



«ՀԱՍՏԱՏՈՒՄ ԵՄ»

Հայաստանի ազգային պոլիտեխնիկական
ուսումնական գիտության և գիտատեխնիկական
համագործակցության գծով պրոռեկտոր՝

տ.գ.դ., պրոֆեսոր Ա. Խ. Գրիգորյան

«27» հունիսի 2022 թ.

Ա. Գրիգորյան

ԱՌԱՋԱՏԱՐ ԿԱԶՄԱԿԵՐՊՈՒԹՅԱՆ ԿԱՐԾԻՔ

*Միշտ Արթուրի Աղամալյանի «Նոր երկչափ անցումային մետաղի քալոգենիդների
հաշվարկային որոնումը և դրանց հատկությունների ուսումնասիրումը
կիսահաղորդչային սարքերում կիրառության համար» թեմայով, Ա.04.10
«Կիսահաղորդիչների ֆիզիկա» մասնագիտությամբ ֆիզիկամաթեմատիկական
գիտությունների թեկնածուի գիտական աստիճանի հայցման արեւնախուսության
վերաբերյալ*

Ատենախոսության թեմայի արդիականությունը:

Ներկայացված աշխատանքում ուսումնասիրվել են ժամանակակից գիտության և տեխնոլոգիայի համար կարևոր նշանակություն ունեցող երկչափ անցումային մետաղի քալոգենիդները (ԱՄՔ), դրանց տարբեր բյուրեղական կառուցվածքները և հատկությունները: Հայտնի են գերազանց հատկություններով օժտված մետաղի քալոգենիդներ բարձրակարգ էլեկտրոնիկայի, սպինտրոնիկայի, օպտոէլեկտրոնիկայի, էներգիայի հավաքման, ճկուն էլեկտրոնիկայի, ԴՆԹ-ի սեկվանավորման և անհատականացված բժշկության մեջ կիրառությունների համար: Այս դասի նյութերի քիմիական բազմազանությունը, դրանց տարբեր կառուցվածքներով հանդես գալու հատկությունը և արդեն հայտնի կառուցվածքների ուշագրավ հատկությունները հետաքրքրական են դարձնում դրանց բոլոր կայուն կառուցվածքների բացահայտումը և ուսումնասիրումը:

Աշխատանքի արդյունքում, ուսումնասիրելով Mo-S, W-S, W-Se, W-Te և V-S քիմիական համակարգերը, գտնվել են նոր երկչափ կայուն նյութեր: Ուսումնասիրվել են նոր գտնված, ինչպես նաև՝ գրականության մեջ արդեն հայտնի երկչափ ԱՄՔ-ների

էլեկտրական և օպտիկական հատկությունները և փոխազդեցությունը մի շարք գազի մոլեկուլների ու ազոտական հիմքերի հետ:

Ցածր չափային կիսահաղորդչային համակարգերի էլեկտրաֆիզիկական բնութագրերի ուսումնասիրությունը և ստացված արդյունքները ունեն կարևոր տեսական և կիրառական նշանակություն:

Ատենախոսության բովանդակությունը, արդյունքների և եզրակացությունների հավաստիությունը:

Ատենախոսությունը բաղկացած է ներածությունից, 5 գլխից, 310 հղում պարունակող գրականության ցանկից և 2 հավելվածից: Աշխատանքի ընդհանուր ծավալը առանց հավելվածների կազմում է 140 էջ և ներառում է 33 նկար ու 3 աղյուսակ:

Ներածության մեջ համառոտ ներկայացված են թեմայի արդիականությունը, աշխատանքի հիմնական նպատակը, ստացված արդյունքների գիտական նորույթը, կիրառական նշանակությունը և պաշտպանության ներկայացվող հիմնական գիտական դրույթները:

Առաջին գլխում ներկայացված է աշխատանքի թեմայի և օգտագործված հաշվողական մեթոդների շուրջ գիտական գրականության համառոտ ակնարկ: Ներկայացված են անցումային մետաղի քալկոգենիդների երկչափ կառուցվածքները, դրանց հատկություններն ու կիրառական նշանակությունը: Ներկայացված են նաև վերջերս տեսականորեն առաջարկված, ինչպես նաև փորձով ստացված նոր անցումային մետաղի երկչափ քալկոգենիդները և արդիական խնդիրները: Գլխում համառոտ ներկայացված են նաև խտության ֆունկցիոնալի տեսությունը, բյուրեղական կառուցվածքների որոնման USPEX էվոլյուցիոն ալգորիթմը և հարակից հաշվարկային մեթոդները: Հիմնավորված են օգտագործված մեթոդների հուսալիությունը և կիրառելիությունը:

Երկրորդ գլխում ներկայացված են M_4X_4 և M_5X_2 ($M = Mo, W, X = S, Se$) ստեխիոմետրիայով նյութերի ֆոնոնային սպեկտրը, $Mo-S$, $W-S$, $W-Se$, $W-Te$ և $V-S$ քիմիական համակարգերում նոր կայուն երկչափ նյութերի որոնման արդյունքները: Mo_5S_4 -ը և Mo_3S_4 -ը ներկայացված են, որպես նոր երկչափ նյութեր $Mo-S$ քիմիական

համակարգում, W_3S_5 -ը և W_5Te_2 -ը՝ որպես կայուն երկչափ նյութեր W-S, W-Se և W-Te քիմիական համակարգերից, իսկ V_3S_4 -ը՝ V-S քիմիական համակարգում:

Երրորդ գլխում հեղինակը ներկայացնում է M_2X_3 , M_4X_4 , և M_5X_2 ($M=Mo, W, X=S, Se$), ինչպես նաև՝ նոր Mo_5S_4 , Mo_3S_4 , W_3S_5 , W_5Te_2 և V_3S_4 ԱՄՔ-ների գոտիական կառուցվածքի, էլեկտրական հաղորդականության, ջերմաէլեկտրական և օպտիկական հատկությունների հաշվարկները և դրանց արդյունքները:

Ստացված գոտիական կառուցվածքներից երևում է, որ M_2X_3 կառուցվածքով նյութերը ցուցաբերում են կիսահաղորդչային հատկություններ, իսկ M_4X_4 , և M_5X_2 կառուցվածքներով՝ կիսամետաղական և մետաղական: Այս արդյունքները համընկնում են գրականությունից հայտնի տվյալների հետ: Ցույց է տրվել նաև, որ նոր նյութերից Mo_5S_4 -ը և Mo_3S_4 -ը մետաղներ են, իսկ W_3S_5 -ը, W_5Te_2 -ը և V_3S_4 -ը՝ կիսահաղորդիչներ:

Ներկայացված են նաև թերմոէլեկտրիկ հզորության և Ջեֆֆեկի գործակիցների արժեքները ուսումնասիրված նյութերի համար:

Երրորդ գլխում ներկայացված են նաև օպտիկական կլանման և անդրադարձման գործակիցների սպեկտրները՝ ուսումնասիրված երկչափ նյութերի համար:

Չորրորդ գլխում նկարագրված են $H-MX_2$, $T'-MX_2$, M_2X_3 , M_4X_4 , M_5X_2 ($M = Mo, W, X = S, Se$), W_5Te_2 , W_3S_5 , V_3S_4 նյութերի մակերևույթին CO , CO_2 , H_2 , H_2O , H_2O_2 , N_2 , NH_3 , NO , NO_2 , O_2 գազերի ադսորբցիայի հաշվարկները և դրանց արդյունքները: Գլխի սկզբում համառոտ ներկայացվում են կիսահաղորդչային գազային տվիչների կարևոր հատկությունները, առկա խնդիրները և գազերի ադսորբցիայի տեսական հետազոտման հիմնական մեթոդները: Ապա գլխի հաջորդ մասերում ներկայացված են հաշվարկների արդյունքները, դրանց վերլուծությունը և բերված են հիմնական եզրակացությունները:

Ցույց է տրված, որ գազերի հետ փոխազդեցության բնույթը հիմնականում Վան-դեր-Վաալսյան է: Mo_2S_3 -ը, Mo_2Se_3 -ը և $H-WS_2$ -ը առաջարկված են որպես ընտրողական զգայունությամբ օժտված նյութեր համապատասխանաբար՝ NO_2 -ի, O_2 -ի և NO -ի համար: V_3S_4 -ը ներկայացված է որպես զգայուն նյութ NO և NO_2 գազերի համար:

Հինգերորդ գլխում նկարագրված են ազոտական հիմքերի ադսորբցիայի հաշվարկները և դրանց արդյունքները: Ամփոփ ներկայացված են ազոտական հիմքերի տվիչների կարևորությունը, դրանց կարևոր պարամետրերը և նախկինում իրականացված աշխատանքները: Հաջորդիվ ներկայացված են ադենինի, ցիտոզինի, գուանինի, թիմինի և ուռացիլի ադսորբցիայի հաշվարկները $H-MX_2$, M_2X_3 ($M = Mo, W, X = S, Se$), W_5Te_2 , W_3S_5 և V_3S_4 ԱՄՔ-ների մակերևույթներին: Ապա կատարված է ստացված արդյունքների վերլուծություն և ամփոփված է հիմնական եզրակացություններով:

Եզրակացությունում ամփոփված են աշխատանքում ստացված հիմնական եզրահանգումները:

Ամփոփելով՝ կարող ենք ասել, որ Մ. Աղամալյանը համապարփակ և մանրամասն տեսական ուսումնասիրությունների միջոցով կարողացել է բացահայտել նոր երկչափ ԱՄՔ-ներ ու նկարագրել դրանց բազմաթիվ կարևոր հատկությունները, որոնք կարող են կարևոր լինել հետագա կիսահաղորդչային սարքերի նախագծման համար:

Աշխատանքում նկատված թերությունները:

Այնուամենայնիվ, մեր կարծիքով, ատենախոսությունը զերծ չէ նաև թերություններից, որոնցից կնշենք հետևյալները.

1. նոր կանխատեսված նյութերի համար դրանց ստացման եղանակները և պայմանները ներկայացված չեն.
2. թերմոէլեկտրիկ նյութերի համար կարևոր է նաև բյուրեղական ցանցի տատանումներով պայմանավորված ջերմահաղորդականությունը, որի հաշվարկը և արդյունքների վերլուծությունը աշխատանքում ներկայացված չեն.
3. գազային տվիչների աշխատանքի համար ջերմաստիճանը կարող է կարևոր դերակատարում ունենալ, սակայն աշխատանքում դիտարկված չեն ընթացող պրոցեսները տարբեր ջերմաստիճաններում.

4. սեղմագրում որոշ նկարներ դժվարընթեռնելի են ընտրված տառաչափի և գույների պատճառով:

Չնայած դրան՝ նշված թերություններն ամենևին չեն նսեմացնում կատարված ծավալուն գիտական աշխատանքի բարձր արժեքը:

Աշխատանքի համապատասխանությունը ՀՀ ԲՈԿ-ի պահանջներին:

Ատենախոսությունը արդիական է և աչքի է ընկում ընտրված խնդիրների խորքային հետազոտմամբ:

Հետազոտությունները կատարվել են առաջադիմական, գիտության մեջ լայնորեն կիրառություն ունեցող և ճշգրիտ արդի մեթոդներով, իսկ ստացված արդյունքների հավաստիությունը կասկած չի հարուցում:

Ատենախոսության հիմնական արդյունքները տպագրված են 5 գիտական աշխատանքներում, այնպիսի միջազգային գիտական ամսագրերում, ինչպիսիք են՝ «Applied Surface Science», «Nanomaterials», «JETP Letters», «Journal of Contemporary Physics (Armenian Academy of Sciences)»:

Սեղմագիրը լիովին համապատասխանում է ատենախոսությանը և արտացոլում է դրա հիմնական բովանդակությունը:

Եզրակացություն:

Ամփոփելով՝ կարող ենք ասել, որ Մ. Ա. Աղամալյանի «Նոր երկչափ անցումային մետաղի քալկոգենիդների հաշվարկային որոնումը և դրանց հատկությունների ուսումնասիրումը կիսահաղորդչային սարքերում կիրառության համար» թեմայով թեկնածուական ատենախոսությունն ավարտուն գիտական աշխատանք է, կատարված հավաստի գիտական մեթոդներով և ունի տեսական և կիրառական կարևոր նշանակություն: Այն համապատասխանում է Ա.04.10 «Կիսահաղորդիչների ֆիզիկա» մասնագիտությամբ թեկնածուական ատենախոսություններին ՀՀ ԲՈԿ-ի կողմից ներկայացվող պահանջներին, իսկ հեղինակը արժանի է ֆիզիկամաթեմատիկական գիտությունների թեկնածուի գիտական աստիճանի շնորհմանը:

Ատենախոսությունը քննարկվել և հավանության է արժանացել Հայաստանի ազգային պոլիտեխնիկական համալսարանի «Միկրոէլեկտրոնիկա և կենսաբժշկական սարքեր» ամբիոնի 2022 թ. հունիսի 23-ին կայացած № 15 ընդլայնված նիստում: Ներկա էին 17 անձ՝ Մ և ԿԲՍ ամբիոնի վարիչ՝ տ.գ.դ., պրոֆեսոր Օ.Հ. Պետրոսյանը, տ.գ.դ., պրոֆեսոր Գ.Շ. Շմավոնյանը, տ.գ.թ., դոցենտ Ա.Մ. Զադոյանը, ֆ.մ.գ.թ., դոցենտ Ժ.Գ. Դոխոյանը, տ.գ.թ., տ.գ.թ., դոցենտ Գ.Շ. Մելիքյանը, տ.գ.թ., տ.գ.թ., դոցենտ Հ.Ռ. Դաշտոյանը, տ.գ.թ., դոցենտ Ն.Բ. Ավդալյանը, տ.գ.թ., դոցենտ Ա.Ա. Վարդանյանը, տ.գ.թ., դոցենտ Օ.Ա. Զադոյանը, դասախոսներ Մ.Ա. Մուրադյանը, Լ.Գ. Ռուստամյանը, Ա.Գ. Ռուստամյանը, «Կապի համակարգեր» ամբիոնի վարիչ՝ տ.գ.դ., պրոֆեսոր Ս.Խ. Խուդավերդյանը, տ.գ.դ., պրոֆեսոր Մ.Յ. Այվազյանը, տ.գ.թ., տ.գ.դ., «Էլեկտրոնային չափիչ համակարգեր և չափագիտություն» պրոֆեսոր Ռ.Ռ. Վարդանյանը, ֆ.մ.գ.թ., դոցենտ Մ.Գ. Տրավաջյանը և ֆ.մ.գ.թ., դոցենտ Հ.Գ. Ասատրյանը:

ՀԱՊՀ-ի «Միկրոէլեկտրոնիկա
և կենսաբժշկական սարքեր»
ամբիոնի վարիչ՝
տ.գ.դ., պրոֆեսոր



Օ. Հ. Պետրոսյան

Օ. Հ. Պետրոսյանի ստորագրությունը հաստատում եմ,

ՀԱՊՀ գիտական քարտուղար՝
տ.գ.թ., դոցենտ



Ծ. Ս. Հովհաննիսյան