Отзыв на автореферат диссертации Тупикиной Елены Юрьевны «Нековалентные взаимодействия в модельных и биомолекулярных системах: анализ структуры, прочности и спектральных проявлений методами квантовой химии и молекулярной динамики», представленной на соискание учёной степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.17 – Химическая физика,горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества

Диссертационная работа Е.Ю. Тупикиной посвящена фундаментальной проблеме физической химии - установлению количественных связей между спектральными характеристиками, геометрией и энергией нековалентных взаимодействий (НКВ) в широком классе систем. НКВ (водородные, галогенные, халькогенные связи и др.), несмотря на их малые энергии, играют важнейшую роль в химии, включая и превращения в живых системах. Вместе с тем, прямое экспериментальное определение геометрии и прочности отдельных нековалентных контактов в конденсированных средах и тем более биомолекулярных системах практически невозможно: каждое взаимодействие входит в «сеть» взаимовлияющих контактов, а эксперимент регистрирует усредненный по ансамблю отклик. Поэтому разработка надежных спектральных корреляций, связывающих ИК- и ЯМР-параметры с геометрией и энергией, а также их распространение на системы с несколькими взаимодействиями является одной из ключевых задач современной химической физики. В этом контексте **актуальность работы** не вызывает сомнений - это «передний край» науки. Особенно интересно это для «нетрадиционных» НКВ (галогенная, халькогенная и т.д. связи), которые вызывают особое внимание исследователей в последние годы. Следует отметить, что соискательница представляет славную научную школу академика РАН В.Ю. Кукушкина – одну из сильнейших в мире в этом направлении.

Научная новизна работы определяется совокупностью фундаментальных результатов, полученных автором впервые. Упомяну лишь два:

-Построен согласованный набор аналитических корреляций «спектр–геометрия–энергия» для широкого класса водородных связей (F–H···F, F–H···X, N–H···N, O–H···O, N–H···O, C–H···X, O–H···Se) в диапазоне энергий 0.2–47 ккал/моль,

-Впервые количественно разделены вклады сольватации, ядерной динамики и квантовой делокализации мостикового протона в формирование химического сдвига $\delta(^1H)$ для прочных водородных связей на примере систем $(FHF)^-$, $(H_5O_2)^+$ и $(PyHPy)^+$. Разработан многоуровневый протокол, сочетающий ab initio молекулярную динамику и численное решение уравнения Шредингера для ядерной подсистемы, позволяющий воспроизводить $\delta(^1H)$ с точностью порядка 1 м.д., недостижимой в статических газофазных расчетах.

Теоретическая и практическая значимость работы не вызывают сомнений. Разработанные спектрально-структурно-энергетические корреляции предоставляют исследователям инструмент для количественной интерпретации ИК- и ЯМР-спектров сложных систем. Массивы согласованных структурных, энергетических и спектральных данных пригодны для использования в качестве обучающих наборов для моделей

машинного обучения. Результаты существенно уточняют представления о связи между электронной структурой, геометрией и спектральными характеристиками ансамблей нековалентных взаимодействий и могут служить основой для рационального дизайна материалов. Достоверность результатов обеспечивается комплексом взаимодополняющих факторов: использованием современных квантово-химических методов, сопоставлением расчетных ИК- и ЯМР-параметров с независимыми экспериментальными данными (как литературными, так и полученными в сотрудничестве с профильными группами), а также успешной проверкой переносимости предложенных дескрипторов на системы, не использованные на этапах калибровки.

По теме диссертации опубликовано 24 работы в научных журналах, включая обзор в Coordination Chemistry Reviews; следует отметить неизменно высокий уровень изданий (значительная часть – журналы первого квартиля). Результаты представлялись на ключевых российских и международных конференциях. Автореферат написан хорошим литературным языком, материал изложен логично и последовательно, а его объём позволяет достаточно полно представить основные результаты диссертационной работы. По ознакомлении с текстом никаких сколь-либо существенных замечаний сделать нельзя.

Убежден, что работа Е.Ю. Тупикиной по своей актуальности, научной новизне, теоретической и практической значимости, объему и качеству проведенных исследований **полностью соответствует** требованиям пп. 9-11, 13, 14 «Положения о присуждении учёных степеней» (Постановление Правительства РФ № 842 от 24.09.2013 г. (в действующей редакции)), а ее автор, безусловно, заслуживает присуждения искомой ученой степени доктора физико-математических наук.

Настоящим даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с защитой диссертации Е.Ю. Тупикиной, и их дальнейшую обработку.

Доктор химических наук по специальности 02.00.01 - Неорганическая химия, профессор РАН

Заместитель директора по научной работе ФГБУН Федеральный исследовательский центр «Иркутский институт химии им. А.Е. Фаворского СО РАН»

Сергей Александрович Адонин

9 сентября 2026 г.

664033, Иркутск, ул. Фаворского, 1, ИрИХ СО РАН

Тел. +7 (3952) 51-14-43

e-mail: sergey.a.adonin@gmail.com

ОТДЕЛ КАДРОВ ИрИХ СО РАН

ПОДПИСЬ ЗАВЕРЯЮ
Начальник отдела кадров
ИрИХ СО РАН
(ФИО)