

ДОПОВІДІ НАЦІОНАЛЬНОЇ АКАДЕМІЇ НАУК УКРАЇНИ

**Доповіді НАН України. – 2014. –
N 5.**

Зміст Contents

PDF-файли статей будуть доступні у травні 2015 року.

| [Вибір номера](#) | [Головна сторінка журналу](#) |

Зміст

Математика

| | |
|--|----|
| <i>Валотин Д. В.</i> Топология слоев неотрицательной кривизны на пятимерных многообразиях II | 7 |
| <i>Герасименко В. І., Федчук Ю. Ю.</i> Кінетичні рівняння активної м'якої речовини | 11 |
| <i>Ефимушкин А. С., Рязанов В. И.</i> О регулируемых решених задачи Римана-Гильберта для уравнений Вейтрами | 19 |
| <i>Іванов О. В., Орловський І. В.</i> Асимптотичні властивості оцінки параметрів лінійної регресії у випадку слабо залежних регресорів | 24 |
| <i>Курдаченко Л. А., Субботін І. Я., Чупорда В. А.</i> Про структуру модулів над узагальнено розв'язними групами | 29 |

Інформатика та кібернетика

| | |
|--|----|
| <i>Грицик В. В., Вондарук А. В., Грицик В. В., Кравець І. І., Оптим Ю. В., Цмоць І. Г.</i> Інформаційна технологія програмно-керованих растрів введення зображень у системи комп'ютерного зору | 24 |
| <i>Сиряк С. В., Сальников Н. Н.</i> О применении сосредоточения в методе конечных элементов Петрова-Галеркина при решении задач конвекции-диффузии | 29 |
| <i>Шевченко А. И., Миненко А. С.</i> Осесимметричное потенциально-вихровое течение со свободной границей | 45 |

Механіка

| | |
|--|----|
| <i>Каминский А. А., Дудик М. В., Кипнис Л. А.</i> Влияние области деструкции материала вблизи вершины межфазной трещины на условия ее срагивания | 50 |
| <i>Кубенко В. Д.</i> Нестационарная нагрузка на поверхности упругого полупространства | 58 |
| <i>Мартынчук А. А.</i> Об устойчивости траекторий множества разностных уравнений | 65 |

Фізика

| | |
|---|----|
| <i>Баранський П. І., Гайдар Г. П.</i> Вплив високотемпературного відпаду на параметри анізотропії рухливості і анізотропії термо-ЕРС захоплення електронів фононами в n-Si | 70 |
| <i>Булавін Л. А., Гаврюшенко Д. А., Коробко О. В., Сисоев В. М., Черевко К. В.</i> Дифузійні потоки та продукування ентропії в плоскпаралельній порі у випадку ідеального розчину | 76 |

Матеріалознавство

| | |
|--|----|
| <i>Ніколюк П. К., Юценко А. В., Стасенко В. А., Ніколайчук В. Я.</i> Дегібридація в сполуках RAI_2Si_2 | 83 |
|--|----|

Науки про Землю

| | |
|---|-----|
| <i>Дугін С. С.</i> Оцінка і вибір полігонів для наземної завірки інформації космічного геомоніторингу | 87 |
| <i>Ковальчук Л. А.</i> Моделирование динамики статистических распределений температуры воздуха посредством процесса Орнштейна-Уленбека и уравнения Фоккера-Планка | 95 |
| <i>Пустовитенко Б. Г., Мерзєєв Е. А.</i> К прогнозу ожидаемых сейсмических воздействий от сильных землетрясений Крыма | 102 |

| | |
|--|-----|
| <i>Шаталов Н. Н.</i> Крупная Новоигнатьевская дайка андезитовых порфиритов — как индикатор разломно-блоковой тектоники и глубинного строения зоны сочленения Донбасса с Приазовьем | 110 |
|--|-----|

Хімія

| | |
|---|-----|
| <i>Вичков К. Л., Тербіленко К. В., Слободяник М. С.</i> Кристалютворення BiVO_4 з розплавлів системи $\text{K}-\text{Bi}-\text{V}-\text{Mo}-\text{O}$ | 116 |
| <i>Дамченко І. В., Кісальова Т. О., Нарасайко Л. Ф., Галатенко Н. А.</i> Розробка та дослідження біологічно активного полімерного матеріалу з іммобілізованим вінокристіном | 121 |
| <i>Желобко О. Ю., Тирнавич І. Т., Воронев А. С., Будивесська О. Г., Козут А. М., Веренев С. А.</i> Особливості формування гідрогелів на основі хітозану та поліеталенгліколя, дисульфидатів шляхом термособорки | 128 |

Біологія

| | |
|--|-----|
| <i>Кущацька Г. М., Липчан О. В., Ділонська С. В., Валуринська О. М., Дамілюк М. О., Вичко А. В., Рыбалченко В. К.</i> Взаємодія пшадки віраду як потенційний протипухлинний агент нового покоління | 138 |
| <i>Тинкович Ю. О., Валіко Р. А.</i> Новий структурний клас 5S рДНК <i>Leiza</i> шкідливого Стер. . | 143 |

Біохімія

| | |
|---|-----|
| <i>Ураєнт Л. П., Манасенко Ф. М., Пасняк Т. А., Гибара М. О., Колеснікова І. М., Цап П. Ю., Веремієвський Г. К., Луцький В. В., Комісаренко С. В.</i> За'язування мотАТ II-5a в Аа20 7b ділізової фібріногену інгібує омишницю ікваліфікаційної детермінанти в 5S126-135 сайті молекули | 149 |
|---|-----|

Медицина

| | |
|---|-----|
| <i>Кальниць В. В., Швец А. В.</i> Проблема надійності: новий підхід и оцінює качества операторської діяльності | 157 |
| <i>Пушкар'єв В. М., Ковалюк О. І., Пушкар'єв В. В., Тренчак М. Д.</i> Дія паклітаноселу та інгібітора ядерного фактора NF- κ B на пухлинні раку щитоподібної залози <i>in vitro</i> | 164 |



УДК 538.915

П. К. Ніколюк, А. В. Ющенко, В. А. Стасенко, В. Я. Ніколайчук

Дегібридизація в сполуках RAI_2Si_2

(Представлено членом-кореспондентом НАН України В. Б. Молодкіним)

Теоретично розглянуто явище дегібридизації для інтерметалічних ізоструктурних сполук ряду RAI_2Si_2 ($R - Sm, Eu, Gd, Tb, Er, Yb$). Показано фізичну природу виникнення δ -подібного піка, величина якого пропорційна кількості вузлів (N), утворених структурними елементами $R-Si$. У порівнянні з одиночною домішкою величина δ -подібного піка зростає в N разів. Це зумовлено тим, що орбіталі $R-Si$, відіграють роль електронних дефектів, періодично розташованих у межах всієї кристалічної решітки. Проведені експериментальні й теоретичні дослідження показали високу ступінь кореляції та само узгодженості, що дозволяє розглядати атомні зв'язки $R-Si$ як своєрідні електронні дефекти, сильно збурюючи електронну систему сполук ряду RAI_2Si_2 . Таке збурення проявляється у виникненні інтенсивних резонансних піків електронних станів, які формуються у валентній зоні досліджуваних інтерметалідів в результаті дії дегібридизаційного фактора.

Дослідженню явища дегібридизації присвячена дана робота, яка має узагальнюючий характер і спрямована на систематизацію отриманих результатів. В інтерметалічних ізоструктурних сполуках ряду RAI_2Si_2 ($R - Sm, Eu, Gd, Tb, Er, Yb$) такий феномен описаний у наукових публікаціях [1–3], в яких отримано і зіставлено в єдиній енергетичній шкалі $K\beta_{1,x}$ – й $L_{2,3}$ – смуги емісії Si й Al . Рентгенівські емісійні смуги Al й Si у сполуках $ErAl_2Si_2$, $GdAl_2Si_2$ й $EuAl_2Si_2$, що зіставлені в єдиній енергетичній шкалі за допомогою рентгеноелектронних даних, ілюструє рис. 1. У вказаних сполуках спостерігаються специфічні трансформації емісійних смуг обох компонентів, але особливо $L_{2,3}$ -смуг Al . Характерною особливістю є те, що вказані смуги складаються з інтенсивних високо- і низькоенергетичних піків (піки A та C див. на рис. 1), розділених глибоким мінімумом. При цьому виявляється, що має місце точний збіг максимумів S і $K\beta_{1,x}$ -смуг (маркер B див. на рис. 1) з мінімумами розділених $AlL_{2,3}$ -смуг (як правило, $L_{2,3}$ -спектри Al в сполуках різного роду характеризуються монотонним розподілом інтенсивності з лише одним максимумом [4]). Треба зауважити, що при дослідженні сполук рентгеноспектральним та рентгеноелектронним методами в електронно-енергетичних діаграмах зазвичай спостерігається більше або менше виражена гібридизація електронних станів – прояв електронних станів одного компонента

© П. К. Ніколюк, А. В. Ющенко, В. А. Стасенко, В. Я. Ніколайчук, 2014

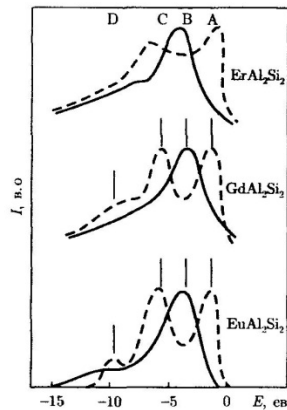


Рис. 1. Електронна структура валентної зони сполук ряду RAl_2Si_2 ($R = Er, Gd, Eu$), що ілюструє явище дегібридизації: ($SiK\beta_{1,x}$ — смуга емісії (суцільна лінія); $AlL_{2,3}$ — смуга (пунктир)). Смуги зіставлені в єдиній енергетичній шкалі за рентгеноелектронними даними. Маркерами А, В, С і D сполуки $ErAl_2Si_2$ відповідають вертикальні мітки над спектрами сполук $GdAl_2Si_2$

сполуки в спектрах іншого. Наприклад, фундаментальне дослідження Є. О. Жураковського по бінарних силіцидах і германідах [4] показує в спектрах сполук різного роду тільки гібридизаційні ефекти. Так само аналогічна ситуація спостерігається в роботах [5–7]. Отже, в нашому випадку ми маємо справу з особливою, специфічною ситуацією.

Дегібридизація — антипод гібридизації. Фізична суть дегібридизації в тому, що гібридна $K\beta_{1,x}$ -смуга Si є енергетично стійкою і тому не утворює хімічних зв'язків з Al, а навпаки, спричиняє розділення $s(d)$ -станів цього металу ($L_{2,3}$ -смуга), внаслідок чого з'являються інтенсивні низько-й високоенергетичні резонанси на його $L_{2,3}$ -смугах, що розділені мінімумом, на який припадає центр мас $K\beta_{1,x}$ -смуги кремнію.

Явище має ряд важливих наслідків. По-перше, спостерігається енергетичне зміщення — як в низько-, так і у високоенергетичний бік — електронних станів $s(d)$ -симетрії Al під впливом енергетично стійких електронних станів Si. По-друге, густина електронних станів на рівні Фермі сполуки сильно зростає [2]. По-третє, різких змін зазнають фізичні властивості таких об'єктів [1–3].

Роль гібридних енергетично стійких станів відіграють двоцентрові валентнозв'язуючі орбіталі типу $(3spd)_{Si} - (4f5d6s)_R$ [2, 3], наявність яких власне і спричиняє енергетичну стійкість гібридної $SiK\beta_{1,x}$ -смуги. Тут слід відзначити, що між елементами сполук типу RAl_2Si_2 має місце як гібридизація типу $R-Si$, так і її антипод — дегібридизація: між орбіталами $R-Si$, з одного боку, та Al — з іншого.

Таким чином, явище дегібридизації є фактично проявом сепарації валентних орбіталей у складних (багатокомпонентних) сполуках, де електровід'ємності хоча б двох компонентів істотно різняться, що приводить до формування стійких електронних конфігурацій між двома елементами з різко відмінними електровід'ємностями χ (у даному випадку максимальна різниця χ має місце якраз для Si й R). Третій компонент з проміжним значенням χ (у даному випадку Al) якраз і проявляє тенденцію до сепарації електронних станів. Власне тому в даному випадку можна говорити про дегібридизаційно-гібридизаційні ефекти.

Теоретична модель явища дегібридації детально описана в статті [8], де на прикладі купратних сполук розроблений математичний апарат такого феномена. Зауважимо, що явище має універсальний характер, оскільки проявляється як у сполуках різного компонентного складу, так і різних структурних типів [8].

Застосовувавши алгоритм [8], для густини електронних станів $g(E)$ в околі рівня Фермі матимемо:

$$g(E) = g_0(E) + N\delta(E - E_L), \quad (1)$$

де $g_0(E)$ — густина електронних станів у незбуреному стані; E_L — енергія локалізованого δ -подібного резонансного піка, N — кількість вузлів, утворених структурними елементами R -Si.

З формули (1) випливає, що в порівнянні з одиночною домішкою, величина δ -подібного піка зростає в N раз. Це обумовлено тим, що орбіталі R -Si відіграють роль електронних дефектів, періодично розташованих у межах всієї кристалічної решітки і збурюючих валентну електронну систему сполуки.

Отримані в серії робіт як експериментальні, так і теоретичні результати [1–3, 8], підтверджують факт зростання густини електронних станів в області прифермієвських енергій. Описані особливості можуть мати широкий спектр наслідків, тому що спричиняють зміни в густині станів в зоні прифермієвських енергій. Останні, як відомо, істотно впливають на кінетичні, магнітні, калориметричні, надпровідні та інші властивості сполук, що визначаються структурою розподілу та заселеністю саме прифермієвських електронних рівнів. Дослідження в даному напрямі надзвичайно перспективні, тому що дають ключ для синтезу нових матеріалів на основі алгоритму, вказаного вище. Сформулюємо цей алгоритм у компактному вигляді: *для отримання сполук з різко аномальними властивостями необхідно синтезувати матеріали, що містять у своєму складі як мінімум три компоненти з різко відмінними величинами електровід'ємностей.*

1. Ніколюк П. К. Явище дегібридації електронних станів в сполуках SmAl_2Si_2 та EuAl_2Si_2 // *Металлофіз. новейш. технології.* – 2001. – **23**, № 1. – С. 27–33.
2. Ніколюк П. К. Дегібридація в сполуках GdAl_2Si_2 та ErAl_2Si_2 // Там же. – 2001. – **23**, № 8. – С. 1111–1116.
3. Ніколюк П. К., Зузяк П. М., Мартинюк В. Д. та ін. Дегібридація в сполуках TbAl_2Si_2 та YbAl_2Si_2 // Там же. – 2002. – **24**, № 11. – С. 1477–1482.
4. Жураковский Е. А., Францевич И. Н. Рентгеновские спектры и электронная структура силицидов и германидов. – Киев: Наук. думка, 1981. – С. 46–299.
5. Jarlborg T., Barbiellini B., Markiewicz R. S., Bansil A. Different doping from apical and planar oxygen vacancies in $\text{Ba}_2\text{CuO}_{4-\delta}$ and $\text{La}_2\text{CuO}_{4-\delta}$: First principles band structure calculations // *Phys. Rev. B.* – 2012. – **86**. – P. 235111.
6. Jacobs T., Catterve S. O., Motzkau H. et al. Electron-tunneling measurements of low- T_C single-layer $\text{Bi}_{2+x}\text{Sr}_{2-y}\text{CuO}_{6+\delta}$: Evidence for a scaling disparity between superconducting and pseudogap states // *Ibid.* – 2012. – **86**. – P. 214506.
7. Plonka N., Kemper A. F., Graser S. et al. Tunneling spectroscopic for probing orbital anisotropy in iron pnictides // *Ibid.* – 2013. – **88**. – P. 174518.
8. Ніколюк П. К., Ніколайчук В. Я., Дзись В. Г. та ін. Явище дегібридації в купритах // *Доп. НАН України.* – 2007. – № 5. – С. 104–109.

Вінницьке Регіональне відділення
Українського Союзу промисловців
і підприємців України

Надійшло до редакції 10.12.2013

П. К. Николюк, А. В. Ющенко, В. А. Стасенко, В. Я. Николайчук

Дегибридизация в соединениях RA_2Si_2

Теоретически рассмотрено явление дегибридизации для интерметаллических изоструктурных соединений ряда RA_2Si_2 ($R - Sm, Eu, Gd, Tb, Er, Yb$). Показана физическая природа возникновения δ -образного пика, величина которого пропорциональна количеству узлов (N) образованных структурными элементами $R-Si$. По сравнению с единичной примесью величина δ -образного пика возрастает в N раз. Это обусловлено тем, что орбитали $R-Si$ играют роль электронных дефектов, периодически расположенных в пределах всей кристаллической решетки. Проведенные экспериментальные и теоретические исследования показали высокую степень корреляции и самосогласованности, что позволяет рассматривать атомные связи $R-Si$ как своеобразные электронные дефекты, сильно возмущающие электронную систему соединений ряда RA_2Si_2 . Такое возмущение проявляется в возникновении интенсивных резонансных пиков электронных состояний, формирующихся в валентной зоне изучаемых интерметаллидов в результате действия дегибридизационного фактора.

P. K. Nikolyuk, A. V. Yushchenko, V. A. Stasenko, Ya. V. Nikolaichuk

Dehybridization in RA_2Si_2 compounds

The theoretical consideration of the dehybridization phenomenon for intermetallic isostructural compounds of RA_2Si_2 ($R - Sm, Eu, Gd, Tb, Er, Yb$) row has been performed. The physical nature of the occasion of a δ -like hump, value of which is proportional to the number of lattice sites N formed by $R-Si$ structural elements is clarified. In comparison with a single admixture, the value of δ -like hump is more by N times. This is caused by that the orbitals $R-Si$ play the role of electronic defects, which are periodically located in the frame of the crystal. The performed theoretical and experimental investigations show a great degree of correlation and self-consistency. This gives possibility to view $R-Si$ bonds as specific electronic defects, which strongly perturb the electronic system of RA_2Si_2 compounds. Such perturbation is displayed in arising the intense resonance humps of electronic states, which are formed in the valence zone of the intermetallids under study as a result of the dehybridization factor action.