

Заключение

комиссии диссертационного совета 24.2.392.06 на базе ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского» по диссертации Бокарева Андрея Николаевича «Межмолекулярное взаимодействие алмазоподобных наночастиц с лекарственными препаратами и биомолекулами», представляемой на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по научной специальности 1.3.6. – Оптика.

Диссертационная работа Бокарева А.Н. выполнена на кафедре оптики и биофотоники Института физики ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского». Научный руководитель – Пластун Инна Львовна, доктор физико-математических наук, доцент, профессор кафедры "Информационная безопасность автоматизированных систем" ФГБОУ ВО "СГТУ имени Гагарина Ю.А."

Диссертационная работа Бокарева А.Н. посвящена изучению спектральных проявлений межмолекулярного взаимодействия алмазоподобных наночастиц с противоопухолевыми препаратами на примере антибиотиков доксорубицина и митоксантрона и с азотистыми основаниями ДНК на основе моделирования ИК спектров методами теории функционала плотности с последующим определением параметров образующихся водородных связей для оценки степени устойчивости молекулярных комплексов.

В диссертационной работе для определения равновесных геометрических конфигураций и расчёта ИК спектров наноалмазов и их комплексов с противоопухолевыми лекарственными препаратами и биомолекулами предложен новый подход, основанный на использовании в качестве модели карбоксилированного наноалмаза молекулы 1,3,5,7-адамтантетракарбоновой кислоты. Проведена верификация предложенного подхода на основе сравнения с экспериментальными данными.

В рамках диссертационной работы методами теории функционала плотности впервые определены равновесные геометрические конфигурации и рассчитаны ИК спектры молекулярных комплексов карбоксилированных наноалмазов с биомолекулами на примере азотистых оснований ДНК в кристаллической фазе и водном окружении. На основе анализа спектральных проявлений межмолекулярного взаимодействия определены параметры образующихся межмолекулярных водородных связей в комплексах карбоксилированных наноалмазов и азотистых оснований ДНК. Проведена сравнительная оценка силы межмолекулярного взаимодействия карбоксилированных наноалмазов с различными азотистыми основаниями ДНК. Установлена последовательность по степени убывания силы межмолекулярного взаимодействия между карбоксилированными

наноалмазами и азотистыми основаниями ДНК: цитозин -> аденин -> тимин -> гуанин, которая хорошо согласуется с полученными экспериментальными результатами по адсорбции азотистых оснований на поверхность карбоксилированных наноалмазов. Методами теории функционала плотности впервые определены равновесные геометрические конфигурации и рассчитаны ИК спектры молекулярных комплексов карбоксилированных наноалмазов с противоопухолевыми лекарственными препаратами доксорубицином и митоксантроном в кристаллической фазе и водном окружении. Установлено, что в данных комплексах происходит достаточно сильное супрамолекулярное взаимодействие, что проявляется в возникновении большого количества водородных связей средней силы, обеспечивающих высокую устойчивость соединений.

В диссертационной работе на основе сравнительного анализа спектральных проявлений межмолекулярного взаимодействия в кристаллической фазе и водном окружении установлено влияние водного окружения на параметры водородных связей в молекулярных комплексах карбоксилированных наноалмазов с азотистыми основаниями ДНК и противоопухолевыми лекарственными препаратами доксорубицином и митоксантроном. В водном окружении происходит ослабление всех водородных связей в рассмотренных комплексах по сравнению с кристаллической фазой, но при этом ни одна водородная связь не разрывается, а классификация по силе остаётся неизменной. Методами теории функционала плотности построены равновесные геометрические конфигурации и рассчитаны ИК спектры наноалмазов с различными поверхностными функциональными группами (-COOH, -OH, -H, -NH₂) в водном окружении. Установлено, что Н-группы на поверхности наноалмаза не образуют водородных связей с молекулами воды, все карбоксильные (-COOH) и гидроксильные (-OH) группы образуют по две водородные связи с молекулами воды, а аминогруппы (-NH₂) по одной. При этом наиболее сильные водородные связи образуются с участием карбоксильных (-COOH) и амино- (-NH₂) групп.

Комиссия пришла к выводу, что диссертационная работа содержит решение актуальной задачи по исследованию спектральных проявлений межмолекулярного взаимодействия алмазоподобных наночастиц с противоопухолевыми препаратами на примере антибиотиков доксорубицина и митоксантрона и с азотистыми основаниями ДНК на основе моделирования ИК спектров методами теории функционала плотности и соответствует специальности 1.3.6.– Оптика.

По материалам диссертации опубликовано 32 печатных работы (из них 1 монография, 11 статей в изданиях из перечня ВАК РФ и изданиях, входящих в базу цитирования SCOPUS), а также получены 2 авторских свидетельства Роспатента о государственной регистрации программы для ЭВМ.

Содержание опубликованных работ полностью отражает содержание диссертации.

При использовании чужих материалов и результатов исследований соискатель ссылается на источник заимствований. В диссертации приведен список используемой литературы. В диссертации и автореферате приведен список основных публикаций автора в изданиях, входящих в перечень ВАК или включенных в базу данных SCOPUS. Недостоверных сведений об опубликованных соискателем работах в диссертации не обнаружено. Согласно результатам проверки, в системе «РУКОНТЕКСТ» процент оригинальности текста составляет 98%, включая 37% цитирования собственных работ.

На основе вышеизложенного комиссия заключает, что диссертационная работа удовлетворяет требованиям пп. 9-11, 13, 14 действующего «Положения о присуждении ученых степеней», а количество публикаций в рецензируемых изданиях достаточно для представления диссертации к защите на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук. Текст диссертации, представленной в диссертационный совет, идентичен тексту диссертации, размещенной на сайте организации.

Комиссия рекомендует:

1. Принять диссертацию Бокарева Андрея Николаевича «Межмолекулярное взаимодействие алмазоподобных наночастиц с лекарственными препаратами и биомолекулами» к защите на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.6. – Оптика в диссертационном совете 24.2.392.06 на базе ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского».
2. В качестве официальных оппонентов рекомендуются:
Горин Дмитрий Александрович, доктор химических наук, профессор, профессор Центра фотоники и квантовых материалов Автономной некоммерческой образовательной организации высшего образования «Сколковский институт науки и технологий».
(Сколковский институт науки и технологий, Сколтех).
Хренова Мария Григорьевна, доктор физико-математических наук, профессор РАН, профессор кафедры физической химии Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова»
(ФГБОУ ВО «МГУ им. М.В. Ломоносова»).
3. В качестве ведущей организации рекомендуется: Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Ивановский государственный химико-технологический университет".

Состав комиссии:

Председатель комиссии

д.ф.-м.н., профессор

(член диссертационного совета 24.2.392.06
по специальности 1.3.6.-Оптика)



Глухова О.Е.

д.ф.-м.н., доцент

(член диссертационного совета 24.2.392.06
по специальности 1.3.6.-Оптика)



Тен Г.Н.

д.ф.-м.н., профессор

(член диссертационного совета 24.2.392.06
по специальности 1.3.6.-Оптика)



Берзин К.В.