

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 диссертациялық зерттеу жұмысы қазіргі заманғы химия ғылымының маңызды және өзекті бағыттарының бірі – азотты гетероциклдік биологиялық белсенді қосылыстардың молекулалық құрылымы мен конформациялық қасиеттерін кванттық-химиялық әдістер арқылы зерттеуге арналған.

Зерттеу барысында автор лупинин азиді мен оның 1,2,3-триазол туындыларының, сондай-ақ олардың  $Cd^{2+}$  ионымен түзетін кешендерінің молекулалық құрылымын, конформациялық икемділігін және спектроскопиялық сипаттамаларын кешенді түрде қарастырған. Сонымен қатар, цитизинилкумарин (ЦК) молекуласының құрылымы мен оның кристалдық күйдегі ерекшеліктері талданған.

Жұмыстың ғылыми жаңалығы теориялық және эксперименттік зерттеу әдістерін тиімді үйлестіре қолдануда көрініс табады. Автор рентгенқұрылымдық талдау, ИҚ-, УК-, ЯМР-спектроскопиясы сияқты эксперименттік әдістермен қатар DFT, TD-DFT және молекулалық динамика есептеу тәсілдерін ұтымды пайдалана білген. Теориялық есептеулер нәтижелерінің эксперименттік деректермен жақсы сәйкес келуі және дәлдігі зерттеулердің ғылыми негізділігін дәлелдейді.

Диссертациялық жұмыста молекулалардың ықтимал конформациялары, олардың энергетикалық тосқауылдары және ерітіндідегі динамикалық қасиеттері анықталып, талданған. Бұл нәтижелер лупинин және цитизин тәрізді табиғи алкалоидтардың жаңа триазол және металл-кешенді туындыларының фармакологиялық тұрғыдан әлеуетті маңыздылығын айқындайды.

Зерттеу нәтижелері органикалық синтез және медициналық химия салалары үшін теориялық және практикалық тұрғыдан құнды болып табылады. Автор ғылыми ізденіс барысында жоғары деңгейдегі кәсіби дайындық пен зерттеушілік қабілетін көрсете білген.

Диссертация нәтижелері 9 ғылыми жарияланымда көрініс тапқан: оның ішінде 4 мақала – Web of Science және Scopus базаларында индекстелетін беделді 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%), 2 мақала – ҚР ҒЖБМ ұсынған журналдарда және 3 мақала – халықаралық конференциялар материалдарында жарияланған.

Жалпы алғанда, Қ.Б. Копбалинаның «Хинолизин қатарындағы алкалоидтар туындыларының реакциялық қабілеттілігі мен энергетикалық тұрақтылығының квантты-химиялық есептеулері» атты диссертациялық жұмысы мазмұны, ғылыми деңгейі және нәтижелерінің жаңалығы жағынан жоғары бағалауға лайық. Зерттеу қазіргі заманғы органикалық химия және молекулалық модельдеу салаларындағы өзекті мәселелерді шешуге бағытталған және теориялық әрі практикалық маңызға ие.

Алынған нәтижелердің ғылыми шынайылығы мен сенімділігі күмән тудырмайды. Сондықтан Қ.Б. Копбалинаның диссертациялық жұмысы аяқталған ғылыми зерттеу болып табылады және 8D05302 – «Физика» білім беру бағдарламасы бойынша философия докторы (PhD) дәрежесін алуға толықтай лайық деп есептеймін.

КеАҚ «Әбілқас Сағынов атындағы  
Қарағанды техникалық университетінің»  
Физика кафедрасының меңгерушісі,  
химия ғылымының кандидаты

