

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы 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

Основной целью диссертационной работы Бокарева Андрея Николаевича является исследование спектральных проявлений межмолекулярного взаимодействия алмазоподобных наночастиц с противоопухолевыми препаратами доксорубицином и митоксантроном, а также с азотистыми основаниями ДНК на основе моделирования ИК спектров методами теории функционала плотности.

В настоящее время 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 автором определяются параметры образующихся водородных связей на основе анализа спектральных проявлений межмолекулярного взаимодействия с целью оценки степени устойчивости молекулярных комплексов, которые могут использоваться для адресной доставки. Для построения начальных молекулярных моделей комплексов наноалмазов с различными веществами автором предложен новый подход, основанный на использовании в качестве модели карбоксилированного наноалмаза молекулы 1,3,5,7-адамтантетракарбоновой кислоты с целью уменьшения времени расчёта равновесных геометрических конфигураций и ИК спектров. Автором проведена верификация предложенного подхода на основе сравнения с экспериментальными данными. На основе предложенного подхода с использованием методов теории функционала плотности автором определены равновесные геометрические конфигурации и рассчитаны ИК спектры молекулярных комплексов карбоксилированных наноалмазов с азотистыми основаниями ДНК, а также с лекарственными препаратами доксорубицином и митоксантроном. На основе анализа спектральных проявлений межмолекулярного взаимодействия автором определены параметры образующихся межмолекулярных водородных связей в рассмотренных комплексах. Выявлена последовательность по степени убывания силы межмолекулярного взаимодействия между карбоксилированными наноалмазами и азотистыми основаниями ДНК: цитозин -> аденин -> тимин -> гуанин. Кроме того, установлено, что в комплексах наноалмазов с доксорубицином и митоксантроном происходит достаточно сильное супрамолекулярное взаимодействие, что проявляется в возникновении большого количества водородных связей средней силы, обеспечивающих высокую устойчивость соединений. Помимо этого, автором установлено, что в водном окружении происходит ослабление всех

водородных связей в рассмотренных комплексах карбоксилированных наноалмазов с азотистыми основаниями ДНК и противоопухолевыми лекарственными препаратами доксорубицином и митоксантроном.

Автором проделан большой объём работы, диссертация представляет собой полное и законченное исследование.

Результаты работы обсуждались на множестве международных и всероссийских конференциях. По материалам диссертации опубликовано 32 печатных работы, включая 1 монографию и 11 статей в изданиях из перечня ВАК РФ и базы цитирования SCOPUS, а также получены 2 авторских свидетельства Роспатента о государственной регистрации программы для ЭВМ.

Замечания к диссертационной работе и автореферату отсутствуют.

Считаю, что диссертация Бокарева А.Н. «Межмолекулярное взаимодействие алмазоподобных наночастиц с лекарственными препаратами и биомолекулами» полностью соответствует требованиям новизны, научно-практической значимости и достоверности, предъявляемым ВАК РФ к диссертациям на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.6. – Оптика, а её автор заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по данной специальности.

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

Доктор физико-математических наук,
зам. директора Института молекулярной тераностики
ФГАОУ ВО «Первый МГМУ им. И.М. Сеченова
Минздрава России»,
119991, г. Москва, ул. Трубецкая, д. 8, стр. 2,
Электронная почта: andrei.zvyagin@mq.edu.au



Звягин Андрей Васильевич

Дата: «23» октября 2023 г.

Подпись Звягина А.В. заверяю



З. Комарова