

УТВЕРЖДАЮ:

Зам. директора по научной работе
Стерлитамакского филиала ФГБОУ ВО
«Башкирский государственный
университет» кандидат исторических
наук, доцент


Алепин П.Н.
« 06 » 2021 г.



ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Стерлитамакского филиала федерального государственного бюджетного
образовательного учреждения высшего образования
«Башкирский государственный университет»

Диссертационная работа «Фазовая диаграмма, кристаллохимические и электрофизические свойства теллуридов меди» выполнена на кафедре общей и теоретической физики естественнонаучного факультета Стерлитамакского филиала федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Башкирский государственный университет».

В период подготовки диссертации соискатель Курбангулов А.Р. работал на кафедре общей и теоретической физики Стерлитамакского филиала ФГБОУ ВО «Башкирский государственный университет» в должности старшего преподавателя.

Курбангулов Азат Рифкатович в 2011 году окончил Стерлитамакскую государственную педагогическую академию им. Зайнаб Бишевой по специальности «Физика и математика». Там же обучался в очной аспирантуре по специальности «Физика конденсированного состояния» в период с 2011 г по 2014 г. Справка о сдаче кандидатских экзаменов выдана 26.11.2021 г. Стерлитамакским филиалом ФГБОУ ВО «БашГУ».

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, профессор Биккулова Нурия Нагимьяновна, заведующая кафедрой общей и теоретической физики естественнонаучного факультета Стерлитамакского филиала ФГБОУ ВО «Башкирский государственный университет».

По результатам рассмотрения диссертации «Фазовая диаграмма, кристаллохимические и электрофизические свойства теллуридов меди» принято следующее заключение:

Диссертация Курбангулова А.Р. представляет собой законченное и самостоятельное исследование системы Cu–Te, заключающееся в уточнении фазовой диаграммы, определении кристаллической структуры устойчивых фаз теллуридов меди нестехиометрических составов и ее эволюции при изменении температуры, выявлении общих закономерностей связи между составом, структурой и физико-химическими свойствами исследуемых соединений.

Личный вклад соискателя заключается в выборе направления исследований, проведении экспериментов, обработке и анализе результатов эксперимента, формулировке выводов. Диссертация является работой, обобщившей результаты, полученные лично автором или при его непосредственном участии. Автор самостоятельно осуществлял подготовку и представление докладов по результатам исследования на научных конференциях и семинарах.

Достоверность результатов диссертации обеспечивается использованием аттестованных образцов, применением общепринятых методов исследования, согласованностью экспериментальных результатов с теоретическими расчётами. Экспериментальные результаты получены с использованием хорошо апробированных современных методов измерений и стандартных программ теоретических расчетов.

Научная новизна работы заключается в том, что на основе результатов кулонометрического титрования, калориметрических измерений и высокотемпературного рентгеноструктурного анализа уточнена фазовая диаграмма состояния системы Cu–Te в области температур 593–673 К и составов Cu_{2-x}Te ($0 \leq x \leq 0,3$). Получены температурные зависимости электронной проводимости, термо-эдс и теплопроводности теллуридов меди нестехиометрического состава Cu_{2-x}Te ($0,04 \leq x \leq 0,5$) в интервале температур 300–750 К. Установлено, что отклонение от стехиометрии приводит к увеличению электронной проводимости и уменьшению электронной термо-эдс, причем все составы проявляют проводимость *p*-типа, а температурная зависимость теплопроводности становится менее выраженной. С использованием эволюционного алгоритма USPEX впервые проведены модельные компьютерные расчеты стабильных фаз теллуридов меди Cu_nTe_m ($n, m = 1 \div 10$). При температуре $T = 0$ К и давлении $p = 10^5$ Па определены модельные соединения Cu_5Te_4 ($\text{Cu}_{1,25}\text{Te}$), Cu_3Te_2 ($\text{Cu}_{1,50}\text{Te}$) и Cu_7Te_4 ($\text{Cu}_{1,75}\text{Te}$), индицирующиеся в триклинной и моноклинной сингониях. Проведены расчеты зонной структуры теллуридов меди нестехиометрического состава $\text{Cu}_{1,85}\text{Te}$, $\text{Cu}_{1,80}\text{Te}$, $\text{Cu}_{1,75}\text{Te}$ при комнатной температуре и модельных структур $\text{Cu}_{1,25}\text{Te}$, $\text{Cu}_{1,50}\text{Te}$, $\text{Cu}_{1,75}\text{Te}$ при температуре $T = 0$ К. Показано, что для зонной структуры теллуридов меди характерна высокая степень *pd*-гибридизации энергетических уровней катиона и аниона вблизи уровня Ферми. Согласно результатам расчета зонной структуры, теллуриды меди относятся к классу бесщелевых полупроводников. Методом неупругого рассеяния нейтронов получены обобщенные фононные спектры соединения Cu_2Te . Показано, что низкоэнергетические возбуждения, обнаруженные при значениях энергии 3–4 мэВ, соответствуют акустическим колебаниям и являются характерной особенностью суперионных проводников с разупорядоченной структурой.

Научная и практическая значимость работы заключается в том, что состояние системы Cu–Te характеризуется сложной фазовой диаграммой, состоящей из множества фазовых переходов в небольшом интервале температур и составов. Обнаружена зависимость термоэлектрических и теплофизических свойств теллуридов меди от нестехиометрии состава и температуры. Показаны закономерности изменения кристаллической структуры, электрофизических и термодинамических свойств

теллуридов меди при температурных фазовых превращениях. Обнаружено, что теллуриды меди $Cu_{2-x}Te$ ($0 \leq x \leq 0,75$) относятся к бесщелевым полупроводникам p -типа. Результаты исследований, полученные в данной работе, могут быть полезны при синтезе полупроводниковых материалов на основе теллуридов меди с необходимыми характеристиками, а также могут способствовать расширению области применения теллуридов меди нестехиометрического состава.

Содержание диссертационной работы соответствует специальности 1.3.8. – Физика конденсированного состояния, что подтверждается публикациями основных результатов в ведущих научных журналах, апробацией работы на соответствующих научных форумах, использованными методами исследования, научной новизной, теоретической и практической значимостью работы. Материалы исследования достаточно полно отражены в 17 работах, опубликованных автором по теме диссертации. Из них 11 в рецензируемых научных журналах из перечня ВАК РФ и 3 Web of Science и Scopus.

Диссертационная работа соответствует требованиям, установленным п. 14 Положения о присуждении учёных степеней. Текст диссертации представляет собой самостоятельную научно-квалификационную работу, не содержит заимствованного материала без ссылки на автора и (или) источник заимствования.

Диссертация «Фазовая диаграмма, кристаллохимические и электрофизические свойства теллуридов меди» Курбангулова Азата Рифкатовича рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. – Физика конденсированного состояния.

Заключение принято на заседании кафедры общей и теоретической физики. Присутствовало на заседании: 10 чел. Результаты голосования: «за» – 10 чел., «против» – 0 чел., «воздержались» – 0 чел., протокол № 4 от 29.11.2021 г.

Доктор физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния, профессор, зав. кафедрой общей и теоретической физики естественнонаучного факультета Стерлитамакского филиала ФГБОУ ВО «Башкирский государственный университет»

Биккулова Нурия Нагимьяновна