

ՊԱՇՏՈՆԱԿԱՆ ԸՆԴԴԻՄԱՆՈՍԻ ԿԱՐԾԻՔ

Արեգ Աշոտի Հունանյանի՝ «Նոր երկչափ անագի օքսիդների հաշվարկային որոնումը և դրանց կիրառությունը կիսահաղորդչային գազային սենսորներում» թեմայով Ա.04.10 - «Կիսահաղորդիչների ֆիզիկա» մասնագիտությամբ ֆիզիկամաթեմատիկական գիտությունների թեկնածուի գիտական աստիճանի հայցման ատենախոսության վերաբերյալ:

Ժամանակակից արագ զարգացող աշխարհում սենսորային տեխնոլոգիան մեծ դեր և պահանջարկ ունի: Կան տարբեր տեսակի սենսորներ, որոնցից ամենամեծ հետաքրքրություն առաջացնում են քիմիական սենսորները, որոնք հնարավորություն են տալիս որոշել շրջակա միջավայրի նյութերի քիմիական բաղադրությունը: Գազային սենսորները՝ քիմիական սենսորների տեսակ են, որոնցում գրանցվող նյութերը գազերն են: Այդպիսի սենսորները հիմնականում ռեզիստիվ են: Որպես զգայուն նյութ այդ սենսորներում ամենից լայն կիրառությունն ունեն կիսահաղորդչային մետաղօքսիդները, օրինակ՝ SnO_2 , TiO_2 , ZnO և այլն: Նշված նյութերից, մասնավորապես, անագի երկօքսիդը լայնորեն կիրառվում է ջրածնի պերօքսիդի գրանցման համար: Ջրածնի պերօքսիդի գազի մոլեկուլների գրանցումը կարևոր է կենսավերլուծության, սննդի անվտանգության, շրջակա միջավայրի մոնիթորինգի և այլ խնդիրների համար: Ջրածնի պերօքսիդի գրանցման համար կորալտով լեգիրված անագի երկօքսիդից պատրաստված գազային սենսորները ցույց են տալիս բարձր զգայունություն և սելեկտիվություն, սակայն այդպիսի սենսորներում ջրածնի պերօքսիդի ադսորբցիայի մեխանիզմները մինչ այժմ ուսումնասիրված չեն եղել: Սենսորները կատարելագործելու համար անհրաժեշտ է լավացնել զգայունությունը, ընտրողունակությունը, ընկալման ժամանակը: Այդ նպատակներին հասնելու համար որպես զգայուն նյութ կարելի է օգտագործել երկչափ անագի օքսիդները, սակայն այդ նյութերը դեռևս բավարար չափով ուսումնասիրված չեն: Երկչափ անագի օքսիդների համակարգում նոր կառուցվածքների ուսումնասիրությունը արդիական խնդիր է: Նշված խնդիրները լուծվել են Ա.

Հունանյանի՝ «Նոր երկչափ անագի օքսիդների հաշվարկային որոնումը և դրանց կիրառությունը կիսահաղորդչային գազային սենսորներում» ատենախոսությունում, որտեղ տեսականորեն՝ առաջնային սկզբունքներով (ab-initio) հաշվարկների միջոցով ուսումնասիրվել են ադսորբցիայի պրոցեսները և իրականացվել է նոր երկչափ անագի օքսիդների հաշվարկային որոնումը: Այդ իսկ առումով, Ա. Հունանյանի ատենախոսության թեմայի արդիականությունը կասկած չի առաջացնում:

Ա. Հունանյանի ատենախոսությունը ունի հետևյալ կառուցվածքը

Ատենախոսությունը կազմված է ներածությունից, երեք գլուխներից, որոնցում ամփոփված են աշխատանքի ընթացքում ստացված արդյունքները, եզրակացությունից, հրապարակումների և գրականության ցանկերից:

Ներածությունում ներկայացված են թեմայի արդիականությունը, աշխատանքի նպատակը և լուծված խնդիրները: Ներկայացված է արդյունքների գիտական նորույթը և գործնական արժեքը: Գլխի վերջում տրված են պաշտպանության ներկայացվող հիմնական դրույթները:

Առաջին գլխում տրվել են ատենախոսության մեջ կիրառված տեսական մեթոդները: Ներկայացվել է ռեզիստիվ գազային սենսորների աշխատանքի մեխանիզմը և բնութագրիչ պարամետրերը: Ներկայացվել է նոր երկչափ կառուցվածքների որոնման հաշվարկային մեթոդը և խնդիրների լուծման համար օգտագործված հաշվարկային գործիքները: Գլխի վերջում տրվել է ատենախոսության շրջանակում քննարկված խնդիրների ձևակերպումները:

Երկրորդ գլուխը նվիրված է կոբալտով լեգիրված անագի երկօքսիդի կառուցվածքի, և ջրածնի պերօքսիդի՝ մաքուր և կոբալտով լեգիրված անագի երկօքսիդի մակերևույթների վրա ադսորբցիայի հաշվարկներին: Ցույց է տրվել, որ լեգիրման դեպքում կոբալտը անագի հանգույցի դիրքում է, իսկ թթվածնի վականսիաները բացակայում են: Ադսորբցիայի հաշվարկները ցույց են տալիս, որ կոբալտով լեգիրված անագի երկօքսիդի դեպքում ադսորբցիան էներգետիկ

տեսանկյունից առավել շահավետ է, իսկ մոլեկուլի տարրալուծման մեխանիզմները մաքուր և լեգիրված անագի երկօքսիդի մակերևույթների վրա տարբերվում են:

Երրորդ գլխում կատարվել է երկչափ անագի երկօքսիդների հաշվարկային որոնումը և կայունության վերլուծությունը: Հաշվարկի արդյունքում ստացվել է նոր կայուն Sn_2O_3 կառուցվածքը: Ստացված նյութերի համար որոշվել են գոտիական կառուցվածքները և հետազոտվել օպտիկական հատկությունները: Ցույց է տրվել, որ Sn_2O_3 -ը 3.92 էՎ արգելված գոտու լայնությամբ, ոչ ուղիղ գոտիական կառուցվածքով կիսահաղորդիչ է: Տակդիր – միաշերտ կառուցվածք փոխազդեցության հաշվարկների արդյունքում ցույց է տրվել, որ Sn_2O_3 -ի աճեցման համար կարելի է օգտագործել վեցանկյուն բորի նիտրիդը:

Չորրորդ գլխում խտության ֆունկցիոնալի միջոցով ուսումնասիրվել են CO , CO_2 , NO , NO_2 , O_2 , H_2O և H_2O_2 մոլեկուլների ադսորբցիաները երկչափ SnO -ի, SnO_2 -ի և Sn_2O_3 -ի վրա: Ցույց է տրվել, որ ադսորբցիաները երկչափ SnO -ի և SnO_2 -ի վրա ֆիզիկական են (Վան դեր Վալսյան կապեր): Երկչափ Sn_2O_3 -ի վրա միայն ջրածնի պերօքսիդի դեպքում է ադսորբցիան քիմիական ստացվել: Ցույց է տրվել, որ այդ դեպքում ադսորբցիան էներգետիկ առումով առավել շահավետ է քան ադսորբցիան մաքուր ծավալային անագի երկօքսիդի վրա:

Եզրակացությունում ամփոփված են աշխատանքում ստացված արդյունքները:

Ատենախուսության շրջանակում ստացված արդյունքները կիրառելի են ծավալային անագի երկօքսիդի հիմնան վրա պատրաստված ջրածնի պերօքսիդի գազային սենսորներում՝ ադսորբցիայի մեխանիզմների նկարագրության համար: Որպես ջրածնի պերօքսիդի գազային սենսոր առաջարկվել է երկչափ անագի օքսիդի նոր կառուցվածք: Աշխատանքում ստացված կարևոր արդյունքներից կցանկանայի նշել հետևյալները՝

1. Ցույց է տրվել, որ կոբալտով լեգիրացված անագի երկօքսիդի մակերևույթի վրա ջրածնի պերօքսիդի ադսորբցիան էներգիապես առավել շահավետ է,

քան աղսորբցիան մաքուր անագի երկօքսիդի վրա, իսկ մոլեկուլի տարրալուծման մեխանիզմները տարբերվում են:

2. Նոր երկչափ անագի օքսիդների որոնման արդյունքում հայտնաբերել է նոր կայուն Sn_2O_3 -ը, որը 3,92 էՎ ոչ ուղիղ արգելված գոտով կիսահաղորդիչ է, որի աճեցման համար որպես տակդիր կարող է օգտագործվել վեցանկյուն բորի նիտրիդը:
3. Նոր երկչափ Sn_2O_3 -ը խոստումնալից կառուցվածք է, որը կարող է օգտագործվել ջրածնի պերօքսիդի գազային սենսորներում, որպես զգայուն նյութ:

Դրա հետ մեկտեղ կցանկանայի նշել ատենախոսությունում տեղ գտած որոշ թերություններ, որոնց շտկումը կբարելավեր աշխատանքի ընդհանուր ընկալումը:

1. Ցանկալի կլիներ լուսաբանել պատճառները այն հանգամանքի, որ Հարթրի-Ֆոկի և խտության ֆունկցիոնալի տեսության մեթոդների դեպքում գոտիական կառուցվածքների համար փորձարարական արդյունքներից տարբերվող արդյունքներ են ստացվում: Դա հավանաբար պայմանավորված է բազիսային ալիքային ֆունկցիաների ընտրությամբ:
2. Կորալտով լեզիրված անագի երկօքսիդի կառուցվածքը և ջրածնի պերօքսիդի աղսորբցիան կորալտով լեզիրված անագի երկօքսիդի մակերևույթի վրա կարելի է ուսումնասիրեն կորալտի 4%-ից բարձր և ցածր կոնցենտրացիաների դեպքում:
3. Ցանկալի կլիներ բացատրել, թե ինչպես է ֆոնոնային դիսպերսիայի օրինաչափություններից որոշվում կայուն կոնֆիգուրացիան ցանցի տատանումների նկատմամբ:

4. Ցանկալի կլինեք ավելի մանրամասն բացատրել քվազիհարմոնիկ մոտարկման դեպքում ինչպես է որոշվում ջերմային ընդարձակման գործակիցը:

Նշված դիտողությունները, սակայն, ամենևին չեն նսեմացնում աշխատանքը: Կատարված աշխատանքի արդյունքում ստացված և ատենախոսությունում ներկայացված արդյունքների հավաստիությունը կասկած չի հարուցում և ընդլայնում է մեր գիտելիքները տվյալ ոլորտում:

Ա. Հունանյանի ատենախոսության սեղմագիրը ճիշտ է արտացոլում աշխատանքի բովանդակությունը: Աշխատանքները տպագրված են հեղինակավոր միջազգային և տեղական ամսագրերում:

Ելնելով վերը ասվածից գտնում եմ, որ Արեգ Հունանյանի «Նոր երկչափ անագի օքսիդների հաշվարկային որոնումը և դրանց կիրառությունը կիսահաղորդչային գազային սենսորներում» թեմայով ատենախոսությունը ավարտուն աշխատանք է: Ատենախոսությունը համապատասխանում է ԲՈԿ-ի կողմից թեկնածուական ատենախոսությանը ներկայացվող բոլոր պահանջներին, իսկ հեղինակը արժանի է Ա.04.10 -«Կիսահաղորդիչների ֆիզիկա» մասնագիտությամբ ֆիզ.-մաթ. գիտությունների թեկնածուի գիտական աստիճանի շնորհմանը:

Ֆիզ. մաթ. գիտ. դոկտոր, պրոֆեսոր՝

Հ.Ա. Մարգարյան

**ՀՈՆ Ինժեներաֆիզիկական
ինստիտուտի տնօրեն, պրոֆեսոր
Հ.Ա. Մարգարյանի ստորագրությունը հաստատում եմ
ՀՈՆ գիտ. քարտուղար, Բ.Գ.Թ., դոցենտ**



Ռ.Ս. Կասաբաբովա

2022թ. հունիսի 12