ОТЗЫВ

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

Диссертационная работа сфокусирована преимущественно на теоретических и отдельных экспериментальных оценках свойств нековалентных взаимодействий по данным ИК и ЯМР-спектроскопии в сочетании с высокоуровневыми квантово-химическими и молекулярно-динамическими расчётами. Объектами исследований явились преимущественно органические однокомпонентные и многокомпонентные соединения, такие как замещенные фосфинселениды, растворы комплексов 1,1-динитроэтана, анилина, богатые, по большей части, водородными или галогенными связями; диселенофосфинаты Ni(II), η^6-$Cr(CO)_3$-арены, гемоподобные комплексы Fe(II), для которых обнаруживаются π-ассоциированные и металл-лигандные взаимодействия; рассматривались биоорганические системы на примере активных сайтов глутатионпероксидазы 1, рибонуклеазы А. В целом, в работе успешно используются современные представления о классификации нековалентных связей на водородные, галогенные, халькогенные, пниктогенные, тетрельные связи и π-взаимодействия.

В основе работы лежит построение моделей и поиск количественных взаимосвязей между спектральными данными и геометрическими, энергетическими и электронными дескрипторами нековалентных связей. Для получения электронных дескрипторов используется расчетная электронная плотность и её производные. Привлекаются зарекомендовавшие себя методы получения таких дескрипторов: квантовая теория атомов в молекулах, подход “взаимодействующих квантовых атомов”. Автор предлагает согласованную “спектрально–структурно–энергетическую схему”, методологически увязывающую построение, настройку и проверку физико-математических моделей на примерах модельных и реальных объектов. При этом предлагаемая в работе схема оценок свойств нековалентных взаимодействий распространяется на разные фазовые состояния вещества и тестируется на соединениях, находящихся в газовой фазе, в растворах, для кристаллов и для крупномасштабных биомолекулярных систем. Достоверность разработанных математических моделей подтверждается характеристиками статистической обработки данных, полученных для крупных и представительных выборок.

Анализ кооперативности и взаимного влияния нескольких нековалентных взаимодействий выступает как еще одна крупная задача диссертационного исследования. Применительно к проблеме взаимовлияющих водородных связей реализован алгоритм решения задачи, которая подобна многомерной обратной спектральной задаче. Автор вводит и описывает понятия кооперативных и антикооперативных эффектов, предлагая принципы соответствующей классификации.

Практическая и научная значимость работы состоит в совершенствовании подходов к прогнозам структуры и свойств органических и биоорганических соединений, расширении возможностей для рационального дизайна и модификации соединений при

конструировании функциональных материалов и биологически активных соединений с востребованными свойствами. Фундаментальность исследований и подходы к физико-математическому моделированию, положенные в основу диссертационной работы, содержат в себе потенциал методологической базы для прогнозов структурных особенностей многокомпонентных соединений по спектральным данным.

Имеется замечание. Несмотря на то, что автор следует принципам категоризации и грамотно использует терминологию нековаленетных связей (водородные, галогенные, халькогенные, пниктогенные, тетрельные связи), в работе часто звучат термины "нековалентное взаимодействие", "нековалентный контакт". В этих случаях не всегда понятно, хотел ли автор подчеркнуть, что имеется в виду тип взаимодействия без выраженной электростатической компоненты или это всегда синонимы термина "нековалентная связь". Сделанное замечание не снижает общей ценности диссертационной работы.

По актуальности поставленных задач, новизне, объему проведенных исследований, достоверности результатов и качеству их обоснованности представленная диссертационная работа Тупикиной Елены Юрьевны «Нековалентные взаимодействия в модельных и биомолекулярных системах: анализ структуры, прочности и спектральных проявлений методами квантовой химии и молекулярной динамики» соответствует требованиям п.9-14 «Положения о порядке присуждения учёных степеней» (утверждено Постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г. №842; в ред. Постановления Правительства Российской Федерации от 21.04.2016 г. №335), предъявляемым к докторским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.17 – Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Ведущий научный сотрудник, заведующий НИЛ
Многомасштабного моделирования многокомпонентных
функциональных материалов, профессор кафедры
теоретической и прикладной химии
ФГАОУ ВО ЮУрГУ (НИУ) д.х.н., профессор
Барташевич Екатерина Владимировна
тел. +79123137705; e-mail: bartashevichev@susu.ru

03.09.2026

ПОДПИСЬ УДОСТОВЕРЯЮ
ВЕДУЩИЙ СПЕЦИАЛИСТ ОТДЕЛА КАДРОВ
ЮЖНО-УРАЛЬСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
СТАРИКОВА Е.А.

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)»,
454080, Россия, г. Челябинск, пр. Ленина, 76.
Тел.: +7 (351) 267-99-00
e-mail: info@susu.ru, сайт: http://www.susu.ru