

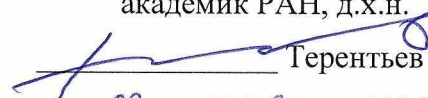
28.05.2026  
~ 12104-377/2171-01



УТВЕРЖДАЮ

Директор Федерального государственного  
бюджетного учреждения науки  
Институт органической химии им.  
Н.Д.Зелинского Российской академии наук  
(ИОХ РАН)

Российской академии наук (ИОХ РАН)  
академик РАН, д.х.н.

  
Герентьев А.О.  
«28» мая 2026 г.

## ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

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

В настоящее время гетероциклические органические соединения играют огромную роль в жизни человечества. Они используются в качестве предшественников в синтезе противоопухолевых препаратов, при создании органических оптоэлектронных материалов и других функциональных веществ. Процесс переноса протона в этих соединениях является частым явлением и может оказывать значительное влияние на их стабильность, спектральные характеристики и биологическую активность. Современные потребности в создании новых высокоэффективных лекарств и разработки современных «умных» материалов не могут опираться на традиционный экспериментальный метод «проб и ошибок», который не соответствует требованиям дизайна в создании функциональных молекул с прогнозируемыми свойствами. В результате возникает необходимость в использовании расчетных методов исследования для понимания механизмов различных химических превращений и управления сложными физико-химическими процессами. Электронные эффекты, пространственная

структура органического гетероциклического соединения, влияние катализаторов и свойств среды не только определяют реакционную способность, но и создают возможность множества путей превращений и затрудняет прогнозирование конечного продукта. Использование методов квантовой химии для выяснения особенностей механизма реакций протонного переноса позволяет существенно интенсифицировать исследовательский процесс, создать теоретическую основу для разработки новых функциональных материалов.

**Диссертационное исследование** Чэн Ляное построено традиционным образом и включает в себя введение, литературный обзор и 3 главы основной части исследования, выводы, список литературы из 283 наименований, 16 таблиц и 49 рисунков. Общий объем диссертационной работы составляет 156 страниц.

**Во введении** подробно рассмотрено современное значение органических гетероциклических соединений и роль квантово-химических расчетов в изучении механизмов их превращений и прогнозировании уникальных свойств, что определяет актуальность представленной диссертационной работы, ее теоретическую и практическую ценность.

**В литературном обзоре (глава 1)** подробно описано текущее состояние исследований в области переноса протона и их значение на примере производных бензо[h]хинолина и урацила, рассмотрены синтетические методы получения этих гетероциклических соединений, их структурные особенности, биологическая активность, а также применение в флуоресцентных зондах.

**В главе 2** представлены методики расчета и результаты теоретического исследования влияния строения производных 10-НВQ на их спектральные характеристики. Моделирование подтвердило, что наиболее выраженные изменения спектральных характеристик могут быть получены при одновременном присутствии электронодонорной группы  $-NH_2$  в положение  $C_7$  и электроноакцепторной группы  $-NO_2$  в положение  $C_4$  молекулы 10-НВQ. Итогом исследования стала разработка модели молекулярного флуоресцентного зонда для обнаружения анионов фтора.

**Глава 3** посвящена теоретическому исследованию влияния свойств различных растворителей на процесс переноса протона в 9,10-дигидроксибензо[h]хинолине. Оценка влияния свойств растворителя на вероятность образования внутримолекулярной водородной связи ( $O_1-H_2...O_3$ ) возбужденном состоянии молекулы 9,10-НВQ показала, что при постепенном

увеличении полярности растворителя от циклогексана до ацетонитрила значение энергетической щели между HOMO к LUMO ( $\Delta E_{\text{HOMO-LUMO}}$ ) возрастает и энергетический барьер для реакции ESIPT увеличивается с 7,12 ккал/моль до 8,15 ккал/моль. Это указывает на ингибирующее влияние процесса усиления полярных свойств среды на осуществление процесса ESIPT для 9,10-HBQ.

**В главе 4** автором представлены результаты теоретического исследования переноса протона в 5-хлорурациле (5-CIU), катализируемого различными растворителями. Результаты расчетов показали, что муравьиная кислота наиболее сильно снижает энергетический барьер реакции, эффективно стабилизируя циклическое восьмичленное переходное состояние, при этом расчетные энергии активации для двух альтернативных каталитических маршрутов изомеризации 5-CIU снижаются на 36,45 и 43,80 ккал/моль, соответственно. При этом для маршрута 5-CIU  $\rightarrow$  5-CIU2  $\rightarrow$  5-CIU3 (путь 2) наблюдается самое высокое значение расчетной константы скорости реакции, что дает преимущество над альтернативным маршрутом изомеризации 5-CIU  $\rightarrow$  5-CIU1  $\rightarrow$  5-CIU3 (путь 1) в 7,5 раз.

**Научная и практическая значимость** диссертационной работы определяются детальным изучением современными методами квантовой химии важных вопросов влияния свойств различных заместителей, среды и катализаторов на закономерности процесса переноса протона в ряду производных бензо[h]хинолина и 5-хлорурацила, углубленным исследованием механизмов этих превращений и решением вопросов управления их селективностью. Полученные результаты хорошо согласуются с имеющимися теоретическими и экспериментальными результатами в рассматриваемой области. Предложенная автором расчетная модель высокоселективного флуоресцентного зонда для определения фторид-ионов по люминесценции в ближней инфракрасной области на основе производных 10-HBQ составляет практическую значимость работы. Исходя из вышесказанного можно считать, что полученные в работе теоретические результаты являются достоверными и значимыми, а ее автор в ходе проведенных исследований успешно решил все поставленные задачи.

**В качестве отдельных замечаний**, не влияющих на общее впечатление от рецензируемой работы, следует отметить следующее:

Автором в диссертационной работе для решения поставленных задач используются уровни теории с разными базисными наборами. В связи с этим возникает необходимость в корректном сравнении полученных данных для

обоснования эффективности выбранного подхода и подтверждения достоверности результатов.

Оправдано ли с научной и практической точек зрения усложнение структуры исследуемых соединений введением дополнительного заместителя в положение С4, если сопоставить полученные автором спектральные характеристики с известными данными для монозамещённой в положение С7 молекулы 10-NBQ?

При оценке перспективности использования  $4\text{NO}_2\text{-}7\text{NH}_2\text{-NBQ}$  в качестве молекулярного зонда для обнаружения анионов фтора следует учитывать возможность их сольватации в случае реальных объектов исследования, что может существенно повлиять на спектральные характеристики и внести заметные изменения в методологию и чувствительность анализа.

Не нивелируются ли в реальных условиях проявления свойств среды различия между рассчитанными константами скорости изомеризации 5-хлорурацила (5-молекулами различных растворителей)?

В тексте диссертации имеются единичные орфографические ошибки и неточности, которые не снижают уровень представленного исследования.

Сделанные замечания не являются принципиальными и не влияют на хороший научный уровень работы. Полученные Чэн Лянюе результаты и сделанные выводы могут быть использованы в качестве теоретического руководства в области направленного синтеза органических оптоэлектронных материалов, дизайна новых биологически активных соединений, лекарств и решении проблем экологического мониторинга. Эти результаты могут быть интересны специалистам, работающим в области органической химии гетероциклических соединений, занимающихся квантово-химическими расчетами и созданием современных функциональных материалов в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова, Институте элементоорганических соединений имени А.Н. Несмеянова РАН, Институте органической и физической химии имени А.Е. Арбузова, Институте физической химии и электрохимии имени А.Н. Фрумкина РАН, Новосибирском институте органической химии имени Н.Н. Ворожцова СО РАН, Российском химико-технологическом университете имени Д.И. Менделеева и в других научных центрах и организациях.

**В целом диссертация Чэн Лянюе** является завершённым научно-квалификационным исследованием, в которой содержится решение научной задачи, имеющей 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 в ряду органических гетероциклических соединений.

**Научная новизна результатов представленной работы и их достоверность** определяются тем, что впервые путем проведения квантово-химических расчетов было 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 этого процесса. Автором было выявлено влияние полярных свойств растворителя на внутримолекулярный перенос протона в возбужденном состоянии (ESIPT) в 9,10-НВQ, а для межмолекулярного переноса протона в 5-хлорурациле (5-ClU) впервые расчетными методами было установлено, что используемые растворители могут катализировать этот процесс и влияют на особенности его протекания. На основании проведенных расчетов структуры и свойств производных 10-НВQ впервые была предложена модель нового молекулярного флуоресцентного зонда для обнаружения фторид-ионов и обоснована стратегия структурного дизайна новых соединений подобного применения.

**Публикации.** Полученные результаты диссертационного исследования опубликованы в 5 статьях в международных научных журналах, входящих в базы данных Scopus и WoS, а также представлены в виде докладов на 9 Международных и Всероссийских научных конференциях. Автореферат в полной мере отражает результаты и выводы диссертационной работы. Подтвержденная оригинальность текста диссертации составляет 82,47 %.

На основании вышесказанного можно утверждать, что диссертационная работа Чэн Лянюе 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 Лянюе, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 Физическая химия.

Отзыв на диссертационную работу Чэн Ляное заслушан и утвержден на научном семинаре лаборатории (протокол № 2 от 28.05.2026 г.).

Даем согласие на включение персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета и их дальнейшую обработку.

Старший научный сотрудник, руководитель группы Теоретической химии № 24 ИОХ РАН, кандидат физико-математических наук по специальности 02.00.04 Физическая химия

 \_\_\_\_\_ Медведев Михаил Геннадьевич

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт органической химии имени Н.Д. Зелинского Российской академии наук, 119991, г. Москва, Ленинский проспект, д. 47.

Телефон: +7-(499)-137-29-44

e-mail: medvedev@ioc.ac.ru

Подпись к.ф.-м.н. Медведева М.Г. удостоверяю:

Ученый секретарь ИОХ РАН

кандидат химических наук



 \_\_\_\_\_ И.К. Коршевец