

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Манина Алексея Николаевича «Многокомпонентные кристаллы фармацевтического назначения: экспериментальный и виртуальный скрининг, методы получения и физико-химические свойства», представленной на соискание ученой степени доктора химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Повышение растворимости и биодоступности лекарственных соединений является одной из ключевых задач современной фармацевтики. В этом контексте сокристаллизация представляет собой мощный инструмент модификации физико-химических свойств лекарственных соединений без изменения их химической структуры. Диссертационная работа А.Н. Манина, посвящённая комплексному изучению многокомпонентных кристаллов, направлена на решение актуальной научно-практической проблемы и обладает значительным потенциалом для применения в фармацевтической промышленности. Полученные закономерности не ограничиваются фармацевтическими сокристаллами и могут быть использованы в промышленности при разработке функциональных материалов с нелинейно-оптическими, флуоресцентными, фотоэлектрическими, магнитными и высокоэнергетическими свойствами по сокристалльной технологии.

**Научная значимость** работы заключается в разработке универсальных подходов к поиску, синтезу и прогнозированию свойств многокомпонентных кристаллов на основе глубокого анализа межмолекулярных взаимодействий и термодинамических данных. Автором получена и охарактеризована 81 новая кристаллическая форма, что само по себе свидетельствует о высокой экспериментальной плодотворности исследования. Особого внимания заслуживает комплексный характер работы, сочетающий масштабный экспериментальный скрининг с современными методами теоретического моделирования.

В диссертации использован впечатляющий спектр современных физико-химических методов: рентгеноструктурный анализ, дифференциальная сканирующая калориметрия, термогравиметрический анализ, масс-спектрометрия, высокоэффективная жидкостная хроматография, изотермическое насыщение, сублимационные эксперименты, а также методы квантовой химии и виртуального скрининга. Также были рассмотрены важные методологические аспекты и предложены комбинированные подходы, позволяющие минимизировать затраты на поиск новых многокомпонентных кристаллов с учётом «слепых зон» существующих экспериментальных методов. Такой многосторонний подход обеспечил **высокую достоверность и воспроизводимость** полученных результатов.

Материалы диссертационного исследования опубликованы в 30 рецензируемых научных статьях, в том числе в журналах с высоким импакт-фактором (Q1, Q2), а также защищены 8 патентами РФ. Это свидетельствует о высоком уровне диссертационной работы и её востребованности научным сообществом. Следует особо отметить, что все кристаллографические данные депонированы в Кембриджскую базу структурных данных,

что подтверждает высокое качество экспериментальной части работы. В рецензируемой научно-квалификационной работе на основании выполненных автором исследований разработаны теоретические положения, совокупность которых можно квалифицировать как научное достижение в области физической химии многокомпонентных кристаллов.


Автореферат написан ясным научным языком, логично структурирован и полно отражает содержание диссертации, её основные результаты и выводы.

В качестве **замечания** следует указать на некорректность следующей формулировки в разделе «Научная новизна»: «Впервые получены фармацевтические сокристаллы таких лекарственных соединений, как ацетазоламид, карбамазепин, нитрофурантоин...». Данное утверждение является неточным, поскольку некоторые сокристаллы указанных соединений (ацетазоламида, карбамазепина, нитрофурантоина) ранее были описаны в научной литературе, на которую, в том числе, ссылается и сам автор в своей работе. В то же время необходимо подчеркнуть, что данное замечание не умаляет общей высокой научной новизны диссертационного исследования в целом.

Считаю, что диссертация Манина А.Н. «Многокомпонентные кристаллы фармацевтического назначения: экспериментальный и виртуальный скрининг, методы получения и физико-химические свойства», выполнена на высоком научном уровне, отличается фундаментальностью, новизной и практической значимостью и соответствует критериям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени доктора химических наук в соответствии с пунктами 9-11, 13, 14 Положения о присуждении ученых степеней (утверждено Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 г. № 842 в действующей редакции), а её автор, Манин Алексей Николаевич заслуживает присуждения ученой степени доктора химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Ведущий научный сотрудник, директор научно-образовательного центра фармацевтики ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский) федеральный университет», доктор химических наук по специальности 02.00.03 – органическая химия

Штырлин Юрий Григорьевич



Почтовый адрес: 420008, Россия, г. Казань, ул. Кремлевская 18, ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский) федеральный университет»  
Телефон: 8(843) 206-52-69 (доб. 48-90)  
Эл. адрес: Yurii.Shtyrlin@kpfu.ru

Дата: 17.11.2025

