

ОТЗЫВ НАУЧНОГО КОНСУЛЬТАНТА

о диссертационной работе 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 Елены Юрьевны Тупикиной посвящена систематическому исследованию нековалентных взаимодействий – водородных, галогенных, π-ассоциированных и металл-лигандных – в модельных молекулярных комплексах, кластерах и фрагментах активных центров ферментов. Центральной задачей работы является решение обратной спектральной задачи, то есть восстановление структурных и энергетических параметров нековалентных контактов по экспериментально измеряемым ИК- и ЯМР-наблюдаемым. Эта проблема, несмотря на более чем столетнюю историю изучения водородной связи, до настоящей работы не имела единого, количественно верифицированного на широком наборе объектов решения.

Логика исследования выстроена последовательно и убедительно: от модельных систем с единственной нековалентной связью автор переходит к более сложным кластерам с взаимовлияющими контактами, а затем – к биомолекулярным активным центрам глутатионпероксидазы и рибонуклеазы А. Такой переход от простого к сложному позволил Е.Ю. Тупикиной не только построить единый набор спектрально-структурно-энергетических корреляций, но и проследить их применимость и ограничения в реальных конденсированных и биомолекулярных средах.

К числу наиболее значимых результатов работы я отношу следующие. Во-первых, построен единый набор аналитических корреляций вида «спектр–геометрия–прочность» для широкого спектра водородных связей ($F-H \cdots X$, $X=F, N, O$, $O-H \cdots O$, $O-H \cdots N$, $N-H \cdots N$, $N-H \cdots O$, $C-H \cdots X$), охватывающий диапазон энергий от слабых ван-дер-Ваальсовых контактов до предельно прочных низкобарьерных связей ($\Delta E \approx 0.2\text{--}47$ ккал/моль) с коэффициентами детерминации $R^2 \approx 0.87\text{--}0.98$. Во-вторых, выполнено физически содержательное разложение вкладов сольватации, ядерной динамики и квантовой делокализации мостикового протона в формирование протонного химического сдвига, и убедительно показано, что для коротких прочных водородных связей именно ядерная квантовая делокализация и тепловое движение скелета определяют наблюдаемое дезэкранирование. В-третьих, разработаны подходы к решению многомерной обратной спектральной задачи для систем с несколькими взаимовлияющими нековалентными контактами, где классические одномерные корреляции утрачивают однозначность из-за кооперативных и антикооперативных эффектов.

Полученные результаты обладают как фундаментальной, так и практической значимостью. Сформированные массивы согласованных структурных, энергетических и спектральных данных служат инструментом быстрой интерпретации ИК- и ЯМР-спектров, калибровки потенциальных функций для молекулярной динамики и могут быть положены в основу датасетов для моделей машинного обучения. Достоверность результатов обеспечена применением современных квантово-химических методов с систематическим контролем сходимости и сопоставлением с независимыми экспериментальными данными (при их наличии).

Результаты диссертации прошли широкую апробацию на российских и международных конференциях, в том числе в форме приглашённых и ключевых докладов, и опубликованы более чем в двух десятках статей в рецензируемых журналах высокого уровня, включая *Coord. Chem. Rev.*, *J. Chem. Inf. Model.*, *J. Comput. Chem.*, *Phys. Chem. Chem.*

Phys., *J. Chem. Phys.*, *Chem. Eur. J.* и другие. Уровень и число публикаций, на мой взгляд, превышают стандартные требования, предъявляемые к докторским диссертациям.

В ряде совместных работ мы являемся соавторами, что дало мне возможность наблюдать научное развитие Елены Юрьевны изнутри. Считаю необходимым подчеркнуть, что моя роль как научного консультанта сводилась преимущественно к технической и организационной помощи, обсуждению общего направления и редакционному согласованию текстов. Е.Ю. Тупикина – зрелый и абсолютно самостоятельный исследователь: она сама ставит задачи, выбирает модели и методы, проводит расчёты, критически анализирует корректность полученных данных и формулирует выводы. Постановка задач, выбор вычислительных схем и интерпретация результатов в настоящей работе целиком принадлежат автору, и в этом смысле диссертация является результатом её собственного научного труда.

Е.Ю. Тупкину отличают глубокая физико-математическая подготовка, владение современным арсеналом квантово-химических и молекулярно-динамических методов, научная аккуратность и осторожность в формулировках, неприятие необоснованных обобщений. Эти качества, в сочетании с широкой эрудицией и высокой работоспособностью, позволяют ей успешно работать на стыке химической физики, квантовой химии, молекулярной спектроскопии и молекулярной биофизики.

Диссертационная работа Тупкиной Елены Юрьевны представляет собой завершённое самостоятельное научное исследование, в котором решена крупная научная проблема, имеющая важное значение для химической физики. По актуальности, научной новизне, объёму и достоверности полученных результатов работа в полной мере соответствует требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание учёной степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.17 – «Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества», а её автор, Елена Юрьевна Тупкина, безусловно заслуживает присуждения искомой учёной степени доктора физико-математических наук.

Научный консультант,
академик РАН, доктор химических наук,
профессор Санкт-Петербургского
государственного университета



В.Ю. Кукушкин

« 08 » июня 2026 г.



08.06.2026

