

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

Диссертационная работа А.Н. Бокарева посвящена исследованию межмолекулярного взаимодействия между рядом алмазоподобных наночастиц, с одной стороны, и противоопухолевых препаратов (доксорубицин, митоксантрон), а также азотистых оснований ДНК с другой. Методология исследования основана на моделировании ИК-спектров методами теории функционала плотности (DFT) для оценки параметров образующихся водородных связей и степени устойчивости молекулярных комплексов. Исследования данного рода представляют существенную ценность в плане создания перспективных материалов с особыми химическими, оптическими, механическими свойствами и др. Особую ценность представляет развитие медицинских направлений применения наноалмазов для адресной доставки лекарственных препаратов с улучшенным терапевтическим действием. Следует отметить, что теоретические исследования спектральных характеристик межмолекулярного взаимодействия между наноалмазами и лекарственными препаратами с оценкой параметров водородных связей ранее не проводились, поэтому такого рода исследования представляются весьма актуальными.

Цели и задачи исследования сформулированы четко. Расчеты методом DFT на уровне B3LYP/6-31G(d) в данной работе представляются вполне обоснованными для сравнительной оценки рассчитанных ИК-спектров с полученными экспериментально. Для достижения поставленной цели оправданно выбраны в качестве основных соединений модельные карбоксилированные наноалмазы – 1,3,5,7-адамтантетракарбоновая кислота (АТТК), а также адамтантетрол (АТ) и 1,3,5,7-тетрааминоадамтан (ТАА), что позволило минимизировать разумное время расчетов ИК-спектров и равновесных конфигураций комплексов. В процессе расчетов установлена последовательность в порядке убывания силы межмолекулярного взаимодействия между карбоксилированными наноалмазами и азотистыми основаниями ДНК: цитозин > аденин > тимин > гуанин, что согласуется с экспериментальными результатами. Важным достижением работы следует признать установление достаточно сильного супрамолекулярного взаимодействия в комплексах карбоксилированных наноалмазов с доксорубицином и митоксантроном за счет водородных связей средней силы. Особенно ценными можно признать результаты расчетов равновесных конфигураций и ИК-спектров наноалмазов с различными поверхностными функциональными группами в водном окружении. В итоге сделано заключение о том, что в водном окружении ослабляются все

водородные связи в комплексах карбоксилированных наноалмазов с азотистыми основаниями ДНК, доксорубицином и митоксантроном по сравнению с кристаллической фазой, но при этом все водородные связи сохраняются.

Все выводы исследования представляются обоснованными.

Автором проделана большая работа, в которой грамотно использованы методы исследования, что делает полученные результаты достоверными. Автореферат написан логично, понятным и научным языком. Разумеется, полученные результаты моделирования межмолекулярных взаимодействий в столь сложных системах на данном уровне остаются еще недостаточно полными в сравнении с реальностью. Возможно, следовало бы включить в расчеты еще и модель поляризуемого континуума. Сделанное замечание не умаляет заслуг соискателя.

Полученные автором результаты имеют высокую научную новизну и значимость, содержат решение важной задачи в области оптики, физической химии, координационной химии и вносят новый и существенный вклад в эти области.

Считаю, что настоящая диссертационная работа представляет собой законченное научное исследование и удовлетворяет требованиям п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 г № 842 (с изменениями на 11 сентября 2021 г.), а ее автор Бокарев Андрей Николаевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.6. – Оптика.

Доцент кафедры неорганической химии,
заведующий научно-исследовательской
лабораторией координационных соединений
Химического института им. А.М. Бутлерова
Казанского (Приволжского) федерального
университета, к.х.н., с.н.с.

 - В.Г. Штырлин

Штырлин Валерий Григорьевич
Адрес: 420008, г. Казань, ул. Кремлевская, 29/1
Телефон: +79274129353
E-mail: Valery.Shtyrlin@gmail.com

Отзыв составлен «2» октября 2023 года.

