

ОТЗЫВ ОППОНЕНТА

на диссертационную работу Чэн Ляньюе «ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПЕРЕНОСА ПРОТОНА В ПРОИЗВОДНЫХ БЕНЗО[h]ХИНОЛИНА И 5-ХЛОРУРАЦИЛЕ МЕТОДАМИ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ», представленную на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 Физическая химия

Актуальность темы исследования

Гетероциклические органические соединения являются важным классом химических веществ и играют огромную роль в различных сферах человеческой жизни. На их основе синтезируются многочисленные лекарственные средства, они являются исходными продуктами при производстве органических оптоэлектронных и других функциональных материалов. Наличие протонов и возможности их внутримолекулярной или межмолекулярной миграции в этих соединениях часто оказывает значительное влияние на их стабильность, уникальные спектральные свойства и биологическую активность. При этом процессы создания новых высокоэффективных лекарств и современных «умных» материалов уже не могут основываться на традиционном экспериментальном методе «проб и ошибок». Диссертационная работа Чэн Ляньюе посвящена исследованию процессов переноса протона в производных бензо[h]хинолина и 5-хлорурациле методами квантово-химического моделирования для установления механизма этих превращений, создания флуоресцентных сенсоров и дизайна других практически важных химических соединений. Использование методов квантовой химии для выяснения закономерностей механизма реакций протонного переноса позволяет существенно интенсифицировать исследовательский процесс, избежать дополнительных материальных затрат, создать обоснованную теоретическую основу для разработки новых функциональных материалов, что имеет большое научное значение, определяет актуальность представленной работы и ее практическую ценность.

Структура диссертации

Диссертационное исследование построено по классической схеме и включает в себя введение, 4 главы, включающих обзор литературных данных, методики расчетов и обсуждение полученных результатов по направлениям диссертационного исследования, выводы, список литературы из 283 наименований, 16 таблиц и 49 рисунков. Общий объем работы 156 страниц.

Достоверность полученных результатов

Достоверность результатов диссертационного исследования и обоснованность основных выводов подтверждается использованием автором современных методов квантово-химических расчетов и компьютерного моделирования. Расчеты выполнены с использованием программы Gaussian 09, а анализ и визуализация данных – с помощью программ Multiwfn, VMD и Chemcraft). Полученные результаты хорошо согласуются с ранее опубликованными теоретическими и экспериментальными данными других исследователей по изучаемой проблеме. Результаты исследования успешно прошли экспертную оценку и были опубликованы в 5 международных научных журналах, входящих в базы данных Scopus и WoS, а также были представлены в виде докладов на 9 Международных и Всероссийских научных конференциях, что свидетельствует об их научной значимости.

Научная новизна

В диссертационной работе Чэн Ляньюе путем проведения квантово-химических расчетов впервые изучено влияние различных заместителей и свойств растворителей на механизм протонного переноса в производных бензо[h]хинолина и 5-хлорурациле, что позволило расширить сведения о механизмах внутримолекулярного (в случае производных бензо[h]хинолина) и межмолекулярного (в случае 5-хлорурацила) переноса протона. Выявлено влияние полярных свойств растворителя на внутримолекулярный перенос протона в возбужденном состоянии (ESIPT) в 9,10-НВQ. Для межмолекулярного переноса протона в 5-хлорурациле (5-ClU) впервые

расчетными методами было установлено, что используемые растворители могут катализировать этот процесс и влияют на его механизм. При этом муравьиная кислота проявляет максимальный каталитический эффект с высокой селективностью. На основе структуры 10-NBQ впервые была рассчитана структура молекулы нового флуоресцентного зонда для обнаружения фторид-ионов и предложена стратегия структурного дизайна новых соединений подобного применения.

Степень обоснованности научных положений, выводов и рекомендаций, выносимых на защиту

Научные положения, выводы и рекомендации диссертации логически вытекают из проведенных расчетных исследований. Представленные результаты и сделанные выводы согласуются с имеющимися теоретическими и экспериментальными литературными данными.

Ценность для науки и практики результатов диссертационной работы

Детальное изучение и установление методами квантовой химии влияния различных заместителей, свойств среды и катализаторов на закономерности процесса переноса протона в ряду производных бензо[h]хинолина и 5-хлорурациле, а также углубленное исследование механизмов этих превращений и решение вопросов управления их селективностью составляют научную значимость представленного диссертационного исследования. Предложенная модель высокоселективного флуоресцентного зонда для определения фторид-ионов по люминесценции в ближней инфракрасной области на основе производных 10-NBQ определяет практическую значимость работы. Полученные результаты и сделанные выводы являются теоретической основой для дальнейших практических исследований в области направленного синтеза органических оптоэлектронных материалов, дизайна новых лекарств и решении проблем экологического мониторинга.

Подтверждение опубликования основных результатов диссертации в научной печати. Основные результаты диссертации опубликованы в 5

научных статьях в рецензируемых журналах, индексируемых в базах данных Scopus/WoS. Материалы работы докладывались на 9 Международных и Всероссийских конференциях. Публикации в полной мере отражают содержание диссертации.

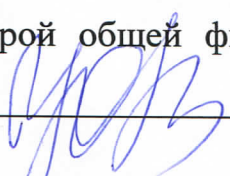
Соответствие содержания автореферата основным положениям диссертации. Содержание автореферата полностью соответствует основным положениям и результатам, изложенным в диссертационной работе. Сделанные выводы в полной мере отражают суть выполненного исследования.

Замечания по работе. Несмотря на общую положительную оценку выполненного исследования к представленной работе имеется ряд вопросов и замечаний:

1. В какой мере результаты, полученные при изучении фотохромных реакций с участием 1,1'-азобис-1,2,3-триазола (1,1'-azobis-1,2,3-triazole) были использованы в представленных исследованиях по изучению внутримолекулярного и межмолекулярного переносов протона?
2. Проводились ли автором квантово-химические расчеты с использованием более современных версий программы Gaussian и сравнительный анализ полученных при этом результатов?
3. В разделе 2.2.3 «Анализ молекулярных орбиталей производных 10-НВQ» приведены изображения молекулярных орбиталей, но не указана величина энергетической щели - разницы энергий между низшей свободной и высшей занятой молекулярными орбиталями.
4. В разделе 4.1 «Расчетные методы исследования процесса переноса протона в 5-хлорурациле» соискателем в формуле для расчета константы скорости используется число симметрии переходного состояния. Как оно определялось для каждого переходного состояния?
5. Диссертация аккуратно оформлена, однако в ней имеются мелкие орфографические и стилистические ошибки, которые не влияют на общее положительное восприятие результатов исследования.

Заключение. Диссертационное исследование Чэн Ляньюе является законченной научно-квалификационной работой, в которой содержится решение научной задачи, имеющей большое значение для развития теоретических знаний в области квантово-химического моделирования и проектирования новых материалов различного функционального назначения, установления механизмов процессов протонного переноса и химических превращений. Работа соответствует требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата химических наук, согласно п. 2.2 раздела II Положения о присуждении ученых степеней в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы», утвержденного ученым советом РУДН протокол № УС-1 от 22.01.2024 г., а ее автор, Чэн Ляньюе, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 Физическая химия.

Официальный оппонент:

доктор химических наук (02.00.04 Физическая химия, химические науки), профессор, заведующий кафедрой общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»  Орлов Юрий Димитриевич
28 мая 2026 года

Адрес: 170100, Россия, Тверь, улица Желябова, 33
тел.: +7-(960)-700-23-23; эл. почта: orlov.yd@tversu.ru

Подпись д.х.н., профессора Орлова Ю.Д. удостоверяю:



И.О. профессора
И.В.