

# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

**Державний обліковий номер:** 0409U005988

**Особливі позначки:** відкрита

**Дата реєстрації:** 28-12-2009

**Статус:** Захищена

**Реквізити наказу МОН / наказу закладу:**



## II. Відомості про здобувача

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Головчан Олексій Віталійович

2. Golovchan Oleksii Vitaliyovich

**Кваліфікація:**

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

**Вид дисертації:** кандидат наук

**Аспірантура/Докторантура:** так

**Шифр наукової спеціальності:** 01.04.07

**Назва наукової спеціальності:** Фізика твердого тіла

**Галузь / галузі знань:** Не застосовується

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

**Дата захисту:** 10-12-2009

**Спеціальність за освітою:** 7.070101

**Місце роботи здобувача:** Донецький фізико-технічний інститут ім. О.О. Галкіна НАН України

**Код за ЄДРПОУ:** 05420497

**Місцезнаходження:** 03680 Київ пр.Науки, 46

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

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

**Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради):** Д 11.184.01

**Повне найменування юридичної особи:**

**Код за ЄДРПОУ:**

**Місцезнаходження:**

**Форма власності:**

**Сфера управління:**

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

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

**Повне найменування юридичної особи:** Донецький фізико-технічний інститут ім. О.О. Галкіна НАН України

**Код за ЄДРПОУ:** 05420497

**Місцезнаходження:** 03680 Київ пр.Науки, 46

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

### **V. Відомості про дисертацію**

**Мова дисертації:**

**Коди тематичних рубрик:** 29.19.04

**Тема дисертації:**

1. Взаємозв'язок електронної, магнітної та кристалічної структур у залізо-марганцевих пніктидах
2. Interrelation between electronic, magnetic and crystal structures in iron-manganese pnictides

**Реферат:**

1. Дисертацію присвячено систематичному дослідженню електронної структури залізо-марганцевих пніктидів методами теорії функціоналу густини. Показано, що зміна симетрії кристалічної ґратки MnAs при виникненні феромагнетизму обумовлена конкуренцією магнітного і структурного параметрів порядку. Проведено систематичне дослідження впливу аніонного і катіонного заміщень на електронну структуру та величини локальних магнітних моментів гексагонального MnAs. Запропоновано рекомендації щодо вибору оптимального, з точки зору магнітокалоричних застосувань, легування. Зіставлення даних розрахунків електронної структури  $Mn_{2-x}Fe_xAs_yP_{1-y}$  з експериментальними даними надало можливість передбачити та експериментально виявити існування потрійної точки на фазовій діаграмі температура-концентрація, а також обґрунтувати та запропонувати концепцію змішаних магнітних станів, яка несуперечливо пояснює поведінку цих сплавів у магнітному полі.

2. The thesis is devoted to a systematic study of the electronic structure of iron-manganese pnictides using density functional theory methods. It is shown that a change of symmetry of the MnAs crystal lattice at the occurrence of ferromagnetism is caused by competition of magnetic and structural order parameters. Systematic investigation of the effect of anionic and cationic substitutions on the electronic structure and local magnetic moments of hexagonal MnAs is performed. Recommendations relating the choice of optimal substitutions (from the viewpoint of magnetocaloric applications) are offered. Comparison of the electronic structure data for the  $Mn_{2-x}Fe_xAs_{1-y}P_y$  system with experimental data has allowed to predict and to find out experimentally the existence of a triple point on the temperature-concentration phase diagram. A concept of mixed magnetic states which consistently explains behavior of the alloys in a magnetic field is proposed and grounded.

**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. Вальков Віктор Іванович

2. Valkov Viktor Ivanovich

**Кваліфікація:** д.ф.-м.н., 01.04.07

**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. Пашкевич Юрій Георгійович
2. Пашкевич Юрій Георгійович

**Кваліфікація:** д.ф.-м.н., 01.04.07

**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. Тимошевський Андрій Миколайович
2. Тимошевський Андрій Миколайович

**Кваліфікація:** к.ф.-м.н., 01.04.07

**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**

Варюхін Віктор Миколайович

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

Варюхін Віктор Миколайович

**Відповідальний за підготовку  
облікових документів**

**Реєстратор**

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



Юрченко Т.А.