

ՊԱՇՏՈՆԱԿԱՆ ԸՆԴԴԻՄԱԽՈՍԻ ԿԱՐԾԻՔ

Վարազդատ Արտեմի Ստեփանյանի «Քվանտային և դասական երևույթները կենսապոլիմերների կառուցվածքում» թեմայով, Ա.04.07 - «Կոնդենսացված վիճակի ֆիզիկա» մասնագիտությամբ ֆիզիկամաթեմատիկական գիտությունների թեկնածուի գիտական աստիճանի հայցման համար ներկայացված ատենախոսության վերաբերյալ

Ներկայացված ատենախոսությունում քննարկվում են կենսապոլիմերներին յուրահատուկ կառուցվածքային անցումների առանձնահատկությունները բնութագրող մոդելներ և այդ անցումների առաջացման հետ սերտորեն կապված դինամիկ պրոցեսներ: Ատենախոսության հիմնական նպատակն է կենսապոլիմերներում հանդիպող էքստրեմալ թերմոդինամիկ վիճակների տեսական ուսումնասիրությունը: Որպես այդպիսի վիճակների կառուցվածքային անցումներ ուսումնասիրվել են բացասական ճնշումը և ճնշման նշանի փոփոխությամբ ուղեկցվող անցումները, կոնֆորմացիոն անցումների հետ մի շարք նմանություններ ունեցող միաչափ համակարգերում բաշխման ֆունկցիայի ուրվագծի փոփոխություններով պայմանավորված անցումները և պոլիմերներում տատանողական մոդերի դինամիկ կոնդենսացիայի պրոցեսը: Աշխատանքում բերված են նոր մոտեցումներ քվանտային թերմոդինամիկայում ճնշումը, ինչպես նաև քվանտային մեխանիկայում լուկալ էներգիայի խտությունը նկարագրելու համար: Ատենախոսության արդյունքները կարող են ունենալ լայն կիրառություններ դեղագործության և նյութագիտության ոլորտներում:

Ատենախոսությունը ներառում է ներածական մաս, որում բերված է թեմային վերաբերող հիմնական մոդելների նկարագրությունը, կարճ ներկայացված են ստացված արդյունքները և շարադրված է բովանդակությունն ըստ գլուխների: Կատարված հետազոտությունների արդյունքները ամփոփված են չորս գլուխներում:

Առաջին գլխում հետազոտված է.

ա. Թերմոդինամիկ համակարգերում բացասական ճնշումով վիճակների գոյության և հավասարակշռության խնդիրը: Ստանդարտ տեսական մոտեցումը վկայում է, որ երկրաչափորեն պարփակված համակարգը ձգտում է լցնել իրեն հասանելի ամբողջ ծավալը՝ ցուցաբերելով դրական ճնշում: Սակայն այս մոտեցման մեջ հաշվի չի առնվում այն հանգամանքը, որ համակարգերը կարող են ոչ տրիվիալ կերպով փոխազդել պատերի հետ: Ատենախոսական աշխատանքում քվանտային թերմոդինամիկայի մեթոդներով դուրս է բերվել ճնշման համար ընդհանուր բանաձև: Օգտագործելով այս բանաձևը պատի հետ տրիվիալ փոխազդող համակարգի համար՝ ապացուցվել է բացասական ճնշումը արգելող թեորեմ: Այնուհետև ներկայացվել են քվանտային և դասական համակարգի պարզ

մողելներ, որտեղ ցույց է տրվել բացասական ճնշումով վիճակների առկայությունը:

բ. Երկու լիցքավորված զուգահեռ շերտերի միջև գտնվող անկարգավորված պոլիէլեկտրոլիտի կառուցվածքի խնդիրը: Այս համակարգում հետերոպոլիմերի անկարգավորվածությամբ պայմանավորված փոխազդեցությունները տրվում են հաջորդականության պատահականությամբ: Այսպիսով համակարգում կան երկու կարևոր փոխազդեցություններ, պոլիէլեկտրոլիտի մոնոմերների միջև կարճ հեռավորության վրա ազդող անկարգավորվածությամբ պայմանավորված փոխազդեցություն և էլեկտրոստատիկ փոխազդեցություն լիցքավորված մոնոմերների, պատերի և համակարգում գտնվող իոնների միջև: Աշխատանքում դուրս է բերվել համակարգում էլեկտրոստատիկ դաշտը նկարագրող Պուլասոն-Բուլցմանի հավասարումը, ինչպես նաև մոնոմերների բաշխումը նկարագրող ոչ-գծային Շրյոդինգերատիպ հավասարումը: Այս հավասարումը լուծվել է թվային մեթոդներով և ստացվել է առաջին սեռի փուլային անցում բացասականից-դրական ճնշում, որը տեղի ունի միայն էլեկտրոստատիկ և անկարգավորված ուժերի համաձուլման շնորհիվ:

Երկրորդ գլխում հետազոտված են միաչափ Իզինգի մողելում նոր տեսակի թերմալ անցումներ: Այս անցումները ի հայտ են գալիս որպես միկրոսկոպիկ համակարգի մոմենտների բաշխման ֆունկցիայում լուկալ և գլոբալ էքստրեմումների առաջացում: Աշխատանքում ուսումնասիրվել է երեք դեպք՝ առանց արտաքին դաշտի, կոնստանտ արտաքին դաշտի առկայությամբ և ջերմաստիճանից կախված արտաքին դաշտով: Վերջինս բազմիցս օգտագործվել է պոլիմերներում պարույր-կծիկ անցումները հաջողությամբ նկարագրելու համար: Ատենախոսության մեջ հաշվվել են առաջին և երկրորդ մոմենտի բաշխումները, որոնց օգնությամբ գտնվել են անցման ջերմաստիճանները, կախված համակարգում մասնիկների քանակից: Արտաքին դաշտի կրիտիկական արժեքից մեծ արժեքների դեպքում անցման երկու ջերմաստիճանները հավասարվում են իրար, և անցումը կորցնում է իր սահունությունը: Այս պահվածքը նման է առաջին սեռի փուլային անցման ջերմաստիճաններին: Ջերմաստիճանից կախված արտաքին դաշտի առկայությամբ համակարգում տեղի է ունենում պարույր-կծիկ անցում: Այս անցման կտրուկությունը կախված է արտաքին դաշտի բանաձևում տրվող պարույր-կծիկ անցման ջերմաստիճանի և Իզինգի մողելի անցման ջերմաստիճանի արժեքների հարաբերությունից:

Երրորդ գլխում հետազոտված է ոչ-ռեյատիվիստիկ քվանտային մեխանիկայում էներգիայի խտության խնդիրը: Ի տարբերություն Դիրակի ռեյատիվիստիկ հավասարման, Շրյոդինգերի հավասարումը չունի միարժեքորեն որոշվող էներգիայի խտության արժեք: Այս ոչ-միարժեքության խնդիրը լուծելու համար աշխատանքում դուրս է բերվել Դիրակի հավասարման էներգիայի խտության ոչ-ռեյատիվիստիկ սահմանը: Այս մեթոդով ստացված էներգիայի խտությունից գտնվել են իրարից անկախ պահպանվող բաղադրիչ էներգիայի խտություններ: Էներգիայի խտության մեխանիկական բաղադրիչից ստացվել է, որ կինետիկ էներգիայի լուկալ արժեքները կարող են լինել բացասական: Նաև դուրս է բերվել էներգիայի հաղորդման արագությունը Գաուսյան և Էյրիի փաթեթների համար, և ցույց է

տրվել, որ այս արագությունը ավելի մեծ է, քան փաթեթների խմբային արագությունները: Հաշվարկվել է էներգիայի խտության սպինային բաղադրիչը Լանդաուի մակարդակներում՝ արտաքին մագնիսական դաշտի առկայությամբ:

Չորրորդ գլխում հետազոտված է բոզոնային համակարգի սառեցման խնդիրը, ինչպես նաև Ֆրյուլիի դինամիկ կոնդենսացիան: Ապացուցվել է, որ գծային փոխազդեցություններով համակարգում մասնիկների քանակը չի նվազում: Նաև ցույց է տրվել, որ գծային դինամիկայով համակարգը չի կարելի բերել կոնդենսացված վիճակի: Այսպիսով քվանտային ռեժիմում ապացուցվել է Ֆրյուլիի դինամիկ կոնդենսացիայի համար ոչ-գծայինության անհրաժեշտությունը, որը մինչ այս ցույց էր տրվել միայն դասական ռեժիմում: Այնուհետև ուսումնասիրվել է թերմալ վիճակում գտնվող բիմոդալ համակարգ: Այս համակարգի համար գտնվել է օպտիմալ սառեցման ալգորիթմ: Ալգորիթմի չափանիշների համար ստացվել են սահմաններ՝ կախված մոդերի հաճախություններից: Մասնավորապես օգգ-ի համար ստացվել է Կառնոյի սահմանի տիպի անհավասարում: Այնուհետև բերվել է ոչ-գծային փոխազդեցության Համիլտոնիանի օրինակ, որի կոնկրետ իմպուլսներով ստացվել է սառեցնել այս համակարգը:

Վերը շարադրվածը վկայում է այն մասին, որ ատենախոսությունում ստացված են կարևոր արդյունքներ կենսապոլիմերների կառուցվածքային անցումների մոդելավորման և տեսական ուսումնասիրման համար:

Ատենախոսության վերաբերյալ իմ դիտողությունները հետևյալն են.

1. Միաչափ Իզինգի մոդելում ստացված բաշխման անցումների կապը կոնֆորմացիոն անցումների հետ ուսումնասիրվել է միայն Չիմ-Բռեգի մոդելի պարզ դեպքում՝ անցման ջերմաստիճանների միջև: Հետաքրքիր է ուսումնասիրել նման անցումների առկայությունը և կապը կոնֆորմացիոն անցումների հետ ավելի բարդ բաղադրյալ մոդելների դեպքում:
2. Ոչ-գծային սառեցման համար բերված օրինակում համակարգում մասնիկների քանակը նվազում է, սակայն պարզ չէ՝ արդյոք համակարգում տեղի է ունենում կոնդենսացիա: Թվում է, թե այս երևույթների միջև կա կապ, որն անհրաժեշտ է ավելի խորը ուսումնասիրել:

Բերված թերությունները չեն ազդում ատենախոսության վերաբերյալ ընդհանուր դրական գնահատականի վրա: Աշխատանքն իր բովանդակությամբ, ծավալով և ստացված արդյունքների արդիականությամբ լրիվությամբ բավարարում է ՀՀ ԲԿԳԿ կողմից թեկնածուական ատենախոսություններին ներկայացվող պահանջներին:

Ելնելով վերը շարադրվածից՝ գտնում եմ, որ Վարազդատ Ստեփանյանը արժանի է Ա.04.07 - «Կոնդենսացված վիճակի ֆիզիկա» մասնագիտությամբ ֆիզիկամաթեմատիկական գիտությունների թեկնածուի գիտական աստիճանի շնորհման: Սեղմագիրը ճիշտ և ամբողջությամբ արտացոլում է ատենախոսության բովանդակությունը:

Պաշտոնական ընդդիմախոս,
ՀՀ ԳԱԱ Ինֆորմատիկայի և ավտոմատացման
պրոբլեմների ինստիտուտի կենսաինֆորմատիկայի
լաբորատորիայի վարիչ,
Ֆիզ.-մաթ. գիտ. դոկտոր



Ա. Հ. Պողոսյան

Ա. Հ. Պողոսյանի ստորագրությունը հաստատում եմ

10 փետրվարի, 2025 թ.

