

## Պաշտոնական ընդդիմախոսի

### ԿԱՐԾԻՔ

*Միշտ Արթուրի Աղամայանի Ա.04.10 – «Կիսահաղորդիչների ֆիզիկա» մասնագիտությամբ ֆիզիկամաթեմատիկական գիտությունների թեկնածուի գիտական աստիճանի հայցման համար ներկայացված «Նոր երկչափ անցումային մետաղի քալկոգենիդների հաշվարկային որոնումը և դրանց հատկությունների ուսումնասիրումը կիսահաղորդչային սարքերում կիրառության համար» թեմայով ատենախոսության վերաբերյալ*

Վերջին տարիներին, սկսած թերևս 2005 թ., երբ փորձնականորեն առաջին անգամ հայտնաբերվեց գրաֆենը, երկչափ նյութերը սկսեցին գրավել շատ մեծ ուշադրություն ոչ միայն իրենց արտասովոր ֆիզիկական հատկությունների, այլև գիտության և տեխնիկայի տարբեր բնագավառներում դրանց հնարավոր կիրառությունների շնորհիվ: Սակայն գրաֆենի լայն կիրառության շրջանակները հետագայում դարձան բավականաչափ սահմանափակ, քանի որ այն չունի արգելված գոտի և օժտված է մետաղական հաղորդականությամբ: Այդ պատճառով էլ հետագայում սինթեզվեցին և ուսումնասիրվեցին ուրիշ երկչափ նյութեր, որոնցից առանձնապես առանձնանում են VI խմբի անցումային մետաղների, մոլիբդենի (Mo), վոլֆրամի (W) քալկոգենիդներ, ինչպիսիք են MoS<sub>2</sub>, MoSe<sub>2</sub>, WS<sub>2</sub>, WSe<sub>2</sub>: Այս և նմանատիպ այլ երկչափ բյուրեղները, որոնք բաղկացած են մոտ 7Å հաստությամբ մոլեկուլային մեկ մենաշերտից, որում նույն հարթության վրա գտնվող մետաղի ատոմները վերևից և ներքևից շրջափակված են քալկոգենեդի ատոմներով, ունեն կիսահաղորդիչներին բնորոշ գոտիական կառուցվածք և վերջավոր առգելված գոտու լայնություն, այսօր դարձել են տեսական և փորձարարական լայն հետազոտությունների առարկա, մեծ հետաքրքրություն են ներկայացնում ոչ միայն ֆունդամենտալ ֆիզիկայի, այլև նանո-, օպտո- էլեկտրոնիկայի, ճկուն էլեկտրոնիկայի, զանազան սենսորների և տվիչների համար: Վերը նշված երկչափ նյութերը հանդիսանում են լավ հայտնի սովորական, ծավալային, շերտավոր, կիսահաղորդչային քալկոգենիդների մասնավոր կառուցվածքներ և

ունեն նույն ստեխիոմետրիան: Ուստի և զարմանալի չէ, որ հաճախ այդպիսի երկչափ նյութերը ստացվում են ծավալային նյութից ատոմական շերտերի մեխանիկական առանձնացման եղանակով: Բացի այդ մեթոդից, նման նյութերի սինթեզի համար գոյություն ունեն նաև ֆիզիկական և քիմիական ուրիշ տեխնոլոգիաներ: Օրինակ, ՀՀ ԳԱԱ Ռադիոֆիզիկայի և էլեկտրոնիկայի ինստիտուտում օգտագործվում է լազերային-իմպուլսային նստեցման մեթոդը, ընդ որում ատոմական հաստության MoS<sub>2</sub> գերբարակ թաղանթներ աճեցվում են տարբեր տակդիրների վրա, այդ թվում ճկուն պոլյամիդային տակդիրների վրա և ստեղծվում են երկչափ հոմո- և հետերոկառուցվածքներ:

Նոր երկչափ նյութերի հայտնաբերումը ներկայումս հիմնականում իրականացում է փորձարարական ճանապարհով, ինչը երկարատև և ոչ այնքան արդյունավետ մեթոդ է: Նյութագիտության մեջ օգտագործվող ժամանակակից հաշվողական մեթոդները կարող են էականորեն օգնել արագացնելու այդ գործընթացը և փորձարար ֆիզիկոսների համար նյութի սինթեզի գործընթացը դարձնել ավելի թիրախային:

Այդ իմաստով էլ ատենախոսության թեման, ինչը նվիրված է անցումային մետաղների քալկոգենիտների դասում հատուկ ալգորիթմների օգնությամբ նոր բյուրեղական կառուցվածքների թիրախային որոնմանը, դրանց գոտիական կառուցվածքի, թերմոէլեկտրական, օպտիկական և ադսորբցիոն հատկությունների հաշվարկմանը խիստ արդիական է և կարևոր:

Ատենախոսության նպատակն է էվոյուցիոն բյուրեղական կառուցվածքի կանխագուշակման մեթոդով որոնել նոր ստեխիոմետրիայով, կայուն երկչափ միացություններ, ուսումնասիրել դրանց բյուրեղական ցանցերի դինամիկ կայունությունը հաշվի առնելով ատոմները ջերմային տատանումները, հաշվարկել դրանց էլեկտրական և օպտիկական հատկությունները, ինչպես նաև գնահատել այդ նյութերի կիրառելիության նպատակահարմարությունը գազային և բիոսենսորներում:

Ատենախոսության հիմնական գիտական նորույթը կայանում է նրանում, որ անցումային մետաղների քալկոգենիտների շարքում տեսականորեն կանխատեսվել է մի շարք նոր երկչափ նյութերի գոյությունը, ինչպիսիք են  $V_3S_4$ ,  $Mo(W)_4S(Se)_4$ ,  $Mo(W)_5S(Se)_2$ , հաշվարկվել են այդ նյութերի կինետիկական, դիէլեկտրիկական և օպտիկական պարամետրերը, ուսումնասիրվել են հայտնի գազերի մոլեկուլների հետ այդ նյութերի փոխազդեցության մեխանիզմները և օրինաչափությունները:

Ատենախոսության կիրառական մեծ նշանակությունն ակնհայտ է: Կանխագուշակված նոր երկչափ բյուրեղական կառուցվածքները և ստեխիոմետրիաները կարող են հիմք հանդիսանալ անհրաժեշտ հատկություններով կիսահաղորդչային կամ մետաղական նյութերի սինթեզի համար, որոնք կարող են կիրառվել ջերմաէլեկտրական սարքերում, ընտրողունակ գազային տվիչներում, օպտոէլեկտրոնիկայում, սպինտրոնիկայում և այլն:

#### Աշխատանքի կառուցվածքը և ծավալը

Ատենախոսությունը բաղկացած է Ներածությունից, հինգ գլուխներից, Եզրակացությունից և 310 հղում պարունակող գրականության ցանկից: Ատենախոսության ընդհանուր ծավալը 140 էջ է, պարունակում է 37 նկար և 3 աղյուսակ:

Ներածությունում հիմնավորված է ատենախոսության արդիականությունը, ներկայացված են աշխատանքի նպատակներն ու խնդիրներին, ինչպես նաև ստացված արդյունքների գիտական նորույթը, գործնական արժեքը և պաշտպանության ներկայացվող հիմնական դրույթները:

Առաջին գլխում բերված է ակնարկ գրականությունից: Համառոտ ներկայացված են անցումային մետաղների քալկոգենիտների գրականությունից հայտնի երկչափ բյուրեղական կառուցվածքները, գոտիական դիագրամը, էլեկտրոնային հատկություններ, կիրառությունները, ինչպես նաև բավականին մանրամասն նկարագրված են բյուրեղների գոտիական կառուցվածքի հաշվարկման համար օգտագործվող մոտավոր տեսական մեթոդները, այդ թվում էլեկտրոնների խտության ֆունկցիոնալի տեսությունը: Վերջում նկարագրված են այն պատ-

րաստի ծրագրային փաթեթները, որոնց օգնությամբ հեղինակը պատրաստվում է իրականացնելու է իր կողմից փնտրվող նոր նյութերի բյուրեղագիտական, էլեկտրոնային, կինետիկական, ֆոնոնային և ադսորբցիոն հատկությունների թվային մոդելավորումը:

Երկրորդ գլուխը նվիրված է անցումային մետաղների քալկոգենիտների նոր երկչափ ֆազաների հայտնաբերմանը և կայունությանը՝ հիմնված դրանց բյուրեղական կառուցվածքի և ֆոնոնային սպեկտրների հաշվարկի վրա:

Երրորդ գլխում ներկայացված են 2, 4, 5 մետաղական ատոմ և 3,4,2 քալկոգենիդային ատոմ հայտնի ստեխիոմետրիկ ֆազաների, ինչպես նաև նոր կանխագուշակված 5, 3 մետաղական ատոմ և, համապատասխանաբար, 4,5,2 քալկոգենիդային ատոմ ստեխիոմետրիայով երկչափ նյութերի կայունության, էներգիայի դիսպերսիայի օրենքի, անիզոտրոպ էլեկտրոնային հաղորդականության, Ջեյքեյի թերմոէլեկտր-ի գործակցի հաշվարկման հարցերը:

Չորրորդ գլուխը նվիրված է երկչափ նյութերի հետ զագերի մոլեկուլների փոխազդեցության ժամանակ լիցքերի փոխանակման, էլեկտրոնների վիճակների խտության փոփոխության հարցերին, ինչպես նաև տարբեր զագերի նկատմամբ առաջարկվող կիսահաղորդչային ադսորբցիոն տվիչների կողմից սենյակային ջերմաստիճանում սպասվող զգայունության հաշվարկին:

Հինգերորդ գլխում դիտարկվում են կանխագուշակված երկչափ նյութերի հնարավոր կիրառությունները որպես ՌՆԹ և ՌՆԹ մակրոմոլեկուլների կազմի մեջ մտնող ազոտային հիմքերի տվիչներ՝ հիմնված ազոտական հիմքերի ադսորբցիայի էներգիայի և զգայունության հաշվարկների վրա:

Եզրակացությունում ամփոփված են ատենախոսությունում ստացված հիմնական արդյունքները:

Ատենախոսության արդյունքներից կուզենահինք առաձնացնել մի քանիսը.

1. Mo, W, V անցումայի մետաղներ, S, Se քալկոգենիտային ատոմներ քիմիական համակարգում կարող են գոյություն ունենալ 4/4 և 5/2 ստեխիոմետրիայով նոր նյութեր:
2. Վանադիում - ծծումբ /V-S/ համակարգում կանխագուշակվել է նոր երկչափ բյուրեղական կառուցվածքով նյութ՝  $V_3S_4$  :
3. Հայտնաբերված նյութերից մի մասը ուղիղ անցումներով և նեղ արգելված գոտով կիսահաղորդիչներ են, մյուսները մետաղներ:
4. Ազոտի մոնօքսիդի գրանցման համար կարող է օգտագործվել հեքսագոնային կառուցվածքով վոլֆրամի սուլֆիդի երկչափ բյուրեղը, որի հետ փոխազդեցության ժամանակ արգելված գոտում առաջանում են նոր էլեկտրոնային վիճակներ:
5. Միևնույն բիոսենսորում հեքսագոնային  $MoS_2$  և  $WS_2$  միավորման արդյունքում հնարավոր է ընտրողաբար և հուսկորեն հայտնաբերել  $\Gamma$ -ի ազոտական հիմքերից, այսպես կոչված, գուանինը (G) և ցիտոսինը (C).

Ատենախոսությունը իր թեմայով և բովանդակությամբ համապատասխանում է Ա.04.10- «կիսահաղորդիչների ֆիզիկա» մասնագիտությանը:

Ատենախոսության սեղմագիրը ճշգրիտ արտացոլում է ատենախոսության բովանդակությանը:

Բնութագրելով դրական Մ.Ա. Աղամյանի ատենախոսությունը՝ պետք է նշել որոշ թերություններ և դիտողություններ՝

1. Նյութերի դինամիկական կայունությունը ստուգելու նպատակով մոլեկուլային դինամիկայի մեթոդով երկրորդ գլխում ուսունասիրվում է վանադիումի և ծծումբի կապի երկարության ժամանակային փոփոխությունը ինչ որ միջին արժեքի շուրջ՝ կախված ջերմաստիճանից: Նախ առաջինը, թվում էր, որ ցանցի ջերմային տատանումների այդպիսի կապերի երկարությունը պետք է ժամանակի ընթացքում փոփոխվեր պարբերականորեն, սակայն դա չի հետևում նկ. 2.9 b), d), f) գրաֆիկներից: Եվ երկրորդը, ջերմաստիճանը 300 K մինչև 700 K բարձրացնելիս, նշված կապի երկարության միջին արժեքը մեծանում է մոտ 7%-ով: Եթե այն ամբողջովին վերագրենք ջերմային ընդարձակմանը, ապա նշված նյութի ջերմային ընդարձակման գործակցի համար կստացվի  $1,7 \cdot 10^{-4} \text{ K}^{-1}$  արժեքը, ինչը

թվում է չափազանց մեծ՝ համեմատած նմանատիպ պինդ նյութերի հետ: Օրինակ, Lin, Z., Liu, W., Tian, S. *et al.* Thermal expansion coefficient of few-layer MoS<sub>2</sub> studied by temperature-dependent Raman spectroscopy. *Sci Rep* 11, 7037 (2021). <https://doi.org/10.1038/s41598-021-86479-6>, հոդվածում երկմենաշերտային MoS<sub>2</sub> - ի համար 300-600 K ջերմաստիճանային տիրույթում բերված է  $(0,5 - 1) \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$  արժեքը: Կարծում եմ հարցի լրացուցիչ պարզաբանման կարիք կա:

2. Հեղինակը ցույց է տվել, որ հայտնաբերված երկչափ M<sub>2</sub>X<sub>3</sub> / M-մետաղական ատոմ, X- քալկոգենիդային ատոմ/ ֆազաներից մեծ մասը ցուցաբերում է էլեկտրական հաղորդականության մեծ անիզոտրոպություն: Քանի որ հաղորդականության մեջ հավասարապես դեր են խաղում էլեկտրոնների կոնցենտրացիան և դրանց շարժունակությունը, ապա պարզ չէ թե ինչով է պայմանավորված հաղորդականության նման անիզոտրոպիան:

3. Ատենախոսության և նրա հավելվածներում բերված են չափազանց մեծ ծավալի գրաֆիկական և աղյուսակային տվյալներ: Օրինակ, բերված են մոտ 144 կլանման և անդրադարձման սպեկտրներ, ավելի քան 700 աղյուսակային տվյալներ տարբեր երկչափ նյութերի կողմից զանազան գազերի մոլեկուլների ադսորբցիայի էներգիաների համար, ինչը խոսում են իրականացված շատ մեծ ծավալի թվային հաշվումների մասին, սակայն այդ արդյունքները քանի որ լավ սիստեմավորված չեն, ապա սովորական ընթերցողի համար դրանք դժվար է դրանք ամբողջովին ընկալել և գնահատել:

4. Կան տեխնիկական վրիպակներ: Օրինակ, նկարներ 4.4, 4.5, 4.6 նկարագրություններում խոսվում է (4.8), (4.9), (4.10) հավասարումների մասին, սակայն դրանք տեքստում ընդհանրապես բացակայում են:

Նշված թերությունները, սակայն, չեն նվազեցնում ատենախոսության գիտական և կիրառական արժանիքը: Ատենախոսությունն անկասկած արժանի է բարձր գնահատականի: Ստացված արդյունքները համոզիչ կերպով հաստատում են ատենախոսության հիմնական դրույթները: Պաշտպանության ներկայացված գիտական դրույթները սահմանված են հստակ և, ես կասեի, նույնիսկ օրինակելի շատ հայցորդների համար:


Ատենախոսության հիմնական արդյունքները ամփոփված են հեղինակի 5 գիտական աշխատանքներում, որոնք հրապարակվել են մեծ ազդեցության գործակցով ամսագրերում: Ցավոք սրտի բացակայում է արդյունքների ներկայացումը գիտական հանրությանը համաժողովների շրջանակներում:

### Եզրակացություն

Միշտ Արթուրի Աղամալյանի «Նոր երկչափ անցումային մետաղի քալկոգենիդների հաշվարկային որոնումը և դրանց հատկությունների ուսումնասիրումը կիսահաղորդչային սարքերում կիրառության համար» թեմայով թեկնածուականատենախոսությունն ավարտուն գիտական աշխատանք է, ժամանակակից հաշվողական մեթոդների օգտագործմամբ իրականացված է մեծ ծավալի աշխատանք, բնութագրվում է բարձր գիտական մակարդակով, ունի մեծ գործնական արժեք և լիովին համապատասխանում է ՀՀ ԲՈԿ-ի կողմից թեկնածուականատենախոսություններին ներկայացվող պահանջներին, իր բովանդակությամբ համապատասխանում է Ա.04.10 «Կիսահաղորդիչների ֆիզիկա» մասնագիտությանը, իսկ *հեղինակն անկասկած, արժանի է ֆիզիկամաթեմատիկական գիտությունների թեկնածուի գիտական աստիճանի շնորհմանը:*

### Պաշտոնական ընդդիմախոս՝

ՀՀ ԳԱԱ Ռադիոֆիզիկայի և էլեկտրոնիկայի  
կիսահաղորդչային նանոէլեկտրոնիկայի  
լաբորատորիայի վարիչ, ՀՀ ԳԱԱ թղթակից-անդամ,  
ֆիզիկամաթեմատիկական գիտությունների դոկտոր,  
պրոֆեսոր

  
27.06.22թ

Ս. Գ. ՊԵՏՐՈՍՅԱՆ

Ս.Գ. Պետրոսյանի ստորագրությունը հաստատում եմ:

ՀՀ ԳԱԱ Ռադիոֆիզիկայի և էլեկտրոնիկայի  
գիտ. քարտուղար





Ա. Եսայան