

ОТЗЫВ

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

Диссертационная работа А.Н. Бокарева посвящена исследованию межмолекулярных взаимодействий поверхностных функциональных групп алмазоподобных наночастиц с лекарственными препаратами и биомолекулами. Поставленные в диссертационной работе задачи являются чрезвычайно актуальными для развития тераностики в биомедицине и для разработки методов оптической визуализации процессов на клеточном уровне в биоткани. Для решения поставленных задач использовалась спектроскопия ИК поглощения и моделирование колебательных спектров методами теории функционала плотности.

Особую важность и новизну в диссертационной работе представляет поиск объектов для построения начальных модельных представлений и реализации аппроксимационных приёмов, позволяющих провести компьютерное моделирование новых соединений - комплексов алмазоподобных наночастиц с противоопухолевыми антибиотиками доксорубицином и митоксантроном и азотистыми основаниями ДНК. Поэтому одним из наиболее интересных и важных результатов работы является успешная оптимизация равновесных геометрических конфигураций указанных комплексов с использованием в качестве модели карбоксилированного наноалмаза молекулы 1,3,5,7-адамтантетракарбоновой кислоты. Полученные конфигурации позволили рассчитать спектры ИК поглощения комплексов в кристаллической фазе и водном окружении. Грамотно проведенный сравнительный анализ экспериментальных и рассчитанных спектров ИК поглощения исследуемых комплексов обеспечил определение важных количественных характеристик межмолекулярных водородных связей и позволил сделать выводы о влиянии водного окружения на устойчивость комплексов.

Научная новизна работы и ее практическая значимость не вызывают сомнений. Автореферат диссертационной работы написан хорошим научным языком. Основные результаты представлены в 32 печатных работах (из них 1 монография, 11 статей в изданиях из перечня ВАК РФ и изданиях, входящих в базу цитирования Scopus). Автором получены 2 авторских свидетельства Роспатента о государственной регистрации программы для ЭВМ. Все это позволяет сделать вывод о достоверности и важности представленных результатов.

После ознакомления с авторефератом считаю, что диссертация А.Н.Бокарева выполнена на высоком научном уровне и удовлетворяет всем требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а его автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.6. – Оптика.

Ведущий научный сотрудник кафедры квантовой электроники  
физического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова  
кандидат физико-математических наук  
119991, г. Москва, ГСП-1, Ленинские горы, д. 1, стр. 62  
Контактная информация: [tdolenko@mail.ru](mailto:tdolenko@mail.ru) ; +7 916 514 63 88

Подпись Доленко Татьяны Альдефонсовны УДОСТОВЕРЯЮ:

Учёный секретарь Учёного совета физического факультета  
МГУ имени М.В. Ломоносова,  
профессор  
17.10.2023 г.

