

Կ Ա Ր Ծ Ի Ք

01.04.07 - «Կոնդենսացված վիճակի ֆիզիկա» մասնագիտությամբ ֆիզիկամաթեմատիկական գիտությունների դոկտորի գիտական աստիճանի հայցմանը ներկայացված՝ Հայկ Ռաֆայելի Ասատրյանի «ՔՎԱՆՏԱՅԻՆ ԷԼԵԿՏՐՈՆԻԿԱՅԻ ՀԱՄԱՐ ՀԵՌԱՆԿԱՐԱՅԻՆ ԲՅՈՒՐԵՂՆԵՐԻ ԷԼԵԿՏՐՈՆԱՅԻՆ ՊԱՐԱՄԱԳՆԻՍԱԿԱՆ ՌԵԶՈՆԱՆՍԱՅԻՆ ՍՊԵԿՏՐՈՍԿՈՊԻԱ» վերնագրով ատենախոսության վերաբերյալ

Տեխնոլոգիական զարգացման արդի ժամանակներում խտացված նյութերի ֆիզիկայի բուն զարգացումը, նոր՝ բարձր տեխնոլոգիական նյութերի որոնումը մեծապես պայմանավորված է տարբեր բնագավառներում, այդ թվում՝ քվանտային էլեկտրոնիկայում, դրանց կիրառական նշանակությամբ (գեներացիայի ցածր շեմ և բարձր արդյունավետություն ունեցող լազերային բյուրեղների մշակում, բարձրորակ բազմաֆունկցիոնալ լազերային և ոչ գծային բյուրեղների սինթեզ, արդյունավետ սցինտիլատորների ստեղծում և այլն):

Ներկայումս, պայմանավորված քվանտային էլեկտրոնիկայի բուն զարգացմամբ, կտրուկ աճել է նախապես տրված օպտիկական հատկություններով օժտված նոր միացությունների, մասնավորաբար՝ հազվագյուտ հողի խմբի իոններով լեզիրված բյուրեղների պահանջարկը: Ուստի խիստ կարևորվում են բյուրեղային ցանցում խառնուրդների զբաղեցրած հանգույցների, դրանց համաչափության, ինչպես նաև բյուրեղային արատների հատկությունների փորձարարական հետազոտությունները: Նշված հատկությունների հետազոտության մեթոդներից մեկը՝ էլեկտրոնային պարամագնիսական ռեզոնանսը (EPR), հնարավորություն է տալիս որոշելու խառնուրդի սպինը և վալենտականությունը, նրա զբաղեցրած դիրքի լոկալ համաչափությունը, մոտակա շրջապատի կառուցվածքը և այլն: Ավելին, EPR սպեկտրը, բնութագրելով տվյալ պարամագնիսական իոնի հատկությունները (որը յուրահատուկ գոնդ է հանդիսանում), թույլ է տալիս բնութագրել միկրոմիջավայրի սպեկտրադիտական և կառուցվածքային առանձնահատկությունները՝ համաչափությունը, բյուրեղային դաշտի ուժգնությունը, իոնական և կովալենտ կապերի առկայությունը և այլն:

Ներկայացված ատենախոսության հիմնական նպատակն է էլեկտրոնային պարամագնիսական ռեզոնանսի մեթոդով հետազոտել անցումային և հազվագյուտ հողի խմբի տարրերով լեզիրված նյութերում առկա արատների և խառնուրդային իոնների

տեղակալման հանգույցները և դրանց լոկալ համաչափությունը՝ բացահայտելու համար հետազոտվող նյութերի հենքի վրա լազերային միջավայրեր ստանալու, արագագործ սցինտիլատորներ և քվանտային ինֆորմատիկայի համար միջավայրեր ստեղծելու հնարավորությունները:

Ատենախոսությունում ուսումնասիրվում են մի քանի դասերի նյութեր՝ հազվագյուտ հողի խմբի՝ $TR^{3+} = Ce^{3+}, Tb^{3+}, Nd^{3+}, Er^{3+}, Dy^{3+}, Ho^{3+}, Tm^{3+}$, ինչպես նաև՝ Fe^{2+} իոններով լեզիրված իտրիում-ալյումինիումի և լյուտեցիում-ալյումինիումի նոնաքարերի (YAG, LuAG) բյուրեղները, իտրիումի օրտոալյումինատի միաբյուրեղը (YAP), կապարի վոլֆրամատի միաբյուրեղը (PWO), ինչպես նաև MnO_4^{2-} մոլեկուլյար իոններով ակտիվացված $K_3Na(CrO_4)_2$ բյուրեղը: Կատարված է մեծածավալ փորձարարական հետազոտություն, լուծված են որոշակիորեն փոխկապակցված խնդիրներ: Հարկ է նշել, որ ատենախոսության յուրաքանչյուր գլուխ ավարտվում է համապատասխան եզրակացություններով, ինչը նպաստում է ստացված արդյունքների դյուրին ընկալմանը:

Ատենախոսությունը բաղկացած է ներածությունից, 6 գլխից, եզրակացություններից և 127 մեջբերված գրականության ցանկից: Բերված են նաև օգտագործված հապավումների և հեղինակի՝ ատենախոսության թեմային առնչվող աշխատանքների ցուցակները: Ատենախոսության ընդհանուր ծավալը կազմում է 277 էջ՝ ներառյալ 126 գծապատկեր և 8 աղյուսակ:

Ներածությունում հիմնավորված է թեմայի արդիականությունը, ձևակերպված են աշխատանքի նպատակն ու խնդիրները:

Առաջին գլուխը նվիրված է $Er^{3+}, Dy^{3+}, Ho^{3+}, Eu^{2+}$ և V^{2+} իոններով լեզիրված և խառնուրդ չպարունակող YAG և LuAG բյուրեղների մանրակրկիտ EPR ուսումնասիրությանը: Մասնավորապես, YAG բյուրեղում գրանցվել է Mo^{3+} կրամերայան իոնին հատուկ EPR գծեր, ինչը վկայում է, որ հետազոտվող YAG բյուրեղում առկա է չվերահսկվող խառնուրդ հանդիսացող Mo^{3+} իոնը:

Հաշվարկված են Er^{3+} իոնով լեզիրված YAG և LuAG բյուրեղների EPR սպեկտրի պարամետրերը, 0.1% Er^{3+} -YAG և 10%Er-LuAG բյուրեղների հետազոտության արդյունքում հայտնաբերվել է երբիումի նոր կենտրոն, որի հիմնական և առաջին գրգռված դուբլետների միջև շտարկյան ճեղքվածքն ավելի փոքր է: Դիտարկված է Dy^{3+} -ի կենտ իզոտոպի սպեկտրի

գերնուրբ կառուցվածքը, և որոշված են YAG-Dy³⁺ բյուրեղի գերնուրբ փոխազդեցության հաստատունները: YAG-Ho³⁺, LuAG-Tb³⁺ և YAG-V²⁺ բյուրեղների EPR սպեկտրներում առկա ցածր ինտենսիվությամբ սատելիտային գծերի առկայությունը բացատրված է «anti-site» (Y→Al_{oct}) կենտրոնների առկայությամբ, որոնք փոխում են որոշ խառնուրդային իոնների լոկալ համաչափությունը և դրանց վրա ազդող բյուրեղային դաշտի ուժգնությունը:

Երկրորդ զլուխում ուսումնասիրված են Ce³⁺, Nd³⁺, Er³⁺, Tm³⁺, Gd³⁺, ինչպես նաև Fe²⁺ իոններով (և դրանց տարբեր իզոտոպներով) լեզիրված խորհումի օրտոայունատի (YAP) բյուրեղի EPR սպեկտրները, որոշված են Ce³⁺, Nd³⁺, Er³⁺ իոններով լեզիրված բյուրեղների g-ֆակտորների գլխավոր արժեքները, Nd³⁺ և Er³⁺ կենտրոնների սպեկտրների գերնուրբ կառուցվածքի պարամետրերը: Ցույց է տրված, որ պարամագնիսական կենտրոնների լոկալ մագնիսական առանցքների թերվածությունները բյուրեղագրական (crystallographic) առանցքների նկատմամբ կախված են խառնուրդի տեսակից: Որոշված են YAP- Tm³⁺ բյուրեղի EPR սպեկտրի պարամետրերը, ինչպես նաև բացահայտված է, որ խառնուրդ չպարունակող YAP բյուրեղի ուսումնասիրվող նմուշները պարունակում են Mo³⁺ և Tb³⁺ իոններ, ինչը, հավանաբար, պայմանավորված է այդ նմուշների աճեցման պայմաններով:

Լայնաշերտ EPR սպեկտրասկոպիայի մեթոդով հետազոտվել է երկաթի խառնուրդով YAP բյուրեղը, ինչի արդյունքում հայտնաբերվել է պարամագնիսական կենտրոն, որի ստորին էներգիական մակարդակները՝ դուբլետը և սինգլետը, իրարից հեռացված են 215.2 GHz -ով: Այս կենտրոնը նույնականացված է Fe²⁺ հետ:

Երրորդ զլուխը նվիրված է նոնաբարերի և օրտոայումինատների հենքի վրա ստացված անկանոն բյուրեղային համակարգերի ուսումնասիրմանը: Մասնագորապես, ստացված և մանրամասն հետազոտված են YLuAG-Mo³⁺, YScAG-Mo³⁺, YLuAG-Er³⁺, YLuAP-Ce³⁺ անկանոն բյուրեղային համակարգերի EPR սպեկտրները: Ցույց է տրված, որ Lu-ի (Sc-ի) տարբեր պարունակությունների դեպքում YLuAG-Mo³⁺ (YScAG-Mo³⁺) համակարգի, ի տարբերություն YAG-Mo³⁺-ի, EPR սպեկտրներում առաջանում են լրացուցիչ գծեր՝ ընդհանուր թվով 13 (22) գիծ. հաշվարկված են այդ գծերի առաջացման հավանականությունները՝ կախված Lu-ի (Sc-ի) պարունակությունից, որոշված են սպինային համիլտոնիանի պարամետրերը: Հետազոտված է նաև (Y_{1-x}Lu_x)₃Al₅O₁₂-Er³⁺ (0 ≤ x ≤ 1) համակարգում Er³⁺ իոնի գրգռված վիճակի EPR սպեկտրը, ինչի արդյունքում հայտնաբերված

են Er^{3+} -ի նոր կենտրոններ, տրված է այդ կենտրոնների առաջացման բացատրությունը: Լրացուցիչ կենտրոններ հայտնաբերված են նաև Lu-ի տարբեր պարունակությամբ YLuAP- Ce^{3+} համակարգի EPR սպեկտրների ուսումնասիրման արդյունքում: Ցույց է տրվել, որ լրացուցիչ կենտրոնների քանակը կախված է Lu-ի պարունակությունից:

Չորրորդ գլուխում հետազոտվում է նոմինալ մաքուր և Mn^{2+} իոններով լեգիրված կապարի վոլֆրամատը՝ $PbWO_4$: Ըստ որում, նոմինալ մաքուր բյուրեղում հայտնաբերվել են լրացուցիչ զծեր, որոնք սպեկտրի գերնուրբ կառուցվածքի ուսումնասիրության արդյունքում նույնականացվում են Ce^{3+} և Nd^{3+} իոններին հատուկ EPR զծերի հետ:

Հինգերորդ գլուխում EPR սպեկտրասկոպիայի մեթոդով հետազոտվում են Ce^{3+} և Tb^{3+} իոններով լեգիրված YAG բյուրեղները: Ցույց է տրված, որ բացի Ce^{3+} և Tb^{3+} իոններին բնորոշ զծերից (որոնք համապատասխանում են սովորական իրավիճակին, երբ խառնուրդային իոնները տեղակալում են Y^{3+} իոնին դողեկահեղրալ դիրքում) EPR սպեկտրում դիտվում են ոչ մեծ ինտենսիվության լրացուցիչ զծեր: Ըստ որում, այդ զծերին համապատասխանող շտարկյան ճեղքումները մեծությամբ տարբերվում են հիմնական իոնների համար դիտվող շտարկյան ճեղքումներից: Այս երևույթը բացատրելու համար առաջարկվում է մոդել, ըստ որի՝ YAG բյուրեղային ցանցում Y^{3+} իոնին տեղակալված TR^{3+} իոնների որոշ մասը կարող է հայտնվել այլ համաչափության և մեծության բյուրեղային դաշտի ազդեցության տակ՝ պայմանավորված, այսպես կոչված, «anti-site» Y_{Al} և/կամ Al_Y արատներով, որոնց առկայությունը հանգեցնում է ինչպես սկզբնական ճեղքումի, այնպես էլ g-գործոնի փոփոխության:

Վեցերորդ գլուխը նվիրված է $K_3Na(CrO_4)_2:MnO_4^{2-}$ սեգնետաէլաստիկում տեղի ունեցող մոլեկուլային խառնուրդում տեղի ունեցող լոկալ կառուցվածքային անցման հետազոտմանը: $K_3Na(CrO_4)_2$ -ում լոկալ կառուցվածքային անցման տիրույթում հայտնաբերված է մոլեկուլային MnO_4^{2-} խառնուրդի երկու ակտիվ կենտրոն, որոնց EPR զծերի հազեցվածության կախումները GFZ -ն հզորությունից իրարից տարբեր են: Նշված երևույթի բացատրման նպատակով առաջարկվում է Յան-Թելլերյան խառնուրդային կենտրոնում ընթացող լոկալ անցման մոդել:

Գնահատելով ատենախոսությունն ամբողջությամբ՝ հարկ է ընդգծել նրա արդիականությունը, ինքնատիպությունը, գործնական նշանակությունը և հեղինակի

գերակայությունն ատենախոսությունում դիտարկվող խնդիրների ձևակերպման և լուծման մեջ: Ատենախոսության հիմնական արդյունքները հրատարակված են բարձր վարկանիշ ունեցող գիտական ամսագրերում, ինչը փաստում է նաև հետազոտության առարկայի արդիականությունը և ստացված արդյունքների հավաստիությունը:

Աշխատանքն ունի բարձր գիտական մակարդակ, սակայն այն գերծ չէ նաև որոշ թերություններից.

1. (3.1) բանաձևի (բինոմիալ բաշխում) կիրառումը Mo^{3+} -ի օկտահեղրալ շրջապատը կազմող Y^{3+} իոններին որոշակի քանակով Lu^{3+} իոններով տեղակալման հավանականության հաշվման համար լրացուցիչ բացատրություն է պահանջում: Բինոմիալ բաշխումը նկարագրող (3.1) բանաձևում (էջ 121) x -ը մեկ Lu^{3+} իոնի տեղակալման հավանականությունն է ($x = 1/6$)՝ պայմանով, որ դիտարկվող օկտահեղրի կենտրոնում գտնվում է Mo^{3+} - ի իոնը: Մինչդեռ ատենախոսության տեքստում x -ով նշանակված է Lu^{3+} իոնների քանակը YAG -ի մեկ ֆորմուլային միավորումում ($Y_{1-x}Lu_x$) $_3Al_5O_{12}$ (Նկ.3.3, էջ 122):

Նույնը վերաբերում է էջ 129 –ում և էջ 140-ում բերված (3.4) և (3.5) բանաձևերին:

2. Ատենախոսությունում EPR սպեկտրների վելուծության հիման վրա փաստվում է, մասնավորապես, $Y_3Al_5O_{12}$ բյուրեղում Y_{Al} և Al_Y «anti-site» արատների առկայությունը: Սակայն քննարկված չէ նույն բյուրեղում խառնուրդային RE^{3+} իոնների օկտահեղրալ հանգույցներում տեղակայման հնարավորությունը:

3. Առկա են մի շարք վրիպումներ.

- էջ 136-ում պնդվում է, որ «В частности, постоянная решетки состава $Y_3Sc_2Al_3O_{12}$ равная 12,247 Å заметно меньше, чем расчетное значение 12,351 Å, полученное по формуле (3.2) для случая замещения всех октаэдрически координированных ионов Al^{3+} на ионы Sc^{3+} .»
Սակայն (3.2) բանաձևով որոշվում է սպինային համիլտոնիանը (էջ 126):
- (2.1) բանաձևի (էջ 100) և (4.1) բանաձևի (էջ 163) ճիշտ չեն գրառառված, (2.3) բանաձևի (էջ 105) բոլոր անդամները բացատրված չեն, Նկ.1.23 -ում (էջ 53) և Աղյ.2.1-ում (էջ 94) կան բացթողումներ:

Սակայն նշված թերությունները և դիտողություններն ամենևին չեն նվազեցնում դիտարկվող ատենախոսության արժանիքները: Հեղինակն իր իսկ կողմից առաջ քաշած

փորձարարական հետազոտությունների արդյունքների վերլուծության ժամանակ ցուցաբերում է բարձր գիտական մակարդակ: Կարծում եմ իրականացված հետազոտությունները շարունակելի են և կարող են խթան հանդիսանալ նոր փորձարարական և տեսական հետազոտությունների համար՝ նպաստակ ունենալով բյուրեղի մատրիցում խառնուրդային իոնների տեղակալման հանգույցների դիրքերի և համաչափության, խառնուրդների բաշխման անհամասեռության և դրանց ազդեցության աստիճանի որոշումը բյուրեղային համակարգերի սպեկտրադիտական և լազերային հատկությունների վրա:

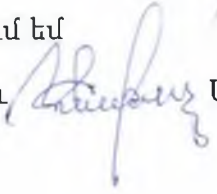
Ամբոջությամբ վերցրած, ատենախոսությունը ձևավորված է բարեխղճորեն. այն շարադրված է մատչելի լեզվով և դյուրընկալելի է:

Հեղինակի հրատարակած աշխատանքներն ամբողջությամբ արտահայտում են ատենախոսության բովանդակությունը: Ատենախոսական աշխատանքի և սեղմագրի բովանդակությունները միմյանց լիովին համապատասխանում են:

Ատենախոսական աշխատանքի արդյունքները կարող են օգտագործվել ՀՀ ԳԱԱ ՖՀԻ-ում, ԵՊՀ-ի ֆիզիկայի և ռադիոֆիզիկայի ֆակուլտետներում, ՀՀ ԳԱԱ ՌՖԵԻ-ում, Ռուսաստանի ԳԱ Սպեկտրոսկոպիայի, Կրիստալոգրաֆիայի, Ա. Ֆ. Իոֆեի անվան ֆիզիկատեխնիկական ինստիտուտներում, ինչպես նաև լազերային բյուրեղների սպեկտրադիտական և սցինցիլիացոն հատկությունների ուսումնասիրությամբ զբաղվող այլ գիտական հաստատություններում:

Վերը ասվածը թույլ է տալիս եզրակացնել, որ գրախոսվող ատենախոսական աշխատանքը՝ ձևակերպված և լուծված խնդիրների արդիականությամբ և կարևորությամբ, ստացված արդյունքների հավաստիությամբ և նորությամբ, անկասկած, ամբողջովին բավարարում է ՀՀ ԲՈՀ-ի կողմից դոկտորի գիտական աստիճանի հայցմանը ներկայացվող պահանջները, իսկ նրա հեղինակը՝ Հայկ Ռաֆայելի Ասատրյանը արժանի է ֆիզիկամաթեմատիկական գիտությունների դոկտորի գիտական աստիճանի շնորհմանը:

ՀՊՄՀ Մաթեմատիկայի, ֆիզիկայի և ինֆորմատիկայի
 Ֆակուլտետի դեկան, ֆիզ. մաթ. գիտ. դոկտոր  Գ.Գ. Դեմիրխանյան

Գ.Գ. Դեմիրխանյանի ստորագրությունը հաստատում եմ  Ս.Ս. Իսայիրյան

ՀՊՄՀ գիտական քարտուղար, մանկ. գիտ. թեկնածու

