

О Т З Ы В

доктора физико-метематических наук, профессора Махсудова Барота Исломовича на автореферат диссертации Нематова Дилшода Давлатшоевича на тему: «**Молекулярная ориентация ДНК на биосовместимых металлооксидных пленках**», представленную в диссертационный совет 6D.КОА-009 при Таджикском техническом университете имени академика М.С. Осими представленной на соискание учёной степени кандидата технических наук по специальности 05.16.09 – материаловедение (в нанотехнологии).

Развиваемая диссертантом тематика является в настоящее время актуальным направлением в исследовании и развитии гибридных методов классической молекулярной динамики и квантовой химии к описанию процессов взаимодействия в тройных системах типа ДНК / метало-оксидная пленка. Подобные гетеропереходы, например, ДНК плюс широкополосные нано-размерные диэлектрики (например, ZrO_2) представляют чрезвычайный интерес также из-за возможностей прямого управления полей и зарядовых переносов в системе и, как следствие, функциональных состояний биомолекул посредством емкостной связи и чрезвычайно интересны как функциональный элемент биоэлектронных устройств. Важной особенностью работы диссертанта является и вопрос повышения эффективности использования современных вычислительных мощностей и молекулярно-динамических (МД) моделирований, визуализация и интерпретация данных МД-моделирования в корреляции с экспериментальными результатами; дальнейшие пути адаптации и оптимизации компьютерных молекулярно-динамических расчетов. В работе исследуются важные и чрезвычайно сложные вопросы, связанные с процессами иммобилизации и конформации молекул ДНК с целью определения основных факторов и механизмов их молекулярной ориентации и конформации на поверхности оксидных полупроводниковых и диэлектрических материалов.

В работе комбинированными методами квантовой химии и классической молекулярной динамики рассмотрены вопросы иммобилизации молекулы ДНК под действием потенциала поверхности твердого тела с включением других физиологических факторов (водно-солевого раствора, температуры) и т.п. Автором проделана значительная работа, осуществлены масштабные исследования процессов взаимодействия ДНК с поверхностью твердых тел методами МД-анализа: рассмотрены большие и сложные молекулярные системы, насчитывающие до сотен тысяч атомов.

Полученные и описанные в диссертации результаты, и положения содержат новизну. В частности, научный интерес представляют результаты изучения процессов взаимодействия и конформационного поведения системы ДНК / ZrO_2 в водной среде, адаптация, а реализация гибридных методов квантовой химии и классической молекулярной динамики. К

наиболее весомым результатам, по мнению рецензента, можно отнести:

1. Методами гибридными молекулярной динамики, сочетающие квантовую химию и классическую молекулярную механику, построены и проанализированы серия компьютерных модельных систем для биологически модифицированных структур на основе оксидных материалов, сопряженные с процессами иммобилизации ДНК / поверхность.


2. Реализованы квантово-химические расчеты и проведен анализ электронных структур нанотрубок и оксидных материалов с биосовместимыми характеристиками.


3. С использованием гибридных методов квантовой химии и классической молекулярной динамики изучены процессы взаимодействия и конформационного поведения ДНК / ZrO_2 в водной среде.

4. Получены качественная и количественная оценки механизмов радиационного повреждения и конформационного поведения ДНК на биосовместимых поверхностях (на примере, ZrO_2) с помощью гибридных методов квантовой химии и классической молекулярной динамики.

Следует отметить вклад автора в развитие современных методических приемов в изучении таких предметах как фундаментальной материаловедении, нанотехнологии и наноматериалы.

Диссертационное исследование является завершенной научно-классификационной работой, отвечает требованиям ВАК, при Президенте РТ, предъявляемым к кандидатским диссертациям по актуальности, новизне и практической значимости полученных результатов, а её автор Д.Д. Нематов заслуживает присвоения ему ученой степени кандидата технических наук по специальности 05.16.09 – материаловедение (в нанотехнологии).

Заведующий кафедрой ядерной физики ТНУ, доктор физ.-мат. наук, профессор  Махсудов Б.И.

Подпись д. ф.-м. н., профессора Махсудова Б.И.,
заверяю Начальник управления кадров ТНУ  Тавкиев Э.Ш.

