

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.КОА-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).

Квантово-химические и молекулярно-динамические исследование электронных и структурных свойств, а также взаимодействия наноразмерных материалов с биологическими молекулами на атомном и молекулярном уровне, представляет собой актуальнейший подход в современной науке с огромным набором фундаментальных и прикладных выгод и приложений. Детальное изучение электронных свойств наноразмерных материалов, в том числе оксидных тонких пленок, позволяют обнаружить их новые свойства, раскрыт новые возможности их применения.

Молекула ДНК ввиду комплекса уникальных свойств, чрезвычайно интересна как функциональный элемент биоэлектронных устройств. Известно, что сочетание биомолекул (ДНК, РНК, нуклеотиды) с поверхностью твердых тел (наночастицы, пленки и подложки из металлических и металло-оксидных соединений) может стать основой для разработки нового класса материалов для молекулярной электроники, в первую очередь, для электронных сенсорных и оптических систем, биочипов, массивов памяти компьютерных архитектур будущего и т.д.

В рецензируемой работе авторами были рассмотрены задачи аккомодации ДНК под действием силового поля поверхности твердого тела и внешних энергетических полей. С применением гибридные молекулярно-динамические квантово-механические методы, осуществлены масштабные моделирование процессов взаимодействия ДНК с твердой поверхностью ZrO_2 ; рассмотрены сложные системы, насчитывающие до сотен тысяч атомов. Для моделирование были использованы современные вычислительные методы и программные пакеты (WEIN2k-для реализация квантово-химических расчетов, DL_POLY-для МД моделирование система ДНК/ ZrO_2). Также освещены важные в области МД моделирования аспекты графического и визуализационного трехмерного представления данных МД анализа. Работа также включает в себе результаты экспериментальных исследований процессов адсорбции молекулы ДНК на поверхности ZrO_2 и формирование биосовместимых комплексов ДНК/ ZrO_2 . Полученные автором спектры комбинационного рассеяния света в системе ДНК+вода+ ZrO_2 сравниваются с полученными теоретическими данными. Результаты рамановской спектроскопии, полученные при комнатной температуре с использованием спектрометра LabRAM HR Evolution в ОИЯИ, указывают на наличие валентных и деформационных колебаний групп атомов азотистых оснований: C - H, O - H, O - P - O, которые образуют молекулу ДНК. Морфология объемных образцов, также было исследовано с помощью просвечивающей

электронной микроскопии (ПЭМ) на приборе JEM 200A. Обнаружена, что в поляризации раствора ДНК с буфером, вызванная двойным электрическим слоем, жестко соединенные с поверхностью наночастицы вносят дополнительный вклад в электронную поляризацию молекул, индуцированной действием световых волн и, как следствие, приводят к изменению частот комбинационного рассеяния. Такое поведение системы может быть вызвано путем блокирования или скрининга соответствующих фрагментов ДНК с введенными наночастицами, что четко соответствует теоретическим результатам в этой работе. С другой стороны было обнаружено, что, при адсорбировании ДНК на поверхности ZrO_2 , поверхностные эффекты играют большую роль в иммобилизационных процессах в системе ДНК - наночастицы, а размер наночастиц не оказывает существенного влияния на происходящие волновые процессы, в частности, на параметры частотной модуляции на границе раздела ДНК/ ZrO_2 .

Внесенные в диссертацию положения содержат новизну. К наиболее весомым результатам, по мнению рецензента, можно отнести результаты исследований релаксации структуры биомолекул на интерфейсе ДНК / ZrO_2 ; исследования структурных превращений и динамики взаимодействия ДНК с поверхностью ZrO_2 , сопряженные с механизмами В-Z-переходов ДНК; рассмотренные на атомно-молекулярном уровне эффекты радиационного воздействия в системе ДНК / поверхность ZrO_2 .

Диссертационная работа Наматова Д.Д. «Исследование молекулярной ориентации ДНК на биосовместимых метало-оксидных пленках гибридными методами квантовой химии и молекулярной динамики» удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а диссертант Нематов Дилшод Давлатшоевич заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата технических наук по специальности 05.16.09 – Материаловедение (в нанотехнологии).

Рецензент:

доцент кафедры «Информационные
технологии и автоматизация»
Душанбинского филиала
НИТУ «МИСиС»,
кандидат технических наук

Табаров Ф.С.

Подпись к.т.н., доцента Ф.С. Табарова заверяю:

Начальник отдела кадров ДФ НИТУ «МИСиС»

Зарипова М.А.

