

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертацию Нематова Дилшоода Давлатшоевича, «Молекулярная ориентация ДНК на биосовместимых металлооксидных пленках», представленную в диссертационный совет 6D.KOA-009 при Таджикском техническом университете имени академика М.С. Осими на соискание учёной степени кандидата технических наук по специальности 05.16.09 – материаловедение (в нанотехнологии).

Актуальность темы исследования. Моделирование молекулярной ориентации ДНК на биосовместимых материалах гибридными квантово-химическими и классическими молекулярно-механическими методами представляет собой одну из передовых рубежей современной науки - в физике, фундаментальной материаловедении, биохимии и био-нано-технологиях. Молекулярно-динамические методы являются универсальными, широко употребляемыми, зачастую единственно возможными подходами для решения огромного спектра исследовательских проблем. Определенно, реализация молекулярно-динамических методов сочетаются с необходимостью выполнения огромного объема вычислений и компьютерных трехмерных динамических визуализаций. Особенно ярко это проявляется в исследованиях объектов сложной структуры – металло оксидных плёнках с органическими молекулами (аминокислотные соединения, ДНК, белки) – представленной архиважной тематике диссертационной работы.

В диссертационной работе в качестве объектов исследования выбраны молекула ДНК с твердыми материалами - оксидными поверхностями-подложками, причем как с полупроводниковыми, так и диэлектрическими свойствами. Здесь диссертантом выполнена огромная исследовательская работа, получен большой объем оригинального научного материала, где выход удается достичь с рациональным объединением классических и квантовых подходов молекулярно-динамического (МД) моделирования. Процессы конформационного поведения и радиационного повреждения ДНК исследовались на металло-оксидных пленках и поверхностях с биосовместимыми свойствами. Например, диоксид циркония (ZrO_2) выбран как один из пер-

спективных материалов в качестве адсорбера молекулы ДНК. Предметом исследования являлись процессы иммобилизации ДНК/поверхность, взаимодействия ДНК с металло-оксидными пленками и поверхностями, где осуществлены современные эффективные компьютерные технологии моделирования, реализованы полномасштабные атомно/молекулярные расчеты, проделана скрупулезная работа по анализу огромной статистики данных МД-моделирования с трехмерной визуализацией атомных траекторий. В указанной области диссертационная работа Нематова Д.Д. призвана восполнить многие пробелы в исследуемой области знаний, хотя, конечно, остается еще много нерешенных проблем. Таким образом, к моменту начала исследований, описанных в данной диссертации, имелся ряд нерешенных вопросов, связанных с проблемой иммобилизации ДНК на биосовместимой поверхности ZrO_2 , с целью использования ДНК для модификации ZrO_2 и получение биосовместимые комплексы ДНК+ ZrO_2 . Этим определяется актуальность и научная значимость темы диссертации.

Структура и объем диссертации.

Диссертационная работа состоит из 127 страниц машинописного текста, введения, 3 глав, выводов, включая 48 рисунков, 8 таблиц и список литературы из 101 наименований.

Во введении диссертант обосновал актуальность выбранной темы, изложил цели и задачи работы, новизну и практическую значимость полученных результатов и сформулировал научные положения, выносимые на защиту.

В первой главе диссертации диссертант излагает современное состояние вопроса, которые охватывают перспективы применения устройств молекулярной электроники, инженерные аспекты дизайна и создания новых передовых микро-нано-материалов на основе молекулы ДНК и комбинаций различных ДНК с различными металлооксидными поверхностями, тонкими пленками и наночастицами, в том числе ZrO_2 . Применительно к исследуемым в рамках диссертационной работы МД-моделям рассмотрены проблемы

параметризации силовых полей и потенциалов. На основании проведенного анализа обосновывается выбор объектов диссертационного исследования, описаны цель и круг задач диссертационной работы.

Во второй главе методом теории функционала плотности с применением пакета WIEN2k проведены квантово-химические расчеты по изучению электронных свойств ZrO_2 , и определены такие важные характеристики, как плотность состояния, плотность зарядов и ширина запрещенной зоны, которые в дальнейшем используются для реализации классических МД-моделирований, при проведении многомасштабных вычислений структурных и функциональных свойств системы ДНК+ ZrO_2 в водном окружении с применением многоцелевого пакета DL_POLY для изучения динамики взаимодействия выбранных объектов исследования.

В третьей главе представлены результаты многомасштабных МД-моделирований по изучению процессов взаимодействия в системе ДНК+ ZrO_2 , окруженной водной средой. В тройной системе ДНК + вода + ZrO_2 для изучения процессов иммобилизации и молекулярной ориентации и ДНК / поверхность ZrO_2 все межатомные взаимодействия описываются посредством стандартных потенциалов и силовых полей из квантовой химии и молекулярной механики. Осуществлены реализация молекулярно-динамических процессов взаимодействия ДНК/поверхность ZrO_2 . Проведены полномасштабные расчеты модельных структур молекулы ДНК с пленками и наночастицами ZrO_2 . Проведены верификации модельных реализаций для процессов радиационного повреждения ДНК на поверхности ZrO_2 . Для тройной системы ДНК+вода+ ZrO_2 выполнены МД-расчеты атомных траекторий и дистанционных изменений между молекулой ДНК и поверхностью ZrO_2 и описано заключение. Особенно важно отметить, что когда процесс протекает в ограниченной среде (например, задаваемой поверхностью ZrO_2), то в системе, в итоге, от особенностей образования связей будет зависеть и конечные структурные конфигурации; а возможно, целый спектр прикладных инструментариев нано-био-технологических устройств будущего. Поэтому пред-

ставления о динамике взаимодействия ДНК+вода+ZrO₂ при различных геометриях системы может рассматриваться как «важное» звено в понимании внутримолекулярных механизмов структурных превращений, следовательно, более сложных объектов типа ДНК, РНК или даже макромолекулярных белковых молекул / оксидная поверхность.

В Заключение диссертационной работы сформулированы основные выводы по полученным результатам проводимых исследований.

Научная новизна заключается в том, что в работе:

-разработаны модельные системы для описания процессов иммобилизации и конформационного поведения ДНК на поверхности ZrO₂ с последующими МД вычислениями трехмерных атомных траекторий с оптимизированными потенциалами.

-с выполнением квантово-химических расчетов исследованы электронные свойства и релаксированные структуры ZrO₂ с различными модификациями зарядов.

-процессы иммобилизации и молекулярной ориентации ДНК смоделированы в требуемой биосовместимой среде на примере ZrO₂.

-осуществлены многомасштабные МД-моделирования и определены динамические и структурные превращения ДНК на поверхности ZrO₂ с водным окружением на атомно/молекулярном уровне.

-получены качественная и количественная оценки конформационного поведения ДНК на поверхности ZrO₂ для моделей радиационного повреждения ДНК с различными модификациями зарядов в системе.

Степень достоверности. Теоретические исследования и вычислительные МД-расчеты проводились на основе гибридных подходов квантовой химии и классической МД с использованием современных лицензионных многоцелевых программных пакетов, таких как WEIN2k и DL_POLY, гарантирующие степень достоверности на уровне мировых достижений современной науки в данной области исследования. Также достоверность научных результатов подтверждается качественным и количественным согласием с резуль-

татами независимых исследований других авторов. Сформированные соискателем выводы логичны и основываются на приведенных в диссертации литературных данных и результатах собственных исследований.

Публикации основных результатов, положений и выводов, приведённых в диссертации. По теме диссертационной работы опубликовано 13 научных работ, из них 7 статьи в ведущих рецензируемых изданиях из списка ВАК при Президенте Республики Таджикистан и 6 материалов докладов и выступлений на конференциях и семинарах республиканского и международного уровней. Выше изложенное позволяет констатировать достаточно высокий уровень апробации диссертационного исследования.

Материал диссертации логичен и последовательно изложен, хорошо иллюстрирован, выводы достаточно обоснованы.

Практическая значимость результатов состоит в том, что полученные результаты об особенностях взаимодействия ДНК с поверхностью ZrO_2 методами квантовой химии и классической молекулярной динамики можно направить на развитие функциональных гетеропереходов, таких как биологических молекул с широко-зонными диэлектриками, которые могут быть использованы в области молекулярной электроники, в частности для создания биочипов, массивов памяти в компьютерных архитектурах будущего. Результаты МД-моделирования процессов поверхностного взаимодействия ДНК с диоксидом циркония могут быть использованы в экспериментальных измерениях методами атомно-силовой микроскопии, поверхностного плазменного резонанса, спектрального комбинационного рассеяния и т. д.

Соответствие автореферата содержанию диссертации.

Автореферат диссертации написан на русском и таджикском языках и изложен на 60 страницах, иллюстрирован рисунками и достаточно полно отражает основное содержание работы. Оформление диссертационной работы и автореферата, в основном, отвечает требованиям существующего Положения ВАК при Президенте Республики Таджикистан. Автореферат полностью отражает содержание диссертационной работы.

Диссертация Нематова Д.Д., соответствует **паспорту специальности 05.16.09** – материаловедение (в нанотехнологии), в частности пунктам:

-п.1. Теоретические и экспериментальные исследования фундаментальных связей состава и строения материалов на разных уровнях (макро, мезо, микро, нано, атомном, электронном) с комплексом физико-механических эксплуатационных свойств с целью обеспечения надежности и долговечности материалов и изделий;

-п.2. Установление закономерностей физико-химических и физико-механических процессов, происходящих на границах раздела в гетерогенных структурах;

-п.3. Разработка физико-химических и физико-механических процессов формирования структуры материалов с заданным комплексом свойств;

-п.4. Разработка физико-химических процессов формирования новых материалов, обладающих уникальными эксплуатационными и технологическими свойствами, оптимальной себестоимостью и экологической чистотой;

-п.5. Влияние режимов технологических воздействий при производстве материалов на их структуру. Оптимизация технологии получения материалов заданной структуры и свойств;

-п.9. Разработка и компьютерная реализация математических моделей физико-химических, гидродинамических, тепловых, хемореологических и деформационных превращений при производстве, обработке, переработке и эксплуатации различных материалов. Компьютерное проектирование композиционных материалов. Компьютерный анализ и оптимизация процессов получения и эксплуатации материалов.

Замечания

Как любой другой научный труд, диссертация Нематова Дилшоода Давлатшоевича также не лишена недостатков. К ним можно отнести следующее:

1) Автором выполнен большой объем сложных компьютерных экспериментов, получен огромный объем данных моделирования. Но из них кроме

структурных данных можно было бы более широко развить и интерпретировать адсорбционные и оптические свойства. В других случаях, было бы лучше сосредоточиться на важных результатах, скажем, на поверхностные или диэлектрические свойства;

2) Результаты анализа энергетических и электронных свойств оксидных материалов требуют более скупкой обработки с точки зрения прикладных аспектов (но это, скорее всего пожелания будущих исследований)

3) Местами обнаруживаются длинные предложения, которые делают восприятие материала трудной. Некоторые длинные предложения можно было более емко, двумя предложениями. Встречаются не совсем корректные грамматические обороты.

Указанные недостатки не влияют на общую положительную оценку диссертации в целом. В рамках диссертации, по существу, впервые достаточно подробно с применением квантово-химических и молекулярно-динамических методов исследованы процессы иммобилизации и взаимодействия ДНК с биосовместимой поверхностью ZrO_2 .

Заключение

Диссертационная работа Нематова Дилшоода Давлатшоевича выполнена на высоком научном уровне и представляет собой законченную научную квалификационную работу по исследованию процессов иммобилизации и взаимодействия ДНК с биосовместимой поверхностью ZrO_2 с применением квантово-химических и молекулярно-динамических методов.

Содержание диссертационной работы и автореферата соответствует паспорту научной специальности 05.16.09 – Материаловедение (в нанотехнологии).

На основании всего выше изложенного считаю, что диссертация Нематова Дилшоода Давлатшоевича на тему «Молекулярная ориентация ДНК на биосовместимых металлооксидных пленках» удовлетворяет всем требованиям Положения о присуждении учёных степеней, утвержденного поста-

новлением Правительства Республики Таджикистан от 26.11.2016 г., №505, предъявляемым к кандидатским диссертациям, в том числе п.10-16 «Порядок присвоения ученых степеней», а его автор, бесспорно, заслуживает при-суждения ему искомой учёной степени кандидата технических наук по спе-циальности 05.16.09 – Материаловедение (в нанотехнологии).

Член-корреспондент НАНТ, профессор,
д.ф.м.н., главный научный сотрудник
НИИ Таджикского национального
Университета

Салихов Т.Х.

Контактные документы:

Адрес: 734025, Душанбе, пр.Рудаки 17, НИИ ТНУ,

Телефон: 919-24-83-11; E-mail: tsalikhov@mail.ru

Подпись профессора Салихова Т.Х.

заверяю, начальник ОК НИИ ТНУ



Рахматуллоева З.