

ՊԱՇՏՈՆԱԿԱՆ ԸՆԴԴԻՄԱԽՈՍԻ ԿԱՐԾԻՔ

Միշա Աղամայանի՝ «Նոր երկչափ անցումային մետաղի քալկոգենիդների հաշվարկային որոնումը և դրանց հատկությունների ուսումնասիրումը կիսահաղորդչային սարքերում կիրառության համար» թեմայով, Ա.04.10 «Կիսահաղորդիչների ֆիզիկա» մասնագիտությամբ ֆիզիկամաթեմատիկական գիտությունների թեկնածուի գիտական աստիճանի հայցման ատենախոսության վերաբերյալ:

Ատենախոսությունը նվիրված է Mo-ի, W-ի և V-ի նոր, երկչափ քալկոգենիդների կայուն կառուցվածքների հաշվողական մեթոդներով հայտնաբերմանը և դրանց էլեկտրական, թերմոէլեկտրիկ և օպտիկական հատկությունների, ինչպես նաև դրանց մի շարք մոլեկուլների հետ փոխազդեցության տեսական ուսումնասիրմանը:

Անցումային մետաղների քալկոգենիդները (ԱՄՔ) վերջին տարիներին մեծ հետաքրքրություն են առաջացնում գիտական հետազոտությունների համար՝ դրանց յուրահատուկ հատկությունների շնորհիվ: Այս դասի նյութերը հետաքրքրական են ինչպես ֆունդամենտալ գիտության տեսանկյունից, այնպես էլ կարևոր տեխնոլոգիական կիրառությունների համար՝ սկսած նանոէլեկտրոնիկայից ու նանոֆոտոնիկայից մինչև նանոչափային զգայուն սարքերում կիրառության համար: Այս դասի նյութերի նկատմամբ հետաքրքրությունը նոր թափ հավաքեց հատկապես առաջին տրանզիստորի ցուցադրումից (Radisavljevic et al. 2011) ու MoS₂-ի մոտ ուժեղ ֆոտոլումինեսցենցիայի հայտնաբերումից հետո (Splendiani et al. 2010):

Անցումային մետաղի երկքալկոգենիդների կառուցվածքը առաջին անգամ բացահայտվեց Լինուս Պոլինգի կողմից 1923 թվականին (Dickinson and Pauling 1923): Դրան հաջորդող տասնամյակներում մեծ քանակով ԱՄՔ-ներ հատնաբերվեցին, որոնց մեծ մասը շերտավոր կառուցվածքով էին: Առաջին անգամ կաչուն ժապավենի միջոցով MoS₂-ի բարակ շերտեր ստացվեց Ռոբերտ Ֆրինդտի կողմից 1963 թվականին (Frindt and Yoffe 1963): Իսկ 2004-ից հետո գրաֆենի հետ կապված հետազոտությունների աճի հետ մեկտեղ միաշերտ նյութերի փորձնական ստացման և հետազոտման մեթոդները կատարելագործվեցին, որը նույնպես նպաստեց ԱՄՔ-ների հետաքրքրության մեծացմանը և հետազոտությունների ակտիվացմանը:

ԱՄՔ-ները սովորաբար կարող են հանդես գալ մի քանի տարբեր կառուցվածքներով, ինչպես օրինակ ամենատարածված 2H և 1T կառուցվածքներով:

Կախված կոնկրետ մետաղից ու քալկոգենից ավելի կայուն կլինի կառուցվածքներից մեկը կամ մյուսը: Շատ դեպքերում մյուս՝ մետակայուն, կառուցվածքը նույնպես կարող է ստացվել կախված պայմաններից:

Ատենախոսության ներածությունում բերված գրականության վերլուծությունից պարզ է դառնում, որ ԱՄՔ-ների այլ կառուցվածքներ նույնպես կարող են գոյություն ունենալ, ընդ որում, դրանք կցուցաբերեն տարբերվող հատկություններ:

Նման գիտական և տեխնոլոգիական կարևորություն ունեցող նյութերի դասում նոր կառուցվածքների հայտնաբերումը, այսպիսով կարևոր խնդիր է: Այս դասի բոլոր կառուցվածքների հիմնարար ուսումնասիրումը մեծ կարևորություն կունենա, քանի որ այն թույլ կտա փորձում ստացվող տարատեսակ կառուցվածքները հեշտությամբ ինդենտիֆիկացնել, ընտրել կոնկրետ կառուցվածքներ կախված կիրառությունից և կառավարել նյութերի սինթեզի պրոցեսը ցնակալի հատկություններով ֆազաներ ստանալու համար:

Ատենախոսությունը կազմված է ներածությունից, 5 գլուխներից, 310 անուն գրականության ցանկից և 2 հավելվածներից: Աշխատանքի ընդհանուր ծավալը առանց հավելվածների կազմում է 140 էջ և ներառում է 33 նկար և 3 աղյուսակ:

Ներածության մեջ հիմնավորված է թեմայի արդիականությունը, բերված է աշխատանքի նպատակները, ստացված արդյունքների գիտական նորույթը և կիրառական նշանակությունը, պաշտպանությանը ներկայացվող հիմնական դրույթները:

Առաջին գլուխը ներառում է համառոտ գիտական գրականության ակնարկ ատանախոսության թեմայի և օգտագործված մեթոդների վերաբերյալ: Սկզբում ներկայացված է ԱՄՔ-ների կարևոր և յուրահատուկ հատկությունները, դրանց կարևորությունը տեխնոլոգիայի և գիտության համար, հայտնի բյուրեղական կառուցվածքները, վերջերս բացահայտված նոր կառուցվածքները ու դրանց հատկությունները: Հաջորդիվ, հեղինակը ներկայացնում է ուսումնասիրության մեթոդները, բերում դրանց համառոտ նկարագրությունը և կիրառման նպատակահարմարության հիմնավորումը: Առաջին գլխի բովանդակությունից, ընթերցողը կարող է պատկերացում կազմել թեմայի արդիականության, առաջարկված գիտական խնդիրների կարևորության և կիրառված մեթոդների էության մասին:

Երկրորդ գլխում հեղինակը ներկայացնում է նոր կայուն կառուցվածքների որոնումը: Սկզբում ներկայացված է M_4X_4 և M_5X_2 ($M = Mo, W, X = S, Se$) նյութերի ֆոնոնային սպեկտրը, որի վերլուծությամբ հաստատվում է դրանց դինամիկական կայունությունը: Հաջորդ ենթագլխում Mo_5S_4 -ը և Mo_3S_4 -ը ներկայացված են, որպես նոր մետակայուն երկչափ նյութեր $Mo-S$ քիմիական համակարգում: $W-S$, $W-Se$ և $W-Te$ քիմիական համակարգերի ուսունասիրությունից գտնվել են W_3S_5 և W_5Te_2 կառուցվածքները: Երկրորդ գլխի վերջին ենթագլխում նկարագրվում է նոր երկչափ նյութերի որոնումը $V-S$ քիմիական համակարգում, որից որպես նոր կառուցված առաջարկված է V_3S_4 -ը:

Երրորդ գլխում հեղինակը ներկայացնում է M_2X_3 , M_4X_4 , և M_5X_2 ($M=Mo, W, X=S, Se$) ստոիխիոմետրիայով, 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: Սկզբում բերված է ուսումնասիրված նյութերի գոտիական կառուցվածքների դիագրամները, արգելված գոտու լայնությունները և դրանց վերլուծությունը: Ապա ներկայացված է էլեկտրական հաղորդականության, թերմոէլեկտրիկ հզորության և Ջեբեկի գործակիցների հաշվարկը Բոլցմանի կինետիկական հավասարման միջոցով: Վերջում ներկայացված է նաև օպտիկական կլանման և անդրադրածման սպեկտրերը:

Չորրորդ գլխում նկարագրված է $H-MX_2$, $T'-MX_2$, 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: Սկզբում համառոտ ներկայացվում է գազային տվիչների կարևորությունը, դրանց կարևոր հատկանիշները և նախկինում կատարված աշխատանքների վերլուծությունը: Ապա, գլխի հաջորդ մասերում ներկայացված են ադսորբցիայի էներգիայի, լիցերի փոխանակման, էլեկտրոնների տեղայնացման ֆունկցիայի, զգայնության և ընտորողականության հաշվարկների արդյունքները և դրանց վերլուծությունը: Պարզաաբանված է գազերի հետ փոխազդեցության հիմնական մեխանիզմը և առաջարկված է O_2 , NO և NO_2 գազերի համար բարձր ընտորողականությամբ օժտված զգայուն նյութեր:

Հինգերորդ գլխում բերված է ազոտական հիմքերի ադսորբցիայի հաշվարկները և դրանց արդյունքները: Սկզբում ամփոփ ներկայացված է ազոտական հիմքերի տվիչների կարևորությունը, դրանց կարևոր պարամետրերը և համառոտ վերլուծված

է առկա գրկանությունը: Հաջորդիվ ներկայացված է ադենինի, ցիտոզինի, գուանինի, թիմինի և ուրացիլի 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 մակերևույթին: Առաջարկված է $H-MoS_2$ -ի, $H-WS_2$ -ի և V_3S_4 -ի կիրառությունը զգայուն և ընտրողական ազոտական հիմքերի տվյալներ պատրաստելու համար:

Եզրակացությունում ամփոփված են աշխատանքում ստացված հիմնական, արդյունքները:

Այսպիսով, աշխատանքում համապարփակ և մանրամասնորեն ուսումնասիրվել են $Mo-S$, $W-S$, $W-Se$, $W-Te$, $V-S$ քիմիական համակարգերի կայուն երկչափ կառուցվածքները, դրանց էլեկտրական, օպտիկական և գազեր ու ազոտական հիմքեր զգալու հետ կապված մի շարք կարևոր հատկությունները: Այնուամենայնիվ, աշխատանքը զերծ չէ նաև թերություններից, որոնցից կնշեմ հետևյալները՝

1) Աշխատանքում ակտիվորեն կիրառվում է «կայունության ուռուցիկ կոր» (convex hull) հասկացությունը, որը որոշվում է USPEX ծրագրային ապահովման միջոցով գոյացման էնթալպիայի հաշվարկով: Ներկայացման համար օգտակար կլինի համառոտ նկարագրել USPEX-ի ալգորիթմի գործողության սկզբունքը և հատկապես ատենախոսության այն մասում, որտեղ նկարագրվում է էնթալպիայի հաշվարկը:

2) 3.3 բաժնում, որը նվիրված է հետազոտվող նյութերի ջերմաէլեկտրական հատկություններին, ցույց է տրված որ, ըստ հաշվարկների, W_3S_5 նոր նյութն ունի Ջեբեկի գործակցի բարձր արժեք: Նման վարքագծի պատճառների և/կամ մեխանիզմների որակական գնահատումն ակնհայտորեն կգեղեցկացնեք աշխատանքը:

3) 5-րդ գլխում, որտեղ դիտարկվում է ազոտական հիմքերի ադսորբցիան երկչափ նյութերի մակերևույթի վրա, պարզ չէ, թե կոնկրետ ինչպես են տրվել ազոտական հիմքերի սկզբնական դիրքերը մակերևույթի նկատմամբ: Ազոտական հիմքերը հարթ միացություններ են, և դրանց սկզբնական կողմնորոշումը մակերևույթի նկատմամբ կարող է կարևոր նշանակություն ունենալ:

Նշված թերությունները, սակայն, ամենևին չեն նսեմացնում կատարված ծավալուն գիտական աշխատանքի արժեքը և նշանակությունը:

Աշխատանքը արդիական է, ունի բարձր գիտական ու կիրառական նշանակություն, կատարված է հուսալի ու ճշգրիտ մեթոդներով: Ստացված արդյունքները հիմնավորված են և դրանց հավաստիությունը կասկած չի հարուցում:

Ատենախոսության հիմնական արդյունքները տպագրված են միջազգային գիտական ամսագրերի («Applied Surface Science», «Nanomaterials», «JETP Letters», «Journal of Contemporary Physics (Armenian Academy of Sciences)») 5 գիտական հոդվածներում:

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

Գտնում եմ, որ ներկայացված ատենախոսությունը ավարտուն գիտահետազոտական աշխատանք է և զգալի ներդրում երկչափ նյութերի ֆիզիկայի բնագավառում: Աշխատանքը բավարարում է ֆիզիկամաթեմատիկական գիտությունների թեկնածուական ատենախոսությանը ներկայացվող պահանջներին, իսկ ատենախոսության հեղինակ Մ. Աղամալյանը արժանի է Ա.04.10 – «Կիսահաղորդիչների ֆիզիկա» մասնագիտությամբ ֆիզիկամաթեմատիկական գիտությունների թեկնածուի գիտական աստիճանի շնորհման:

17.06.2022

Պաշտոնական ընդդիմախոս՝
Ֆ.մ.գ.թ., դոցենտ

Դ.Բ. Հայրապետյան

Դ.Բ. Հայրապետյանի ստորագրությունը հաստատում եմ,



Հայ-ռուսական համալսարանի
գիտական քարտուղար՝

Ռ.Ս. Կասաբաբովա