

СПбГУ
ПРОТОКОЛ
заседания научной комиссии в области химических наук

19 февраля 2024 г.

№ 11/7/4-02-6

Председательствующий – П.М. Толстой, профессор

Присутствовали: 12 из 24 членов научной комиссии (список прилагается, Приложение 1)

Повестка дня:

1. О рассмотрении заявки доцента Елены Юрьевны Тупикиной на участие в конкурсном отборе на соискание Премии Правительства Санкт-Петербурга за выдающиеся достижения в области науки и техники (Естественные науки – премия им. Л. Эйлера).

РЕАЛИЗАЦИЯ ПУНКТОВ ПОВЕСТКИ:

1. 1. О рассмотрении заявки доцента Елены Юрьевны Тупикиной на участие в конкурсном отборе на соискание Премии Правительства Санкт-Петербурга за выдающиеся достижения в области науки и техники (Естественные науки – премия им. Л. Эйлера).

СЛУШАЛИ: Научная комиссия рассмотрела материалы заявки доцента Елены Юрьевны Тупикиной, выдвигаемой на участие в конкурсном отборе на соискание премии Правительства Санкт-Петербурга за выдающиеся научные результаты в области науки и техники в номинации 16. естественные и технические науки - премия им. Л.Эйлера.

Тупикина Елена Юрьевна в настоящий момент является доцентом кафедры физической органической химии института химии СПбГУ. Научные интересы Тупикиной Е.Ю. связаны с квантово-механическим моделированием систем с нековалентными взаимодействиями, описанием влияния слабых взаимодействий на протекание различных химических процессов. К текущему моменту Тупикиной Е.Ю. опубликовано 36 статей, из которых 26 в журналах первого квартиля, а также три монографии. Индекс Хирша: 9 (по данным Scopus), 10 (по данным Google Scholar).

Елена Юрьевна Тупикина прошла обучение в бакалавриате и магистратуре на кафедре молекулярной спектроскопии физического факультета СПбГУ в 2009–2015 гг. Работа в аспирантуре была посвящена спектральной диагностике водородных связей методами спектроскопии ИК и ЯМР, а также с использованием методов в квантовой химии. В 2019м году была успешно и в срок была защищена диссертация на соискание степени кандидата физико-математических наук по специальности «01.04.05 – Оптика», тема диссертации – «ЯМР и ИК диагностика геометрии, энергии и электронного строения комплексов с водородной связью», научный руководитель – доктор химических наук профессор Толстой П.М. После аспирантуры Елена Юрьевна продолжила свою работу в СПбГУ в институте химии.

Основные научные интересы Тупикиной Е.Ю. связаны с исследованием комплексов с различными нековалентными взаимодействиями с использованием методом квантовой

химии, а также спектроскопии ИК и ЯМР. К основным научным результатам можно отнести следующие.

(1) Еленой Юрьевной были развиты и апробированы на различных системах методы спектральной диагностики водородных связей, а именно, установлены количественные зависимости между спектральными параметрами (ИК и ЯМР) и геометрией, энергией, а также свойствами внешней электронной оболочки для разнообразных комплексов с водородной связью. В частности, при помощи квантово-химических методов построены простые в использовании корреляционные уравнения, связывающие спектральные параметры с геометрией и энергией для водородных связей $\text{FH}\cdots\text{X}$, $\text{NH}\cdots\text{X}$ и $\text{CH}\cdots\text{X}$ ($\text{X} = \text{O}, \text{N}, \text{F}$), $\text{OH}\cdots\text{O}$. На примере ионных кластеров вида $[\text{FH}]_n\text{Cl}(-)$ отработана методика исследования систем с множественными водородными связями, в частности их взаимного влияния (кооперативное или антикооперативное) по величинам колебательных частот и химических сдвигов. Предложенные Тупикиной Е.Ю. методы оценки прочности и геометрии водородных связей имеют особую практическую значимость для исследования водородных связей в неупорядоченных системах, где неприменимы кристаллографические методы, а также для внутримолекулярных водородных связей, когда прямая оценка энергии водородной связи затруднена. Предложенные закономерности могут найти своё применение не только в фундаментальных исследованиях, но и в материаловедческих задачах, в частности в области современного дизайна супрамолекулярных систем и органических функциональных материалов, ассоциированных посредством множественных нековалентных связей, обладающих свойством самовосстановления.

(2) Была разработана новая методика зондирования топологических особенностей внешних электронных оболочек атомов, молекул и молекулярных комплексов атомом гелия-3 с использованием измеримого спектрального параметра – химического сдвига δHe .

(3) Тупикиной Е.Ю. был детально исследован механизм каталитического восстановления перекисей с участием фермента глутатионпероксидазы. Этот фермент защищает биомолекулы от окислительного повреждения и предотвращает развитие сердечно-сосудистых и нейродегенеративных заболеваний. Детально изучены нековалентные взаимодействия, образуемые селеноцистеиновым фрагментом и молекулами воды/пероксида между собой и с другими аминокислотными остатками, определена их роль в реакциях восстановления пероксида. Впервые показано, что наличие водородных связей и σ -дырочных взаимодействий (халькогенных, тетрельных и пниктогенных связей) в активном центре глутатионпероксидазы промотирует процесс восстановления перекисей.

(4) Совместно с коллегами опубликован цикл работ, посвящённых систематическому исследованию влияния стерических эффектов на синтез, строение и реакционную способность литийнафталинов. На их примере было впервые продемонстрировано влияние стерического отталкивания и высокой основности субстрата на лёгкость протекания реакций деборилирования, дано исчерпывающее описание ключевых факторов, влияющих на скорость протекания металл-галогенного обмена в стерически напряженных жёстких системах. Впервые удалось продемонстрировать, что влияние направляющих групп может быть подавлено за счёт возникающего стерического напряжения в молекуле или эффективного сопряжения направляющей группы с π -системой, что принципиально меняет региоселективность металл-галогенного обмена.

(5) Методами твердотельной спектроскопии ЯМР на ядрах ^{31}P было проведено исследование комплексов с водородными связями, образованными фосфиноксидами и

фосфиновыми кислотами, в частности для исследования возможностей спектральной диагностики геометрии и прочности водородных связей вида $\text{OH}\cdots\text{O}$ по величинам изотропного значения химического сдвига ядра ^{31}P , так и по величинам отдельных компонент тензора анизотропии химического сдвига ядра ^{31}P .

Также Тупикина Е.Ю. имеет опыт успешного руководства научными проектами и координации работы научного коллектива, что подтверждается успешной реализацией двух проектов за последние три года – грантом РНФ и грантом Президента. Сейчас Елена Юрьевна руководит ещё одним проектом РНФ. В качестве исполнителя Елена Юрьевна участвовала в более чем 20 научных проектах (РНФ, РФФИ, СПбГУ).

Тупикина Е.Ю. ведёт активную преподавательскую работу. Елена Юрьевна является разработчиком четырёх авторских курсов для новой образовательной программы магистратуры института химии «Цифровая химия», двух курсов для программы магистратуры «Химия», а также одного курса для дополнительных образовательных программ СПбГУ. Все разработанные курсы направлены на освоение навыков проведения расчётного эксперимента с применением методов квантовой химии и полуэмпирических методов на профессиональном уровне, достаточном для решения научных и производственных задач по разработке и внедрению ИТ-решений в сферах автоматизации, контроля производственных процессов, использовании искусственного интеллекта и применении методов машинного обучения в высокотехнологичных компаниях в химической, нефтегазовой и фармацевтической отраслях. Помимо этого, Тупикина Е.Ю. проводит занятия со студентами бакалавриата института химии по дисциплинам «Физика» и «Квантовая химия». Все курсы, реализуемые Еленой Юрьевной, используют интерактивные средства обучения, в частности Blackboard и MS Teams.

Тупикина Е.Ю. является членом учебно-методической комиссии по УГСН «Химия», научной комиссии в области химических наук, членом методической комиссии и членом жюри Олимпиады школьников СПбГУ по физике. Елена Юрьевна является автором двух учебно-методических пособий («Школьные олимпиады СПбГУ 2021. Физика», «Школьные олимпиады СПбГУ 2022. Физика»). Под руководством Тупикиной Е.Ю. за последние три года были защищены две магистерские, три бакалаврские выпускные квалификационные работы, а также шесть курсовых работ.

ПОСТАНОВИЛИ: по итогам голосования (за – 12, против – нет, воздержались – нет), рекомендовать кандидатуру доцента Елены Юрьевны Тупикиной к выдвижению на соискание премии Правительства Санкт-Петербурга за выдающиеся научные результаты в области науки и техники в номинации 16. естественные и технические науки - премия им. Л.Эйлера.

Заместитель председателя научной комиссии

 П.М. Толстой