

# Айк Ашот Захарян

✉ hayk.zakaryan@ysu.am



Научно-исследовательский институт физики  
Հաշվարկային նյութագիտության լաբորատորիա  
Заведующий лабораторией

## 🎓 Образование

Учреждение	Ереванский Государственный Университет
Факультет	Радиофизика
Дата	2014 - 2017
Степень / Звание	Аспирант

Учреждение	Ереванский Государственный Университет
Факультет	Радиофизика
Дата	2012 - 2014
Степень / Звание	Магистр

Учреждение	Ереванский Государственный Университет
Факультет	Радиофизика
Дата	2008 - 2012
Степень / Звание	Бакалавр

## 🎓 Ученое звание/Ученая степень

Учреждение	Ереванский Государственный Университет
Дата	2017
Степень / Звание	Кандидат наук
Специальность	Физико-математические науки
Научный руководитель	Владимир Арутюнян
Научная тема	Исследование адсорбции газов на поверхности диоксида олова с помощью теории функционала плотности

## 🌐 Знание языков

Հայերեն English Русский

## 📖 Публикации

### Статья

#### Material hardness descriptor derived by symbolic regression

Hayk A. Zakaryan, Christian Tantardini, Zhong-Kang Han, Tariq Altalhi, Sergey V. Levchenko,

*Статья*

**Gas sensing properties of two dimensional tin oxides: A DFT study**  
Areg Hunanyan, Nane Petrosyan, Hayk Zakaryan

Applied Surface Science 2024 160814

---

*Статья*

**Computational Search and Stability Analysis of Two-Dimensional Tin Oxides**  
Areg A. Hunanyan, Vladimir M. Aroutiounian, Hayk A. Zakaryan

Journal of Physical Chemistry C 2022 4647-4654

---

*Статья*

**Computational Design of Gas Sensors Based on V3S4 Monolayer**  
Hayk A. Zakaryan, Misha A. Aghamalyan, Yevgeni Sh. Mamasakhlisov, Ilya V. Chepkasov,  
Ekaterina V. Sukhanova, Alexander G. Kvashnin, Anton M. Manakhov, Zakhar I Popov,  
Dmitry G. Kvashnin  
Nanomaterials 2022 774

---

*Статья*

**2D-Mo3S4 phase as promising contact for MoS2**  
H.A. Zakaryan, M.A. Aghamalyan, E.V. Sukhanova, A.G. Kvashnin, L.A. Bereznikova, D.G. Kvashnin,  
Z.I. Popov  
Applied Surface Science 2022 152971

---

*Статья*

**Adsorption of Hydrogen Peroxide on Two-Dimensional Transition Metal Chalcogenides**  
M. A. Aghamalyan, V. M. Aroutiounian, E. S. Mamasakhlisov, E. V. Sukhanova, A. G. Kvashnin, Z. I. Popov,  
A. A. Zakaryan  
Journal of Contemporary Physics (Armenian Academy of Sciences) 2022 170-173

---

*Статья*

**Map of Two-Dimensional Tungsten Chalcogenide Compounds (W-S, W-Se, W-Te) Based on USPEX Evolutionary Search**  
E. V. Sukhanova, A. G. Kvashnin, M. A. Agamalyan, H. A. Zakaryan, Z. I. Popov  
JETP Letters 2022 292-296

---

*Статья*

**Computational Search and Stability Analysis of Two-Dimensional Tin Oxides**  
Areg A. Hunanyan, Hayk A. Zakaryan, Vladimir M. Aroutiounian  
Journal of Physical Chemistry C 2022 4647-4654

---

*Статья*

**Influence of UV Rays on the Volt-Capacity Characteristic of SnO<sub>2</sub>:Co Sensor of Vapors of Hydrogen Peroxide**  
M. S. Aleksanyan, A. G. Sayunts, A. A. Zakaryan, V. M. Aroutiounian, V. M. Arakelyan, G. E. Shakhnazary  
Journal of Contemporary Physics (Armenian Academy of Sciences) 2020 151-156

---

**Статья**

**Investigations of Sensors for Detection of Hydrogen Peroxide Vapors under the Influence of UV Illumination**

M. S. Aleksanyan, A. G. Sayunts, A. A. Zakaryan, V. M. Harutyunyan, V. M. Arakelyan,

G. E. Shahnazaryan

Journal of Contemporary Physics (Armenian Academy of Sciences) 2020 205-212

---

**Статья**

**First-Principles Study of the Interaction of H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> with the SnO<sub>2</sub> (110) Surface**

M. A. Aghamalyan, A. A. Hunanyan, V. M. Aroutiounian, M. S. Aleksanyan, A. G. Sayunts, H. A. Zakaryan

Journal of Contemporary Physics (Armenian Academy of Sciences) 2020 235-239

---

**Статья**

**Computational Search for New W–Mo–B Compounds**

Hayk A. Zakaryan, Alexander G. Kvashnin, Christian Tantardini, Yulia A. Kvashnina, Artem R. Oganov

Chemistry of Materials 2020 7028-7035

---

**Статья**

**ВЛИЯНИЕ УЛЬТРАФИОЛЕТОВЫХ ЛУЧЕЙ НА ВОЛЬТ- ЕМКОСТНУЮ ХАРАКТЕРИСТИКУ**

**SnO<sub>2</sub>:Co СЕНСОРА ПАРОВ ПЕРЕКИСИ ВОДОРОДА**

М.С. АЛЕКСАНЯН, А.Г. САЮНЦ, А.А. ЗАКАРЯН, В.М. АРУТЮНЯН, В.М. АРАКЕЛЯН, Г.Э. ШАХНАЗАРЯН

Известия НАН РА. Физика (Journal of Contemporary Physics (Armenian Academy of Sciences) 2020

218-227

---

**Статья**

**ИССЛЕДОВАНИЕ СЕНСОРА ДЛЯ ОБНАРУЖЕНИЯ ПАРОВ ПЕРЕКИСИ ВОДОРОДА ПОД**

**ДЕЙСТВИЕМ УЛЬТРАФИОЛЕТОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ**

М.С. АЛЕКСАНЯН, А.Г. САЮНЦ, А.А. ЗАКАРЯН, В.М. АРУТЮНЯН, В.М. АРАКЕЛЯН, Г.Э. ШАХНАЗАРЯН

Известия НАН РА. Физика (Journal of Contemporary Physics (Armenian Academy of Sciences) 2020

312-324

---

**Статья**

**Effects of UV Irradiation on the Sensing Properties of Co-doped SnO<sub>2</sub> Thin Film for Ethanol**

**Detection**

Mikayel Aleksanyan, Artak Sayunts, Hayk Zakaryan, Vladimir Aroutiounian, Gohar Shahnazaryan,

Valeri Arakelyan

International Journal on Advances in Systems and Measurements 2020 312-321

---

**Статья**

**Stable and hard hafnium borides: A first-principles study**

Congwei Xie, Qi Zhang, Hayk A. Zakaryan, Hao Wan, Ning Liu, Alexander G. Kvashni, Artem R.Oganov

Journal of Applied Physics 2019 205109(1-9)

---

**Статья**

**Formation Energy of Intrinsic and Impurity Defects in Tin Dioxide**

A. A. Hunanyan, M. A. Aghamalyan, V. M. Aroutiounian, H. A. Zakaryan

Journal of Contemporary Physics (Armenian Academy of Sciences) 2019 282-286

---

**Статья**

**New Tungsten Borides, their Stability and Outstanding Mechanical Properties**

Hayk A. Zakaryan, Alexander G. Kvashnin, Changming Zhao, Yifeng Duan, Yulia A. Kvashnina,  
Congwei Xie, Huafeng Dong, Artem R Oganov  
Journal of Physical Chemistry Letters 2018 3470-3477

---

Статья

**CO gas adsorption on SnO<sub>2</sub> surfaces: density functional theory study**

Hayk Zakaryan, Vladimir Aroutiounian

Sensors & Transducers 2017 50-56

<http://www.sensorsportal.com/HTML/DIGEST/Submission.htm>

---

Статья

**Исследование структуры и дефектов легированного кобальтом диоксида олова: теория функциональной плотности и эмпирические силовые потенциалы**

А. А. Закарян, В. М. Арутюнян

Известия НАН РА. Физика (Journal of Contemporary Physics (Armenian Academy of Sciences) 2017

312-320

<http://www.flib.sci.am/eng/Fizika/Frame.html>

---

Статья

**Adsorption of CO gas molecules on SnO<sub>2</sub> surface**

V.M. Aroutiounian, H.A. Zakaryan

International Scientific Journal for Alternative Energy and Ecology 2017 91-99

---

Статья

**ADSORPTION OF CO MOLECULES ON SNO 2 (110), (100), (101), (001) SURFACE ORIENTATIONS: DENSITY FUNCTIONAL THEORY STUDY**

H. Zakaryan

SEMICONDUCTOR MICRO- AND NANOELECTRONICS. PROCEEDINGS OF THE ELEVENTH INTERNATIONAL CONFERENCE

2017 88-91

<http://icsmn.yusu.am/11th%20ICSMN-Proceedings.pdf>

---

Статья

**Stable reconstruction of the (110) surface and its role in pseudocapacitance of rutile-like RuO<sub>2</sub>**

Hayk A. Zakaryan, Alexander G. Kvashnin, Artem R. Oganov

Scientific Reports 2017 1 - 9

<https://www.nature.com/articles/s41598-017-10331-z>

---

Статья

**Adsorption of the H and H<sub>2</sub>O on SnO<sub>2</sub> Surfaces in an O<sub>2</sub> Environment: Density Functional Theory Study**

H. Zakaryan

Armenian Journal of Physics 2016 283-293

<http://ajp.asj-oa.am/>

---

Статья

**Влияние влажности на запрещенную зону графена**

А.А.Закарян, В.М. Арутюнян

**Конференция**

**Ab initio investigation of CO gas sensing mechanism on SnO<sub>2</sub> surfaces**

H. A. Zakaryan, V. M. Aroutiounian

---

**Конференция**

**Cobalt impurity in thin dioxide and its influence in hydrogen sensors**

H. Zakaryan, V. Aroutiounian, M. Aghamalyan

---

**Конференция**

**UV-assisted Chemiresistive Alcohol Sensor Based on Cobalt Doped Tin Dioxide**

Mikayel Aleksanyan, Artak Sayunts, Hayk Zakaryan, Vladimir Aroutiounian, Valeri Arakelyan,

Gohar Shahnazaryan

---