

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ЭКСПЕРТНОЙ КОМИССИИ

диссертационного совета 6D.КOA-009 при Таджикском техническом Университете имени академика М.С. Осими на диссертационной работе Нематова Дилшода Давлатшоевича **«Молекулярная ориентация ДНК на биосовместимых металлооксидных пленках»** планируемой к защите на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 05.16.09 – Материаловедение (в нанотехнологии)

Рассмотрев диссертационную работу Нематова Д. Д., на тему: **«Молекулярная ориентация ДНК на биосовместимых металлооксидных пленках»** на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 05.16.09 – Материаловедение (в нанотехнологии), экспертная комиссия диссертационного совета 6D.КOA-009 при Таджикском техническом Университете им. академика М.С. Осими представляет следующее заключение:

Представленная диссертационная работа соответствует формуле специальности 05.16.09 – Материаловедение (в нанотехнологии):

- **формуле паспорта специальности**, так как в диссертации рассматриваются вопросы: реализация теоретических 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.

Актуальность темы. Комбинированными методами квантовой химии и классической молекулярной динамики исследованы весьма актуальные на сегодняшний день проблемы иммобилизации (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. В настоящее время нано- и био-электроника стремительно развиваются. Следовательно, междисциплинарные исследования в области нано-био-технологий имеют огромный прорывной потенциал и основные надежды здесь связаны с нано-размерными технологиями, с новыми физическими, химическими и биологическими явлениями, происходящими на атомно/молекулярном уровне.

Целью работы является исследование процессов иммобилизации и взаимодействия ДНК с биосовместимой поверхностью ZrO_2 с применением квантово-химических и молекулярно-динамических методов.

Научная новизна диссертационной работы: На основе результатов исследования построены полноатомные модели трёхкомпонентных систем ДНК+ H_2O + ZrO_2 для последующих компьютерных МД-расчетов. На основе серии МД-расчетов для системы ДНК+ H_2O + ZrO_2 уточнены параметры силовых полей и потенциалов межатомного взаимодействия и впервые:

-разработаны модельные системы для описания процессов иммобилизации и конформационного поведения ДНК на поверхности ZrO_2 с последующими МД вычислениями трехмерных атомных траекторий с оптимизированными потенциалами.

-с выполнением квантово-химических расчетов исследованы электронные свойства и релаксированные структуры ZrO_2 с различными модификациями зарядов.

-процессы иммобилизации и молекулярной ориентации ДНК смоделированы в требуемой биосовместимой среде на примере ZrO_2 .

-осуществлены многомасштабные МД-моделирования и определены динамические и структурные превращения ДНК на поверхности ZrO_2 с водным окружением на атомно/молекулярном уровне.

-получены качественные и количественные оценки конформационного поведения ДНК на поверхности ZrO_2 для моделей радиационного повреждения ДНК с различными модификациями зарядов в системе.

Теоретическая и практическая значимость: Полученные теоретические и вычислительные результаты, могут быть использованы при дизайне и технологиях синтеза биомолекул / оксидной поверхности в нано-био-электронике, при структурных исследованиях методами рентгеноструктурного, дифракционного и спектрального анализа, при интерпретации экспериментальных данных. 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, биологические молекулы с широко-зонными диэлектриками, которые могут быть использованы в области молекулярной электроники, в частности, при создании 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.

Диссертация состоит из введения, трёх глав, выводов, списка литературы из 101 наименований библиографических ссылок и приложения. Работа изложена на 127 страницах машинописного текста, включая 8 таблицы и 48 рисунков.

Материалы диссертации прошли достаточно широкую апробацию. По теме диссертации опубликованы 13 печатных работ, из них 3 статьей 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»** 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 защиты, свидетельствующих о личном вкладе автора в науку.

Экспертная комиссия рекомендует принять диссертацию Нематову Д.Д. **«Молекулярная ориентация ДНК на биосовместимых металлооксидных**

пленках» к защите в диссертационного совета 6D.KOA-009 по специальности 05.16.09 – Материаловедение (в нанотехнологии).

В качестве **официальных оппонентов** экспертная комиссия рекомендует:

Салихов Тагоймурод Хаитович - доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник НИИ Таджикского национального университета, член-корреспондент Национальной академии наук Таджикистана.

Анакулов Музаффар Мамадалиевич - кандидат технических наук, заведующий кафедрой физики ТГУ имени Ш. Шотемура.

В качестве ведущей организации экспертная комиссия рекомендует: филиал Национального исследовательского технологического университета «МИСиС» в городе Душанбе.

**Председатель экспертной
комиссии:**

доктор химических наук,
профессор, академик
Национальной академии наук
Таджикистана



Ганиев И.Н.

**Члены экспертной
комиссии:**

к.т.н., доцент



Идиев М.Т.

к.т.н., доцент

Акрамов Б. Н.

Подписи верны:

Ученый секретарь
диссертационного совета 6D.KOA-009
ТГУ им. Акад. М.С.Осими, к.т.н., доцент



Бабаева А.Х.

Подпись Бабаевой А. Х. заверяю
Начальник ОК и СР ТГУ
им. акад. М.С. Осими



Шарипова Д.А.