

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ЭКСПЕРТНОЙ КОМИССИИ

диссертационного совета 6D.KOA-009 при Таджикском техническом университете имени академика М.С. Осими по диссертационной работе Нематова Дилшода Давлатшоевича на тему **«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.KOA-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), в частности пунктам:

-п.1. Закономерности формирования структуры материалов с заданным комплексом эксплуатационных характеристик в зависимости от их состава, а также при различных воздействиях (механическом, термическом, термомеханическом, радиационном и других). (С помощью гибридных методов квантовой химии и классической МД исследованы и выявлены основные фундаментальные механизмы взаимодействия и молекулярной ориентации и радиационного повреждения ДНК на биосовместимой поверхности ZrO_2 ; методами КР - спектроскопии обнаружены основные факторы взаимодействия и условия структурообразование биосовместимых комплексов ДНК/ ZrO_2 , сопровождающих агрегацией ZrO_2 за счет поверхностного взаимодействия ДНК и ZrO_2);

-п.2. Закономерности изменения механических, физических, физико-химических и других эксплуатационных свойств материалов в условиях их практического использования в определенных областях и взаимосвязь этих изменений с изменением их фазового и химического состава. (Для нативной и поврежденных версий ДНК смоделированы и изучены процессы взаимодействия и конформационного поведения ДНК/ ZrO_2 в условиях физиологических температур и водного окружения на атомно/молекулярном уровне; стало известно, что происходит сильный контакт и тесное свзь ДНК и ZrO_2 за счет их электрического взаимодействия на расстояния 1.5 нм, когда выбранные атомы и участки ДНК станут отрицательно-заряженными ионами);

-п.3. Механизмы фазовых и структурных превращений в материалах при их получении, обработке давлением, термических воздействиях, модификации поверхностных слоев, в процессе эксплуатации в изделиях различного назначения. (С применением и верификацией множественных МД-моделей, реализацией эффективных потенциалов и силовых полей смоделированы различные сценарии повреждения и динамики структурных превращений ДНК

(фазовых переходов ДНК) сопряженные с механизмами В-Z-переходов ДНК/ ZrO_2 ; стало известно, что в водных растворах ZrO_2 имеет положительный поверхностный заряд, способствующий физической адсорбции ДНК за счет электростатических взаимодействий ДНК и ZrO_2);

-п.4. Разработка физико-химических и физико-механических основ процессов формирования новых материалов с уникальными комплексами свойств (функциональные, эксплуатационные и технологические), оптимальной себестоимостью и экологической безопасностью. (Построены серия компьютерных МД - модельных структур для наноразмерных систем на основе ZrO_2 , сопряженных с процессами иммобилизации ДНК / поверхность ZrO_2 ; методами компьютерной визуализации и графического 3-D анализа атомных траекторий показана, что при взаимодействиях ДНК с подложкой (ZrO_2) её фосфатная часть сильнее притягивается к подложке ZrO_2 по сравнению с другими фрагментами молекулы);

-п.4. Разработка физико-химических и физико-механических основ процессов формирования новых материалов с уникальными комплексами свойств (функциональные, эксплуатационные и технологические), оптимальной себестоимостью и экологической безопасностью. (Методами рамановской спектроскопии (комбинационного рассеяния света) и ПЭМ получены спектры изменения интенсивности света при формировании комплексов ДНК+ ZrO_2 , ДНК+ H_2O + ZrO_2 и ДНК+ H_2O +YSZ (итрий-стабилизированные наночастицы ZrO_2), а также получены снимки структур молекулярных комплексов ДНК-модифицированных нанокристаллов ZrO_2).

-п.6. Закономерности и критерии оценки разрушения структуры; современные методы исследования макро-, микро- и субмикроструктуры материалов, заготовок и деталей; методы испытания и определения физико-механических и физикохимических характеристик материалов, заготовок и деталей, эксплуатационных свойств материалов на образцах и изделиях. (На основе ТФП реализованы квантово-химические расчеты электронных свойств ZrO_2 с целью дальнейшего проведения МД-моделирования процессов взаимодействия ДНК с поверхности ZrO_2 на атомном/молекулярном уровне; выявлено, что кулоновское притяжения ДНК с поверхностью ZrO_2 в основном происходит за счёт электронов атома кислорода из-за низкого уровня ПЭС и повышенных вакантных мест в орбитах атомов кислорода);

-п.7. Математические модели физико-химических, гидродинамических, тепловых, хемореологических и деформационных превращений при производстве, обработке, переработке и эксплуатации различных материалов. Компьютерный анализ и оптимизация процессов получения и эксплуатации материалов. (Методом компьютерной молекулярной динамики, с реализацией эффективных потенциалов и силовых полей смоделированы и изучены нетривиальные процессы радиационного повреждения ДНК, различные сценарии повреждения ДНК/ ZrO_2 со всевозможными модификациями зарядов в системе; исследованы процессы структурных изменений и динамики взаимодействия ДНК с поверхностью ZrO_2 , сопряженные с механизмами В-Z-

переходов ДНК).

Актуальность темы. В диссертационной работе комбинированными методами квантовой химии и классической молекулярной динамики с сочетанием методов спектроскопии комбинационного рассеяния (СКР) и просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) исследованы весьма актуальные на сегодняшний день проблемы иммобилизации, взаимодействия, конформационного превращения 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. Для конструирования молекулярных электронных устройств необходимо научиться «управлять» молекулами, позиционировать их в заданном месте подложки с необходимой ориентацией. Поэтому на сегодняшний день крайне актуальным является изучение процессов иммобилизации молекул ДНК на твердых и оксидных поверхностях, полупроводников и диэлектрических материалах с целью исследования молекулярной ориентации и радиационных повреждений ДНК. Более того, для каждой индивидуальной биомолекулы, используемой в конкретном технологическом процессе, необходимо подбирать оптимальные варианты как носителя, так и условий, и способов иммобилизации. С другой стороны, к моменту начала исследований, описанных в данной диссертации, имелся ряд нерешенных вопросов, связанных с проблемами иммобилизации ДНК на биосовместимой поверхности ZrO_2 , модификации поверхности ZrO_2 и получения биосовместимых комплексов ДНК+ ZrO_2 . Этим определяются актуальность и научная значимость темы диссертации.

Целью диссертационной работы заключается в исследование процессов иммобилизации (молекулярной ориентации и конформационных превращений) молекулы ДНК при взаимодействии с биосовместимой поверхностью ZrO_2 и структурообразование комплексов ДНК/ ZrO_2 – наночастиц.

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 качественная и количественная оценки конформационного поведения ДНК на поверхности ZrO_2 для моделей радиационного повреждения ДНК с различными модификациями зарядов в системе;

- реализованы экспериментальные наблюдения процессов взаимодействия и структурообразования в системе молекула ДНК – поверхность ZrO_2 методом комбинационного рассеяния света и получены ПЭМ – картины ДНК-модифицированных нанокристаллов ZrO_2 .

Теоретическая и практическая значимость: Полученные теоретические и экспериментальные результаты о динамике и особенностях взаимодействия ДНК с поверхностью ZrO_2 , а также развитый гибридный подход, сочетающий в себе квантово-химические и молекулярно-динамические методы моделирования, могут быть использованы при дизайне и технологиях синтеза биомолекул / оксидная поверхность (ДНК-модифицированные 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 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.

Диссертация состоит из введения, трёх глав, выводов, списка литературы из 105 наименований библиографических ссылок и приложения. Работа изложена на 138 страницах машинописного текста, включая 8 таблицы и 50 рисунков.

Материалы диссертации прошли достаточно широкую апробацию. По материалам диссертационной работы опубликованы 9 статей в рецензируемых научных журналах (из них 5 в Scopus) и 7 статей в материалах международных и республиканских научных конференций.

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 на тему «**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. на тему «Молекулярная ориентация ДНК на биосовместимых металлооксидных пленках» к защите в диссертационном совете 6D.KOA-009 по специальности 05.16.09 – материаловедение (в нанотехнологии).

В качестве официальных оппонентов экспертная комиссия рекомендует:

Коваленко Илья Борисович - доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник проблемной лаборатории космической биологии биологического факультета ФГБОУ ВО Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова.

Файзиева Малохат Рахимджонова – кандидат физико – математических наук, доцента кафедры оптики и спектроскопии физического факультета Таджикского национального университета.

В качестве **ведущей организации** экспертная комиссия рекомендует Институт химии имени В.И. Никитина Национальной Академии наук Таджикистана.

Председатель экспертной комиссии:

д.х.н., профессор, академик НАНТ



Ганиев И.Н.

Члены экспертной комиссии:

д.т.н., профессор



Сафаров А.М.

д.т.н., профессор



Гафаров А.А.

Подписи верны:

Ученый секретарь

диссертационного совета 6D.KOA-009

ТТУ им. акад. М.С.Осими, к.т.н., доцент



Бабаева А.Х.