

О Т З Ы В

на автореферат диссертации Нематова Дилшода Давлатшоевича на тему: «Молекулярная ориентация ДНК на биосовместимых металлооксидных пленках», представленную в диссертационный совет 6D.КOA-009 при ТТУ имени академика М.С. Осими представленной на соискание учёной степени кандидата технических наук по специальности 05.16.09 – материаловедение (в нанотехнологии).

В диссертационной работе на основе комбинированных методов квантовой химии и молекулярной динамики в сочетании с микроскопических и спектральных методов исследования изучены процессы адсорбция и иммобилизация молекулы ДНК над поверхностью из наночастицы диоксида циркония в условиях, максимально приближенных к физиологическим условиям (температуры, давлении, водно-солевого раствора, т.д.) и экспериментальному измерению. Автором выполнен значительный объем теоретические работы и экспериментальные измерения, в результате которого были осуществлены масштабные исследования процессов взаимодействия ДНК с металлооксидными наноматериалами, обладающими биосовместимыми свойствами. Развиваемая диссертантом тематика является крайне актуальным направлением в мировой науке и молекулярно-динамические расчеты являются наиболее подходящими, а также широко употребляемыми методами для решения исследовательских проблем в этой области.

Диссертантом выполнена огромная исследовательская работа, получен большой объем оригинального научного материала, где выход удается достичь с рациональным объединение эксперимента с классических и квантовых методов моделирования. Наиболее важные результаты диссертация являются: применение методов квантовой химии и молекулярной механики для моделирования процессов взаимодействия и радиационных повреждений ДНК на ZrO_2 ; построение и анализ моделей квантовой химии для диоксида циркония; верификация МД методов для молекулярных систем типа ДНК+ ZrO_2 в водном окружение с выбором эффективных потенциалов и силовых полей; реализация квантово-химических расчетов с применением программного пакета WEIN2k для оценки электронных состояний и функциональных свойств ZrO_2 ; расчеты конформационного поведения система ДНК / ZrO_2 в пакете DL_POLY; экспериментальныт измерения процессов взаимодействия и структурообразования молекулы ДНК с нанокристаллами ZrO_2 методами спектроскопии комбинационного рассеяния и просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ).

Несмотря на очевидные достижения, работа *не лишена недостатков*, к числу которых можно отнести следующие:

- 1. Для реализации квантово-химических расчетов в рамках ТФП использовалась обменно-корреляционная функция GGA. Однако можно было использовать и другие функционалы, которые позволяют с высокой точностью оценивать электронные свойства квантовых систем по сравнению с GGA.


- 2. Фундаментальные аспекты взаимодействия молекул ДНК с наночастицами ZrO_2 до конца не изучены, хотя можно было провести дополнительные эксперименты с инфракрасными спектрометрами и получить гораздо больше информации.

- 3. В диссертации не исследованы ВАХ для ДНК-модифицированных нанокристаллов ZrO_2 , что было бы весьма интересно.

Однако указанные недостатки носят частный характер и не умаляют достоинства диссертационной работы.


Диссертация представляет собой масштабным научным исследованием, посвященным актуальным научным проблемам и содержит важные научные результаты, наиболее интересные из которых отмечены выше. Анализ автореферата показывает, что диссертация является законченной научно – исследовательской работой, выполненной современным уровне. Считаю, что диссертационная работа Наматова Д.Д. на тему «Молекулярная ориентация ДНК на биосовместимых металлооксидных пленках» удовлетворяет всем требованиям в соответствии с пунктом 116 «Порядка присвоения ученых степеней и присуждения ученых званий (доцента, профессора)» (постановление Правительства Республики Таджикистан от 26 ноября 2016 года, № 505п. 9-14, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а сам диссертант Нематов Дилшод Давлатшоевич заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата технических наук по специальности 05.16.09 – Материаловедение (в нанотехнологии).

Заслуженный деятель науки и техники
Таджикистана, доктор технических наук,
профессор кафедры экспериментальной
физики ТГПУ имени С. Айни


Маджидов Хамид

Подпись д.т.н., профессора Маджидова Х.
заверяю:

Начальник отдела кадров и специальных
работ ТГПУ имени С. Айни


Назаров Д.К.