

ОТЗЫВ
научного руководителя

на диссертационную работу Бокарева Андрея Николаевича
**«Межмолекулярное взаимодействие алмазоподобных наночастиц
с лекарственными препаратами и биомолекулами»,**
представленную на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.6 - «Оптика»

Диссертационная работа Бокарева А.Н. посвящена решению актуальной задачи оптики и спектроскопии модифицированных наноалмазов и алмазоподобных наночастиц, связанной с изучением спектральных проявлений процессов комплексообразования наноалмазов с лекарственными препаратами и биомолекулами в ходе адресной доставки и удержания лекарств в клетках организма с целью повышения их терапевтического действия. Методами квантовохимического молекулярного моделирования на основе теории функционала плотности были рассчитаны ИК спектры и структура молекулярных комплексов и их составляющих и проанализированы параметры спектров и образующихся в мультикомпонентных смесях водородных связей, на основе чего были сделаны выводы о силе межмолекулярного взаимодействия и возможностях комплексообразования. Результаты работы представляют значительный интерес как для изучения оптических свойств и спектральных характеристик алмазоподобных наночастиц и их комплексов, так и для установления механизмов взаимодействия наноалмазов с лекарственными препаратами и биомолекулами в ходе терапии различных заболеваний.

Бокаревым А.Н. был апробирован и реализован новый подход к молекулярному моделированию наноалмазов с модификацией поверхности. Предложенный подход строится на использовании в качестве модельного объекта более мелких алмазоподобных структур на основе адамантана как наименьшего диамантоида и является весьма эффективным для подобных объектов.

За время работы над диссертацией Бокаревым А.Н. был выполнен большой объём исследований аналитического, расчётного и модельного характера, разработаны программные комплексы графической визуализации численного эксперимента, получены новые научные результаты, объясняющие экспериментальные наблюдения других исследователей. По результатам исследований, выполненных в ходе работы над диссертацией, опубликованы 32 работы, в том числе одна монография, 11 статей в изданиях, входящих в перечень ВАК РФ и базу цитирования SCOPUS, получены 2 свидетельства Роспатента о государственной регистрации программы для ЭВМ. Материалы диссертационного исследования были представлены на 28 международных и всероссийских научных конференциях, школах и семинарах.

На всех этапах работы над диссертацией А.Н. Бокаревым был продемонстрирован высокий уровень профессиональной подготовки, о чём свидетельствуют виртуозное владение современными программными средствами проведения численного эксперимента на основе методов теории функционала плотности, вдумчивая и кропотливая работа с научной литературой и глубокие познания в области оптики и спектроскопии углеродных наноструктур.

Владение аналитическими подходами, принятыми в молекулярном моделировании, умение не только соотносить результаты выполненных расчётов с

данными натуральных экспериментов, но и делать выводы на основе полученных результатов исследования говорят о том, что А.Н. Бокарев является самостоятельным сложившимся исследователем.

Большинство новых научных результатов в рамках проведённого диссертационного исследования получены диссертантом самостоятельно с применением современных средств квантовохимического молекулярного моделирования. Необходимо отметить, что результаты исследования имеют большое прикладное значение как для оптики и спектроскопии алмазоподобных наноструктур, так и для таргетной терапии онкологических заболеваний.

Считаю, что диссертационная работа представляет собой завершённое научное исследование и является научно-квалификационной работой, выполненной на высоком уровне и удовлетворяющей всем требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а её автор Бокарев Андрей Николаевич заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.6 - «Оптика».

Д.ф.-м.н., профессор кафедры
«Информационная безопасность
автоматизированных систем»
ФГБОУ ВО «Саратовский государственный
технический университет имени Гагарина Ю.А.,

Пластун Инна Львовна

410052 г.Саратов,
ул.Политехническая, 77,
Тел. (845-2) 99-88-04,
e-mail: inna_pls@mail.ru

10.04.2023

Подпись Пластун И.Л. заверяю,
Учёный секретарь Ученого совета
СГТУ имени Гагарина Ю.А.,



Тищенко Н.В.