

# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

**Державний обліковий номер:** 0406U002233

**Особливі позначки:** відкрита

**Дата реєстрації:** 01-06-2006

**Статус:** Захищена

**Реквізити наказу МОН / наказу закладу:**



## II. Відомості про здобувача

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Горинь Андрій Маркіянович

2. Horyn Andriy Markiyanovych

**Кваліфікація:**

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

**Вид дисертації:** кандидат наук

**Аспірантура/Докторантура:** так

**Шифр наукової спеціальності:** 02.00.01

**Назва наукової спеціальності:** Неорганічна хімія

**Галузь / галузі знань:** Не застосовується

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

**Дата захисту:** 10-05-2006

**Спеціальність за освітою:** 2004

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

**Код за ЄДРПОУ:** 02070987

**Місцезнаходження:** 79000, м. Львів, вул. Університетська, 1

**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 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:** 79000, м. Львів, вул. Університетська, 1

**Форма власності:**

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

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

### **V. Відомості про дисертацію**

**Мова дисертації:**

**Коди тематичних рубрик:** 31.17.15

**Тема дисертації:**

1. Тверді розчини на основі тернарних станідів та антимонідів перехідних і рідкісноземельних металів структурних типів MgAgAs та Y<sub>3</sub>Au<sub>3</sub>Sb<sub>4</sub>
2. Solid solutions based on ternary stannides and antimonides of transition and Rare Earth metals with MgAgAs and Y<sub>3</sub>Au<sub>3</sub>Sb<sub>4</sub> structure types

**Реферат:**

1. У роботі досліджено вплив заміщення компонентів у тернарних сполуках структурних типів MgAgAs та Y<sub>3</sub>Au<sub>3</sub>Sb<sub>4</sub> іншими елементами на кристалічну й електронну структури та фізичні властивості. Побудовано ізотермічні перерізи діаграм стану систем Ti-Co-{Sn, Sb} при 870/1070 К, підтверджено існування 4 тернарних сполук. Визначено області гомогенності, кристалічну структуру, поміряні електротранспортні та магнітні властивості сплавів твердих розчинів заміщення TiCo<sub>1-x</sub>M'<sub>x</sub>Sb (M' = Ni, Cu), Ti<sub>1-x</sub>Sc<sub>x</sub>NiSn, Zr<sub>1-x</sub>M''<sub>x</sub>NiSn (M'' = Sc, Nb, Mo), ZrNi<sub>1-x</sub>CoxSn, ZrNiSn<sub>1-x</sub>Sbx, ZrCoSb<sub>1-x</sub>Snx, VFe<sub>1-x</sub>CuxSb і R<sub>3</sub>Cu<sub>3</sub>Sb<sub>4-x</sub>Snx (R = La, Ce, Pr, Nd, Sm). Встановлено, що сполуки зі структурою типу MgAgAs та електронною концентрацією 18 ел./ф.о., мають напівпровідникові властивості, а для заміщених фаз при зміні електронної концентрації відбувається поступовий перехід від активаційної провідності до металічної. Розраховано електронні структури 6 тернарних сполук і 4 твердих розчинів на їх основі і встановлено сильну гібридизацію

зовнішніх електронних орбіталей всіх атомів. Для сполук та зразків твердих розчинів заміщення, що проявляють напівпровідникові властивості, виявлено доволі широкий інтервал енергій з низькою густиною станів, у межах якого лежить рівень Фермі. Заміщення компонентів у тернарних сполуках приводить до зміщення рівня Фермі в напрямку зони провідності або валентної зони з утворенням інтерметалічних напівпровідників n- або p-типу, відповідно. Зразки твердого розчину  $ZrCoSb_{1-x}Sn_x$  і сполуку  $TiCoSb$  запропоновано до застосування як матеріал для термоелектричних генераторів.

2. In the present work the effect of substitution of the components in the ternary intermetallic compounds with  $MgAgAs$  and  $Y_3Au_3Sb_4$  structure types by other elements on their crystal and electronic structures and physical properties was investigated. The isothermal sections of the phase diagrams of the  $Ti-Co-\{Sn, Sb\}$  systems at 870/1070 K were constructed. The presence of 4 ternary compounds in these systems was confirmed. The homogeneity ranges and crystal structure of the  $TiCo_{1-x}M'_xSb$  ( $M' = Ni, Cu$ ),  $Ti_{1-x}Sc_xNiSn$ ,  $Zr_{1-x}M''_xNiSn$  ( $M'' = Sc, Nb, Mo$ ),  $ZrNi_{1-x}Co_xSn$ ,  $ZrNiSn_{1-x}Sb_x$ ,  $ZrCoSb_{1-x}Sn_x$ ,  $VFe_{1-x}Cu_xSb$  and  $R_3Cu_3Sb_4-xSn_x$  ( $R = La, Ce, Pr, Nd, Sm$ ) solid solutions were determined, their electronic transport and magnetic properties were measured. It was established that compounds with  $MgAgAs$  structure type and valence electron count (VEC) 18 el./f.u., have semiconducting properties. The changes in the VEC due to doping resulted in the gradual transition from an activated to the metallic-like conduction. Electronic structures of the 6 ternary compounds and related 4 solid solutions were calculated, and strong hybridization of the outer-shell electrons of all atoms was observed. For the ternary compounds and the substitutional solid solutions alloys with semiconducting properties a wide energy interval of low density of states, that included the Fermi level, was found. The substitution of the components in the ternary compounds resulted in the shift of the Fermi level to the conduction or valence band, and thus the n- or p-type intermetallic semiconductor was formed, respectively. The samples of the  $ZrCoSn_{1-x}Sb_x$  solid solution and the  $TiCoSb$  compound were proposed as a material for the thermoelectric generators.

**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. Бодак Оксана Іванівна

2. Bodak Oksana Ivanivna

**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. Стадник Юрій Володимирович

2. Stadnyk Yuriy Volodymyrovych

**Кваліфікація:** к.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

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

### **Офіційні опоненти**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Томашик Василь Миколайович

2. Томашик Василь Миколайович

**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. Стельмахович Богдан Мирославович
2. Стельмахович Богдан Мирославович

**Кваліфікація:** к.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

**Рецензенти**

## **VIII. Заключні відомості**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові  
голови ради**

Ковальчук Євген Прокопович

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

Ковальчук Євген Прокопович

**Відповідальний за підготовку  
облікових документів**

**Реєстратор**

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



Юрченко Т.А.