«8D05302–Физика» - білім беру бағдарламасы бойынша философия докторы (PhD) дәрежесін алу үшін ұсынылған Копбалина Қымбат Бағдатқызының «Хинолизин қатарындағы алкалоидтар туындыларының реакциялық қабілеттілік пен энергетикалық тұрақтылығының квантты - химиялық есептеулері» тақырыбындағы диссертациялық жұмысына ресми рецензенттің

ЖАЗБАША ПІКІРІ

р/н №	Өлшемшарттар	Өлшемшарттарға сәйкестігі (жауап нұсқаларының бірін сызу)	Ресми рецензенттің ұстанымына негіздеме (ескертуді курсивпен көрсету)
1.	Диссертация тақырыбының (бекіту күніне) ғылымның даму бағыттарына және/немесе мемлекеттік бағдарламаларға сәйкес болуы	1.1 Ғылымды дамытудың басым бағыттарына және/немесе мемлекеттік бағдарламаларға сәйкестігі: 1) диссертация мемлекет бюджетінен қаржыландырылатын жобаның немесе нысаналы бағдарламаның аясында орындалған (жобаның немесе бағдарламаның атауы мен нөмірін көрсету); 2) диссертация басқа мемлекеттік бағдарлама аясында орындалған (бағдарламаның атауын көрсету); 3) диссертация Қазақстан Республикасының Үкіметі жанындағы Жоғары ғылыми-техникалық комиссия бекіткен ғылым дамуының басым бағытына сәйкес (бағытын көрсету) келеді.	Диссертациялық жұмыстың тақырыбы ғылымды дамытудың басым бағыты болып табылатын «Жаратылыстану ғылымдары саласындағы ғылыми зерттеулер» бағытына толық сәйкес келеді. Диссертация Қазақстан Республикасы Білім және ғылым министрлігі үйлестіретін іргелі ғылыми бағдарламалар аясында, атап айтқанда «Хинолизидин алкалоидтары мен гваян сесквитерпендері туындыларының кеңістіктік құрылымы мен стереохимиясы» тақырыбындағы (Грант № ИРН AP23487966, 2024–2026 жж.) ғылыми-зерттеу жұмыстарының жоспарына сәйкес орындалған.
2.	Ғылым үшін маңыздылығы	Жұмыс ғылымға елеулі үлесін қосады/қоспайды, ал оның маңыздылығы ашылған/ашылмаған.	Диссертациялық зерттеу нәтижелері заманауи кванттық-химиялық модельдеу мен спектроскопиялық әдістерді (ЯМР, ИҚ, УК) кешенді түрде қолдану арқылы органикалық қосылыстардың құрылымдық және электрондық қасиеттерін терең түсіндіруге мүмкіндік береді. Жұмыста алынған нәтижелер молекулалардың конформациялық икемділігі, кеңістіктік құрылысы мен олардың реакциялық қабілеттілігі арасындағы өзара байланысты нақтылауға елеулі үлес қосады. Зерттеу барысында ұсынылған құрылым–қасиет–реакциялық қабілет корреляциялары органикалық қосылыстардың электрондық сипаттамаларын болжаудың ғылыми негізін кеңейтеді. Бұл, өз

			кезегінде, жаңа биологиялық белсенді қосылыстарды, функционалдық материалдарды және оптоэлектрондық қасиеттері бар гибридтік жүйелерді бағытты синтездеу үшін теориялық база қалыптастырады. Сонымен қатар, есептелген және эксперименттік деректердің жоғары деңгейде сәйкестігі қолданылған кванттық-химиялық әдістердің сенімділігін дәлелдеп, оларды ұқсас молекулалық жүйелерді зерттеуде тиімді құрал ретінде пайдалануға болатынын көрсетеді. Осылайша, жұмыс іргелі химия, молекулалық физика және материалтану салаларындағы ғылыми білімді тереңдетіп, ғылымды дамытуға елеулі үлес қосады.
3.	Өзі жазу принципі	Өзі жазу деңгейі: 1) <u>жоғары;</u> 2) орташа; 3) төмен; 4) өзі жазбаған.	Диссертациялық жұмыста келтірілген ғылыми нәтижелердің өзектілігі нақты әрі жүйелі түрде негізделген. Ізденуші зерттеу тақырыбының ғылыми-теориялық және қолданбалы маңызын терең талдау арқылы дәлелдеп көрсеткен. Жұмыста хинолизин және цитизин қатарындағы алкалоидтардың құрылымдық-спектрлік ерекшеліктері жан-жақты зерттеліп, олардың конформациялық күйі мен электрондық қасиеттері арасындағы өзара байланыс айқындалған. Алынған нәтижелер аталған алкалоидтардың молекулалық құрылымы мен спектрлік сипаттамалары жөніндегі ғылыми түсініктерді кеңейтіп, олардың реакциялық қабілеттілігі мен функционалдық қасиеттерін болжауға мүмкіндік береді. Бұл зерттеу қорытындылары органикалық және координациялық химия салаларында жаңа бағыттағы молекулаларды жобалауға және құрылым–қасиет байланысын тереңірек түсінуге маңызды ғылыми негіз қалыптастырады.
4.	Ішкі бірлік принципі	4.1 Диссертация өзектілігінің негіздемесі: 1) <u>негізделген;</u> 2) ішінара негізделген; 3) негізделмеген.	Жұмыстың мазмұны диссертациялық зерттеу тақырыбын және қорғауға ұсынылған негізгі ғылыми тұжырымдарды толық әрі жүйелі түрде қамтиды. Атап айтқанда, лупинин азиді, лупинин-1,2,3-триазол туындылары, олардың Cd^{2+} ионымен түзетін кешендері, сондай-ақ цитизинилкумарин кешені кванттық-химиялық есептеулер мен

	заманауи спектроскопиялық әдістер негізінде кешенді зерттелген. Диссертация мазмұны зерттеу бағытын жан-жақты ашады: жұмыстың мақсаты мен міндеттері нақты айқындалған, қорғауға ұсынылған негізгі қағидалар, алынған нәтижелер мен жасалған қорытындылар өзара үйлесімді және диссертация тақырыбына толық сәйкес келеді.
мазмұны диссертация тақырыбын ıдайды; ы.	Диссертация мазмұны диссертация тақырыбын толық әрі нақты айқындайды және зерттеудің логикалық құрылымын жүйелі түрде көрсетеді. Жұмыста қойылған мақсат пен міндеттер бірізді түрде шешіліп, әр бөлімде алынған нәтижелер негізгі ғылыми тұжырымдарға негіз болады. Теориялық есептеулер мен спектроскопиялық деректер өзара салыстырылып, олардың сәйкестігі арқылы зерттеу қорытындыларының сенімділігі дәлелденген. Сонымен қатар, қарастырылған қосылыстардың құрылымдық және спектрлік ерекшеліктері диссертация тақырыбымен тікелей байланысты талданған. Нәтижесінде, жұмыс мазмұны зерттеу бағытын толық ашып, қорғауға ұсынылған қағидалардың дәйектілігін қамтамасыз етеді және ғылыми жаңалықтың мазмұндық тұрғыдан тұтастығын көрсетеді.
міндеттері диссертация ес келеді: келеді; ді.	Диссертациялық зерттеудің мақсаты мен міндеттері таңдалған тақырыпқа толықтай үйлеседі және жұмыстың мазмұнын айқын әрі жүйелі түрде сипаттайды.
ның барлық бөлімдері мен лық байланысқан: ысқан; ысқан;	Диссертациялық зерттеу ішкі ғылыми логикасы сақталған, мазмұны жағынан біртұтас әрі өзара сабақтас бөлімдерден құралған жүйелі еңбек болып табылады. Алынған эксперименттік нәтижелер жан-жақты талданып, құрылымдық тұрғыдан негізделген және толық сипаттамаға ие.
н жаңа шешімдер (қағидаттар, ып салыстырылып бағаланған: р; жүргізілген;	Диссертациялық жұмыста сыни талдау бар.

		3) талдау өз пікіріне емес, басқа авторлардың сілтемелеріне негізделген; 4) талдау жоқ.	
5.	Ғылыми жаңашылдық принципі	5.1 Ғылыми нәтижелер мен ережелер жаңа ма? 1) толығымен жаңа; 2) ішінара жаңа (25-75% жаңа); 3) жаңа емес (жаңасы 25%-дан кем).	Диссертация жұмыста алынған ғылыми нәтижелер мен ұсынылған қағидалар жаңалығымен сипатталады. Зерттеу барысында хинолизин және цитизин қатарындағы алкалоидтардың құрылымдық-конформациялық және спектрлік ерекшеліктері алғаш рет кванттық-химиялық есептеулер мен эксперименттік әдістерді кешенді ұштастыру арқылы жүйелі түрде талданған. Алынған деректер молекулалардың кеңістіктік құрылысы, электрондық сипаттамалары және спектрлік параметрлері арасындағы өзара байланысты нақтылауға мүмкіндік береді. Сонымен қатар, зерттелген қосылыстар мен олардың кешендерінің ерітіндідегі және кристалдық күйдегі құрылымдық айырмашылықтары айқындалып, олардың реакциялық қабілеттілігі мен функционалдық қасиеттерін болжауға ғылыми негіз қаланған. Бұл нәтижелер аталған бағыттағы ғылыми білімді толықтырып, жаңа теориялық және қолданбалы тұжырымдар ұсынады.
		5.2 Диссертацияның қорытындылары жаңа ма? 1) толығымен жаңа; 2) ішінара жаңа (25-75% жаңа); 3) жаңа емес (жаңасы 25%-дан кем).	Диссертация жұмысының нәтижелері жаңалық сипатында болып, олар эксперименттік деректерге негізделген салыстырмалы талдау арқылы расталды.
		5.3 Техникалық, технологиялық, экономикалық немесе басқару шешімдері жаңа және негізделген бе? 1) толығымен жаңа; 2) ішінара жаңа (25-75% жаңа); 3) жаңа емес (жаңасы 25%-дан кем).	Қолданылған зерттеу әдістері жаңа нәтижелер алуға мүмкіндік берді.
6.	Негізгі қорытындылардың негізділігі	Барлық негізгі қорытындылар ғылыми тұрғыдан қарағанда ауқымды дәлелдемелерде негізделген/негізделмеген (qualitative research (куолитатив ресеч) және өнер және гуманитарлық ғылымдар бойынша даярлық бағыттары үшін).	Диссертацияның қорытындысында келтірілген барлық негізгі тұжырымдар негізделген.
7.	Қорғауға шығарылған	Әрбір ереже бойынша келесі сұрақтарға жеке жауап	

	негізгі ережелер	беру қажет: 7.1 Ереже дәлелденді ме? 1) дәлелденді; 2) шамамен дәлелденді; 3) шамамен дәлелденбеді; 4) дәлелденбеді; 5) бұл тұжырымда ереженің дәлелденгенін тексеру мүмкін емес. 7.2 Тривиалды ма? 1) ия; 2) жоқ; 3) бұл тұжырымда ереженің тривиалды екенін тексеру мүмкін емес. 7.3 Жаңа ма? 1) ия; 2) жоқ; 3) бұл тұжырымда ереженің жаңашылдығын тексеру мүмкін емес. 7.4 Қолдану деңгейі: 1) тар; 2) орташа; 3) кең 4) бұл тұжырымда ереженің қолдану деңгейін тексеру мүмкін емес. 7.5 Мақалада дәлелденген бе? 1) ия; 2) жоқ 3) бұл тұжырымда мақаладағы ереженің дәлелденгенін тексеру мүмкін емес.	**Қағидат 1** Лупинин азиді (1-(азидометил)октагидро-2Н-хинолизин) молекуласында метилазид фрагментінің аксиалды конформері негізгі күйге қарағанда 0,15–0,60 ккал/моль энергияға жоғары болатын бірнеше төменэнергетикалық конфигурацияларды құрайды. Бұл конфигурациялар тербеліс спектрінде 2100, 1250 және 650 $см^{-1}$ жиіліктерде көрінетін тербеліс жолақтарын береді. Қағидат есептеулер мен талдаулар арқылы дәлелденген; ол жаңалыққа ие, тривиалды емес және қолдану аясы кең; мақалада толық негізделген. **Қағидат 2** Лупинин-1,2,3-триазол туындылары мен олардың Cd^{2+} ионымен түзілетін комплекстері зарядтың қайта бөлінуі, молекулалық орбиталь деңгейлерінің өзгеруі, электрондық қабаттардың поляризациясының артуы және 200–500 нм аймағындағы жұтылу жолақтарының қызылға ығысуымен сипатталады. Бұл қағидат есептеулер мен талдау нәтижелері арқылы расталған; жаңалықты сипаттайды, тривиалды емес және кең қолдану мүмкіндігі бар; мақалада толық негізделген. **Қағидат 3** Цитизинилкумарин кешенінде донорлық және акцепторлық фрагменттердің өзара әрекеттесуі π-электрондық жүйені тұрақтандырып, ішкімолекулалық заряд тасымалын күшейтеді. Тұрақсыз және тұрақты конфигурациялар арасындағы энергия айырмашылығы шамамен 6,4 мэВ құрайды. Төрт тұрақты конформер бар, олардың екеуі берік сутектік байланыстар түзеді (энергиялары негізгі күйден 0,6 ккал/моль жоғары). Қағидат есептеулер мен талдауларға негізделген; жаңалық сипатында, тривиалды емес және қолдану аясы кең; мақалада дәлелденген.
8.	Дәйектілік қағидаты. Дереккөздер мен ұсынылған ақпараттың дәйектілігі	8.1 Әдіснаманы таңдау – негізделген немесе әдіснама нақты жазылған: 1) ия; 2) жоқ.	Зерттеу әдістемесі саналы түрде таңдалған және оның негіздемесі берілген. Қолданылған әдістер 2-тараудағы «Теориялық зерттеу әдістері» бөлімінде толық баяндалған.

		8.2 Диссертация жұмысының нәтижелері компьютерлік технологияларды қолдану арқылы ғылыми зерттеулердің қазіргі заманғы әдістері мен деректерді өңдеу және интерпретациялау әдістемелерін пайдалана отырып алынған: 1) ия; 2) жоқ.	Диссертациялық жұмыстың нәтижелері заманауи кванттық-химиялық әдістерді, соның ішінде DFT және TD-DFT, пәнаралық есептеулерді, сондай-ақ органикалық қосылыстарға бейімделген молекулалық динамика әдісін қолдану арқылы алынған. Автордың зерттеу нәтижелері қазіргі заманғы есептеу және эксперименттік тәсілдер негізінде алынған, сондықтан олар сенімді және жоғары деңгейде түсіндірілген. Сонымен қатар, диссертациядағы негізгі нәтижелер рецензияланған ғылыми журналдарда жарияланған, бұл олардың дұрыстығын растайды.
		8.3 Теориялық қорытындылар, модельдер, анықталған өзара байланыстар және заңдылықтар эксперименттік зерттеулермен дәлелденген және расталған (педагогикалық ғылымдар бойынша даярлау бағыттары үшін нәтижелер педагогикалық эксперимент негізінде дәлелденеді): 1) ия; 2) жоқ.	Автордың жүргізген зерттеулері негізінде қорытындылар жасалып, эксперимент нәтижелері мен деректерді алу әдістері арасындағы өзара байланыс айқындалды. Диссертацияда келтірілген барлық заңдылықтар тексеріліп, расталған және жалпы қабылданған физикалық принциптерге сай келеді. Нәтижелер эксперименттік деректерді талдау арқылы және әдеби деректермен салыстыру арқылы дәлелденген.
		8.4 Маңызды мәлімдемелер нақты және сенімді ғылыми әдебиеттерге сілтемелермен расталған / ішінара расталған / расталмаған.	Автор халықаралық рецензияланған журналдардағы мақалаларға және негізгі тұжырымдармен байланысты сенімді, өзекті ғылыми әдебиеттерге сүйенген.
		8.5 Пайдаланылған әдебиеттер тізімі әдеби шолуға жеткілікті/жеткіліксіз.	Автор шолу бөлімінде әдебиеттерді, оның ішінде халықаралық рецензияланған журналдар мен ҚР ҒЖБССҚК тізіміндегі журналдарда жарияланған соңғы мақалаларды қолданған. Көп жағдайда келтірілген әдебиеттер Clarivate Analytics және Scopus дерекқорларында рецензияланған журналдардың мақалаларына негізделген және жоғары дәйексөзге ие.
9	Практикалық құндылық қағидаты	9.1 Диссертацияның теориялық маңызы: 1) бар; 2) жоқ.	Диссертациялық жұмыста жаңа теориялық қағидаттар ұсынылып, автор зерттеліп отырған тақырып аясында ғылыми білімнің дамуына айтарлықтай үлес қосқан.
		9.2 Диссертацияның практикалық маңызы бар және алынған нәтижелерді практикада қолдану мүмкіндігі жоғары:	Алынған нәтижелер практикалық маңызға ие, өйткені хинолизидин және цитизин топтарындағы алкалоидтардың құрылымдық және спектрлік қасиеттері бұл қосылыстардың фармакология мен

		1) ия; 2) жоқ.	оптоэлектроникада қолданылу мүмкіндігін көрсетеді және жаңа биологиялық белсенді заттар мен функционалдық материалдарды әзірлеуге негіз бола алады.
		9.3 Практикалық ұсыныстар жаңа ма? 1) толығымен жаңа; 2) ішінара жаңа (25-75% жаңа); 3) жаңа емес (жаңасы 25%-дан кем).	Практикалық қолдануға арналған ұсыныстар жаңалыққа ие.
10.	Жазу және рәсімдеу сапасы	Академиялық жазу сапасы: 1) жоғары; 2) орташа; 3) орташадан төмен; 4) төмен.	Диссертациядағы материалды ұсыну тәсілі ғылыми стандарттарға сәйкес келетін стильде берілген. Жұмыстың барлық бөлімдері логикалық және түсінікті құрылымда ұйымдастырылған. Диссертациялық жұмыс жоғары деңгейде дайындалып, толық аяқталған ғылыми-зерттеу жұмысы ретінде ұсынылған.
11.	Диссертацияға ескертулер	Жұмысқа қатысты ескертулер мен кемшіліктер жоқ.	Копбалина Қымбат Бағдатқызының «Хинолизин қатарындағы алкалоидтар туындыларының реакциялық қабілеттілігі мен энергетикалық тұрақтылығының кванттық-химиялық есептеулері» атты диссертациялық жұмысы ҚР ҒЖБМ ҒЖБССҚК талаптарына толық сәйкес келеді.
12.	Докторант мақалаларының зерттеу тақырыбы бойынша ғылыми деңгейі (диссертация мақалалар сериясы нысанында қорғалған жағдайда ресми рецензенттер докторанттың зерттеу тақырыбы бойынша әр мақаласының ғылыми деңгейін зерделейді)	Диссертациялық жұмыстың қорытындысы бойынша 9 ғылыми мақала жарияланған. Осы мақалалардағы зерттеу нәтижелерін автор өздігінен алған. Докторанттың мақалалары зерттеу тақырыбы бойынша жоғары ғылыми деңгейге ие деп бағаланады, бұл автордың импакт-факторы бар журналдарда жарияланған еңбектерімен расталады.	
13.	Ресми рецензенттің шешімі	Копбалина Қымбат Бағдатқызының “Хинолизин қатарындағы алкалоидтар туындыларының реакциялық қабілеттілік пен энергетикалық тұрақтылығының квантты - химиялық есептеулері” тақырыбындағы	

		диссертациялық жұмысы Қазақстан Республикасының философия докторы (PhD) дәрежесін беру қағидаларының талаптарына толық сәйкес келеді. Диссертация өзекті ғылыми мәселелерге арналған, ғылыми жаналығы мен практикалық маңызы бар, алынған нәтижелер жеткілікті деңгейде негізделген және жарияланған ғылыми мақалаларда апробацияланған. Осыған байланысты Копбалина Қымбат Бағдатқызына «8D05302 – Физика» мамандығы бойынша философия докторы (PhD) дәрежесін беруді ұсынамын.

Рецензент:

Аға ғылыми қызметкер,
“National Laboratory Astana”

Мират Кәрібаев