

ОТЗЫВ

официального 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 учёной степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 Физическая химия

Актуальность темы исследования

Диссертационная работа Чэн Ляньюе посвящена исследованию процессов переноса протона в производных бензо[h]хинолина и 5-хлорурациле методами квантовохимического моделирования для установления механизма этих превращений, создания флуоресцентных сенсоров и дизайна других практически важных химических соединений. Гетероциклические органические соединения играют огромную роль в нашей жизни. Они используются в качестве предшественников противоопухолевых препаратов, органических оптоэлектронных и других функциональных материалов. Процесс переноса протона в этих соединениях часто оказывает значительное влияние на их стабильность, уникальные спектральные свойства и биологическую активность. Растущие потребности в разработке новых высокоэффективных лекарств и современных «умных» материалов уже не могут основываться на традиционном экспериментальном методе «проб и ошибок». Использование методов квантовой химии для выяснения особенностей механизма реакций протонного переноса позволяет существенно интенсифицировать исследовательский процесс, создать теоретическую основу для разработки новых функциональных материалов, что имеет большое научное значение, определяет актуальность представленной работы и её практическую ценность.

Структура диссертации

Диссертационное исследование Чэн Ляньюе состоит из введения, четырёх основных глав, выводов и списка литературы. Полный объем диссертации – 156 страниц, работа содержит 16 таблиц и 49 рисунков, список литературы включает в себя 283 наименования. Автореферат полностью отражает содержание диссертационной работы. Диссертационная работа отвечает заявленной специальности 1.4.4 Физическая химия.

Достоверность полученных результатов

Все результаты, представленные в диссертации, получены автором, либо при его непосредственном участии. Диссертация написана ясно, включает хороший анализ литературных источников по теме исследования и содержит большой объем аналитической и вычислительной работы.

Достоверность полученных результатов и сделанных соискателем выводов не вызывает сомнений, так как в работе использованы современные и наиболее надёжные для решения поставленных задач современные методы квантовохимических расчётов и компьютерного моделирования (расчёты выполнены с использованием программы Gaussian 09, а анализ и визуализация данных – с помощью программ Multiwfn, VMD и Chemcraft), а также их хорошей согласованностью с ранее опубликованными теоретическими и экспериментальными данными по изучаемой проблеме.

Основные результаты исследования успешно прошли экспертную оценку и были опубликованы в высокорейтинговых международных научных журналах, входящих в базы данных Web of Science и Scopus, что подтверждает признание их научной значимости. Основные результаты диссертационной работы неоднократно докладывались и обсуждались на российских и международных конференциях и были представлены в виде докладов на девяти Всероссийских и Международных научных конференциях. Все это свидетельствует о высокой научной квалификации Чэн Лянюе.

Научная новизна

В диссертационной работе путём проведения квантовохимических расчётов 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 возбуждённом состоянии (ESIPT) в 9,10-НВQ. Для межмолекулярного переноса протона в 5-хлорурациле (5-ClU) впервые расчётными 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-НВQ 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 и выводы диссертации логически вытекают из проведённых расчётных исследований. Представленные результаты и сделанные выводы согласуются с имеющимися экспериментальными и теоретическими литературными данными.

Ценность для науки и практики результатов диссертационной работы

Научная значимость представленного диссертационного исследования заключается в детальном изучении и установлении 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 углублённое исследование механизмов этих превращений и решение вопросов управления их селективностью. Предложенная 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 теоретической основы для 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 пяти научных статьях в рецензируемых журналах, индексируемых в базах данных WoS/Scopus. Материалы работы докладывались на девяти Всероссийских и Международных конференциях. Публикации полностью отражают содержание диссертации.

Соответствие содержания автореферата основным положениям диссертации

Содержание автореферата полностью соответствует основным положениям и результатам, изложенным в диссертационной работе. Выводы, выносимые на защиту, адекватно отражают суть выполненного исследования.

Замечания по работе.

Несмотря на большое количество оригинальных и важных результатов при прочтении диссертации возникло несколько замечаний:

1. В разделе 2.1 «Методика и особенности проведения теоретических расчётов» указано, что для решения задачи точного описания фотохимических реакций применялась вычислительная стратегия, использующая метод CASSCF для оптимизации основного состояния и стабильных конфигураций возбуждённого состояния. При этом далее в тексте диссертации эти расчёты не приводятся.

2. Согласно проведённым автором расчётам и сделанным выводам $7\text{NH}_2\text{-}4\text{NO}_2\text{-NBQ}$ продемонстрировал самый большой Стоксов сдвиг и поэтому его использование в качестве молекулярного зонда должно проявлять высокую чувствительность к анионам фтора. Это требует дополнительного рассмотрения значений интенсивности соответствующих полос в анализируемых спектрах.
3. Анализ полученных автором в результате проведённых расчётов данных $7\text{NH}_2\text{-}4\text{NO}_2\text{-NBQ}$ действительно можно рассматривать как перспективный вариант для создания на его основе флуоресцентных зондов ближнего инфракрасного диапазона с целью определения анионов фтора в различных системах. Однако, кроме мешающих анионов других галогенов, что имеет большое значение, следует учитывать наличие других мешающих анионов в анализируемых жидкостях. Следует также знать, будут ли меняться спектры излучения при наличии специфической и неспецифической сольватации, т.к. в реальных условиях все ионы будут в сольватированном состоянии.
4. В диссертации имеются незначительные орфографические и стилистические ошибки, которые не влияют на общее положительное восприятие результатов исследования.

Сделанные замечания не снижают общую значимость представленных результатов и выводов и имеют частный характер. Основные защищаемые положения диссертации обоснованы, характеризуются научной новизной и практической значимостью.

Заключение.

Диссертационное исследование Чэн Лянюе «Исследование процессов переноса протона в производных бензо[h]хинолина и 5-хлорурациле методами квантово-химического моделирования» является законченной научно-квалификационной работой, в которой содержится решение научной задачи, имеющей значение для развития теоретических знаний в области квантовохимического моделирования и проектирования новых функциональных материалов, установления механизмов химических превращений. Работа соответствует требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание учёной степени кандидата химических наук, согласно п. 2.2 раздела II Положения о присуждении учёных степеней в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы», утверждённого учёным советом РУДН протокол № УС-1 от 22.01.2024 г., а её автор, Чэн Лянюе,

заслуживает присуждения учёной степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 Физическая химия.

Официальный оппонент:

доктор физико-математических наук (специальность 1.3.8. Физика конденсированного состояния), старший научный сотрудник лаборатории магнитных явлений Института физики имени Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук (ИФ СО РАН) – обособленного отделения Федерального государственного бюджетного научного учреждения «Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук (ФИЦ КНЦ СО РАН г. Красноярск)».

27 мая 2026 г.

Томилиן Феликс Николаевич

Адрес официального оппонента: 660036, Россия, г. Красноярск, Академгородок, 50, стр. 38, Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН.
тел.: +7 (950) 978-88-90, e-mail: felixnt@gmail.com

Заверяю
Ученый секретарь Кр. М. С.
Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского
отделения Российской академии наук - обособленное
подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН (ИФ СО РАН)

