

ОТЗЫВ НА АВТОРЕФЕРАТ

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

Диссертация Бокарева Андрея Николаевича посвящена исследованию спектральных проявлений межмолекулярного взаимодействия алмазоподобных наночастиц с противоопухолевыми препаратами доксорубицином и митоксантроном 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.

Тема исследований является весьма актуальной по причине того, что в настоящее время наноалмазы являются перспективным материалом с различными вариантами возможного практического применения, что вызвано их особыми свойствами. Одним из наиболее активно развивающихся медицинских направлений применения наноалмазов является использование их для адресной доставки лекарственных препаратов с целью улучшения терапевтического действия.

В данной работе для оценки степени устойчивости молекулярных комплексов, которые могут использоваться для адресной доставки, автором определяются параметры образующихся водородных связей на основе анализа спектральных проявлений межмолекулярного взаимодействия.

Научная новизна результатов диссертации состоит в обнаружении спектральных проявлений комплексообразования на основе водородного связывания в рассмотренных молекулярных комплексах, а также в использовании нового аппроксимационного приёма для уменьшения времени расчёта равновесных геометрических конфигураций и ИК спектров, основанного на применении в качестве модели карбоксилированного наноалмаза молекулы 1,3,5,7-адамантантетракарбоновой кислоты.

Полученные в диссертации результаты дают теоретическое обоснование механизмов образования комплексов карбоксилированных наноалмазов с рассмотренными противоопухолевыми лекарственными препаратами, используемых для адресной доставки, а также позволяют более точно интерпретировать экспериментальные ИК спектры данных молекулярных комплексов.

Совпадение расчетных и экспериментальных данных для рассматриваемых в диссертации молекулярных комплексов подтверждает достоверность методов исследования.

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

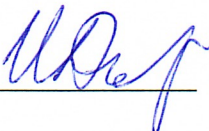
свидетельства Роспатента о государственной регистрации программы для ЭВМ. Результаты работы докладывались на международных и всероссийских конференциях.

Замечания к тексту автореферата отсутствуют.

Актуальность темы исследований, новизна полученных результатов, высокий научный уровень работы, её теоретическая и практическая значимость позволяют сделать заключение о том, что диссертационная работа Бокарева А.Н. соответствует всем требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук в соответствии с пунктами 9-11, 13, 14 действующего «Положения о присуждении ученых степеней», утверждённого постановлением Правительства Российской Федерации №842 от 24 сентября 2013 года, а её автор заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.6 – Оптика.

Даю согласие на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Кандидат физико-математических наук,
доцент кафедры высшей математики,
зав. лабораторией «Математическое моделирование
физики живых систем» СарФТИ НИЯУ МИФИ,
607186, Нижегородская область, г. Саров, ул. Духова, д. 6.
Электронная почта: ivdokukina@mephi.ru


Докукина Ирина Владимировна

Отзыв составлен «13» октября 2023 г.

Подпись Докукиной И.В. заверяю

*начальником отдела кадров
СарФТИ НИЯУ МИФИ*



И.В. Двелевская
13.10.2023