

## ОТЗЫВ

научного консультанта на диссертацию Копбалиной Кымбат Багдаткызы «Квантово-химические расчёты реакционной способности и энергетической стабильности производных алкалоидов хинолизинового ряда», представленную на соискание степени доктора философии по образовательной программе «8D05302 – Физика»

Копбалина Кымбат Багдаткызы прошла научную стажировку на физическом факультете Санкт-Петербургского государственного университета (Санкт-Петербург, Россия) в июне 2024 года. В течение стажировки она сформулировала научную задачу своей диссертации. Я был назначен научным руководителем данной стажировки и научным консультантом подготавливаемой диссертационной работы. Совместно с руководством физико-технического факультета КарНИУ им. академика Е. А. Букетова нами был составлен план исследований, который включал проведение расчетов по компьютерному моделированию структуры, термодинамических и спектральных характеристик ряда сложных органических соединений азид лупинина, производные лупинин-1,2,3-триазола и их комплексов с ионом  $\text{Cd}^{2+}$ , а также цитизинилкумаринового комплекса.

За время стажировки и годы совместной работы Кымбат Копбалина приобрела солидные знания и навыки в области квантово-химических расчетов и компьютерного моделирования молекулярных систем. Её диссертационная работа «Квантово-химические расчёты реакционной способности и энергетической стабильности производных алкалоидов хинолизинового ряда» посвящена анализу экспериментального материала и теоретическим исследованиям структурных и спектральных свойств сложных органических соединений азид лупинина. Одним из актуальных направлений применения таких объектов является их использование в качестве перспективных объектов для исследований в области органического синтеза для фармакологической промышленности.

Автором в результате теоретического исследования азид лупинина было выяснено, что при комнатной температуре в хлороформном растворе присутствует ансамбль состояний, обусловленных различными ориентациями метил азидной группы. Подтверждение этому было найдено путем расчета химических сдвигов и сравнения с экспериментальными значениями для ядер  $^{13}\text{C}$  и  $^1\text{H}$ , определенными методами ЯМР спектроскопии в работах ранее. Теоретически показаны характеристические спектральные особенности для разных состояний в спектрах  $^{13}\text{C}$  и  $^1\text{H}$  ЯМР, а так же спектрах ИК поглощения. Кроме того, была исследована структура хинолизиновых производных с лупининовой частью и триазольным кольцом, полученных в результате синтеза гибридным методом, который может

приводить к формированию веществ с новой биологически перспективной активностью. Было теоретически продемонстрировано, что такие новые молекулы (хинолизиновые производные) могут образовывать стабильные комплексы с ионом  $Cd^{2+}$ , детектирование которого является важной практической задачей в связи с широким кругом токсического воздействия, оказываемого им на организм человека и протекающие в нём процессы. Так же было продемонстрировано изменение электронных свойств хинолизиновых производных при комплексообразовании и сделан вывод о наиболее оптимальной структуре хинолизиновых производных, которая с одной стороны позволяет получить большую энергетическую устойчивость, а с другой – большее изменение спектральных свойств в электронном поглощении – относительно просто реализуемом методе экспериментального детектирования. Это важно при разработке сенсоров для детектирования ионов  $Cd^{2+}$  в растворе.

Кроме того, было проведено исследование структуры цитизинилкумаринового комплекса в его кристаллическом виде и в растворах. Данное вещество может представлять особый интерес для нужд фотофармакологии в связи с интенсивной люминесценцией кумариновых производных, а так же в связи с выраженным биологическим действием кумариновых и цитизиновых производных. Для исследуемого вещества в этанольном и диметилсульфоксидном растворах был изучен конформационный состав, обнаружено несколько конформационных состояний, подтверждение которым было найдено методом спектроскопии ЯМР, а также спектроскопии электронного поглощения в УФ-видимом диапазоне. Для вещества были изучены электронные свойства как в кристаллическом, так и в растворном состоянии. Так же в кристаллическом состоянии были теоретически и экспериментально изучены колебательные свойства, что может быть использовано для контроля синтеза вещества в твердом состоянии неразрушающими оптическим методом отражения в средней ИК области при производстве на фармакологическом предприятии.

Кымбат Копбалину отличает серьезный, системный подход к выбору методов и объектов исследования, вдумчивый анализ полученных результатов, глубокие теоретические знания, умение ориентироваться в современной научной и технической литературе и высокопрофессиональное владение техникой вычислительного эксперимента.

В целом, при выполнении диссертационной работы докторант проявил хорошие теоретические навыки, позволившие получить новые надежные теоретические результаты. Особенно среди них можно выделить сведения о структурных конформационных состояниях, колебательных и ЯМР

свойствах, а так же свойствах электронного поглощения в растворах для изученных веществ, которые нашли своё подтверждение в проведенных экспериментах в рамках данной работы, а так же согласуются с полученными ранее экспериментальными результатами. Результаты работы позволяют надеяться на возможность использовать полученные сведения о структуре веществ и спектральных свойствах в биологии и фармакологии для дальнейшего изучения биологической активности на модельных системах в применении к задачам разработки новых перспективных лекарств, а так же для разработки методов контроля синтеза перспективных лекарственных средств.

Научный консультант  
Доктор физико-математических наук  
профессор кафедры Физики Твердого Тела  
Физического факультета  
СПбГУ

Смирнов М. Б.

