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 ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.17 – Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества

Диссертационная работа Елены Юрьевны Тупикиной посвящена актуальной и фундаментально значимой проблеме физической химии и химической физики – установлению закономерностей формирования, энергетики и спектральных проявлений нековалентных взаимодействий в модельных и биомолекулярных системах. Исследования такого рода имеют принципиальное значение для развития современных представлений о межмолекулярных взаимодействиях, строении и свойствах конденсированных сред, молекулярном распознавании, а также для интерпретации спектроскопических данных и построения надежных вычислительных моделей сложных молекулярных систем.

Актуальность работы определяется как широкой распространенностью нековалентных взаимодействий в химических и биологических объектах, так и необходимостью согласованного применения методов квантовой химии, анализа электронной плотности, спектроскопии и молекулярной динамики для выявления связи между локальной структурой, энергетическими характеристиками и наблюдаемыми спектральными параметрами. Автореферат отражает заметный объем систематических исследований, выполненных с использованием современных квантово-химических подходов и методов обработки структурно-энергетической информации.

Полученные результаты обладают существенной научной новизной. Автором развит комплексный подход к исследованию нековалентных взаимодействий, объединяющий высокоуровневые квантово-химические расчеты, анализ электронной плотности, энергетическое разложение и расчет спектральных параметров. Установлены и проанализированы связи между геометрическими характеристиками межмолекулярных контактов, прочностью взаимодействий и их спектральными проявлениями. Значимым представляется выявление закономерностей изменения параметров ЯМР при формировании водородных, галогенных и халькогенных связей, а также рассмотрение эффектов окружения и кооперативности. В совокупности эти результаты расширяют физико-химическое понимание природы слабых направленных взаимодействий и создают основу для их надежной идентификации в системах различной сложности.

Практическая и методическая ценность работы состоит в том, что предложенные подходы и выявленные корреляции могут быть использованы при интерпретации спектров ЯМР, при анализе структуры молекулярных комплексов, в исследованиях растворов и биомолекулярных систем, а также при разработке вычислительных протоколов для изучения нековалентных взаимодействий. Материалы автореферата свидетельствуют о высокой квалификации автора, владении современным аппаратом вычислительной химии и способности решать комплексные научные задачи на высоком уровне.

Полагаю, что работа Тупикиной Е.Ю. является законченным научным исследованием, по актуальности, научной новизне и значимости результатов исследований, степени их научной апробации и опубликования в научных журналах соответствует критериям, предъявляемыми ВАК РФ к докторским диссертациям (пп. 9–

11, 13, 14 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 №842), а ее автор Тупикина Елена Юрьевна заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности «1.3.17 – Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества».

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

Руководитель научного направления
«экстремальные состояния вещества»
ФИЦ ПХФ и МХ РАН
чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н.
e-mail: ivl@icp.ac.ru

Ломоносов Игорь Владимирович

Подпись Ломоносова И.В. заверяю

Ученый секретарь ФИЦ ПХФ и МХ РАН
д.х.н.

Психа Б.Л.

07 октября 2026 г.

Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской физики РАН, 142432, Московская обл., г. Черноголовка, пр-кт акад. Семенова, д. 1, тел.: +7 (496) 522-44-74, сайт: https://www.icp.ac.ru, e-mail: office@icp.ac.ru