ՊԱՇՏՈՆԱԿԱՆ ԸՆԴԴԻՄԱԽՈՍԻ

ԿԱՐԾԻՔ

Արեգ 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:

Նյութերի ֆիզիկայի կենտրոնական նպատակը դրանց հատկությունների որոշումն է՝ օգտագործելով միայն բաղադրիչ մասնիկների մասին տեղեկությունները: Այս նպատակի իրականացումը հնարավորություն է տալիս կանխատեսել դեռեւս անհայտ, նոր պինդ մարմինների կամ հեղուկների գոյությունն ու հատկությունները: Համակարգչային հաշվողական մեթոդների մշակմամբ բացահայտվում են ցանկալի հատկություններով տարբեր նյութերի ստացման հնարավորություններ: Դա վերաբերում է, մասնավորապես բարձր ջերմակայունությամբ համաձուլվածքներին, գերհաղորդիչներին, գերկարծր նյութերին, ցածր դիէլեկտրական թափանցելիությամբ պինդ մարմիններին եւ այլն: Քանի որ Շրյոդինգերի հավասարումը հազվադեպ է անալիտիկորեն լուծելի, էլեկտրոնային կառուցվածքի մոտավոր լուծումներ ստանալու թվային մոտեցումներն անգնահատելի են դարձել քիմիայի և նյութագիտության համար: Այս հաշվողական ջանքերը կրիտիկական խթան ստացան, երբ Հոհենբերգը և Կոնը և այնուհետեւ Կոնն ու Շամը [3] վերաձեւակերպեցին Շրյոդինգերի հավասարումը, որը ներառում է N փոխազդող էլեկտրոնների բոլոր 3N տարածական կոորդինատները՝ վերածելով այն խտության ֆունկցիոնալի տեսության: Այդ տեսությունը, որը հիմնված է էլեկտրոնային խտության վրա՝ ընդամենը երեք տարածական կոորդինատների ֆունկցիա է: Կոնի եւ

Շամի հավասարումները բազմամասնիկային համակարգում հնարավոր փոխազդեցությունների հաշվառմամբ անլուծելի խնդիրը փոխանակային կոռելացիայի ֆունկցիոնալի միջոցով վերածում են արդյունավետ պոտենցիալով մեկ մասնիկի հաշվարկային կառավարելի խնդրի: Թեև այդ, այսպես կոչված «աստվածային ֆունկցիոնալը», որը ճշգրիտ կդարձներ այս վերաձեւակերպումը, չի գտնվել, և հավանաբար երբեք չի գտնվի, մոտավոր ֆունկցիոնալները մեծ հաջողություն են գրանցել նյութերի բազմաթիվ հատկությունների նկարագրման խնդիրներում: Հետևաբար, խտության ֆունկցիոնալի տեսության մեթոդները դարձել են նյութագիտության հիմնական գործիքը, և խտության ֆունկցիոնալի տեսության հաշվարկները շատ նյութերի հետազոտական ջանքերի ընդհանուր, կարևոր բաղադրիչ են:

Երկչափ նյութերն օժտված են առավել նշանակալի հատկություններով, և այդ հատկությունները օգտագործվում են ամենատարբեր կիրառություններում: Այս նյութերի կիրառումը տարբեր նպատակների համար կախված է դրանց կառուցվածքային, էլեկտրոնային, մեխանիկական, ջերմային, ֆիզիկական, քիմիական և մագնիսական հատկություններից: Ներկայումս սինթեզվել և տեսականորեն կանխատեսվել են շատ երկչափ նյութեր: Դրանց ֆիզիկական և քիմիական յուրահատկությունները դրանց դարձնում են հետաքրքրական այնպիսի կիրառություններում, ինչպիսիք են օպտո- և նանոէլեկտրոնային սարքերը, էներգիայի պահեստավորումը, օդատիեզերական արտադրությունը, գազային և կենսազգայուն տեխնոլոգիաները եւ այլն:

Արեգ Հունանյանի ատենախոսությունում կենտրոնական տեղ է հատկացված երկչափ անագի օքսիդների համակարգում (կոբալտով լեգիրված եւ առանց դրա) կառուցվածքների հաշվարկային որոնմանը եւ տարբեր ջերմաստիճաններում ստացված նյութերի կայունության պարզաբանմանը: Այս տեսանկյունից դիտարկվում է գազային սենսորներում երկչափ անագի օքսիդների հնարավոր կիրառությունները:

Ատենախոսությունը շարադրված է 103 էջում, ներկայացվելով համառոտ ներածությամբ, չորս գլուխներով, եզրակացությամբ եւ 129 անուն օգտագործված գրականության ցանկով: Առկա են 50 նկար եւ 15 աղյուսակ: Ատենախոսության հիմնական արդյունքները ներկայացված են չորս գիտական հոդվածներով:

Ատենախոսության ներածության մեջ ներկայացված են թեմայի արդիականությունը, աշխատանքի նպատակը, գիտական նորույթը, կիրառական նշանակությունը, գիտական դրույթները, ատենախոսության համառոտ բովանդակությունը:

Ատենախոսության առաջին գլուխը նվիրված է թեմային առնչվող գիտական գրականության ընդարձակ վերլուծությանը: Այստեղ ներկայացված են գազային սենսորների գործառույթի ընդհանուր սկզբունքները: Նկարագրված են ծավալային եւ երկչափ անագի օքսիդի կառուցվածքները եւ հարմար տակդիրի ընտրության համար անհրաժեշտ պայմանները: Մանրամասն նկարագրված է խտության ֆունկցիոնալի տեսության կիրառման ընթացքը: Ներկայացվել են նաեւ Հարթրի-Ֆոկի մոտավորությունը, Կոն-Շամի թեորեմները, փոխանակային փոխազդեցության ֆունկցիոնալը, ինչպես նաեւ առաջնային սկզբունքի մեթոդով հաշվարկային գործիքները, գազային սենսորների բնութագրական պարամետրերը եւ նոր կառուցվածքների որոնման հաշվարկային մեթոդը: Առաջնային սկզբունքի մեթոդով նկարագրված է ֆոնոնային սպեկտրի եւ մոլեկուլային դինամիկայի հաշվարկը: Գլխի վերջում ներկայացված է ատենախոսության խնդրի դրվածքը:

Ատենախոսության երկրորդ գլուխում խտության ֆունկցիոնալի մեթոդով ուսումնասիրվել է կոբալտով լեգիրված անագի օքսիդի կառուցվածքը (§2.2): Այնուհետեւ առաջնային սկզբունքի մեթոդով հաշվարկվել ջրածնի պերօքսիդի փոխազդեցությունը անագի երկօքսիդի (110) մակերեւույթի հետ (§2.3): §2.4-ում ներկայացվել է պերօքսիդի փոխազդեցությունը կոբալտով լեգիրված անագի երկօքսիդի (110) մակերեւույթի հետ: Հաշվարկվել են ադսորբման էներգիաները, էլեկտրոնների տեղայնացման ֆունկցիաները եւ լիցքի տեղաշարժը: Ցույց է տրվել, որ

կոբալտով լեգիրված անագի երկօքսիդում կոբալտը տեղակալում է անագի հանգույցը: Պարզվել է, որ մաքուր եւ կոբալտով լեգիրված նմուշներում ադսորբման վերջնարդյունքները տարբերվում են: Ցույց է տրվել, որ ադսորբման արդյունավետությունը մեծ է կոբալտով լեգիրման դեպքում:

Ատենախոսության երրորդ գլուխը նվիրված է նոր երկչափ անագի օքսիդների հաշվարկային որոնմանը, դրանց կայունության վերլուծությանը եւ հատկությունների ուսումնասիրմանը: §3.1-ում ներկայացված է համապատասխան տեսական մեթոդները: §3.2-ը նվիրված է USPEX ալգորիթմի միջոցով երկչափ անագի օքսիդի տարատեսակների կառուցվածքային որոնումներին: Հայտնի կառուցվածքներից բացի պարզվել են նոր Sn_2O_3, Sn_3O_5 Sn_3O_4 կայունության հարցերը: Երկչափ անագի օքսիդի տարատեսակների դինամիկական կայունության պարզաբանման նպատակով §3.3-ում հաշվարկվել են դրանց ֆոնոնային սպեկտրները, եւ ցույց է տրվել, որ Sn_3O_4 եւ t-SnO կառուցվածքներն անկայուն են: Քվազիներդաշնակ մոտավորությամբ հաշվարկելով ֆոնոնային ներդրումը Հելմհոլցի ազատ էներգիայում, ուսումնասիրվել է ծավալային ընդարձակման գործակցի ջերմաստիճանային կախումը: Առաջնային սկզբունքով մոլեկուլային դինամիկայի հաշվարկներն օգտագործվել են տարբեր ջերմաստիճաններում նյութերի կայունությունն ուսումնասիրելու համար (§3.4): §3.5-ը նվիրված է դիտարկված կառուցվածքների էներգիական գոտու եւ էլեկտրոնային վիճակների խտության ուսումնասիրմանը: Լիցքի տեղաշարժը դիտարկվել է §3.6-ում: Դիէլեկտրական թենզորի իրական եւ կեղծ մասերի հաշվարկմամբ ներկայացվել են լույսի կլանման եւ բեկման ցուցիչները (§3.7): §3.8-ում կայունության տեսանկյունից դիտարկվել է երկչափ անագի օքսիդի տարատեսակների համար հարմար տակդիրների հաշվարկման խնդիրը: §3.9-ում շարադրված են այս գլխում արված հաշվարկների հիմնական եզրակացությունները:

Ատենախոսության չորրորդ գլուխը նվիրված է երկչափ SnO, SnO_2 եւ Sn_2O_3 կառուցվածքների վրա CO, CO_2, NO, NO_2, O_2, H_2O եւ H_2O_2 մոլեկուլների ադսորբման

ուսումնասիրմանը: Հաշվարկման մեթոդները եւ մուտքային պարամետրերը ներկայացված են **§4.1**-ում: Հաշվակներն արվել են VASP ծրագրային փաթեթով: Որպես ադսորբման կենտրոններ ընտրվել են վերին շերտի, կամրջային եւ խոռոչային ատոմներ (**§4.2**): Այնուհետեւ **§4.3**-ում մանրամասնորեն դիտարկվել է տարբեր մոլեկուլների ադսորբումը SnO եւ SnO_2 կառուցվածքներում: Ուսումնասիրվել են էլեկտրոնային տեղայնացման ֆունկցիաները: **4.4** ում ներկայացվել է տարբեր մոլեկուլների ադսորբումը Sn_2O_3 կառուցվածքում: Ներկայացվել է էլեկտրոնային տեղայնացման ֆունկցիաները: **§4.5**-ում շարադրված են այս գլխում արված հաշվարկների հիմնական եզրակացությունները:

Ատենախոսության շրջանակներում կատարված ուսումնասիրությունները նշանավորվել են կիսահաղորդչային նոր նյութերի ստացման եւ գազային սենսորային սարքերի մշակման վերաբերյալ այնպիսի արդյունքների ստացմամբ, որոնք ժամանակակից կիսահաղորդչային տեխնոլոգիաների շնորհիվ կարող են կարեւորվել ժամանակակից սենսորային սարքերի բնութագրերի բարելավման առումով: Այդպիսի արդյունքների թվում կուզենայի նշել հետեւյալները՝

1. Ցույց է տրվել, որ անագի երկօքսիդը կոբալտով լեգիրելիս, վերջինս զբաղեցնում է անագի հանգույցը՝ չառաջացնելով թթվածնային թափուրքներ:
2. Կոբալտով լեգիրված SnO_2-ի (110) մակերեւույթին ջրածնի պերօքսիդի ադսորբման վերաբերյալ հաշվարկներով ցույց է տրվել, որ այն էներգիայի առումով նախընտրելի է, մաքուր SnO_2-ի նույն մակերեւույթին ադսորբման համեմատ:
3. USPEX ալգորիթմի միջոցով նոր երկչափ անագի օքսիդի տարատեսակների որոնման արդյունքում հայտնաբերվել է կայուն Sn_2O_3 եւ մետակայուն Sn_3O_5 կառուցվածքներ:

Ամփոփելով ատենախոսության գիտական ձեռքբերումները, կարող եմ պնդել, որ Ա. Հունանյանը համապարփակ եւ միաժամանակ մանրակրկիտ տեսական

ուսումնասիրության արդյունքում կարողացել է բացահայտել երկչափ անագի օքսիդի տարատեսակների կայունության խնդիրը եւ այդ նյութերը որոշ գազերի համար որպես սենսորային հենք օգտագործելու կարեւորությունը:

Մեր կարծիքով ատենախոսությունը զերծ չէ նաեւ թերություններից:

1. Ծավալային ընդարձակման գործակիցը հաշվարկվել է քվազիներդաշնակ մոտավորությամբ: Այդ մոտավորության համաձայն, ֆոնոնային համակարգի ներդաշնակ մոտավորությամբ ֆոնոնային դիսպերսիան համարվում է ծավալից կախված: Ինչու՞ է այսպիսի մոտեցումը նախընտրվում աններդաշնակ մոտավորության ուղղակի հաշվառման համեմատ: Այս դեպքում պետք է արվեր այս մոտավորությունների համեմատական վերլուծություն:
2. Ցանկալի է, որ ներկայացված լինեին ծավալից ֆոնոնային սպեկտրի կախման կորերը, որոնք որոշիչ դեր ունեն ծավալային ընդարձակման գործակցի զրո չլինելու խնդրում:
3. Հաշվի առնելով, որ մեծապես կարեւորվում են սենյակային ջերմաստիճաններում գործող սենսորային սարքերը, ցանկալի է, որ նոր երկչափ անագի օքսիդնեռի ադսորբցիայի հաշվարկները իրականացվեին այդպիսի ջերմաստիճաններում:
4. Էլեկտրոնային լիցքի բաշխման չափը ցուցադրող սանդղակը որոշ նկարներում բացակայում է:
5. Առկա են որոշ վրիպակներ ((14) եւ (20) բանաձեւերում բացակայում է «մինուս» նշանը, (16) բանաձեւում r փոփոխականը, (28) բանաձեւում β փոխարեն գրված է b եւ այլն):
6. Սեղմագրում առկա են գիտական եզրերի ոչ հայերեն գործածումներ:

Այնուամենայնիվ, նշված թերությունները, ամենեւին չեն նսեմացնում կատարված գիտական ծավալուն աշխատանքի բարձր արժեքը: Ատենախոսությունը արդիական է եւ աչքի է ընկնում դիտարկված խնդիրների խորքային հետազոտմամբ:

Ստացված արդյունքները հավաստի են:

Ատենախոսությունը աչքի է ընկնում նաեւ առնչվող գիտական գրականության ամբողջական վերլուծությամբ:

Սեղմագիրը ճիշտ է արտացոլում ատենախոսության բովանդակությունը:

Ամփոփելով վերը շարադրվածը, կարող ենք համոզվածությամբ պնդել, որ Արեգ Հունանյանի ատենախոսությունը ավարտուն գիտահետազոտական աշխատանք է եւ զգալի ներդրում՝ նոր նյութերով գազային սենսորների ստեղծման բնագավառում: Կարծում ենք, որ այն բավարարում է ֆիզիկամաթեմատիկական գիտությունների թեկնածուի աստիճան հայցելու համար ատենախոսություններին ներկայացվող բոլոր պահանջներին, եւ հեղինակը՝ Արեգ Հունանյանն անկասկած արժանի է Ա.04.10-«Կիսահաղորդիչների ֆիզիկա» մասնագիտությամբ ֆիզիկամաթեմատիկական գիտությունների թեկնածուի գիտական աստիճանի շնորհմանը:

Ֆիզ.մաթ. գիտ. դոկտոր, պրոֆեսոր՝ Ա. Վարդանյան

2022թ. հունիսի 8

ԵՊՀ պինդ մարմնի ֆիզիկայի ամբիոնի վարիչ, պրոֆեսոր Արշակ Վարդանյանի ստորագրությունը հաստատում եմ:

ԵՊՀ գիտական քարտուղար՝ Մ. Հովհաննիսյան