

«УТВЕРЖДАЮ»

Первый проректор –

проректор по научной работе РУДН

доктор медицинских наук, профессор, член-корр. РАН



А.А. Костин

2025 г.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы» (РУДН) на основании решения, принятого на заседании кафедры Физической и коллоидной химии протокол № 0200-16-БУП-7 от 27.11.2025 г.

Диссертация Чэн Ляньюе «Исследование процессов переноса протона в производных бензо[h]хинолина и 5-хлорурациле методами квантово-химического моделирования» выполнена на кафедре Физической и коллоидной химии факультета физико-математических и естественных наук Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы».

Чэн Ляньюе, гражданин КНР, 1996 года рождения, в июле 2021 года окончил Шэньсийский педагогический университет по специальности «Физическая химия» (магистратура). После этого он прошел годичный курс обучения в подготовительном факультете при Федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Российский университет дружбы народов» (РУДН). В октябре 2022 года поступил в аспирантуру Российского университета дружбы народов по программе подготовки научно-педагогических кадров по направлению, соответствующему научной специальности 1.4.4. «Физическая химия», по которой подготовлена диссертация. В период подготовки диссертации и в настоящее время является аспирантом кафедры физической и коллоидной химии РУДН.

Справка о сдаче кандидатских экзаменов выдана в 2025 году Федеральным государственным автономным образовательным учреждением высшего образования «Российский университет дружбы народов».

Научный руководитель - доктор химических наук, доцент, заведующий кафедрой Физической и коллоидной химии Чередниченко Александр Генрихович.

Тема диссертационного исследования утверждена на заседании Ученого совета факультета физико-математических и естественных наук РУДН 11.11.2025, протокол № 0200-УСП-5.

По итогам обсуждения принято следующее заключение:

- рекомендовать работу Чэн Лянюе к защите на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. «Физическая химия». Диссертационная работа Чэн Лянюе «Исследование процессов переноса протона в производных бензо[h]хинолина и 5-хлорурациле методами квантово-химического моделирования» является законченной научно-исследовательской работой и отвечает п. 9, 10, 11 и др. «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства РФ от 30 января 2002 года № 74 (в редакции постановления Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. № 842).

Оценка выполненной соискателем работы. Диссертация Чэн Лянюе является актуальным, законченным самостоятельным фундаментальным исследованием, посвященным изучению процессов переноса протона в производных бензо[h]хинолина и 5-хлорурациле методами квантово-химического моделирования с целью установления механизма этих превращений, создания флуоресцентных сенсоров и дизайна практически важных химических соединений, отличающимся научной новизной и имеющим важное теоретическое значение.

Личное участие автора состоит в формулировании цели и задач диссертационного исследования, проведении глубокого анализа и систематизации литературных данных, самостоятельном проведении квантово-химических расчетов с использованием современного программного обеспечения Gaussian 09, Multiwfn, VMD, Chemcraft, оптимизации расчетных процедур. Чэн Лянюе осуществлял детальный анализ и обсуждение полученных результатов, участвовал в написании научных статей, редактировал их текст и отвечал на вопросы рецензентов. Активно представлял полученные результаты исследования на Международных и Всероссийских конференциях различного уровня.

Степень достоверности результатов исследования. Достоверность результатов диссертационного исследования и обоснованность основных выводов подтверждается использованием современных методов квантово-химических расчетов и компьютерного моделирования (Gaussian 09, Multiwfn, VMD, Chemcraft), а также хорошей согласованностью с ранее опубликованными теоретическими и экспериментальными данными по изучаемой проблеме. Основные результаты исследования были опубликованы в высокорейтинговых международных научных журналах, входящих в базы данных Web of Science и Scopus, и успешно прошли экспертную оценку, что подтверждает признание их научной значимости. Кроме того, эти результаты были представлены и подробно обсуждены в виде докладов на Всероссийских

и Международных научных конференциях, получив положительные отзывы научной общественности.

Научная новизна.

1. Впервые путем проведения квантово-химических расчетов 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.

2. Выявлено влияние полярных свойств растворителя на внутримолекулярный перенос протона в возбужденном состоянии (ESIPT) в 9,10-НВQ.

3. Для межмолекулярного переноса протона в 5-хлорурациле (5-CIU) 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.

4. На основе молекулы 10-НВQ впервые была рассчитана структура нового флуоресцентного зонда для обнаружения фторид-ионов и предложена общая стратегия структурного дизайна этих устройств.

Теоретическая и практическая значимость работы. Детальное изучение 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 теоретическую значимость представленного диссертационного исследования. Рассчитанная модель высокоселективного флуоресцентного зонда для определения фторид-ионов по люминесценции в ближней инфракрасной области на основе производных 10-НВQ определяет практическую значимость работы. Полученные результаты и сделанные выводы могут быть использованы в качестве теоретического руководства в области направленного синтеза органических оптоэлектронных материалов, дизайна новых лекарств и решении проблем экологического мониторинга.

Ценность научных работ соискателя состоит в том, что полученные соискателем методами квантовой химии результаты позволяют раскрыть влияние строения, свойств среды и катализаторов на закономерности процесса переноса протона в ряду различных производных бензо[h]хинолина и 5-хлорурациле, определить спектральные характеристики еще неизвестных соединений. На основе проведенных квантово-химических расчетов с использованием производных 10-НВQ была разработана расчетная модель высокоселективного флуоресцентного зонда для определения фторид-ионов с использованием флуоресценции в ближней инфракрасной области. Полученные результаты и сделанные выводы могут быть использованы в

других химических направлениях химической науки, в том числе в области синтеза новых материалов для оптоэлектроники, при получении новых биологически активных соединений и при разработке приборов аналитического контроля состояния окружающей среды.

Соответствие специальности. Диссертационное исследование соответствует паспорту специальности 1.4.4. «Физическая химия», а именно: п.1. «Экспериментально-теоретическое определение энергетических и структурно-динамических параметров строения молекул и молекулярных соединений, а также их спектральных характеристик»; п.4 «Теория растворов, межмолекулярные и межчастичные взаимодействия. Компьютерное моделирование строения, свойств и спектральных характеристик молекул и их комплексов в простых и непростых жидкостях, а также ранних стадий процессов растворения и зародышеобразования»; п.8 «Динамика элементарного акта химических реакций. Механизмы реакции с участием активных частиц»; п.9 Связь реакционной способности реагентов с их строением и условиями протекания химической реакции. п.10. Создание и разработка методов компьютерного моделирования строения и механизмов превращений химических соединений на основе представлений квантовой механики, различных топологических и статистических методов, включая методы машинного обучения, методов молекулярной механики и молекулярной динамики, а также подходов типа структура-свойства. п.11 «Получение методами квантовой химии и компьютерного моделирования данных об электронной структуре, поверхностях потенциальной и свободной энергии, реакционной способности и динамике превращений химических соединений, находящихся в различном окружении, в том числе в кластерах, клатратах, твердых и жидкокристаллических матрицах, в полостях конденсированных сред и белковом окружении».

Полнота изложения материалов диссертации в работах, опубликованных соискателем. По результатам работы было опубликовано 5 статьи в журналах, рецензируемых базами данных ВАК, WoS и Scopus. Диссертационная работа была апробирована на 9 Всероссийских и международных конференциях.

Основное содержание диссертации в полной мере изложено в публикациях:

1. Cheng, L.Y. Proton transfer theoretical study catalyzed by 5-chlorouracil / Liangyue Cheng // J. Phys. Org. Chem. - 2024. - Vol. 37. - Art. № 8. - Art. № e4638. <https://doi.org/10.1002/poc.4638>. (SCOPUS/WoS).

2. Cheng, L.Y. Photochromic reaction pathways of 1,1'-azobis-1,2,3-triazole: A CASSCF and spin-flip DFT study / Liangyue Cheng // Comput. Theor. Chem. - 2024. - Vol. 1241. - P. 114870. <https://doi.org/10.1016/j.comptc.2024.114870>. (SCOPUS/WoS).

3. Cheng, L.Y. Theoretical study on the relationship between ESIPT process and solvent of 9,10-dihydroxybenzo [h] quinoline / L.Y. Cheng, A.G.

Cherednichenko // J. Photochem. Photobiol., A - 2025. - Vol. 460. - P. 116121. <https://doi.org/10.1016/j.jphotochem.2024.116121>. (SCOPUS/WoS).

4. Cheng, L.Y. Design of a near-infrared fluorescent sensor for detecting fluoride anion based on 10-hydroxybenzo[h]quinoline: a theoretical study / L.Y. Cheng, A.G. Cherednichenko // Russ. Chem. Bull. - 2025. - Vol. 74. - № 4. - P. 912-923. DOI: 10.1007/s11172-025-4586-6 (SCOPUS/WoS).

5. Cheng, L.Y., DFT Study of the Size Effect on the Adsorption Configuration of 5-Chlorouracil on B_nN_n ($n = 12, 16, 20, 24$) Nanocages / L.Y. Cheng, A.G. Cherednichenko // Theor. Chem. Acc. - 2026. - Vol. 145. - № 36. DOI: <https://doi.org/10.1007/s00214-026-03289-7> (SCOPUS/WoS).

6. Cheng, L.Y. Сенсор флуоресценции ближнего инфракрасного диапазона на основе молекулярной структуры HBQ / Liangyue Cheng // Всероссийская молодежная научная конференция с международным участием «Функциональные материалы: Синтез. Свойства. Применение» YOUNG ISC 2024. Сборник тезисов. - г. Санкт-Петербург, 2024. - С. 29.

7. Cheng, L.Y. Чередниченко А.Г. Влияние электрического поля на процесс изомеризации 5-хлорурацила // Новые материалы и химические технологии. Сборник статей. - Москва, 2024. - С. 53-54.

8. Cheng, L.Y. Теоретическое исследование переноса протона 5-хлорурацила, катализируемого различными растворителями / L.Y. Cheng, A.G. Cherednichenko // VIII Всероссийская молодёжная конференция с международным участием «Химия и химическое образование XXI века». Сборник тезисов. - г. Санкт-Петербург, 2025. - С. 133-134.

9. Cheng, L.Y. Теоретическое исследование процесса ESIPT соединения 9-10-HBQ, регулируемого полярностью растворителя / L.Y. Cheng, A.G. Cherednichenko // XXXII Международная научная конференция студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов-2025». Сборник тезисов. - Москва, 2025. - С. 421.

10. Cheng, L.Y. Зависимость процесса ESIPT от растворителя в соединениях 9,10-дигидроксибензо[n]хинолина / L.Y. Cheng, A.G. Cherednichenko // XXVIII Всероссийская конференция молодых учёных-химиков (с международным участием). Сборник тезисов. - Нижний Новгород, 2025. - С. 491.

11. Cheng, L.Y. Пути фотохромной реакции 1,1'-азобис-1,2,3-триазола: исследование CASSCF и спин-флип DFT / L.Y. Cheng, A.G. Cherednichenko // I Всероссийская конференция «Полимеры и композиты на их основе: прикладные и экологические решения». Сборник тезисов. - Казань, 2025. - С. 200.

12. Cheng, L.Y. Оценка флуоресцентных молекул-зондов на основе 10-HBQ для исследования селективности фторид-ионов / L.Y. Cheng, A.G. Cherednichenko // XVII Международная научно-практическая конференция «Образование и наука для устойчивого развития». Сборник тезисов. - Москва, 2025. С. 287-288.

13. Cheng, L.Y. Молекулы флуоресцентных зондов на основе 10-HBQ для специфического распознавания фторид-ионов / L.Y. Cheng, A.G.

Чередниченко // XXXV Российская молодежная научная конференция с международным участием, посвященная 165-летию со дня рождения Н.С. Курнакова «Проблемы теоретической и экспериментальной химии». Сборник тезисов. - Екатеринбург, 2025. - С. 448.

14. Cheng, L.Y. Влияние растворителей на энергетические барьеры реакции ESIPT 9,10-дигидроксибензо[h]хинолина / L.Y. Cheng, А.Г. Чередниченко // VII Международный симпозиум «Innovations in Life Sciences». Сборник тезисов. - Белгород, 2025.

Текст диссертации был проверен на использование заимствованного материала без ссылки на авторов и источники заимствования. После исключения всех корректных совпадений иных заимствований не обнаружено, степень оригинальности составила 82,47 %).

Диссертационная работа Чэн Ляное рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. «Физическая химия».

Заключение принято на заседании кафедры Физической и коллоидной химии, протокол № 0200-16-БУП-7 от 27.11.2025 г. Присутствовало на заседании 11 чел. Результаты голосования: «за» – 11 чел., «против» – 0 чел., «воздержалось» – 0 чел.

Председательствующий на заседании:
доцент кафедры
физической и коллоидной химии,
к.х.н., доцент

 Т.Ф. Шешко

Подпись Т.Ф. Шешко удостоверяю.
Ученый секретарь Ученого совета
Факультета ФМиЕН РУДН

 И.С. Зарядов