

Отзыв

на автореферат диссертации Захарова Александра Алексеевича
**«Спектральные проявления межмолекулярного взаимодействия
лекарственных препаратов, биомолекул и наночастиц»**, представленной
на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по
специальности 1.3.6. Оптика

Работа А.А. Захарова посвящена исследованию спектральных проявлений межмолекулярных взаимодействий за счет водородного связывания с участием биомолекул, лекарственных препаратов, наночастиц и их комплексов методами квантово-химического молекулярного моделирования и ИК-спектроскопии. Методология исследования основана на сравнении экспериментально полученных параметров ИК-спектров с рассчитанными с помощью методов теории функционала плотности (DFT) для оценки силы образующихся водородных связей и устойчивости молекулярных комплексов. Проведенные исследования представляются важными для понимания и создания наиболее благоприятных условий доставки лекарственных препаратов полиэлектролитными и иными капсулами для повышения эффективности лечения, совершенствования бактериального синтеза наночастиц, повышения растворимости, биодоступности соединений и др. Заметим, что оценки спектральных характеристик межмолекулярного взаимодействия наряду с оценками параметров водородных связей в новых биологически значимых двух- и трехкомпонентных системах отличаются новизной, что делает данные исследования весьма актуальными.

Цели и основные задачи исследования сформулированы достаточно четко. Выполненные в данной работе расчеты методом DFT на уровне B3LYP/6-31G(d), LANL2DZ вполне обоснованы для сравнительной оценки рассчитанных ИК-спектров с экспериментально полученными. В работе в качестве основных выбраны следующие объекты: метиллизин с солями серебра и тиосульфата натрия для биосинтеза наночастиц сульфида серебра (с участием бактерий *Bacillus subtilis* 168), содержащей полиаргинин и декстран-сульфат, малеинимид и янтарная кислота. На основе анализа данных квантово-химических расчетов в сравнении с ИК-спектрами выявлено весьма значительное межмолекулярное взаимодействие между метиллизином и солями рабочего раствора. В процессе исследования молекулярных комплексов митоксантрона с компонентами полиэлектролитной капсулы, включающей полиаргинин и декстран-сульфат, автору удалось установить, что полиаргинин образует множественные водородные связи средней силы с митоксантроном, в то время как декстран-сульфат образует слабые водородные связи с полиаргином и митоксантроном, выступая в качестве буфера. Установлено, что малеинимид способен усиливать образование водородных связей с рядом белковых аминокислот, что можно использовать для усиления терапевтической

активности белковых нанокapsул и наногелей в таргетной терапии. Очень интересны результаты модифицирования свойств янтарной кислоты путём её перекристаллизации, приводящей к усилению водородных связей с остаточными молекулами воды, что повышает растворимость и биодоступность янтарной кислоты, открывая возможности её практического применения.

Все выводы исследования обоснованны.

Автором проделана продолжительная полезная работа, в которой профессионально использованы методы исследования, что обеспечивает достоверность полученных результатов. Автореферат написан понятным научным языком. Тем не менее, следует заметить, что употребление термина «молекулярные механизмы комплексообразования» по отношению к достигнутым результатам исследования водородных связей представляется некоторым преувеличением. Однако сделанное замечание не умаляет заслуг соискателя.

Полученные в диссертационной работе результаты имеют высокую научную новизну и значимость, содержат решение важной задачи в области оптики, физической химии, биоорганической и координационной химии и вносят новый и существенный вклад в данные области науки.

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 Захаров Александр Алексеевич 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 «3» ноября 2023 года.

