

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

экспертной комиссии диссертационного совета Д 003.051.01 на базе ИНХ СО РАН по кандидатской диссертации Яковлевой Галины Евгеньевны «ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ЗАМЕЩЕНИЙ В КАТИОННОЙ И АНИОННОЙ ПОДРЕШЕТКАХ НА ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДИСЕЛЕНИДА ВОЛЬФРАМА»

Комиссия диссертационного совета Д 003.051.01 (по химическим наукам) на базе ФГБУН Института неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН в составе: председателя — доктора физико-математических наук, профессора **Окотруба Александра Владимировича**, членов комиссии — доктора химических наук **Баковца Владимира Викторовича** и доктора химических наук **Наумова Николая Геннадьевича**, в соответствии с п. 25 Положения о совете по защите диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, утвержденного приказом Минобрнауки России от 13 января 2014 г. № 7, на основании ознакомления с кандидатской диссертацией **Яковлевой Галины Евгеньевны** и состоявшегося обсуждения приняла следующее заключение:

1. Соискатель ученой степени кандидата физико-математических наук соответствует требованиям пп. 2-4 Положения о порядке присуждения ученых степеней (утв. Постановлением Правительства России от 24.02.2013 г. №842), необходимым для допуска его диссертации к защите.
2. Диссертация на тему «Исследование влияния замещений в катионной и анионной подрешетках на термоэлектрические свойства диселенида вольфрама» в полной мере соответствует специальности 02.00.04 – «физическая химия», к защите по которой представлена работа.
3. Основные положения и выводы диссертационного исследования отражены в 3 статьях, опубликованных **Яковлевой Галиной Евгеньевной** в журналах, которые входят в перечень индексируемых в международной системе научного цитирования Web of Science и в 12 тезисах докладов на российских и зарубежных научных конференциях. Представленные соискателем сведения об опубликованных им работах, в которых изложены основные научные результаты диссертации, достоверны.
4. Оригинальность содержания диссертации составляет более 90% от общего объема текста; цитирование оформлено корректно по всему тексту; заимствованного материала, использованного в диссертации без ссылки на автора либо источник заимствования, не обнаружено; научных работ, выполненных соискателем ученой степени в соавторстве, без ссылок на соавторов, не выявлено.
5. В диссертации исследованы термоэлектрические свойства твердых растворов замещения $W_{1-x}Nb_xSe_{2-y}S_y$. Измерены зависимости электропроводности, теплопроводности, коэффициента Зеебека и коэффициента Холла от температуры. Проведен поиск оптимальных концентраций замещающих элементов в катионной и анионной подрешетках соединений для получения наибольшей термоэлектрической эффективности. Установлена взаимосвязь химического состава соединений с физическими свойствами.

Для объяснения нетипичного поведения температурной зависимости концентрации носителей заряда в соединениях $W_{1-x}Nb_xSe_{2-y}S_y$, определенной из измерения эффекта Холла, предложена эмпирическая модель, в основании которой лежат предположения о сложной валентной зоне соединений с основным и дополнительным экстремумами в энергетической зависимости электронной плотности. Таким образом, увеличение концентрации

замещающего элемента в анионной подрешетке (серы) приводит к увеличению вклада «легких дырок» в электронные транспортные свойства соединений.

Установлено, что замещение элементов в катионной подрешетке приводит к увеличению концентрации носителей заряда. Показано, что замещение ионов W^{4+} ионами Nb^{4+} приводит к увеличению ангармоничности колебаний решетки, и теплопроводность данных соединений уменьшается. В ряду образцов $W_{0.98}Nb_{0.02}Se_{2-y}S_y$ ($y = 0.2, 0.3, 0.4, 0.5$) замещение иона халькогена Se^{2+} ионом S^{2+} с отличающимся радиусом и массой привело к увеличению теплопроводности. Такое поведение теплопроводности, может быть объяснено с точки зрения изменения текстуры соединений. Представлены СЭМ изображения образцов, подтверждающие увеличение размеров зерен кристаллитов с увеличением концентрации серы в твердых растворах замещения $W_{1-x}Nb_xSe_{2-y}S_y$.

Установлено, что замещения в анионной подрешетке изменяют морфологию поликристаллического образца, приводя к уменьшению роста составляющих его зерен в вертикальном направлении и способствуя росту зерен в направлении слоя. Такое изменение морфологии ведет к изменению числа границ рассеяния, что повлияло на теплопроводность и подвижность основных носителей заряда.

На основании измеренных данных рассчитан фактор добротности материалов ZT . Показано, что наилучшую термоэлектрическую эффективность среди изученной серии соединений имеет образец $W_{0.98}Nb_{0.02}Se_{1.7}S_{0.3}$ ($ZT = 0.26$). Приведен сравнительный анализ полученных данных с результатами работ, в которых применялись другие методы модификации свойств диселенида вольфрама.

Комиссия рекомендует:

1. Принять к защите на диссертационном совете Д 003.051.01 на базе ИНХ СО РАН кандидатскую диссертацию **Яковлевой Галины Евгеньевны** «Исследование влияния замещений в катионной и анионной подрешетках на термоэлектрические свойства диселенида вольфрама».
2. Утвердить официальными оппонентами:
 - Пшеная-Северина Дмитрия Александровича, кандидата физико-математических наук, старшего научного сотрудника Лаборатории физики термоэлектриков (ФГБУН Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук), г. Санкт-Петербург.
 - Быкова Алексея Александровича, доктора физико-математических наук, профессора, ведущего научного сотрудника Лаборатории физики низкоразмерных электронных систем (ФГБУН Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова Сибирского отделения Российской Академии Наук), г. Новосибирск.
3. Утвердить в качестве ведущей организации ФГАОУ ВО Национальный исследовательский Томский государственный университет, Лаборатория новых материалов и перспективных технологий Сибирского физико-технического института имени академика В. Д. Кузнецова, г. Томск.

д. ф.-м. н. Окотруб Александр Владимирович

д. х. н. Баковец Владимир Викторович

д. х. н. Наумов Николай Геннадьевич

Наумова И. Г.
Подпись *Окотруб А. В. Баковец В. В.*
заверяю *Гербасова О. А.*
Ученый секретарь ИНХ СО РАН
" 10 " 06 2019 г.

