

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации **Бокарева Андрея Николаевича** «**Межмолекулярное взаимодействие алмазоподобных наночастиц с лекарственными препаратами и биомолекулами**», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.6 – «оптика»

В настоящее время одним из активно разрабатываемых направлений применения в медицинских целях наноалмазов является их использование для адресной доставки лекарств с целью улучшения терапевтического действия. Основной целью кандидатской диссертации А.Н. Бокарева является исследование 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.

Теоретическую и прикладную важность выполненных А.Н. Бокарева исследований трудно переоценить.

- Так, например, соискателем методом функционала 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.
- Впервые в работе определены равновесные геометрические конфигурации и рассчитаны ИК спектры наноалмазов с различными поверхностными функциональными группами в водном окружении. На основе анализа спектральных проявлений взаимодействия молекул воды с поверхностными функциональными группами установлены параметры образующихся в водном растворе водородных связей в зависимости от типа функционализации поверхности.

Следует также согласиться с автором, что полученные научные результаты позволяют более точно интерпретировать экспериментальные ИК спектры данных молекулярных комплексов.

В качестве замечания отмечу следующее:

В автореферате на рисунках 2, 3, 5 – 8 приведены экспериментальные и рассчитанные спектры исследуемых в кандидатской диссертации соединений, однако не указано каким образом и с какой точностью проведены компьютерные расчеты.

Указанный недостаток не отражается на моей в целом высокой оценке проделанной автором научной работы. Результаты научного исследования представлялись на большом количестве научных конференций разного уровня. Солиден и список из 32 публикаций автора, который включает 1 монографию и 11 статей в изданиях списка ВАК. Соискателем также получены 2 авторских свидетельства Роспатента о государственной программе для ЭВМ.

Диссертация А.Н. Бокарева «Межмолекулярное взаимодействие алмазоподобных наночастиц с лекарственными препаратами и биомолекулами» соответствует требованиям, предъявляемым ВАК РФ к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.6 «оптика» и автор несомненно заслуживает присвоения искомой ученой степени.

Рецензент, доктор физ.-мат. наук, профессор,
профессор кафедры общей и теоретической физики Самарского национального исследовательского университета имени академика С.П. Королёва

А.В. Горохов

443011, г. Самара, ул. акад. Павлова, 1, раб. тел.. 8(846)3345434

email: gorokhov.av@ssau.ru

04.10.2023

