

**ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 6D.КОА-013  
НА БАЗЕ ТАДЖИКСКОГО НАЦИОНАЛЬНОГО УНИВЕРСИТЕТА ПО  
ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ ДОКТОРА  
ФИЛОСОФИИ (PhD) - ДОКТОРА ПО СПЕЦИАЛЬНОСТИ 6D070500 –  
«МАТЕМАТИЧЕСКОЕ И КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ».**

Аттестационное дело

Решение диссертационного совета от 27.08.2020 г., протокол №1

О присуждении Хамидовой Дилором Насруллоевне, гражданке Республики Таджикистан, ученой степени доктора философии (PhD) – доктора по специальности 6D070500 – «Математическое и компьютерное моделирование».

Диссертация *“Компьютерное моделирование методом молекулярной динамики амилоидных фибрилл и их разрушение дендримерами и дендриграфтами”* по специальности 6D070500 – «Математическое и компьютерное моделирование» принята к защите 2 апреля 2020г., протокол №1, диссертационным советом 6D.КОА-013 на базе Таджикского национального университета (734025, г. Душанбе, проспект Рудаки, 17), созданным на основании приказа ВАК при Президенте Республики Таджикистан от 6 июня 2017 года №22.

Хамидова Дилором Насруллоевна, родилась 15 сентября 1989 года в г. Душанбе.

В 2012 окончила с отличием факультет «Инновационные и компьютерные технологии» по специальности «инженер – системотехник» Технологического университета Таджикистана.

После окончания работала на кафедре «Программирование и информационные технологии» данного университета.

В 2014 году поступила в магистратуру Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики и в 2016 году окончила его с отличием по специальности «Информационные технологии и измерительные системы в биотехнологии и биоинженерии».

С 2016 по 2019 годы проходила докторантуру на механико-математическом факультете Таджикского национального университета.

Диссертация выполнена на кафедре информатики Таджикского национального университета.

**Научный руководитель:** Комилийён Файзали Саъдулло - доктор физико-математических наук, профессор кафедры информатики Таджикского национального университета.

**Научный консультант:** Неелов Игорь Михайлович - доктор физико-математических наук, профессор кафедры информационной технологии топливно-энергетического комплекса НИУ ИТМО (РФ).

**Официальные оппоненты:**

1. Муминов Хикмат Халимович - доктор физико-математических наук, профессор, академик, вице-президент Академии наук Республики Таджикистан.
2. Иброгимов Дилшод Эмомович - доктор химических наук, доцент, заведующий кафедрой переработки энергоносителей и нефтегазового сервиса ТТУ имени академика М.С. Осими.

**Оппонирующая организация** – Таджикский государственный медицинский университет имени Абуали ибни Сино в своем положительном отзыве, подписанным доктором медицинских наук, профессором Мухабатовым Дж.К., заведующим кафедрой медицинской и биологической физики с основами информационных технологий доктором медицинских наук, профессором Шерматовым Д.С., заведующим кафедрой биохимии кандидатом химических наук, доцентом Махсудовой М.С., заведующим кафедрой неврологии и основы медицинской генетики кандидатом медицинских наук Ганиевой М.Т. и утвержденный ректором ГОУ «Таджикского государственного медицинского университета имени Абуали ибни Сино» доктором медицинских наук, профессором Гулзода М.К. указала, что диссертационная работа Хамидовой Дилором Насруллоевны *“Компьютерное моделирование методом молекулярной динамики амилоидных фибрилл и их разрушение дендримерами и дендриграфтами”* является законченным научным исследованием и соответствует всем требованиям «Положения о порядке присуждения учёных степеней», предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени доктора философии (PhD) – доктора по специальности 6D070500 – «Математическое и компьютерное моделирование», а её автор Хамидова Дилором Насруллоевна заслуживает присуждения ей ученой степени доктора философии (PhD) – доктора по специальности 6D070500 – «Математическое и компьютерное моделирование».

**Выбор официальных оппонентов обосновывается** тем, что они являются признанными специалистами в исследуемой области (имеются опубликованные работы, близкие к теме диссертации).

**Выбор оппонирующей организации обусловлен** тем, что преподаватели Таджикского государственного медицинского университета имени Абуали ибни Сино являются признанными специалистами в области науки близкие по теме диссертации, имеют широко известные достижения в этих областях науки и способны объективно оценить научную и практическую ценность диссертационного исследования.

Соискатель имеет 24 опубликованные работы, в том числе по теме диссертации 24 работы, в рецензируемых научных изданиях – 18.

**Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:**

- [1-А] *Popova, E. Lysine Dendrimers and Their Complexes with Therapeutic and Amyloid Peptides: Computer Simulation / E. Popova, D. Khamidova, I. Neelov, F. Komilov // Dendrimers. Fundamentals and Application. IntechOpen. – 2018, UK, London. – P. 29-45 (коллективная монография).*
- [2-А] *Попова, Е. В. Компьютерное моделирование взаимодействия лизиновых дендримеров со стопкой амилоидных пептидов / Е.В. Попова, Д.Н. Хамидова, И.М. Неелов, Ф.С. Комилов, Ф. Леермакерс // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. – 2017. – Т. 17. – № 6. – С. 1033-1044. – DOI: 10.17586 /2226-1494-2017-17-6-1033-1044.*
- [3-А] *Хамидова, Д. Н. Компьютерное моделирование амилоидных пептидов методом молекулярной динамики / Д.Н. Хамидова, Ф.С. Комилов // Вестник Таджикского национального университета. Серия естественных наук. – 2018. – № 2. – С. 48-53.*
- [4-А] *Хамидова, Д.Н. Компьютерное моделирование взаимодействия лизинового дендримера и пептидов Эпиталон / Д.Н. Хамидова А.В. Попова, В.В. Безродный, С.Е. Михтанюк, Е.В. Попова, И.М. Неелов, Ф. Леермакерс // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. –2018.–Т.18.–№4. – С.595-605. – DOI: 10.17586/2226-1494-2018-18-4-595-605.*
- [5-А] *Хамидова, Д.Н. Компьютерное моделирование взаимодействия лизиновых дендриграфтов с молекулами амилоидных пептидов / Д.Н. Хамидова, М.Ю. Ильяш, В.В. Безродный, Э.И. Фатуллаев, С.Е. Михтанюк, И.М. Неелов, Ф. // Известия Санкт-Петербургского государственного технологического института (технического университета). – 2019. – № 50 (76). – С. 85-91.*
- [6-А] *Хамидова, Д. Н. Компьютерное моделирование фрагментов амилоидных пептидов и их взаимодействие с дендримерами /Д.Н. Хамидова// Вестник Таджикского национального университета. Серия естественных наук.–2017.– № 1. – С. 83-88.*

- [7-A] *Neelov, I.* Molecular Dynamics Simulation of Interaction of Lysine Dendrigraft of 2<sup>nd</sup> Generation with Stack of Amyloid Peptides / I. Neelov, **D. Khamidova**, V. Bezrodnyi, S. Mikhtaniuk // International journal of biology and biomedical engineering. – 2019. – P. 26-31. – ISSN: 1998-4510.
- [8-A] **Khamidova, D.N.** Molecular dynamics simulation of complexes of lysine dendrimer and dendrigraft with AENG tetrapeptide / D.N. Khamidova, V.V. Bezrodnyi, A.V. Popova, S.E. Mikhtaniuk, I.M. Neelov, E.V. Popova // International journal of biology and biomedical engineering. – 2018. – P. 4558.
- [9-A] *Neelov, I.* Complexes and conjugates of lysine dendrimer with therapeutic tetrapeptides. Molecular dynamics simulation / I. Neelov, E. Popova, **D.Khamidova** // AIP Conference Proceedings 2. Series Mathematical Methods and Computational Techniques in Science and Engineering II. – 2018. – P. 20-28.
- [10-A] *Neelov, I.* Computer simulation of interaction of lysine dendrimer with stack of amyloid peptides / I. Neelov, **D. Khamidova**, E. Popova, F. Komilov // Proceedings – 2017 4<sup>th</sup> International conference on mathematics and computer science and in industry, MCSI 2017. – 2018. – P. 183-188.
- [11-A] *Neelov, I.* Interaction of lysine dendrimers of 2<sup>nd</sup> and 3<sup>rd</sup> generation with stack of amyloid peptides. Molecular dynamics simulation / I. Neelov, E. Popova, **D. Khamidova**, F. Komilov // International Journal of Biology and Biomedical Engineering. – 2017. – V. 11. – P. 95-100.
- [12-A] *Neelov, I.* Interaction of lysine dendrimers with therapeutic peptides. Molecular dynamics simulation / I. Neelov, E. Popova, **D. Khamidova**, I. Tarasenko // International Journal of Biology and Biomedical Engineering. – 2017. – V. 11. – P. 194-203.
- [13-A] *Neelov, I. M.* Complexes of Lysine Dendrimers of 2<sup>nd</sup> Generation with Semax and Epithalon Peptides / I.M. Neelov, E.V. Popova, **D.N. Khamidova**, I.I. Tarasenko // Molecular Dynamics Simulation. International Journal of Biochemistry Research. – 2017. – V. 2. – P. 28-33.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

**разработана** компьютерная модель взаимодействия положительно заряженных лизиновых дендримеров второго и третьего поколения и дендриграфтов второго поколения со стопками амилоидных пептидов LVFFAE

**предложено** что физическим механизмом, ответственным за разрушение амилоидных стопок, является наличие электростатических

взаимодействий между противоположно заряженными дендримерами (дендриграфтами) и пептидами

**доказано** что дендримеры и дендриграфты взаимодействуя с амилоидными пептидами, образуют разрушенные фибриллы и устойчивые комплексы, что амилоидные пептиды LVFFAE находятся в основном на поверхности комплексов, почти не проникая в них.

**Теоретическая значимость исследования обосновано тем, что:**

**доказаны** что дендримеры (дендриграфты) взаимодействуя с амилоидными пептидами, приводят к разрушению амилоидных фибрилл применительно к проблематике диссертации результативно (эффективно, то есть с получением обладающих новизной результатов) **использован** комплекс существующих базовых методов исследования

**изложены** доказательства, что рассмотренные фрагменты фибрилл (стопки), состоящие из коротких амилоидных пептидов с первичной структурой LVFFAE, содержащие гидрофобный участок амилоидных фибрилл  $A\beta_{1-40}$  и  $A\beta_{1-42}$  являются стабильными и хорошо согласуются с ранними результатами моделирования других авторов, агрегатов пептида, состоящих из сходных коротких амилоидных пептидов

**изучены** связи данной работы с другими авторами, которые были получены в работах группы профессора Б. Клайнерта в 2006 году и его соавторами

**Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:**

**разработаны** подходы по разрушению стопок амилоидных пептидов с помощью лизиновых дендримеров и дендриграфтов, также может быть внедрено для разрушения токсичных амилоидных олигомеров и фибрилл в организме человека, применено в лечении нейродегенеративных заболеваний и использовано для создания лекарственных препаратов по лечению болезни Альцгеймера, а также для доставки биоактивных терапевтических пептидов в раковые и другие клетки организма.

**создана** компьютерная модель взаимодействия лизиновых дендримеров и дендриграфтов с амилоидными пептидами

**Оценка** достоверности результатов исследования выявила:

**для экспериментальных работ** показаны результаты в виде конформаций в различных условиях

**использованы** современные методы использования компьютерного моделирования методом молекулярно динамики.

**Личный вклад** соискателя состоит в определении всех направлений исследований, в самостоятельном написании диссертации, в

непосредственном принятии участия в постановке задач, в проведении компьютерных расчётов и теоретических исследований, в анализе и обсуждении полученных результатов. Эти результаты характеризуются внутренним единством из-за наличия связей между ними в рамках теоретического исследования и разработки компьютерной модели для задач управления, и представляют собой вклад в развитие теории и практики автоматизации управленческих задач. Они могут быть применены для дальнейшего моделирования разветвлённых пептидов и, в частности, дендримеров и дендриграфтов.

На заседании 27 августа 2020 г. диссертационный совет принял решение присудить Хамидовой Д.Н. ученую степень доктора философии (PhD) – доктора по специальности 6D070500 – «Математическое и компьютерное моделирование».

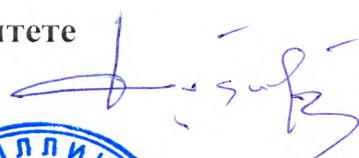
При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 11 человек, из них 6 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 15 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за- 11, против - нет, недействительных бюллетеней- нет.

**Председатель диссертационного совета**

**6D.KOA-013**

**при Таджикском национальном университете**

**д. ф.-м н., профессор**



**Юнуси М.**

**Учёный секретарь диссертационного совета**

**6D.KOA-013**

**при Таджикском национальном университете**

**к. ф. м. н., доцент**



**Садуллоев Р.И.**