«ՀԱՍՏԱՏՈՒՄ ԵՄ»
ՀՀ ԳԱԱ Ռադիոֆիզիկայի և էլեկտրոնիկայի
ինստիտուտի տնօրեն
Տ.Վ. Զաքարյան
«02» հունիսի 2022թ.

ԱՌԱՋԱՏԱՐ ԿԱԶՄԱԿԵՐՊՈՒԹՅԱՆ ԿԱՐԾԻՔ

Արեգ Աշոտի Հունանյանի «Նոր երկչափ անագի օքսիդների հաշվարկային որոնումը և դրանց կիրառությունը կիսահաղորդչային գազային սենսորներում» թեմայով, Ա.04.10 - «Կիսահաղորդիչների ֆիզիկա» մասնագիտությամբ ֆիզիկամաթեմատիկական գիտությունների թեկնածուի գիտական աստիճանի հայցման ատենախոսության վերաբերյալ:

<u>Ատենախոսության թեմայի արդիականությունը:</u>

Վերջին տասնամյակների ընթացքում գազային սենսորները մեծ դեր են խաղացել տարբեր ոլորտներում, ինչպիսիք են սննդի անվտանգության ոլորտը, քիմիական արդյունաբերությունը, շրջակա միջավայրի մշտադիտարկումը, առողջապահությունը, գյուղատնտեսությունը և այլն: Գազային սենսորների պատրաստման համար ամենատարածված նյութերից են մետաղի օքսիդները: Մասնավորապես ջրածնի պերօքսիդի գրանցման համար ամենատարածված գազային սենսորներում, որպես զգայուն նյութ սովորաբար օգտագործվում է անագի երկօքսիդը: Փորձնական արդյունքները ցույց են տալիս, որ ջրածնի պերօքսիդի գրանցման համար

չլեգիրացված անագի եկօքսիդով պատրաստված գազային սենսորները ունեն համեմատաբար վատ զգայունություն և ընտրողունակություն: Այդ պարամետրերի բարելավման տարբերակներից մեկը մետաղական ատոմներով լեգիրացումն է: Մասնավորապես՝ հայտնի է, որ կոբալտով լեգիրացման դեպքում բարելավվում են, թե զգայունությունը և թե ընտրողունակությունը, սակայն կոբալտով լեգիրացված անագի երկօքսիդի կառուցվածքը և ջրածնի պերոքսիդի ադսորբցիայի մեխանիզմները չլեգիրացած և կոբալտով լեգիրացված անագի երկօքսիդի վրա դեռևս լավ ուսումնասիրված չեն: Ատենախոսության մեջ փորձ է արվել նշված խնդիրները տեսականորեն ուսումնասիրվել խտության ֆունկցիոնալի մեթոդի օգնությամբ:

Ստացված արդյունքները բացահայտում են ադսորբցիայի մեխանիզմների հիմնական առանձնահատկությունները և կիրառելի են գազային սենսորների պարամետրերի հաշվարկներում:

Ադսորբցիոն սենսորների պարամետրերի հեռանկարային տարբերակներից է նաև զգայուն շերտի չափայնության փոքրացումը մինչև 2D: Այդպիսի նյութերից, օրինակ՝ երկչափ անագի օքսիդները, ի տարբերություն ծավալային անագի օքսիդ-ների, դեռ բավականաչափ ուսումնասիրված չեն և հնարավոր է որոշ կայուն բյուրեղական կառուցվածքներ դեռ հայտնաբերված չեն: Բացի այդ, ուսումնասիրված չեն երկչափ անագի օքսիդների մակերևույթներին տարբեր գազերի մոլեկուլների ադսորբցիայի մեխանիզմները և պարամետրերը: Նշված խնդիրները լուծելու համար՝ աշխատանքում USPEX էվոլյուցիոն ալգորիթմի միջոցով իրականացվել է երկչափ անագի օքսիդների համակարգում նոր կառուցվածքների հաշվարկային որոնում, որից հետո գնահատվել է ստացված նյութերի կայունությունը: Հաշվարկվել են նաև այդպիսի նյութերի օպտիկական և էլեկտրոնային հատկությունները: Կայուն անագի օքսիդների համար ուսումնասիրվել են ադսորբցիաները ջրածնի պերօքսիդի և այլ նախապես ընտրված գազերի նկատմամբ: Հաշվարկներից ստացված արդյունքները կարող են հիմք ծառայել գազերի դետեկտման համար նոր նյութեր սինթեզելու համար:

Վերը նշվածը հաստատում է ատենախոսության արդիականությունը և կարևորությունը գործնական կիրառությունների տեսանկյունից:

Ատենախոսության բովանդակությունը, արդյունքների և եզրակացությունների հավաստիությունը:

Ատենախոսությունը բաղկացած է ներածությունից, 4 գլուխներից և գրականության ցանկից, որն իր մեջ ներառում է 129 հղում: Աշխատանքում առկա են 50 նկար, 15 աղյուսակ: Աշխատանքի ընդհանուր ծավալը 103 էջ է:

Ներածությունում ներկայացված են թեմայի արդիականությունը, աշխատանքի նպատակը և լուծվող խնդիրները: Ներկայացված է արդյունքների գիտական նորույթը և գործնական արժեքը: Պաշտպանության ներկայացվող հիմնական դրույթները հինգն են, որոնք ճիշտ են ձևակերպված:

Առաջին գլխում ներկայացվել է կիսահաղորդչային գազային սենսորների աշխատանքի սկզբունքը և հիմնական պարամետրերը: Ներկայացվել է ծավալային և երկչափ անագի օքսիդների հայտնի կառուցվածքները: Տրվել է ատենախոսության խնդրի դրվածքը: Համառոտ ներկայացված են դրված խնդիրների լուծման համար հաշվարկներում օգտագործված հիմնական տեսական մեթոդները և ծրագրային գործիքները: Այս գլուխը հիմնականում ակնարկային է:

Երկրորդ գլխում խտության ֆունկցիոնալի տեսությամբ ուսումնասիրվել են կոբալտով լեգիրացված անագի երկօքսիդի կառուցվածքը, և ջրածնի պերօքսիդի փոխազդեցությունը մաքուր և կոբալտով լեգիրացված անագի երկօքսիդի մակերևույթների հետ: Հաշվարկները իրականացվել են Quantum Espresso ծրագրային փաթեթով: Կոբալտով լեգիրացված անագի երկօքսիդի կառուցվածքը ուսումնասիրելու համար հաշվարկվել են արատների ձևավորման էներգիաները տարբեր կետային արատների դեպքում: Ցույց է տրվել, որ ամենացածր ձևավորման էներգիան ունի այն կառուցվածքը, որտեղ կոբալտը անագի հանգույցի դիրքում է /տեղակայման խառնուրդ/:

Ջրածնի պերօքսիդի ադսորբցիան ուսումնասիրելու համար տարբեր նախնական կառուցվածքների համար կատարվել են կառուցվածքային ռելաքսացիայի հաշվարկներ, ինչից հետո հաշվարկվել են ադսորբցիայի էներգիաները: Արդյունքում ցույց է տրվել, որ մաքուր անագի երկօքսիդի վրա ադսորբցիան էներգիապես ամենաշահավետն այն դեպքում է, երբ պերօքսիդի մոլեկուլը տարրալուծվում է OH մոլեկուլի և H, O ատոմների, որոնք ադսորբվում են մակերևույթի վրա: Կոբալտով լեգիրացված անագի երկօքսիդի մակերևույթի վրա պերօքսիդի ադսորբցիան էներգիապես առավել շահավետ է ստացվել, քան ադսորբցիան մաքուր անագի երկօքսիդի մակերևույթի վրա, իսկ ամենացածր էներգիառվ կառուցվածքում մոլեկուլը տարրալուծվում է O_2-ի և 2H ատոմների:

<u>Երրորդ գլխում</u> էվոլյուցիոն ալգորիթմի միջոցով իրականացվել է նոր երկչափ անագի երկօքսիդների հաշվարկային որոնումը: Հաշվարկների արդյունքում հաստատվել է երկու նոր կառուցվածքի Sn_2O_3-ը և Sn_3O_5-ի գոյության հնարավորությունը: Ստացված նյութերի կայունությունը ուսումնասիրվել է ֆոնոնային դիսպերսիայի և մոլեկուլային դինամիկայի հաշվարկների միջոցով: Արդյունքում ստացվել է որ Sn_2O_3 միացությունը կայուն է, իսկ Sn_3O_5-ը մետակայուն:

Երկչափ անագի օքսիդների համար ուսումնասիրվել են զոտիական կառուցվածքները և օպտիկական հատկությունները: Նոր հայտաբերված Sn_2O_3-ի աճեցման նպատակով ուսումնասիրվել են թեկնածու տակդիրների հետ փոխազդեցությունները: Հաշվարկների արդյունքում ցույց է տրվել, որ Sn_2O_3-ը 3.92 էՎ արգելված զոտու լայնությամբ, ոչ ուղիղ զոտիական կառուցվածքով կիսահաղորդիչ է, որի վերին և ստորին շերտերի անագի ատոմները ունեն մեկ չլրացված կապ: Օպտիկական հատկությունների համար հաշվարկվել են էքստինկցիայի գործակիցի սպեկտրները, որտեղից երևում է, որ բոլոր նյութերի համար մաքսիմումները ընկած են սպեկտրի ուլտրամանուշակագույն տիրույթում:

<u>Չորրորդ գլխում</u> ուսումնասիրվել են CO, CO_2, NO, NO_2, O_2, H_2O և H_2O_2 մոլեկուլների ադսորբցիաները երկչափ SnO-ի, SnO_2-ի և Sn_2O_3-ի վրա: Հաշվարկների համար

օգտագործվել է VASP ծրագրային փաթեթը: Ադսորբցիաները ուսումնասիրելու համար ընտրվել են երեք տեսակի ադսորբցիայի կենտրոններ՝ վերին շերտի ատոմներ, կամրջային ատոմներ և խոռոչային կետեր: Հաշվարկների արդյունքում ցույց է տրվել, որ բոլոր մոլեկուլների ադսորբցիաները երկչափ SnO-ի և SnO_2-ի վրա ֆիզիկական են: Sn_2O_3-ի դեպքում ադսորբցիաները ֆիզիկական են CO, CO_2, NO, NO_2, O_2 և H_2O մոլեկուլների համար, իսկ H_2O_2-ի դեպքում էներգիապես ամենաշահավետ կառուցվածքում մոլեկուլը տարրալուծվում է երկու OH մոլեկուլների, որոնք ըստ էլեկտրոնների տեղայնացման ֆունցիայի կովալենտ կապով կապված են Sn_2O_3-ի անագի ատոմների հետ: Ադսորբցիան այս դեպքում ավելի շահավետ է, քան մոլեկուլի ադսորբցիան ծավալային անագի երկօքսիդի վրա:

<u>Եզրակացությունում</u> ամփոփված են աշխատանքում ստացված արդյունքների գլխավոր եզրահանգումները:

<u>Աշխատանքի համապատասխանությունը ՀՀ ԲՈԿ-ի պահանջներին:</u>

Ատենախոսությունն իր արդիականությամբ, նորությամբ, ծավալով, հիմնավորմամբ, ձևակերպմամբ և հիմնական արդյունքների կարևորությամբ համապատասխանում է ՀՀ ԲՈԿ-ի կողմից թեկնածուական ատենախոսություններին ներկայացվող պահանջներին: Ատենախոսության հիմնական դրույթները հրապարակվել են հեղինակի 4 գիտական աշխատանքներում: Սեղմագիրը լիովին համապատասխանում է ատենախոսությանը և արտացոլում է դրա հիմնական դրույթները:

Ստացված կարևոր արդյունքներով հանդերձ ատենախոսությունը զերծ չէ թերություններց, որոնցից կնշենք հետևյալը:

1. 2D Sn_2O_3 բյուրեղական ցանցի ջերմային տատանումների մոդելավորման ժամանակ բերված են անագի և թթվածնի մեջ եղած կապի երկարության փոփոխությունը ժամանակի ընթացքում պիկովարկյանին ժամանակային սանդղակով, որտեղից երևում է, որ ի հակառակ սպասումների, տատա-

նումները պարբերական չեն, ինչը ֆիզիկական բացատրության կարիք ունի:

2. Ելնելով միայն կապի էներգիայի հաշվարկներից որպես տակդիր Sn_2O_3 նոր նյութի համար առաջարկվում է օգտագործել բորի նիտրիդը: Սակայն այս տակդիրի դեպքում խնդրահարույց կարող է լինել տակդիրի ջերմային ընդարձակումը, քանի որ այն ունի մոտ $2,8.10^{-6}$ K^{-1} ջերմային ընդարձակման գործակից, ինչը զգալիորեն տարբերվեում է Sn_2O_3 ջերմային ընդարձակման գործակցից, որը ըստ ատենախոսության հավասար պետք է լինի $1.67.10^{-5}$ K^{-1} :
3. Ցանկալի կլիներ, որպեսզի աշխատանքի արդյունքները ներկայացված լինեին գիտական հանրությանը սեմինարների և գիտաժողովների ժամանակ:

Չնայած նշված թերություններին, Ա.Ա. Հունանյանի ատենախոսությունը արդիական է, ավարտուն և ունի գիտական ու գործնական կարևոր նշանակություն:

<u>Եզրակացություն</u>

Ա.Ա. Հունանյանի «Նոր երկչափ անագի օքսիդների հաշվարկային որոնումը և դրանց կիրառությունը կիսահաղորդչային գազային սենսորներում» թեմայով թեկնածուական ատենախոսությունն ավարտուն աշխատանք է, կատարված է բարձր գիտական և հաշվողական մակարդակով և ունի կարևոր կիրառական արժեք:

Ներկայացված ատենախոսական աշխատանքը իր ծավալով ու գիտական մակարդակով լիովին համապատասխանում է ՀՀ ԲՈԿ–ի կողմից թեկնածուական ատենախոսությունների պահանջներին և բովանդակությամբ համապատասխանում է Ա.04.10 - «Կիսահաղորդիչների ֆիզիկա» մասնագիտությանը, իսկ հեղինակը արժանի է ֆիզիկամաթեմատիկական գիտությունների թեկնածուի գիտական աստիճանի շնորհմանը:

Ատենախոսությունը զեկուցվել, մանրամասն քննարկվել և հավանության է արժանացել «ՀՀ ԳԱԱ Ռադիոֆիզիկայի և էլեկտրոնիկայի ինստիտուտ» ՊՈԱԿ 2022թ. հունիսի 2-ին կայացած գիտական սեմինարում: Ներկա էին ֆիզմաթ. գիտ. դոկտոր, պրոֆ. Ս. Պետրոսյանը, ֆիզմաթ. գիտ. թեկնածուներ Ա. Մուսայելյանը, Ս. Ներսեսյանը, Ա. Եսայանը, ՌՖԷԻ-ի և ԵՊՀ-ի այլ գիտաշխատողներ:

Կարծիքը ձևավորեց և ամփոփեց՝

ՌՖԷԻ-ի «Կիսահաղորդչային նանոէլեկտրոնիկայի»

լաբորատորիայի վարիչ, ՀՀ ԳԱԱ թղթ.անդամ, ֆ.մ.գ.դ., պրոֆ. Ս. Պետրոսյան

Ս. Պետրոսյանի ստորագրությունը հաստատում եմ՝

ՀՀ ԳԱԱ ՌՖԷԻ-ի փոխ. տնօրեն Է. Ասմարյան