine solutions have been developed. Calculations of effective radii, redistribution of electron density and energy, dissociation of nonequivalent hybrid orbitals depending on the interatomic distances Bi-I; Sb-I; Se-I; Te-I have been performed. It has been shown that under certain conditions the redistribution of electron density changes sign. This means that chemical bonds can be both donor and acceptor. Bibl. 8. Tabl. 5.

Keywords: thermoelectric material, chemical bond, powder technologies, mechanochemistry, mechanoactivation methods, multicomponent systems, effective radii, electron density, donors, acceptors, nonequivalent hybrid orbitals, energy.

Надійшла до редакції 14.08.2025