



Հաստատում եմ
ՀՀ ԳԱԱ Ֆիզիկական հետազոտությունների
ինստիտուտի տնօրեն, ՀՀ ԳԱԱ թղթակից անդամ,
ֆիզ.մաթ. գիտ. դոկտոր
Ա.Վ. Պապոյան _____
«17» օգոստոսի 2020 թ.

ԱՌԱՋԱՏԱՐ ԿԱԶՄԱԿԵՐՊՈՒԹՅԱՆ ԿԱՐԾԻՔ

Ալեքսանդր Եվգենիի Մամասախիսովի «Մետաղների և կիսահաղորդիչների նանոմասնիկների փոխազդեցությունը կենսաբանական մակրոմոլեկուլների հետ լուծույթում» թեմայով Ա.04.10 - «Կիսահաղորդիչների ֆիզիկա» մասնագիտությամբ ֆիզիկամաթեմատիկական գիտությունների թեկնածուի գիտական աստիճանի հայցման համար ներկայացված ատենախոսության վերաբերյալ

Ժամանակակից գիտատար տեխնոլոգիաների զարգացումը պահանջում է տարբեր գիտությունների եզրագծին իրականացվող գիտական հետազոտություններ: Դա լիովին վերաբերվում է նաև կենսաբժշկական խնդիրների լուծմանը, որտեղ նոր ֆունկցիոնալ հնարավորությունների ստացումը հաճախ պահանջում է բազմաբնույթ ֆիզիկական երևույթների և մոտեցումների ներգրավում:

Վերջին տարիներին արագ զարգացում է ստացել մետաղական և կիսահաղորդիչ նանոմասնիկների և նանոկառուցվածքների կիրառումը կենսաբժշկական խնդիրների լուծման համար՝ ներառյալ ախտորոշման և բուժման նոր եղանակների մշակումը: Այդ առումով, շնորհիվ յուրօրինակ օպտիկական և էլեկտրական բնութագրերի, հեռանկարային են կիսահաղորդչային քվանտային կետերը, որոնք փոխազդեցությամբ կապակցված են մակրոմոլեկուլների համակարգի հետ: Մասնավորապես, արդիական է ԴՆԹ զգայակների (սենսորների) մշակման խնդիրը, որում նանոկառուցվածքների կիրառումը կարող է բերել զգայունության և արդյունավետության բարձրացման:

Ա. Մամասախիսովի ատենախոսական աշխատանքը նվիրված է ֆոտոէլեկտրաքիմիական ԴՆԹ սենսորների զգայունության բարելավումն ապահովող տեսական մոտեցումների մշակմանը: Աշխատանքի հիմնական նպատակն է ուսումնասիրել ԴՆԹ - քվանտային կետ միաշերտ կոմպլեքսների էլեկտրոնային,

կառուցվածքային և դինամիկ հատկությունները ԴՆԹ սենսորների էլեկտրոդային մակերևույթի վրա՝ էլեկտրոլիտային լուծույթում փոխկապակցող լիգանդների առկայության դեպքում: Այս նպատակին հասնելու համար անհրաժեշտ է ԴՆԹ-սենսորների էլեկտրոդների մակերևույթի վրա հաղորդականության և հիբրիդացման գործընթացների վրա ազդող գործոնների, ինչպես նաև հետազոտվող նմուշում տեղի ունեցող գործընթացների հետ դրանց կապի նույնականացումն ու բացահայտումը: Այս առումով անհրաժեշտ է որոշել էլեկտրոլիտ-պինդ մարմին ինտերֆեյսի վրա ԴՆԹ-քվանտային կետ կոմպլեքսների հաղորդականությունը կարգավորող հիմնական օրենքները, ինչպես նաև ԴՆԹ սենսորի մակերևույթի վրա զգայուն շերտի ձևավորման թերմոդինամիկական և կինետիկ օրինաչափությունները: Այս գործոններից մեկն է՝ ցածր մոլեկուլային քաշի միացությունների (լիգանդների) ազդեցությունը նուկլեյնաթթվի հիբրիդացման էլեկտրաքիմիական հատկությունների, ջերմոդինամիկայի և կինետիկայի վրա, ինչը նշանակալի պրակտիկ հետաքրքրություն է առաջացնում և օգնում է որոշել նման սարքերի համար օպտիմալ գործունեության պայմանները: Ելնելով վերը նշվածից, այս աշխատանքի արդիականությունը պայմանավորված է ցածր մոլեկուլային միացությունների ազդեցության ուսումնասիրման նոր մոտեցումների մշակման հետ՝ հիմնված ուսումնասիրվող նմուշում ԴՆԹ-ի թիրախային մոլեկուլների հայտնվելու դեպքում ԴՆԹ-սենսորի էլեկտրոլիտ - էլեկտրոդ ինտերֆեյսի վրա ԴՆԹ - քվանտային կետ կոմպլեքսների զգայուն շերտի հաղորդունակության փոփոխության վրա:

Ատենախոսությունը շարադրված է 105 էջի վրա և պարունակում է 29 նկար: Այն բաղկացած է ներածությունից, չորս գլուխներից, եզրակացությունից և գրականության ցանկից՝ 120 վերնագրով:

Ատենախոսության ներածության մեջ հիմնավորված է աշխատանքի արդիականությունն ու գիտական նորույթը, ներկայացված է նպատակը, ինչպես նաև ստացված արդյունքների գիտական և գործնական արժեքը: Հստակ ձևակերպված են պաշտպանության ներկայացվող հիմնական դրույթները:

Առաջին գլուխն ունի ակնարկային բնույթ, և պարունակում է այն հիմնական հասկացություններն ու մեթոդները, որոնք հետագայում օգտագործվում են թեզում: Մասնավորապես, այն ներառում է նուկլեինաթթուներով նանոմասնիկների տարբեր կոմպլեքսների հատկությունների վերլուծումը, ինչպես նաև նուկլեինաթթուների և դրանց կոմպլեքսների կառուցվածքային, թերմոդինամիկական և այլ հատկությունների նկարագրությանը՝ ցածր մոլեկուլային զանգվածով միացությունների (լիգանդների) ներկայությամբ: Պարփակ ակնարկի ձևով անդրադարձ է կատարված ատենախոսության թեմային մոտ ուղղություններով իրականացված տեսական և փորձարարական ուսումնասիրություններին:

Ատենախոսության երկրորդ գլխում ներկայացված են ինտերկալացնող լիգանդների առկայությամբ ԴՆԹ - քվանտային կետեր կոմպլեքսների միաշերտի հաղորդականության հետազոտությունների մոտեցումներն ու արդյունքները: Դիտարկված է ֆոտոէլեկտրաքիմիական հայտնաբերման եղանակը, որում որպես ֆոտոակտիվ տարրեր օգտագործվում են քվանտային կետերը՝ իրենց յուրօրինակ ֆոտոէլեկտրական հատկություններով:

Դիտարկված մոդելում ԴՆԹ-սենսորի զգայուն շերտը ձևավորված է էլեկտրոդի մակերևույթին ամրացված միաշղթա և երկշղթա ԴՆԹ-երով՝ համապատասխանաբար

մեծ և փոքր էլեկտրական դիմադրությամբ: Երկշղթա ԴՆԹ-երին կցված են որոշ քանակությամբ ինտերկալացնող լիզանդներ՝ հարթ կառուցվածքով հետերոցիկլային մոլեկուլներ, որոնք նպաստում են ԴՆԹ-սենսորի զգայուն շերտում ֆոտոհոսանքի ուժեղացմանը: Որպես թիրախներ դիտարկվել են միաշղթա ԴՆԹ-եր՝ կապակցված քվանտային կետերով (օրինակ՝ CdS): Էլեկտրամագնիսական ճառագայթումը բերում է քվանտային կետերի ֆոտոգրգռման, և առաջացած ազատ լիցքակիրները (էլեկտրոն-խոռոչ զույգերը) տարածվում են միաշերտով: Թիրախ ԴՆԹ-ի կոնցենտրացիան լուծույթում որոշվում է մոնոշերտի ֆոտոհոսանքը չափելով: ԴՆԹ-ով լիցքի տեղափոխումը նկարագրվում է խիտ π -սթեկինգով հիմքեր պարունակող դելոկալիզացված հատվածների միջը բազմակի, մասնակի կոհերենտ թռիչքներով:

Հաշվարկված են միավալենտ դրական լիցքավորված և չլիցքավորված լիզանդների դեպքերում հիբրիդացման իզոթերմերը և համակարգի աշխատանքը նկարագրող այլ կարևոր կախումները: Հաշվարկված է քվանտային կետերով ԴՆԹ-զոնդեր – թիրախներ համալիրների դիմադրությունը, հաշվի առնելով լիզանդների կլանումը ԴՆԹ-ի երկթել հատվածների վրա: Ցույց է տրված, որ էլեկտրամագնիսական ճառագայթահարման դեպքում միաշերտի դիմադրությունը նվազում է լուծույթում ԴՆԹ-ի թիրախների կոնցենտրացիայի մեծացման հետ: Միառժամանակ դիմադրությունը նույնպես կախված է լուծույթում գտնվող փոխկապակցված դրական լիցքավորված լիզանդների քանակից, և նվազում է մոնոպոլիենտային լիզանդների դեպքում՝ էլեկտրականորեն չեզոքների համեմատությամբ:

Ատենախոսության երրորդ գլուխը նվիրված է դուպլեքս ԴՆԹ-ի կայունության և ԴՆԹ – լիզանդ կոմպլեքսներում կարգավորված վիճակից ոչ կարգավորվածի անցման դեպքում ֆլուկտուացիոն վարքի ուսումնասիրությանը: Ինտերկալատոր-լիզանդների ազդեցությունը հաշվի առնելու համար հաշվարկված են պարուրության աստիճանը և կորելյացիոն երկարությունը, որը համակարգում ֆլուկտուացիաները նկարագրող հիմնական բնութագիրն է: Ուսումնասիրվել է լիզանդներին կապակցման պայմաններում ԴՆԹ-ի կրկնակի պարույրի կառուցվածքի կայունացման մեխանիզմը և վերլուծվել է սառնային և ջերմային դենատուրացման մեջ միաթել և երկթել ձևերի միջև կապերի վերաբաշխման դերը: Հաշվարկվել են ԴՆԹ-ի դենատուրացիայի կորերը, ուսումնասիրվել են ԴՆԹ-ի մի շարք ֆլուկտուացիոն հատկություններ: Դիտարկվել է ԴՆԹ-ի կրկնակի պարույրի ֆլուկտուացիոն հատկությունների ազդեցությունը դրա էլեկտրոնային հատկությունների և, մասնավորապես, շղթայի երկայնքով տարածվող էլեկտրոնային գրգռման դելոկալիզացման վրա: Խնդիրը լուծված է կիսադասական համիլթոնյանի շրջանակներում, որտեղ ԴՆԹ-ի ազատության մեխանիկական աստիճանները դիտարկված են որպես դասական, իսկ էլեկտրոնայինները՝ որպես քվանտային, սերտ զուգակցման մոտարկման շրջանակներում:

Ստացված են հաշվարկային կորեր, մասնավորապես՝ մաքուր ԴՆԹ-ի և ԴՆԹ-լիզանդ կոմպլեքսի դենատուրացման աստիճանի ջերմաստիճանային կախման, պարույրի աճի պարամետրից լիզանդների կոնցենտրացիայի կախման, ինչպես նաև ջերմաստիճանից ԴՆԹ-լիզանդ կոմպլեքսի կորելյացիոն երկարության կախման, որում ստացված է երկգագաթ պատկեր՝ նկարագրող սառնային և ջերմային դենատուրացման ռեժիմները:

Ատենախոսության չորրորդ գլուխը նվիրված է ԴՆԹ-ի հատվածների հիբրիդացման կինետիկայի, ինչպես նաև ադսորբցիայի ուսումնասիրմանը՝ կախված հավասարակշռության և ռելաքսացիոն բնութագրերից: Դիտարկված է ԴՆԹ-սենսորի

մակերևույթի վրա ԴՆԹ հիբրիդացման կինետիկան՝ երկթել ԴՆԹ-ի վրա ադսորբացված ինտերկալացնող լիզանդների առկայությամբ: ԴՆԹ զոնդերի և ԴՆԹ թիրախների հիբրիդացումը և ԴՆԹ-ի կրկնակի շղթայում գտնվող լիզանդների կլանումը դիտարկվել են որպես քվազիքիմիական ռեակցիաներ, և համակարգի վարքը նկարագրվել է քիմիական կինետիկայի հավասարումներով: Հաշվարկված են ԴՆԹ-ի զոնդերի հիբրիդացման աստիճանի և ԴՆԹ-ի լրացման աստիճանի կախվածությունները ժամանակից: Վերլուծված է ստացված օրինաչափությունների վարքը՝ կախված խնդրի այնպիսի կարևոր պարամետրերից, ինչպիսիք են, մասնավորապես, լիզանդների հիբրիդացման և կլանման բնութագրական ռելաքսացման ժամանակները և ԴՆԹ-ի կրկնակի պարույրից լիզանդների արտազատման գործակիցը:

Վերլուծված և հաշվարկված է ԴՆԹ դուպլեքսների ձևավորման և դրանց լիզանդներով հագեցվածության ժամանակային դինամիկան՝ խնդրի տարբեր պարամետրերի դեպքում: Ցույց է տրված և բացատրված է, որ կախված լիզանդի դիսոցիացման հաստատունի և ԴՆԹ դուպլեքսի տրոհման հաստատունի հարաբերակցությունից, իրականանում է դուպլեքս ԴՆԹ-ի լիզանդներով հագեցվածության աստիճանի ժամանակային կախվածության և կայունացված արժեքի երկու՝ որակապես տարբեր սցենար:

Աշխատանքի եզրակացության մեջ ձևակերպված են ատենախոսական աշխատանքում ստացված հիմնական արդյունքները, որոնցից հարկ է առանձնացնել հետևյալները.

1. ԴՆԹ-սենսորի մակերևույթին առաջացած ԴՆԹ-դուպլեքսների և քվանտային կետերի միջև առաջացած կոմպլեքսների միաշերտի հաղորդականությունը աճում է լուծույթում ԴՆԹ-թիրախների կոնցենտրացիայի աճի դեպքում, ինչը կարող է լուծույթում ԴՆԹ-թիրախների գրանցման արդյունավետ եղանակի հիմք հանդիսանալ:
2. Դրական լիցքավորված և էլեկտրանեյտրալ լիզանդների դեպքում ԴՆԹ – քվանտային կետ կոմպլեքսներով կազմված միաշերտի հաղորդականությունն էապես կախված է ԴՆԹ-ի հետ կապակցվող ինտերկալատոր լիզանդների լիցքից:

Կարելի է վստահաբար փաստել, որ ատենախոսական աշխատանքում ստացված արդյունքներն ունեն ինչպես հիմնարար, այնպես էլ գործնական զգալի արժեք, մասնավորապես՝ բժշկական կիրառությունների համար: Ատենախոսությունն ամբողջությամբ թողնում է դրական տպավորություն, սակայն այն զերծ չէ նաև որոշ թերություններից: Աշխատանքի վերաբերյալ կարելի է անել հետևյալ դիտողությունները.

1. Չնայած նրան, որ աշխատանքում դիտարկված տեսակն մոտեցումները բավականաչափ իրատեսական և հիմնավորված են, այնուամենայնիվ փորձի հետ համեմատության բացակայությունը կարող է բերել նրան, որ դիտարկման մեջ հաշվի չեն առնվել որոշ գործոններ, մասնավորապես՝ կապված քվանտային կետի տեսակի ընտրության, դրա մակրոմոլեկուլի հետ համակցման հետևանքով օպտիկական և էլեկտրական բնութագրերի փոփոխման հետ: Դրա մասին հիշատակվում է ներածական 1-ին գլխում (էջ 9-10), սակայն հետագայում չի հիշատակվում ու վերլուծվում: Նույնը վերաբերվում է մակրոմոլեկուլով լիցքի

փոխանցման մեխանիզմին. կա՞ն արդյոք հնարավոր փորձարարական գործոններ, որոնք կարող են ազդել դիտարկված թռիչքային մեխանիզմի վրա:

2. Նկար 3.6-ում բերված է երկշղթա ԴՆԹ-ում էլեկտրոնային գրգռման դելոկալիզացումը բնութագրող «մասնակցության գործակիցը»: Ստացվել է ալիքային ֆունկցիայի և ազատության աստիճանի տատանողական (ֆլուկտուացիոն) վարք՝ շղթայի $N = 30$ երկարության համար: Թվում է, որ $n = 1, 14, 27$ դեպքերում պատկերը որակապես չի փոխվում, ինչը չի մեկնաբանվել: Ավելին, հեղինակը նշում է, որ ստացված արդյունքի տարբերությունը *New J. Phys.* **17**, 113030 (2015)-ում բերվածից (այն է՝ տատանողական վարքի բացակայությունը նշված աշխատանքում) պայմանավորված է հաշվարկում օգտագործված շղթայի տարբեր երկարություններով ($N = 30$ և $N = 1000$): Այդ ենթադրությունը կարելի էր հաստատել, կրկնելով հաշվարկը $N = 1000$ -ի համար:
3. Ատենախոսությունում առկա են բազմաթիվ տառասխալներ և այլ վրիպակներ: Օրինակ՝ Նկ. 4.4-ի աջ պատկերում $k > 1$ -ի փոխարեն պետք է լինի $k < 1$, որոշ դեպքերում գրականության հղումների համարակալումը տեքստում չի համապատասխանում ցանկին (ցանկում 83-րդ հղումից սկսած համարակալումը կրկին սկսվում է 1-ից):

Նշված դիտողություններն ուղղակիորեն չեն առնչվում պաշտպանությանը ներկայացված հիմնական դրույթներին և աշխատանքի հիմնական արդյունքներին, ուստի չեն նսեմացնում աշխատանքի արժեքն ու դրա վերաբերյալ դրական կարծիքը: Աշխատանքում ստացված արդյունքների հավաստիությունը կասկած չի հարուցում:

Ատենախոսությունն իր արդիականությամբ, ծավալով, գիտական նորույթով, ձևակերպմամբ, հիմնավորմամբ և հիմնական արդյունքների կարևորությամբ համապատասխանում է ՀՀ ԲՈԿ-ի կողմից թեկնածուական ատենախոսություններին ներկայացվող պահանջներին:

Ատենախոսության հիմնական արդյունքները հրապարակվել են հեղինակի 5 գիտական հոդվածներում՝ տպագրված տեղական և միջազգային հանդեսներում (այդ թվում 3-ը՝ ընդգրկված Scopus-ի ցանկում): Հրատարակված աշխատանքները համապատասխանում են ատենախոսության բովանդակությանը: Սեղմագիրն ամբողջովին համապատասխանում է ատենախոսությանը և արտացոլում է դրա հիմնական դրույթները:

Ատենախոսական աշխատանքում ստացվել են հիմնարար և կիրառական նշանակություն ունեցող մի շարք արդյունքներ, որոնք կարող են օգտագործվել Հայ-ռուսական համալսարանում, Երևանի պետական համալսարանի ֆիզիկայի և կենսաբանության ֆակուլտետներում, ՀՀ ԳԱԱ ֆիզիկական հետազոտությունների ինստիտուտում, ՀՀ ԳԱԱ Մոլեկուլային կենսաբանության ինստիտուտում, ինչպես նաև արտերկրի մի շարք գիտական կազմակերպություններում:

Եզրակացություն

Ելնելով վերը շարադրվածից՝ կարելի է եզրակացնել, որ Ալեքսանդր Եվգենիի Մամասախիսովի «Մետաղների և կիսահաղորդիչների նանոմասնիկների փոխազդեցությունը կենսաբանական մակրոմոլեկուլների հետ լուծույթում» թեմայով թեկնածուական ատենախոսությունն իրենից ներկայացնում է գիտական բարձր մակարդակի վրա իրականացված արդիական և ավարտուն գիտական աշխատանք: Այն լիովին բավարարում է ՀՀ ԲՈԿ-ի կողմից թեկնածուական ատենախոսություններին

ներկայացվող պահանջներին, իսկ աշխատանքի հեղինակը՝ Ա. Մանասախլիսովը արժանի է Ա.04.10 - «Կիսահաղորդիչների ֆիզիկա» մասնագիտությամբ ֆիզիկամաթեմատիկական գիտությունների թեկնածուի աստիճանի շնորհմանը:

Հեղինակն աշխատանքը ներկայացրել է ՀՀ ԳԱԱ Ֆիզիկական հետազոտությունների ինստիտուտի ընդհանուր սեմինարին՝ 2020 թ. օգոստոսի 17-ին: Սեմինարը կազմակերպվել է առցանց՝ Zoom հարթակում: Աշխատանքի մանրամասն քննարկմանը մասնակցել են ֆիզ.մաթ. գիտ. դոկտորներ Ա. Պապոյանը, Դ. Սարգսյանը, Գ. Գրիգորյանը, ֆիզ.մաթ. գիտ. թեկնածուներ՝ Ռ. Մանուչարյանը, Պ. Մուժիկյանը, Ի. Ղամբարյանը, Ե. Կաֆադարյանը, Ա. Մանուկյանը, Ռ. Հովսեփյանը, Է. Գազազյանը, Ս. Շմավոնյանը, Ա. Սարգսյանը, Կ. Հովհաննիսյանը և ուրիշները:

ՀՀ ԳԱԱ Ֆիզիկական հետազոտությունների
ինստիտուտի Պինդ մարմնի ֆիզիկայի
լաբորատորիայի վարիչ,
ֆիզ.մաթ. գիտ. թեկնածու

Ա.Ա. Մանուկյան

ՀՀ ԳԱԱ Ֆիզիկական հետազոտությունների
ինստիտուտի Տեսական ֆիզիկայի
լաբորատորիայի ավագ գիտաշխատող,
ֆիզ.մաթ. գիտ. թեկնածու

Է.Ա. Գազազյան

17 օգոստոսի 2020 թ.

Ա.Ա. Մանուկյանի ստորագրությունը հաստատում եմ՝
ՀՀ ԳԱԱ Ֆիզիկական հետազոտությունների ինստիտուտի
գիտքարտուղար՝ ֆիզ.մաթ. գիտ. թեկնածու



Պ.Հ. Մուժիկյան