

ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА ПДС 0200.002 ФЕДЕРАЛЬНОГО
ГОСУДАРСТВЕННОГО АВТОНОМНОГО ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО
УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ «РОССИЙСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ ДРУЖБЫ НАРОДОВ ИМЕНИ ПАТРИСА ЛУМУМБЫ»
ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА
НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 16 июня 2026 г., протокол № 7

О присуждении Чэн Ляньюе, гражданину КНР, ученой степени кандидата химических наук.

Диссертация «Исследование процессов переноса протона в производных бензо[h]хинолина и 5-хлорурациле методами квантово-химического моделирования» по специальности 1.4.4. Физическая химия в виде рукописи принята к защите 12 мая 2026 года, протокол № 5 диссертационным советом ПДС 0200.002 «Химические науки» Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы» (РУДН им. П. Лумумбы) Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (117198, г. Москва, ул. Миклухо-Маклая, д. 6; приказ 413 от 02.07.2025).

Соискатель Чэн Ляньюе, гражданин КНР, 1996 года рождения, в 2021 году закончил магистратуру Шэньсийского педагогического университета (КНР) по специальности «Физическая химия». В 2022 году поступил в аспирантуру на кафедру физической и коллоидной химии Факультета физико-математических и естественных наук Российского университета дружбы народов имени Патриса Лумумбы по программе подготовки научно-педагогических кадров по направлению 1.4.4. Физическая химия (химические науки).

В настоящее время является аспирантом этой кафедры.

Диссертация 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» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Научный руководитель – доктор химических наук (05.27.06 – технология и оборудование для производства полупроводников, материалов и приборов электронной техники), Чередниченко Александр Генрихович, гражданин РФ, заведующий кафедрой физической и коллоидной химии ФГАОУ ВО «Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы».

Официальные оппоненты:

1. Орлов Юрий Дмитриевич, гражданин РФ, доктор химических наук (02.00.04 Физическая химия), профессор, заведующий кафедрой общей физики Тверского Государственного Университета.

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

дали положительные отзывы о диссертации.

В отзывах оппонентов указано, что диссертационное исследование соответствует требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой 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», утвержденного ученым советом РУДН протокол № УС-1 от 22.01.2024 г., а ее автор, Чэн Ляное, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук.

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской академии наук (ИОХ РАН) в своем положительном отзыве, подписанном старшим научным сотрудником группы Теоретической химии № 24 ИОХ РАН, кандидатом физико-математических наук по специальности 02.00.04 Физическая химия Медведевым Михаилом Геннадьевичем и утвержденном директором ИОХ РАН академиком РАН Терентьевым Александром Олеговичем указала, что диссертация Чэн Ляное является законченной научно-квалификационной работой, в которой путем проведения квантово-химических расчетов с использованием современного программного обеспечения 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.

В заключение отзыва ведущей организации указано, что диссертационная работа соответствует требованиям п. 2.1 раздела II Положения о присуждении ученых степеней в федеральном государственном автономном образовательном учреждения высшего образования «Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы», утвержденного ученым советом РУДН 22.01.2024 г.,

протокол № УС-1, а ее автор, Чэн Ляньюе заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук.

Соискатель имеет 5 опубликованных работ по теме диссертации в рецензируемых научных изданиях, индексируемых в международных базах данных «Scopus» и «Web of Science». Общий объем публикаций 2,5 п.л. Авторский вклад 90,0 %.

Наиболее значимые публикации:

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

На автореферат диссертации поступило 5 положительных отзыва от:

Устынюк Лейлы Юрьевны, гражданина РФ, доктора химических наук (02.00.15 Кинетика и катализ), старшего научного сотрудника кафедры Физической химии химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова

Хозиной Елены Вадимовны, гражданки РФ, кандидата физико-математических наук (02.00.04 Физическая химия), старшего научного сотрудника лаборатории сорбционных процессов Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт физической химии и электрохимии имени А.Н. Фрумкина Российской академии наук.

Иванцовой Натальи Андреевны, гражданки РФ, кандидата химических наук (03.00.16 Экология), доцента, доцента кафедры промышленной экологии ФГБОУ ВО РХТУ имени Д.И. Менделеева.

Титова Алексея Александровича, гражданина РФ, доктора химических наук (1.4.1. Неорганическая химия), ведущего научного сотрудника лаборатории гидридов металлов ФГБУН Института элементоорганических соединений имени А.Н. Несмеянова РАН.

Утенышева Андрея Николаевича, гражданина РФ, кандидата химических наук (02.00.04 Физическая химия), старшего научного сотрудника Федерального исследовательского центра проблем химической физики и медицинской химии РАН г. Черноголовка Московской области.

Выбор официальных оппонентов обосновывается их высокой квалификацией, наличием научных трудов и публикаций, соответствующих теме оппонируемой диссертации.

Основные публикации Орлова Ю.Д. по тематике диссертационного исследования:

1. Chernova E.M., Orlov Y.D., Miroshnichenko E.A. The electronic structure of free radical 9-fluorenyl within the framework of QTAIM // Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials, 2025 Vol. 17, P. 514-521.

2. Rusakova N.P., Orlov Y.D., Homologs of Thioacetone and Acetone in the Quantum Theory of Atoms in Molecules // Reviews and Advances in Chemistry, 2024, Vol. 14(1), P. 31-36.

3. Chernova E.M., Orlov M.Y., Rusakova N.P., Orlov Y.D., Electronic Structure of Homological Series of Primary Amines and Aminyl Radicals // Reviews and Advances in Chemistry, 2024, Vol. 14(4), P. 504-508.

4. Rusakova N.P., Orlov Y.D. Charges and Volumes of Functional Groups of Amino Acids and Amino Aldehydes // Reviews and Advances in Chemistry, 2023, Vol. 13(1), P. 38-45.

5. Rusakova N.P., Turovtsev V.V., Orlov Y.D., et al. Electronic structure of dimethyl sulfoxide homologues // Russian Chemical Bulletin, 2023, Vol. 72(7), P. 1499-1504.

6. Verevkin S.P., Turovtsev V.V., Andreeva I.V., Orlov Y.D., et al. Webbing a network of reliable thermochemistry around lignin building blocks: tri-methoxy-benzenes // RSC advances, 2021, Vol. 11(18), P. 10727-10737.

7. Chernova E.M., Orlov M.Y., Turovtsev V.V., et al. Enthalpies of formation of phenylaminy radicals // Russian Chemical Bulletin, 2021, Vol. 70(2), P. 330-335.

Основные публикации Томилина Ф.Н. по тематике диссертационного исследования:

1. Mitroshin A.M., Miltsov S.A., Kolesnikov I.E., Lypenko D.A., Dmitryev A.V., Litvinova L.S., Korshunov V.M., Taydakov I.V., Ushakova E.V., Rogova A.V., Tomilin F.N., Yakimansky A.V. In situ Generation of Carbazole-triazine thermally activated delayed fluorescen emitters within the conjugated polymerchain // Chinese Journal of polymer Science, 2026, Vol. 44, P. 361-370.

2. Krasitskaya V.V., Shchugoreva I.A., Rogova A.V., Safenkova I.V., Sokolov A.E., Nikolaeva E.N., Tomilin F.N., Frank L.A. Structure-affinity balance of anti-cardiac troponin I aptamer: Effects of sequence truncation // *International Journal of Biological Macromolecules*, 2026, Vol. 341, P. 150299.
3. Andryushchenko T.A., Tarasov A. S., Lyaschenko S.A., Lukyanenko A.V., Yakovlev I.A., Fedorova N.A., Tomilin F.N., et al. Structure, electronic and optical properties of $(\text{Cr}_{1-x}\text{Mn}_x)$ 2GeC MAX phase: DFT calculations and epitaxial film synthesis // *Materials Today Communications*, 2025, P. 114184.
4. Parfenova E.V., Slyusarenko N. V., Kulagin S.V., Rogova A.V., Tomilin F.N., Slyusareva E.A. Photophysical Properties of Luminophores Based on 3-(1,3-Benzothiazol-2-yl)-4-hydroxybenzenesulfonic Acid // *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*, 2024, Vol. 88(6), P. 940-945.
5. Shchugoreva I.A., Smyslov R.Y., Nasirova I.A., Goikhman M.Ya., Yakimansky A.V., Ovchinikov S.G., Artyushenko P.V., Rogova A.V., Tomilin F.N., Avramov P.V. Synergetic experimental and theoretical investigation of molecular structure-Optical properties relationships of anthrazoline-based polymeric chains // *Optical Materials*, 2024, Vol. 157, P. 116135.
6. Platunov M.S., Fedorova N.A., Pyastolova Y.V., Laptash N.M., Knyazev Y.V., Tomilin F.N., Dubrovskiy A.A. Unraveling Dynamic Jahn-Teller Effect and Magnetism in $\text{FeTiF}_6 \times 6\text{H}_2\text{O}$ Single Crystal // *Journal of Alloys and Compounds*, 2024, Vol. 999, P. 175104.
7. Stepin E.A., Sushko E.S., Vnukova N.G., Churilov G.N., Rogova A.V., Tomilin F.N., Kudryasheva N.S. Effects of Endohedral Gd-Containing Fullerenols with a Different Number of Oxygen Substituents on Bacterial Bioluminescence // *International Journal of Molecular Sciences*, 2024, Vol. 25(2), P. 708.

Выбор ведущей организации обосновывается тем, что Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт органической химии имени Н.Д. Зелинского Российской академии наук (ИОХ РАН) является ведущим научным институтом РАН в области синтеза и исследования свойств органических соединений. В сфере интересов сотрудников ИОХ РАН находятся исследования спектральных свойств гетероциклических органических соединений, в том числе с использованием методов квантово-химического моделирования, что соответствует теме диссертационного исследования Чэн Ляное и подтверждается их научными публикациями:

1. Murygin I.I., Gridnev I.D., Chiral surface control in the Soai reaction: A DFT study of α -quartz-induced enantioselective autocatalysis // *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2025, Vol. 27(40), P. 21406-21409.
2. Bespalov I.A., Krivoshchapov N.V., Lisov A.A. et al. Physics-Informed Bayesian Optimization for Conformational Ensemble Augmentation // *Journal of*

Chemical Information and Modeling, 2025, Vol. 65, P. 6048-6056.

3. Gridnev I.D. Co-Catalyzed Asymmetric Hydrogenation. The Same Enantioselection Pattern for Different Mechanisms // International Journal of Molecular Sciences, 2023, Vol. 24(6), P. 5568.

4. Mikhaylov O.A., Gridnev I.D. Global Search for Stable C₄H₅NO Compounds-Guinness Molecules and Stability Islands // Molecules, 2023, Vol. 28(2), P. 728.

5. Isaev A.N. Effect of halogen at the divalent sulfur atom on the properties of complexes with a chalcogen and hydrogen bond // Russian Journal of Physical Chemistry A, 2023, Vol. 97(5), P. 955-964.

6. Chaliy V.A., Kelbysheva E.S., Ezernitskaya M.G. et al. CO-Preserving Photoinduced Transfer of Cymantrenyl Moiety: a Tandem Experimental and Computational Investigation // Chemistry-A European Journal, 2023, Vol. 29(29), e202203949.

7. Shaydullin R.R., Galushko A.S., Pentsak E.O. et al. Yellow to blue switching of fluorescence by the tuning of the pentaphenylphosphole structure: phosphorus electronic state vs. ring conjugation // Physical Chemistry Chemical Physics, 2022, Vol. 24(41), P. 25307-25315.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

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-HBQ. 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-HBQ впервые была рассчитана структура молекулы нового флуоресцентного зонда для обнаружения фторид-ионов и предложена стратегия структурного дизайна новых соединений подобного применения.

Теоретическая значимость 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 углубленном исследовании механизмов этих превращений и решении вопросов управления их селективностью. 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.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики заключается в том, что на основании проведенных расчетов и анализа полученных результатов была предложена и теоретически обоснована модель высокоселективного флуоресцентного зонда для определения фторид-ионов по люминесценции в ближней инфракрасной области на основе производных 10-NBQ, которая определяет стратегию структурного дизайна новых функциональных материалов подобного применения для использования в медицине, биохимических исследованиях и экологическом мониторинге.

Оценка достоверности результатов исследования и сделанных соискателем выводов не вызывает сомнений, так как в работе использованы современные и надежные для решения поставленных задач методы квантово-химических расчетов и компьютерного моделирования, 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. Все выводы логически вытекают из результатов проведенных расчетов.

Личный вклад соискателя состоит в анализе литературы, участии в постановке задач, проведении квантово-химических расчетов, участии в анализе полученных результатов и формулировании выводов работы. Все статьи из списка публикаций подготовлены диссертантом лично или при его непосредственном участии, во всех статьях диссертант является первым автором.

На заседании 16 июня 2026 г. диссертационный совет принял решение присудить Чэн Лянюе ученую степень кандидата химических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 16 человек, из них 5 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 21 человека, входящих в состав совета, дополнительно введены на разовую защиту 0, проголосовали за – 16, против – 0, недействительных бюллетеней – 0.

Заключение диссертационного совета подготовили:

д.х.н., профессор кафедры физической и коллоидной химии ФГАОУ ВО «Российский университет Дружбы народов имени Патриса Лумумбы»
Боженко Константин Викторович; д.х.н., профессор, член-корреспондент РАН, ведущий научный сотрудник кафедры неорганической химии химического факультета ФГБОУ ВО «Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова» Кузнецов Алексей Николаевич и д.х.н., профессор РАН, профессор кафедры физической химии химического факультета ФГБОУ ВО «Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова» Савилов Сергей Вячеславович.

Председатель диссертационного
совета ПДС 0200.002 «Химические
науки» доктор химических наук



Хрусталева В.Н.

Ученый секретарь диссертационного
совета ПДС 0200.002 «Химические
науки» кандидат химических наук

Маркова Е.Б.

16.06.2026