



УТВЕРЖДАЮ

и.о. директора ДФ НИТУ «МИСиС»

Саидзода Р. Х.

« 09 » 20 20 г.

ОТЗЫВ

ведущей организации на диссертационную работу Нематова Дилшода Давлатшоевича на тему: «**Молекулярная ориентация ДНК на биосовместимых металлооксидных пленках**», представленную в диссертационный совет 6D.KOA-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).

Актуальность исследования. Объединение биомолекул с металлическими или полупроводниковыми частицами, фуллеренами или углеродными нанотрубками порождают новый класс материалов, прежде всего, для новых электронных и оптических систем. В первую очередь, это охватывает взаимодействия ДНК, РНК, протеинов с твердыми поверхностями (наночастицами, тонкими пленками и подложками из металлических и металлооксидных соединений) для молекулярной электроники, для синтеза новых электронных сенсорных и оптических систем, биочипов, массивов памяти в компьютерных архитектурах будущего с новыми физическими, химическими и биологическими явлениями, происходящими на атомно/молекулярном уровне. При этом, важно отметить, что молекула ДНК действует и как диэлектрик, и как широкозонный полупроводник, и даже как сверхпроводник, что делает систему ДНК/поверхность весьма интересной, и одновременно, нетривиальным объектом исследования. В рамках диссертационной работы, процессы взаимодействия ДНК исследуются на поверхности оксидных материалов, например, пленок и поверхностей на основе диоксида циркония. ZrO_2 благодаря своей хорошей биосовместимости и высокой диэлектрической проницаемости ($\epsilon=25$) представляет собой перспективный материал в качестве адсорбера молекулы ДНК. Процессы взаимодействия (иммобилизации) и конформационного превращения ДНК / металлооксидная поверхность может привести, например, к

известному В-Z переходу молекулы, который представляет наиважнейшее прикладное значение. Тем не менее, вопросы взаимодействия ДНК с поверхностью ZrO_2 мало изучены в литературы, вовсе не исследованы или данные отсутствуют в нужном объеме. В диссертации фактически проделана одна из первых попыток в указанной области исследовать биологически модифицированные наноструктуры (ДНК- модифицированные наноструктуры) на металлооксидных пленках на основе ZrO_2 .

Диссертационная работа изложена на 127 листах машинописного текста и состоит из введения, трех глав и основных выводов. Диссертация содержит 48 рисунков, 8 таблиц и 101 библиографических источников.

Первая глава включает в себя современное состояние вопроса (обзор литературы) и состоит из 3 разделов и 8 подразделов (параграфов), которые охватывают перспективы применения устройств молекулярной электроники, инженерные аспекты дизайна и создания новых передовых микро-нано-материалов на основе молекулы ДНК и комбинаций ДНК с различными металлооксидными поверхностями, тонкими пленками и наночастицами, в частности ZrO_2 .

Во второй главе методом теории функционала плотности (ТФП) с применением пакета WIEN2k проведены квантово-химические расчеты по изучению электронных свойств ZrO_2 , где определены такие важные характеристики, как плотность состояния (DOS, density of state), плотность зарядов и ширина запрещенной зоны. В дальнейшем, в последующих главах, полученные в Главе 2 квантово-химические оценки используются при реализации классических МД-моделирований, при проведении многомасштабных вычислений структурных и функциональных свойств системы ДНК+ H_2O + ZrO_2 в рамках многоцелевого пакета DL_POLY для изучения динамики взаимодействия выбранных объектов исследования.

В заключительной третьей главе представлены результаты многомасштабных МД-моделирований по изучению процессов взаимодействия в

системе ДНК+ZrO₂, окруженной водной средой. В тройной системе ДНК + вода + ZrO₂ для изучения процессов иммобилизации и молекулярной ориентации ДНК / поверхность ZrO₂ все межатомные взаимодействия описаны посредством стандартных потенциалов и силовых полей из квантовой химии и молекулярной механики. Приведены оценки конформационных изменений молекулы ДНК с B-Z -переходом ДНК на основе данных о динамическом изменении и ориентации отдельных фрагментов ДНК на поверхности ZrO₂.

Научная новизна работы.

В диссертационной работе решены следующие актуальные задачи:

-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.

-на основе результатов исследования построены полноатомные модели трёхкомпонентных систем ДНК+вода+ZrO₂ для последующих компьютерных МД-расчетов.

-уточнены параметры силовых полей и потенциалов межатомного взаимодействия для системы ДНК+H₂O+ZrO₂.

Теоретическая и практическая значимость исследования. Полученные теоретические и вычислительные результаты о динамике и особенностях взаимодействия ДНК с поверхностью ZrO_2 , а также развитый гибридный подход, сочетающий в себе квантово-химические и молекулярно-динамические методы моделирования, могут быть использованы при дизайне и технологиях синтеза биомолекул / оксидная поверхность в нано-био-электронике, при структурных исследованиях методами рентгеноструктурного, дифракционного и спектрального анализа, при интерпретации экспериментальных данных. Получены 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 широкозонными 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.

Обоснованность и достоверности полученных результатов. Теоретические исследования и вычислительные МД-расчеты проводились на основе гибридных подходов квантовой химии и классической МД с использованием современных лицензионных многоцелевых программных пакетов, а также визуализационных и графических утилитов с программными обеспечениями и символьными вычислениями, включающими функции языка программирования (WEIN2k, DL_POLY, AMBER, NAMD, VMD, Mathematica, MATLAB, т.п.), гарантирующие степень достоверности на уровне мировых достижений современной науки в данной области исследования.

Материалы диссертации прошли достаточно широкую апробацию. По теме диссертации опубликованы 13 печатных работ, из них 3 статьи в журналах входящих в перечень ведущих рецензируемых журналов, рекомендуемых ВАК

РТ и РИНЦ, 4 статьей в журналах из перечня рецензируемых SCOPUS и 6 материалов и тезисов докладов на конференциях.

Оригинальность содержание диссертации составляет 88,93% от общего объема текста; цитирование оформлено корректно; заимствованного материала, использованного в диссертации без ссылки на автора, либо источников заимствования не обнаружено, научных работ, выполненных соискателем ученой степени в соавторстве, без ссылок на соавторов, не выявлено.

Диссертация Нематова Дилшоода Давлатшоевича «Молекулярная ориентация ДНК на биосовместимых металлооксидных пленках» выполнено на высоком уровне. Исследования проведены с использованием современных комбинированных физико-химических (Молекулярно-динамических и квантово-химических) методов анализа и применением современных лицензионных многоцелевых программных пакетов, а также визуализационных и графических утилитов.

Ведущая организация рекомендует использовать полученные теоретические и вычислительные результаты для развитый гибридный подход, сочетающий в себе квантово-химические и молекулярно-динамические методы моделирования, при дизайне и технологиях синтеза биомолекул / оксидная поверхность в нано-био-электронике, при структурных исследованиях методами рентгеноструктурного, дифракционного и спектрального анализа, при интерпретации экспериментальных данных и могут быть применены при решении задач моделирования динамических процессов и процессов взаимодействия биологических молекул с различными металлооксидными плёнками и поверхностями. Полученные результаты 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.

Также результаты диссертационной работы могут быть использованы прикладных разработках в передовых областях современной нано-би

электроники, наномедицине, биоинженерии, в качестве учебных пособий для профильных лекционных курсов высших учебных заведений РТ и стран СНГ.

Не смотря на очевидное достижение, работа не лишена недостатков, к числу, которых можно отнести:

1. Получено очень много исследовательского материала и их более широкое описание, несомненно, могут представлять важное прикладное значение.

2. Отдельные графики и таблицы в Главах 2 и 3 **требуют** более детальной интерпретации, прежде всего, с точки зрения инженерно-прикладного применения. Это касается повсеместных выводов, где представлены оригинальные данные моделирования молекулярной динамики, но и также, будущих планов диссертанта.

3. В работе не полно обсуждены результаты электронных свойств ZrO_2 .

4. В работе встречается грамматические и стилистические ошибки.

Указанные замечания не умаляют достоинств основных положений, выносимых автором на защиту, и не снижают ценности полученных им научно-технических сведений, отличающихся безусловной полезностью и новизной.

Заключение

Диссертация Нематова Дилшода Давлатшоевича **«Молекулярная ориентация ДНК на биосовместимых металлооксидных пленках»** соответствует требованиям, предусмотренным «Положением о порядке присуждения учёных степеней», утвержденным постановлением Правительства Республики Таджикистан от 26 ноября 2016 года за № 505, и представляет собой специально подготовленную рукопись, содержащую совокупность научных результатов и положений, выдвигаемых автором для публичной защиты, которые можно квалифицировать как новое научное достижение, имеющие важное значение для развития фундаментальной материаловедении, молекулярной электроники, био- и нанотехнологий.

Диссертационная работа имеет цельное единство, в ней отражен личный вклад автора в науку, а его автор – Нематов Дилшод Давлатшоевич заслуживает

присуждения ученой степени кандидата технических наук по специальности 05.16.09 – Материаловедение (в нанотехнологии).

Диссертационная работа Нематова Дилшода Давлатшоевича на тему «Молекулярная ориентация ДНК на биосовместимых металлооксидных пленках» была заслушана на заседании кафедры «Энергоэффективных и ресурсосберегающих технологий» Душанбинского филиала Национального исследовательского технологического университета «МИСиС», протоколом № 2 от 8 сентября 2020 года.

Председатель, зав. кафедрой
«Энергоэффективных и ресурсосберегающих
технологий» Душанбинского филиала НИТУ «МИСиС»,
кандидат физ.-мат. наук, доцент
E-mail: akramov60@mail.ru. Тел.: 935102960

М.Б. Акрамов

Ученый секретарь кафедры
«Энергоэффективных и ресурсосберегающих
технологий» Душанбинского филиала НИТУ «МИСиС»,
кандидат химических наук
E-mail: dilbar110867@mail.ru. Тел.: 907814124

Д.К. Хакимова

Эксперт, старший преподаватель кафедры
«Энергоэффективных и ресурсосберегающих
технологий» Душанбинского филиала НИТУ «МИСиС»,
кандидат технических наук
E-mail: fantotsi.0104@mail.ru. Тел.: 909551988

Ф.С. Табаров

Полное название: Филиал федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС» в г. Душанбе.

Адрес: 734042, Таджикистан, г. Душанбе, ул. Назаршоева, 7

Официальный сайт: www.df.misis.ru

E-mail: ttucdo@mail.ru. Тел.: (+99237)2222008

Подлинность подписей Акрамова М.Б., Табарова Ф.С., Хакимовой Д.К. заверяю

Начальник центра кадров ДФ/НИТУ «МИСиС»



М.А. Зарипова