

УТВЕРЖДАЮ

Ректор ТТУ им. акад. М.С.Осими

Д.т.н., профессор
Одиназода Хайдар Одина



2020г.

Исполнитель (подпись)

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ТАДЖИКСКОГО ТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА ИМЕНИ АКАДЕМИКА М.С.ОСИМИ

Диссертация Нематова Дилшода Давлатшоевича на тему «Молекулярная ориентация ДНК на биосовместимых металлооксидных пленках» выполнена на кафедре «Физика» Таджикского технического университета имени академика М.С.Осими.

В период подготовки диссертации соискатель Нематов Дилшод Давлатшоевич являлся соискателем на кафедре «Физика» Таджикского технического университета имени академика М.С. Осими с 20.11.2018 и был прикреплен для подготовки диссертации и сдачи кандидатских экзаменов при кафедре «Физика» Таджикского технического университета имени академика М.С.Осими. Работает на кафедре «Физика» Таджикского технического университета имени академика М.С.Осими (01.09.2017 г. по настоящее время).

В 2017 году окончил физический факультет Таджикского национального университета по специальности «Вычислительные машины системы и сети».

Удостоверение о сдаче кандидатских экзаменов выдано в 2020г. под № 1029 Таджикского технического университета имени академика М.С.Осими.

Научный руководитель:

Холмуродов Холмирзо Тагойкулович – доктор физико-математических наук, профессор, советник по научному сотрудничеству Таджикского технического университета имени академика М.С.Осими.

По итогам обсуждения принято следующее заключение:

1. Цель и актуальность работы. Целью работы являлось исследование процессов иммобилизации и взаимодействия ДНК с биосовместимой поверхностью ZrO_2 с применением квантово-химических и молекулярно-динамических методов. В работе комбинированными методами квантовой химии и классической молекулярной динамики исследованы весьма актуальные на сегодняшний день проблемы взаимодействия и молекулярной ориентации ДНК на биосовместимых твердых материалах - наночастицах, пленках и поверхностях. Сочетания биомолекул (ДНК, РНК, белки) с твердыми поверхностями (наночастицами, пленками и подложками из металлических и

металло-оксидных соединений) способны создать новый класс материалов для перспективного развития молекулярной электроники, в первую очередь, для синтеза новых электронных сенсорных и оптических систем, биочипов, массивов памяти в компьютерных архитектурах будущего и т.д.

Тема диссертационной работы утверждена на заседании Ученого совета ТТУ им. М.С. Осими Протокол № 1 от 30. 09. 2019г.

2. Личное участие автора в получение результатов, изложенных в диссертации. Диссертант непосредственно участвовал в получении исходных данных и проведении научных теоретических вычислений, в разработке основных теоретических положений, методик, алгоритмов, математических моделей и т.п. Соискатель лично участвовал в апробации результатов исследования, выполнял ряд МД-моделирований и квантово-химических расчетов методом ТФП по пакетам WEIN2k, DL_POLY, AMBER, NAMD, VMD, Mathematica, MATLAB, т.п., а также участвовал во всех основных публикациях по результатам диссертационной работы.

3. Степень достоверности результатов проведенных исследований. 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.

4. Новизна результатов проведенных исследований. На основе результатов исследования построены полноатомные модели трёхкомпонентных систем ДНК+вода+ZrO₂ для последующих компьютерных МД-расчетов. На основе серии МД-расчетов для системы ДНК+H₂O+ZrO₂ уточнены параметры силовых полей и потенциалов межатомного взаимодействия и впервые:

-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.

5. Практическая значимость. Представленные результаты исследований могут быть применены при решении задач моделирования динамических процессов и процессов взаимодействия биологических молекул с различными металлооксидными плёнками и поверхностями. Также результаты диссертационной работы могут быть использованы в прикладных разработках в передовых областях современной нано-био-электроники, наномедицине, биоинженерии, в качестве учебных пособий для профильных лекционных курсов высших учебных заведений.

6. Ценность научных работ соискателя. 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 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.

7. Полнота изложения материалов диссертации в работах, опубликованных соискателем:

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.

По материалам диссертационной работы опубликовано 13 работы, из них 3 статьи опубликованы в журналах, рекомендуемых ВАК при Президенте Республики Таджикистан и 4 статьи, опубликованные в изданиях, входящих в Scopus.

Основное содержание работы изложено в следующих публикациях:

Статьи, опубликованных в научных журналах, рекомендованных ВАК при Президенте Республики Таджикистан:

1. Нематов, Д.Д. Кванто-механический расчет электронного строения $ZrO_2:Ti^{4+}$ в рамках теории функционала плотности / Бурхонзода, А.С., Нематов, Д.Д., Гиёсов, С.С., Хусенов, М.А., Холмуродов, Х.Т. // Политехнический вестник. ТТУ им. Акад. М.С.Осими. Серия: Интеллект. Иннов. Инвес.», - 2019, - №3, - с.11-17.

2. Нематов, Д.Д. Квантово-механический расчет электронного строения наночастиц из нитрида бора, допированного титаном методом ТФП / Нематов, Д.Д., Бурхонзода, А.С., Хусенов, М.А., Холмуродов, Х.Т. // Вестник ТНУ. Серия естественных наук, - 2019, - №1(45), - с.134-140.

3. Нематов, Д.Д. Молекулярная динамика процессов переноса нуклеотидной цепочки внутри углеродной нанотрубки, взаимодействующих с

наночастицами золота / Нематов, Д.Д., Бурхонзода, А.С., Хусенов, М.А., Холмуродов, Х.Т. // Политехнический вестник. Серия: Интеллект. Инновации. Инвестиции, - 2018, - № 4(44), - с. 21-26.

**Статьи, опубликованные в изданиях,
входящих в Scopus:**

4. Nematov, D.D. Molecular Dynamics of DNA Damage and Conformational Behavior on a Zirconium-Dioxide Surface / Nematov, D.D., Burkhonzoda, A.S., Khusenov, M. A., Kholmurodov, Kh. T., Doroshkevich, A. S., Doroshkevich, N. V., Zelenyak, T. Yu., Majumder, S. // Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques, - 2019, - V. 13(6), - pp. 1165–1184.

5. Nematov, D.D. Frequency modulation of the Raman Spectrum at the Interface DNA - ZrO₂ nanoparticles / Doroshkevich, A.S., Nabiev, A.A., Shylo, A.V., Pawlukojc, A., Doroshkevich, V.S., Glazunova, V.A., Zelenyak, T.Yu., Doroshkevich, N.V., Rahmonov, Kh.R., Khamzin, E.Kh., Nematov, D.D., Burkhonzoda, A.S., Khusenov, M.A., Kholmurodov, Kh.T., Majumder, S., Balasoju, M., Madadzada, A., Bodnarchuk, V.I. // Egyptian Journal of Chemistry, - 2019, - V. 62, - pp. 13-20.

6. Nematov, D.D. The quantum-chemistry calculations of electronic structure of boron nitride nanocrystals with density functional theory realization / Nematov, D.D., Khusenov, M., Burkhonzoda, A., Kholmurodov, Kh., Ibrahim, M. // Egyptian Journal of Chemistry, - 2019, - V. 62, - pp. 21-27.

7. Nematov, D.D. Molecular dynamics simulations of the DNA radiation damage and conformation behavior on a ZrO₂ surface / Nematov, D., Burkhonzoda, A., Khusenov, M., Kholmurodov, Kh., Doroshkevych, A., Doroshkevych, N., Zelenyak, T., Majumder, S., Refaat, A., Ibrahim, M. // Egyptian Journal of Chemistry, - 2019, - V. 62, - pp. 149-161.

**Научные статьи, опубликованные в материалах международных и
республиканских конференциях:**

8. Nematov, D.D. Molecular dynamics of nanoscale phenomena: computer design for new drugs and materials / Khusenov, M.A., Nematov, D.D., Burkhonzoda, A.S., Kholmurodov, Kh.T., Doroshkevych, A., Doroshkevych, N., Zelenyak, T., Majumder, S. // Materials of the 8th International Eurasian Conference on Mathematics Sciences and Applications (SERIES NANO-TECNOLOGY), Baku, - 2019, - pp.85-86.

9. Нематов, Д.Д. Влияние чужеродных атомов на электронную структуру бор-азотных нанотрубок // Материалы Международного молодёжного научного форума "Ломоносов-2019", Секция «Физ. твер. тел», Москва, - 2019, - с. 912-916. ISBN 978-5-317-06100-5.

10. Нематов, Д.Д. Квантово-химический расчет электронной структуры нанокристаллов ZrO₂ в рамках теории функционала плотности / Нематов, Д.Д., Бурхонзода, А.С., Хусенов, М.А., Фозилов, Ш. У., Холмуродов, Х.Т. // Международная научно-практическая конференция студентов, магистрантов, аспирантов и молодых учёных «МУХАНДИС-2019», Душанбе, - 2019, -Часть 2, - с.35-46.

11. Нематов, Д.Д. Молекулярно-динамическое моделирование взаимодействия трёх наночастиц золота с нуклеотидом внутри УНТ / Нематов Д. Д., Хусенов М. А., Бурхонзода А.С. // Материалы Международной научно – практической конференции: Электроэнергетика. ТТУ, - 2018, - Часть 1, - с.144-152.

12. Nematov, D.D. Molecular orientation of DNA on zirconium dioxide surface: graphical 3-D representation of the DNA conformation from MD trajectory calculations / Nematov, D.D., Kholmurodov, Kh., Aleksandr, D. N., Khusenov, M., Burhonzoda, A., Majumder, S. //Materials the scientific-practical international conference of students, magister, PhD students and young scientists «MUHANDIS-2019», Dushanbe, -2019, Part 3, - pp.8-17.

13. Nematov, D.D. The experimental and molecular dynamics studies of the DNA radiation damage and conformation behavior on a zirconium dioxide surface/ Nematov, D.D., Kholmurodov, Kh., Aleksandr, D. N., Khusenov, M., Burhonzoda, A., Majumder, S. // The First International Conference on Molecular Modeling and Spectroscopy (19-22 February National Research Centre, Egypt), Cairo, - 2019, - p.16.

Личный вклад автора. Автор принимал непосредственное участие в постановке задач, проведении компьютерных расчетов и теоретических исследований, анализе и обсуждении полученных результатов МД-моделирования.

8. Научная специальность, которой соответствует диссертация:

Диссертационная работа по специальности 05.16.09 – Материаловедение (в нанотехнологии) на тему «Молекулярная ориентация ДНК на биосовместимых металлооксидных пленках» соответствует паспорту научной специальности 05.16.09 – Материаловедение (в нанотехнологии):

- **по формуле паспорта специальности**, так как в диссертации рассматриваются вопросы: реализация квантово-химических расчетов с применением программного пакета WEIN2k для оценки электронных и функциональных свойств ZrO_2 с различными модификациями зарядов. Оптимизация и верификация МД-моделей для тройных молекулярных систем, таких как ДНК+ H_2O + ZrO_2 , с выбором эффективных потенциалов и силовых полей. Развитие и адаптация многомасштабных методов классической МД для описания процессов взаимодействия и конформационного поведения ДНК, а также молекулярной ориентации ДНК в тройных молекулярных системах ДНК+ H_2O + ZrO_2 с применением многоцелевого пакета DL_POLY. Проведение МД-расчетов с целью исследования процессов взаимодействия и молекулярной ориентации ДНК с поверхностью ZrO_2 на атомно/молекулярном уровне, а также анализ и оценка динамики распределения расстояния ДНК/ ZrO_2 , процессов В-Z-перехода ДНК (конформационных изменений молекулы ДНК на поверхности ZrO_2 в зависимости от модификации зарядов естественных и поврежденных моделей ДНК);

- областям исследования паспорта специальности, в частности по 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.

9. Выводы:

Диссертация на тему «Молекулярная ориентация ДНК на биосовместимых металлооксидных пленках» оформлена в соответствии с пунктом 24.1 Положения о совете по защите диссертаций на соискание учёной степени кандидата наук, на соискание учёной степени доктора наук.

Диссертация соответствует требованиям, предъявляемым Положением о присуждении учёных степеней к кандидатским диссертациям, в том числе п.9, является научно-квалификационной работой, в которой приводится соответствующий критерий с конкретизацией полученных в диссертации научных результатов и их значения.

Диссертация Нематова Дилшоода Давлатшоевича на тему «Молекулярная ориентация ДНК на биосовместимых металлооксидных пленках» рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 05.16.09 – Материаловедение (в нанотехнологии).

Заключение принято на расширенном заседании кафедры «Физика» ТТУ им. акад. М.С.Осими.

Присутствовали на заседании 16 чел.,

Результаты голосования: «за» - 16 чел.,

«против» - 0 чел.,

«воздержались» - 0 чел.,


протокол № 5 от «08» января 2020 г.

Председатель заседания:

к.ф.-м.н., доцент, зав. кафедрой «Физики»  Ходжахонов Идрис Тураевич

Секретарь заседания:

к.т.н., и.о. доцент

 Ёдалиева Зулфия Нуралиевна

Подписи к.ф.-м.н., доцента Ходжахонова И.Т.

и к.т.н., и.о. доцента Ёдалиева З. заверяю:

Начальник управления кадров

и специальных работ

ТТУ им.ак.М.С.Осими

 Шарипова Д.А.

