

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Захарова А.А. «Спектральные проявления межмолекулярного взаимодействия лекарственных препаратов, биомолекул и наночастиц», представленной Диссертационному Совету 24.2.392.06 на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.6 – оптика.

Актуальность диссертационной работы Захарова А.А. определяется значимостью изучаемых объектов, как в практическом, так и теоретическом плане. Анализ межмолекулярного взаимодействия и комплексообразования на основе механизмов водородного связывания является одним из средств выявления закономерностей образования мультикомпонентных смесей с новыми физико-химическими свойствами. Такие исследования направлены на создание улучшенных модификаций лекарственных и диагностических средств, используемых в современной фармакологии, оптике живых систем и медицине.

Цель работы - выявление спектральных проявлений особенностей межмолекулярного взаимодействия, основанного на водородном связывании, а также определение степени устойчивости образующихся молекулярных комплексов - достигается методами ИК спектроскопии и молекулярного моделирования. Для оценки устойчивости образующихся комплексов определяются параметры водородных связей.

Научная новизна результатов работы заключается в обнаружении ранее не исследованных оптических и квантово-химических свойств рассмотренных двух- и трёхкомпонентных смесей, молекулярных систем и комплексов, а также в использовании новых объектов для модельных представлений многоатомных соединений.

Автореферат диссертации дает достаточно полное представление о характере проведенных исследований. Однако при ознакомлении с ним все же возникает ряд вопросов и замечаний.

1. В качестве одной из задач исследования ставится оценка «степени взаимодействия» лекарственного препарата со слоями электролитных молекул. Какие количественные характеристики понимает автор под термином «степень взаимодействия»?
2. Автором указывается, что «достоверность методов исследования подтверждается качественным совпадением расчетных и экспериментальных данных для рассматриваемых молекулярных комплексов». Однако, в автореферате приводятся экспериментальные ИК-спектры только для модифицированной янтарной кислоты. Проводились ли экспериментальные исследования ИК-спектров других молекулярных комплексов, изучаемых автором?
3. К сожалению, в рамках автореферата не описано, каким образом рассчитывались значения энергии водородных связей  $\Delta E$ . Что понимается под этой величиной?



4. Следует отметить, что выбранный автором теоретический уровень для квантово-химического изучения межмолекулярных, в основном, водородных, связей, не совсем удачен. Описание подобных эффектов требует учета дальнедействующих (нековалентных) взаимодействий путем введения соответствующих поправок в функционал, а также использования базисов с диффузными функциями.
5. Более корректным доказательством существования водородных связей в исследованных комплексах, а также описание свойств этих связей в молекулярных комплексах представляется изучение топологии электронной плотности в критических точках распределения в рамках теории Бейдера «Атомы в молекулах» или анализа натуральных орбиталей (NBO-анализа).

Сделанные замечания не умаляют достоинств работы. Судя по автореферату, публикациям автора и характеризуя работу в целом, считаю, что она выполнена на высоком научном уровне и отвечает требованиям, предъявляемым ВАК к кандидатским диссертациям. Основные результаты работы выглядят вполне обоснованными и достоверными, а ее автор, Захаров А.А., безусловно, заслуживает присуждения искомой ученой степени.

профессор кафедры физики,  
декан факультета неорганической химии и технологии  
ФГБОУ ВО «Ивановский государственный  
химико-технологический университет»,  
д.х.н., доцент

 Белова Наталья Витальевна


153000 г. Иваново  
Пр. Шереметевский, 7  
Тел.+79158144425  
belova@isuct.ru

Отзыв составлен «15» ноября 2023 года

Подпись Беловой Н.В. заверяю

Ученый секретарь ФГБОУ ВО «Ивановский  
государственный химико-  
технологический университет»  
к.э.н., доцент



 Хомякова Анна Александровна