

# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

**Державний обліковий номер:** 0521U101750

**Особливі позначки:** відкрита

**Дата реєстрації:** 17-09-2021

**Статус:** Захищена

**Реквізити наказу МОН / наказу закладу:**



## II. Відомості про здобувача

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Мороз Микола Володимирович

2. Moroz Mykola Volodymyrovych

**Кваліфікація:** к. ф.-м. н., 01.04.10

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

**Вид дисертації:** доктор наук

**Аспірантура/Докторантура:** так

**Шифр наукової спеціальності:** 02.00.04

**Назва наукової спеціальності:** Фізична хімія

**Галузь / галузі знань:** Не застосовується

**Освітньо-наукова програма зі спеціальності:** Не застосовується

**Дата захисту:** 15-09-2021

**Спеціальність за освітою:** Педагогіка і методика середньої освіти. Фізика

**Місце роботи здобувача:** Львівський національний університет імені Івана Франка

**Код за ЄДРПОУ:** 02070987

**Місцезнаходження:** вул. Університетська, буд. 1, м. Львів, Львівська обл., 79000, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Міністерство освіти і науки України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

### **III. Відомості про організацію, де відбувся захист**

**Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради):** Д 35.051.10

**Повне найменування юридичної особи:** Львівський національний університет імені Івана Франка

**Код за ЄДРПОУ:** 02070987

**Місцезнаходження:** вул. Університетська, буд. 1, м. Львів, Львівська обл., 79000, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Міністерство освіти і науки України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

### **IV. Відомості про підприємство, установу, організацію, в якій було виконано дисертацію**

**Повне найменування юридичної особи:** Львівський національний університет імені Івана Франка

**Код за ЄДРПОУ:** 02070987

**Місцезнаходження:** вул. Університетська, буд. 1, м. Львів, Львівська обл., 79000, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Міністерство освіти і науки України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

### **V. Відомості про дисертацію**

**Мова дисертації:**

**Коди тематичних рубрик:** 31.15.25.09

**Тема дисертації:**

1. Термодинамічні властивості халькогенідів та халькогалогенідів деяких перехідних металів та фазові діаграми систем на їхній основі
2. Thermodynamic properties of chalcogenides and chalcogenides of some transition metals and phase diagrams of the systems based thereon

**Реферат:**

1. Дисертаційна робота присвячена встановленню складу, умов синтезу та термодинамічних властивостей сполук окремих ділянок рівноважного T-x простору халькогенідних та халькогалогенідних систем Ag-BII-XVI, Ag-XVI-YVII, Ag-BII-DIV-XVI, Ag-BII-XVI-YVII та Ag-DIV-XVI-YVII (BII = Zn, Cd, Hg, Fe; DIV = Ge, Sn, Pb; XVI = S, Se, Te; YVII = Cl, Br, I) за T<600 K. Методами фізико-хімічного аналізу побудовано T-x діаграми стану окремих перерізів систем. Вперше запропоновано науковий підхід до встановлення фазових рівноваг в три- та чотириелементних системах за температур, коли існують кінетичні перешкоди досягненню рівноважного стану. В ЕХК здійснено низькотемпературний (T<600 K) електрохімічний синтез рівноважного набору фаз із метастабільних сумішей компонентів окремих частин концентраційного простору досліджуваних систем. Низькотемпературним методом вперше синтезовано халькогеніди (AgFeS<sub>2</sub>, Ag<sub>2</sub>FeS<sub>2</sub>, Ag<sub>2</sub>FeSe<sub>2</sub> і Ag<sub>2</sub>FeTe<sub>2</sub>) та низькотемпературні модифікації сполук AgFeSe<sub>2</sub>, AgFeTe<sub>2</sub>, Ag<sub>2</sub>FeSnS<sub>4</sub>, Ag<sub>2</sub>FeSn<sub>3</sub>S<sub>8</sub>,

Ag<sub>2</sub>FeGeSe<sub>4</sub>, Ag<sub>2</sub>FeSnSe<sub>4</sub>, Ag<sub>2</sub>FePbSe<sub>4</sub> і Ag<sub>2</sub>FeGeTe<sub>4</sub>) та халькогалогеніди (Ag<sub>23</sub>Te<sub>12</sub>Cl, Ag<sub>5</sub>Te<sub>2</sub>Cl, Ag<sub>10</sub>Te<sub>4</sub>Cl<sub>3</sub>, Ag<sub>19</sub>Te<sub>6</sub>Cl<sub>7</sub>, Ag<sub>19</sub>Te<sub>6</sub>Br<sub>7</sub>, Ag<sub>3</sub>TeBr, Ag<sub>5</sub>Te<sub>2</sub>Br, Ag<sub>10</sub>Te<sub>4</sub>Br<sub>3</sub>, Ag<sub>23</sub>Te<sub>12</sub>Br і Ag<sub>7</sub>SnSe<sub>5</sub>Br). За температурними залежностями ЕРС досліджених ЕХК вперше визначено основні термодинамічні функції (енергію Гіббса, ентальпію та ентропію) тридцяти тернарних та тетрарних сполук. Для частини з них знайдено аналітичні рівняння температурних змін теплоємностей та розраховано ентальпії поліморфних перетворень. Встановлено можливість оцінки метастабільного стану фаз за T < 600 К.

2. The thesis is devoted to the establishment of the formula composition, synthesis conditions and thermodynamic properties of compounds of separate sections of the equilibrium T-x space of the chalcogenide and chalcocalide systems Ag-BII-XVI, Ag-XVI-YVII, Ag-BII-DIV-XVI, Ag-BII-XVI-YVII, and Ag-DIV-XVI-YVII (BII = Zn, Cd, Hg, Fe; DIV = Ge, Sn, Pb; XVI = S, Se, Te; YVII = Cl, Br, I) at T < 600 K. The XRD, DTA, and DSC-TG methods were used to investigate the phase diagrams of parts of the systems. A new scientific approach was proposed to determine phase equilibria in the three- and four-element systems at temperatures with kinetic obstacles to achieving equilibrium. Chalcogenides (AgFeS<sub>2</sub>, Ag<sub>2</sub>FeS<sub>2</sub>, Ag<sub>2</sub>FeSe<sub>2</sub>, Ag<sub>2</sub>FeTe<sub>2</sub>, low-temperature modifications of AgFeSe<sub>2</sub>, AgFeTe<sub>2</sub>, Ag<sub>2</sub>FeSnS<sub>4</sub>, Ag<sub>2</sub>FeSn<sub>3</sub>S<sub>8</sub>, Ag<sub>2</sub>FeGeSe<sub>4</sub>, Ag<sub>2</sub>FeSnSe<sub>4</sub>, Ag<sub>2</sub>FePbSe<sub>4</sub>, and Ag<sub>2</sub>FeGeTe<sub>4</sub>) and chalcocalides (Ag<sub>23</sub>Te<sub>12</sub>Cl, Ag<sub>5</sub>Te<sub>2</sub>Cl, Ag<sub>10</sub>Te<sub>4</sub>Cl<sub>3</sub>, Ag<sub>19</sub>Te<sub>6</sub>Cl<sub>7</sub>, Ag<sub>19</sub>Te<sub>6</sub>Br<sub>7</sub>, Ag<sub>3</sub>TeBr, Ag<sub>5</sub>Te<sub>2</sub>Br, Ag<sub>10</sub>Te<sub>4</sub>Br<sub>3</sub>, Ag<sub>23</sub>Te<sub>12</sub>Br, and Ag<sub>7</sub>SnSe<sub>5</sub>Br) were synthesized for the first time by the low-temperature method. From the temperature dependences of EMF of investigated cells, the principal thermodynamic functions (Gibbs energy, enthalpy, and entropy) of 30 ternary and quaternary compounds were determined for the first time. Analytical equations of temperature changes of heat capacities are found for some of them and enthalpies of polymorphic transformations are calculated. The possibility of estimating the metastable state of phases at T < 600 K has been established.

**Державний реєстраційний номер ДіР:**

**Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки:**

**Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:**

**Підсумки дослідження:**

**Публікації:**

**Наукова (науково-технічна) продукція:**

**Соціально-економічна спрямованість:**

**Охоронні документи на ОПВ:**

**Впровадження результатів дисертації:**

**Зв'язок з науковими темами:**

## **VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Решетняк Олександр Володимирович

2. Reshetnyak Oleksandr Volodymyrovych

**Кваліфікація:** д. х. н., 02.00.04

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:**

**Код за ЄДРПОУ:**

**Місцезнаходження:**

**Форма власності:**

**Сфера управління:**

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Решетняк Олександр Володимирович

2. Reshetnyak Oleksandr Volodymyrovych

**Кваліфікація:** д. х. н., 02.00.04

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:**

**Код за ЄДРПОУ:**

**Місцезнаходження:**

**Форма власності:**

**Сфера управління:**

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

## **VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів**

**Офіційні опоненти**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Чергинець Віктор Леонідович

2. Cherginets Viktor Leonidovych

**Кваліфікація:** д. х. н., 02.00.04

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:**

**Код за ЄДРПОУ:**

**Місцезнаходження:**

**Форма власності:**

**Сфера управління:**

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Гулай Любомир Дмитрович
2. Hulay Lyubomyr Dmytrovych

**Кваліфікація:** д. х. н., 02.00.01**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується**Додаткова інформація:****Повне найменування юридичної особи:****Код за ЄДРПОУ:****Місцезнаходження:****Форма власності:****Сфера управління:****Ідентифікатор ROR:** Не застосовується**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Сергеев Валентин Вікторович
2. Sergeev Valentyn Viktorovich

**Кваліфікація:** д.х.н., 02.00.04**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується**Додаткова інформація:****Повне найменування юридичної особи:****Код за ЄДРПОУ:****Місцезнаходження:****Форма власності:****Сфера управління:****Ідентифікатор ROR:** Не застосовується**Рецензенти****VIII. Заключні відомості****Власне Прізвище Ім'я По-батькові  
голови ради**

Каличак Ярослав Михайлович

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові  
головуючого на засіданні**

Каличак Ярослав Михайлович

**Відповідальний за підготовку  
облікових документів**

**Реєстратор**

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є  
відповідальним за реєстрацію наукової  
діяльності**



Юрченко Т.А.