

ОТЗЫВ НАУЧНОГО РУКОВОДИТЕЛЯ

на диссертационную работу Нематова Дилшода Давлатшоевича
на тему «**Молекулярная ориентация ДНК на
биосовместимых металлооксидных пленках**»,
представленную на соискание ученой степени кандидата
технических наук по специальности
05.16.09 – Материаловедение (в нанотехнологии).

Характеристика научной и производственной деятельности соискателя

Нематов Дилшод Давлатшоевич 1994 года рождения. В 2017 году окончил **физический факультет** Таджикского национального университета по специальности «Вычислительные машины». В сентябре 2017 года начал работу в Таджикском техническом университете имени академика М.С. Осими в качестве ассистента кафедры «Физика». С 2018 года Нематов Д.Д. является соискателем кафедры «Физика». За период обучения и работы над диссертацией он проявил себя с положительной стороны. Обладает достойными теоретическими знаниями и практическим опытом.

Нематов Д.Д. является автором более 31 опубликованных научных работ, в том числе по теме диссертации 16 работ, из них 9 статьи опубликованы в журналах, рекомендуемых ВАК при Президенте РТ и 5 статьи, опубликованные в изданиях, входящих в Scopus.

Нематов Д.Д. пользуется уважением среди сотрудников и студентов кафедры «Физики» ТТУ имени М.С. Осими.

Оценка диссертация

В соответствии поставленной цели в диссертационной работе Нематова Д.Д. решены следующие задачи:

- развитие и адаптация методов квантовой химии и классической молекулярной динамики для моделирования процессов взаимодействия и радиационных повреждений ДНК на поверхности ZrO_2 . Построение и анализ моделей квантовой химии для оксидных пленок, поверхностей на основе ZrO_2 . Реализация МД-моделей для тройных молекулярных систем, таких как ДНК+ H_2O + ZrO_2 с выбором эффективных потенциалов и силовых полей;

- реализация квантово-химических расчетов с применением программного пакета WEIN2k для оценки электронных и функциональных свойств ZrO_2 с различными модификациями зарядов;

- 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. Выяснить механизмы взаимодействия и конформационного поведения ДНК, а также молекулярной ориентации ДНК в тройных молекулярных системах ДНК+ H_2O + ZrO_2 ;

- проведение молекулярно-динамического (МД) исследования процессов радиационного повреждения ДНК на поверхности ZrO_2 с оценкой динамики распределения расстояния в водной среде для моделей нативной и поврежденных версий ДНК с различными модификациями зарядов. Оценки конформационных изменений молекулы ДНК с B-Z-переходом ДНК на основе данных о динамическом изменении и ориентации отдельных фрагментов ДНК на поверхности ZrO_2 . Визуализация и графический 3-D анализ атомных траекторий процессов взаимодействия и структурных конформационных превращений ДНК на поверхности ZrO_2 .

На начальных этапах работы по теме диссертации Нематов Д.Д. в короткие сроки освоил теоретические основы процессов оптимизации и верификации основных принципов гибридного подхода МД-моделирования с практической утилизацией программных кодов WEIN2k, DL_POLY, VMD, Mathematica, т.д., например, программный пакет многоцелевого назначения МД-расчетов DL_POLY был освоен им на уровне, необходимом для решения поставленных перед ним задач по исследованиям тройных систем типа ДНК+H₂O+ZrO₂. При выполнении диссертационной работы Нематов Д.Д. тесно сотрудничает с Лабораторией нейтронной физики им И.М. Франка ОИЯИ (ОБЪЕДИНЕННОГО ИНСТИТУТА ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ), г. Дубна, Московской обл., Российской Федерации и Университетом Васеда, Токио, Япония. То есть, работая над диссертационным проектом, соискатель тесно сотрудничает в составе широкой международной коллаборации Таджикистан-Россия-Япония, что подчеркивает степень достоверности и важности полученных ими научных результатов, освещенности тематики исследования международной научной аудитории.

Представленные результаты исследований могут быть применены при решении задач моделирования динамических процессов и процессов взаимодействия биологических молекул с различными металлооксидными плёнками и поверхностями. Результаты моделирования процессов поверхностного взаимодействия ДНК с ZrO_2 могут быть использованы при интерпретации результатов экспериментальных измерений методами атомно-силовой микроскопии, поверхностного плазменного резонанса, спектрального комбинационного рассеяния, а также, при синтезе ДНК-модифицированных нанокристаллов ZrO_2 . Также результаты диссертационной работы могут быть использованы в прикладных разработках в передовых областях современной нано-био-электроники, материаловедения и биоинженерии, в качестве учебных пособий в профильных лекционных курсах высших учебных заведений.

В целом диссертация Нематова Д.Д. представляет собой масштабным и цельным научным исследованием, посвященным актуальным научным проблемам и содержит важные научные результаты, которые неоднократно докладывались на международных и республиканских конференциях и семинарах.

Диссертационная работа Нематова Д.Д. на тему «Молекулярная ориентация ДНК на биосовместимых металлооксидных пленках» соответствует требованиям ВАК при Президенте Республики Таджикистан, а её автор достоин присуждения ученой степени кандидата технических наук по специальности 05.16.09 – Материаловедение (в нанотехнологии).

Научный руководитель:

доктор физико-математических наук, профессор,
Ведущий научный сотрудник лаборатории
нейтронной физики им И.М.Франка
Объединенного института ядерных
исследований
e-mail: mirzo@jinr.ru

Х.Т. Холмуродов

Подпись Холмуродова Холмирзо Тагойкуловича удостоверяю.
Ученый секретарь Лаборатории нейтронной
физики им И.М.Франка Объединенного
института ядерных исследований

Д.М. Худоба

Лаборатория нейтронной физики имени И.М. Франка, ОИЯИ,
ул. Жолио-Кюри 6, г. Дубна, Московская обл., Россия, 141980
e-mail: dmn@nf.jinr.ru, тел.: +7 (49621) 6-50-96

