

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ЭКСПЕРТНОЙ КОМИССИИ

по защите диссертации Ханиной Александры Сергеевны на тему «Влияние параметров синтеза, гетеровалентного замещения и вакансий на термоэлектрические свойства слоистых оксиселенидов на основе Bi » представленная по специальности 1.3.11. – «Физика полупроводников» и состоявшейся в НИТУ МИСИС 23 июня 2026 года.

Диссертация принята к защите Диссертационным советом НИТУ МИСИС 13.04.2026 г., протокол № 38.

Диссертация выполнена на кафедре функциональных наносистем и высокотемпературных материалов НИТУ МИСИС.

Научный руководитель – доктор физико-математических наук Ховайло Владимир Васильевич, профессор кафедры функциональных наносистем и высокотемпературных материалов НИТУ МИСИС.

Экспертная комиссия утверждена Диссертационным советом НИТУ МИСИС (протокол № 38 от 13.04.2026 г.) в составе:

1. Костишин Владимир Григорьевич, д.ф.-м.н., заведующий кафедрой технологии материалов электроники НИТУ МИСИС - председатель комиссии;
2. Панина Лариса Владимировна, д.ф.-м.н., профессор кафедры технологии материалов электроники НИТУ МИСИС;
3. Калошкин Сергей Дмитриевич, д.ф.-м.н., директор института новых материалов и нанотехнологий НИТУ МИСИС;
4. Задорожный Владислав Юрьевич, д.т.н., профессор кафедры нанотехнологий и микросистемной техники федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы»;
5. Штерн Максим Юрьевич, д.т.н., профессор Института перспективных материалов и технологий федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский университет «Московский институт электронной техники».

В качестве ведущей организации утверждено федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Челябинский государственный университет», г. Челябинск.

Экспертная комиссия отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

1. Разработан и апробирован метод механохимического синтеза путём высокоэнергетического шарового размола для быстрого синтеза оксиселенидов как p -типа, так и n -типа. Показано, что данный подход позволяет получать фазово-чистые порошки за 25 минут, что является самым быстрым известным методом синтеза для этих материалов на сегодняшний день и открывает перспективы для масштабируемого производства.
2. Продемонстрировано, что использование высокоэнергетического размола не только сокращает время синтеза, но и позволяет эффективно управлять микроструктурой и дефектообразованием образцов оксиселенидов, что напрямую влияет на их термоэлектрические свойства. Установлено, что применение данного метода удваивает

значение термоэлектрической добротности zT нелегированных оксиселенидов по сравнению с теми же составами, полученными традиционным твердофазным синтезом.

3. Установлено, что для системы $\text{Bi}_{1-x}\text{Pb}_x\text{Cu}_{1-x}\text{SeO}$ p -типа совместный эффект от замещения свинцом и введения дополнительных вакансий меди приводит к четырёхкратному увеличению фактора мощности и росту термоэлектрической добротности zT до 0.75. Для оксиселенидов $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}_{1-x}$ n -типа выявлена критическая роль вакансий селена в управлении концентрацией и подвижностью носителей заряда.

4. Проведена оценка анизотропии транспортных свойств в слоистых оксиселенидах и впервые количественно охарактеризованы различия в теплопроводности (10-15 %), электропроводности (5-30 %) и коэффициенте Зеебека (40-50 %) между направлениями, параллельными и перпендикулярными оси спекания, что имеет важное значение для оптимизации текстуры материалов.

Научная новизна и практическая значимость исследования обоснованы тем, что:

1. Показано, что подбор параметров механохимического синтеза позволяет понизить теплопроводность за счёт уменьшения среднего размера зерна и повысить электропроводность за счёт дополнительных носителей заряда, возникающих из-за образования вакансий на позициях меди в соединении BiCuSeO .

2. Установлено, что увеличение концентрации носителей заряда, достигаемое за счёт замещения позиции висмута на свинец (Pb_{Bi}) и введение вакансий на позиции меди (V_{Cu}) приводит к четырёхкратному увеличению термоэлектрического фактора мощности в оксиселенидах $\text{Bi}_{1-x}\text{Pb}_x\text{Cu}_{1-x}\text{SeO}$.

3. На основании результатов комплексных исследований установлено, что вакансии селена в оксиселенидах $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}_{1-x}$ n -типа играют доминирующую роль в контроле концентрации и подвижности носителей заряда. Показано, что избыток селена ($x = -0.05$) подавляет образование вакансий, в то время как дефицит селена ($x = 0.05$) резко увеличивает проводимость за счёт введения дополнительных носителей заряда, что в свою очередь приводит к росту термоэлектрической добротности zT до 0.6.

4. Продемонстрировано, что подбор параметров высокоэнергетического шарового размола позволяет получать однофазные образцы оксиселенидов на основе висмута без использования длительной высокотемпературной термообработки. Данный подход позволяет сократить время синтеза и является масштабируемой и энергоэффективной альтернативой традиционному твердофазному синтезу с сохранением или улучшением функциональных характеристик материала

Оценка достоверности результатов исследования выявила, что:

1. Экспериментальные результаты получены с использованием современных методов исследований и испытаний; показана воспроизводимость результатов исследования.

2. Полученные результаты находятся в качественном и количественном согласии с результатами, представленными в литературных источниках по данной тематике.

3. Достоверность результатов подтверждается наличием публикаций соискателя в высокорейтинговых рецензируемых научных журналах, а также выступлениями на профильных международных и российских научных конференциях.

Личный вклад соискателя состоит в анализе литературных источников, формулировке целей и задач работы, составлении плана и проведении научных экспериментов, обработке и обобщении полученных данных, формулировке основных выводов и заключений, в написании и подготовке статей для публикации, а также в апробации полученных результатов на научных конференциях.

По материалам диссертации опубликовано 2 статьи в журналах, индексируемых в наукометрической базе данных Scopus и 6 публикации в сборниках тезисов и научных трудов отечественных и международных научных конференций.

Пункт 2.6 Положения присуждения ученой степени кандидата наук НИТУ МИСИС соискателем ученой степени не нарушен.

Диссертация Ханиной Александры Сергеевны соответствует критериям п. 2 Положения о порядке присуждения ученых степеней в НИТУ МИСИС, так как в ней на основании выполненных автором исследований микроструктуры, тепло- и электрофизических свойств установлена роль вакансий, гетеровалентного замещения, а также параметров синтеза на термоэлектрические свойства оксиселенидов BiCuSeO p -типа и $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$ n -типа, а также разработан механохимический метод быстрого синтеза фазово-чистых материалов со свойствами, сопоставимыми или превосходящими свойства материалов, полученные традиционным твердофазным синтезом. Содержание диссертации соответствует квалификационным требованиям паспорта специальности 1.3.11. – «Физика полупроводников».

Экспертная комиссия приняла решение о возможности присуждения Ханиной Александре Сергеевне ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.11. – «Физика полупроводников».

Результаты голосования: при проведении тайного голосования экспертная комиссия в количестве 5 (пяти) человек, участвовавших в заседании, из 5 человек, входящих в состав комиссии, проголосовала: за 5 (пять), против 0, действительных бюллетеней 0.

Председатель Экспертной комиссии

В.Г. Костишин

23.06.2026 г.