

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Бокарева Андрея Николаевича
на тему «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 посвящена исследованию спектральных проявлений межмолекулярного взаимодействия алмазоподобных наночастиц с противоопухолевыми препаратами на примере антибиотиков доксорубина и митоксантрона и с азотистыми основаниями ДНК. Для решения этой задачи автор использовал моделирование ИК спектров методами теории функционала плотности с последующим определением параметров образующихся водородных связей для оценки степени устойчивости молекулярных комплексов.

Данная тематика является актуальной, так как наноалмазы, благодаря своим особым оптическим, химическим и физическим свойствам, являются перспективным материалом с широким спектром возможного практического применения, в том числе и в медицине для адресной доставки противоопухолевых лекарственных препаратов с целью улучшения терапевтического действия.

Можно констатировать, что тема работы, цель исследования, задачи, поставленные в диссертации, способ их решения, полученные результаты актуальны и современны.

Следует отметить, что в данной работе разработан новый подход к построению начальных молекулярных моделей комплексов наноалмазов с различными веществами, основанный на использовании в качестве объекта, моделирующего карбоксилированный наноалмаз, молекулы 1,3,5,7-дамантан-тетракарбоновой кислоты (АТКК). Методами теории функционала плотности построены равновесные геометрические конфигурации и рассчитаны ИК спектры наноалмазов с различными поверхностными функциональными группами.

Положения, выносимые автором на защиту четко сформулированы, содержат важную теоретическую и экспериментальную информацию. Новизна обоснована и подтверждена.

Опубликованные работы автора диссертации входят в Web of Science и Scopus, так как опубликованы в том числе в журналах Fullerenes Nanotubes and Carbon Nanostructures, Journal of Raman Spectroscopy, Nanosystems: physics,

chemistry, mathematics и др. Результаты обсуждались на научных конференциях с международным участием в Москве, Санкт-Петербурге, Саратове.

Замечаний по работе нет.

Считаю, что диссертационная работа Бокарева Андрея Николаевича по актуальности, способам решения задач, объему проведенных исследований, степени научной новизны и практической значимости результатов полностью отвечает требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.6 – Оптика.

Доктор физ.-мат. наук, спец. 01.04.05 – Оптика,
доцент, профессор кафедры общей и
экспериментальной физики ИФТИС МПГУ,
119435 Москва, ул. Малая Пироговская 29,
Моб. тел +7 916 577-2891


И.А. Васильева

2.10.2023



И.А. Васильева
УДОСТОВЕРЯЮ
Зам. начальника
Управления
делами *[Signature]* С.С. Яковлев