

8D05302 – «Физика» білім беру бағдарламасы бойынша философия докторы (PhD) дәрежесіне іздену үшін ұсынылған  
Копбалина Қымбат Бағдатқызының

«Хинолизин қатарындағы алкалоидтар туындыларының реакциялық қабілеттілік пен энергетикалық тұрақтылығының квантты - химиялық есептеулері» атты тақырыбындағы диссертациялық жұмысына ғылыми кеңесшісінің  
ПІКІРІ

Қ.Б. Копбалинаның «Хинолизин қатарындағы алкалоидтар туындыларының реакциялық қабілеттілік пен энергетикалық тұрақтылығының квантты - химиялық есептеулері» атты тақырыбындағы диссертациялық жұмысы қазіргі заманғы химия ғылымының өзекті бағыттарының бірі — биологиялық белсенді азотты гетероциклдік қосылыстардың молекулалық құрылымы мен конформациялық ерекшеліктерін зерттеуге арналған.

Автор лупинин азидінің және оның 1,2,3-триазол туындыларының, сондай-ақ олардың  $Cd^{2+}$  ионымен кешендерінің молекулалық құрылымын, конформациялық икемділігін және спектроскопиялық қасиеттерін кешенді түрде зерттеген. Сонымен қатар, цитизинилкумарин (ЦК) молекуласының құрылымы мен оның кристалдық күйдегі ерекшеліктері талданған.

Зерттеу эксперименттік және теориялық әдістердің үйлесімді қолданылуымен ерекшеленеді: рентгенқұрылымдық талдау, ИҚ-, УК-, ЯМР-спектроскопиясы және DFT, TD-DFT, молекулалық динамика әдістері нәтижелі пайдаланылған.

Лупинин және цитизин сияқты табиғи алкалоидтар биологиялық белсенділік тұрғысынан үлкен қызығушылық тудырады. Олардың жаңа триазол және металл-кешенді туындылары фармакологиялық тұрғыдан маңызды заттардың әлеуетті прекурсорлары болып табылады. Лупинин азиді негізінде алынған жаңа триазолды туындылар мен  $Cd^{2+}$  кешендерінің электрондық құрылымын және конформациялық қасиеттерін зерттеу органикалық синтез және медициналық химия саласында маңызды бағыт болып табылады.

Автор зерттеуде қазіргі заманғы кванттық-химиялық модельдеу әдістерін (DFT, TD-DFT), сондай-ақ спектроскопиялық эксперименттерді тиімді үйлестіре білген. Теориялық есептеулердің нәтижелері эксперименттік деректермен салыстырылып, жақсы үйлесім көрсеткен. Молекулалардың ықтимал конформациялары, энергия тосқауылдары және ерітіндідегі динамикасы терең талданған.

Қорғауға шығарылатын нәтижелердің шынайылығы жарияланған 9 ғылыми еңбекте расталған: 4 мақала Web of Science және Scopus базасында индекстелетін журналдарда (оның ішінде: 2 мақала – *Molecules* (IF=4.6, Q1, перцентиль – 82%), 1 мақала – *Materials* (IF=3.2, Q1, перцентиль – 79%), *Materials Letters* (IF=2.7, Q2, перцентиль – 74%), ҚР Ғылым және жоғары білім саласындағы сапаны қамтамасыз ету комитеті ұсынған



журналдарда 2 мақала және халықаралық конференция материалдарында 3 мақала жарияланды.

Диссертациялық жұмыс мазмұны, ғылыми деңгейі және нәтижелерінің жаңалығы тұрғысынан молекулалық модельдеу мен физика салаларын біріктіретін өзекті зерттеу болып табылады. Зерттеу молекулалық жүйелердің құрылымдық, термодинамикалық және динамикалық қасиеттерін сипаттау үшін кванттық механика, статистикалық физика және компьютерлік молекулалық динамика әдістерін қолданады, бұл органикалық молекулалардың реактивтілігі мен конформациялық ерекшеліктерін дәл болжауға және жаңа функционалды қосылыстарды жобалауда ғылыми негіз құруға мүмкіндік береді.

Жұмыстың нәтижелері жоғары теориялық және практикалық маңызға ие, автор ғылыми ізденіс пен талдау жүргізуде жоғары дайындық көрсеткен.

Алынған нәтижелер мен жұмыстың қорытындылары күмән тудырмайды. Қ.Б. Копбалинаның диссертациялық жұмысы аяқталған ғылыми зерттеу болып табылады және докторлық диссертацияларға қойылатын талаптарға жауап береді, ал оның авторы 8D05302 – «Физика» білім беу бағдарламасы бойынша философия докторы (PhD) дәрежесін алуға лайықты деп есептеймін.

Академик Е.А. Бөкетов атындағы ҚарҰЗУ  
Физика және нанотехнологиялар  
кафедрасының зерттеуші профессоры  
физика – математика  
ғылымдарының докторы



Ибраев Н. Х.

