

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Чэн Ляньюе «ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПЕРЕНОСА ПРОТОНА В ПРОИЗВОДНЫХ БЕНЗО[h]ХИНОЛИНА И 5-ХЛОРУРАЦИЛЕ МЕТОДАМИ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ», представленной на соискание учёной степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. - Физическая химия

Диссертационная работа Чэн Ляньюе представляет собой большое систематическое исследование процессов переноса протона в шестичленных азотсодержащих соединениях. Актуальность темы диссертационной работы обусловлена важным значением этих гетероциклов для создания медицинских препаратов и новых материалов. Эти соединения существуют в виде нескольких изомеров, превращающихся друг в друга путем переноса протона между атомами азота и кислорода, что влияет на их свойства. В работе Чэн Ляньюе получены сведения о процессах переноса протона в производных бензо[h]хинолина и 5-хлорурациле. Рассмотрены реакции, протекающие как из основного, так и из возбуждённого состояния, а также пути модификации исследованных соединений с целью направленного изменения их спектральных характеристик.

В автореферате диссертационной работы Чэн Ляньюе приведены сведения об относительной стабильности изомеров бензо[h]хинолина и его производных в основном и возбуждённом электронных состояниях, об энергетических характеристиках их превращений друг в друга, а также об относительной стабильности, механизмах изомеризации различных форм 5-хлорурацила, в том числе в протонных растворителях.

Автором использован современный квантово-химический метод функционала плотности и несколько различных приближений в рамках этого метода, что позволило выявить степень зависимость полученных результатов от используемого приближения. Получено хорошее соответствие с доступными из литературы экспериментальными данными.

Автореферат даёт полное представление о содержании работы. Содержание автореферата соответствует содержанию опубликованных статей.

Всё это позволяет сделать вывод о том, что результаты диссертационной работы являются достоверными, выводы - обоснованными, а её автор заслуживает присуждения искомой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. - Физическая химия.

Даю диссертационному совету согласие на обработку моих персональных данных.

Доктор химических наук, старший научный сотрудник  
кафедры физической химии Химического факультета  
Московского государственного университета имени  
М.В.Ломоносова,  
119991, г. Москва, Ленинские годы 1, стр. 3,  
Тел.: +7 (985) 1700143, Эл. почта: leila\_ust@mail.ru  
22.05.2026 г.

Устынюк Лейла Юрьевна



## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Чэн Ляньюе «Исследование процессов переноса протона в производных бензо[h]хинолина и 5-хлорурациле методами квантово-химического моделирования», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 Физическая химия (химические науки)

Диссертационная работа Чэн Ляньюе посвящена актуальной проблеме современной физической химии и химической физики - установлению механизмов переноса протона (внутри- и межмолекулярного) в гетероциклических соединениях, имеющих значение для создания функциональных материалов, флуоресцентных сенсоров и биологически активных веществ. Использование методов квантовой химии (DFT) позволяет не только интерпретировать экспериментальные данные, но и предсказывать свойства новых соединений, что соответствует современному уровню развития науки.

Автором впервые проведено систематическое исследование влияния заместителей различной электронной природы на спектральные характеристики производных 10-гидроксibenзо[h]хинолина и показана возможность управления положением полос поглощения и флуоресценции вплоть до ближней ИК-области. Особого внимания заслуживает разработка теоретических основ создания высокоселективного флуоресцентного зонда на ионы фтора, а также выявление корреляций между полярностью растворителя и барьером реакции внутримолекулярного переноса протона в возбужденном состоянии для 9,10-дигидроксibenзо[h]хинолина. Впервые на примере 5-хлорурацила проведен сравнительный анализ каталитической эффективности воды, метанола и муравьиной кислоты в реакции межмолекулярного переноса протона, причем показано, что муравьиная кислота не только снижает барьер, но и обеспечивает высокую кинетическую селективность одного из путей изомеризации. Автореферат написан грамотным научным языком, имеет четкую структуру (введение, список сокращений, четыре главы основного содержания, выводы, список публикаций). Представленный материал хорошо иллюстрирован, что облегчает восприятие результатов. Обоснованность выводов подтверждается использованием современных квантово-химических методов и согласием расчетных данных с имеющимися экспериментальными результатами для модельных систем. Личный вклад автора в работу, апробация на 9 всероссийских и международных конференциях, а также 4 статьи в журналах уровня WoS и Scopus свидетельствуют о высокой степени достоверности полученных результатов.

Замечания и вопросы по автореферату:

1. В списке сокращений присутствует термин TD-DFT (Зависимая от времени теория функционала плотности), что выглядит логичным при расчете электронных переходов, особенно в случае расчетов спектров испускания. Однако из текста становится ясно, что использовался только DFT. Так ли это?
2. Используются сокращения для многих методов и растворителей, однако они не внесены в список сокращений, что усложняет восприятие.
3. В ходе процессов, связанных с внутримолекулярным переносом протона и перераспределения кратных связей, происходит таутомерная изомеризация, поэтому подобные соединения скорее нужно называть таутомерами (например, на Рис. 11)
4. В выводах говорится, что «разработанные молекулы-зонды обладают высокой селективностью обнаружения ионов F<sup>-</sup>». Приводятся данные по Cl<sup>-</sup> и Br<sup>-</sup>. Было бы

интересно узнать, возможно ли оценить влияние других анионов (например,  $\text{H}_2\text{PO}_4^-$ ,  $\text{AsO}_4^-$ ), которые часто мешают фторид-селективным сенсорам?

Указанные замечания и вопросы носят дискуссионный характер и не снижают общей высокой оценки диссертационной работы.

Таким образом, можно утверждать, что представленная диссертационная 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 её автор, Чэн Ляное, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 Физическая химия.

Д.х.н., Ведущий научный сотрудник  
Лаборатории гидридов металлов (№119)  
tit@ineos.ac.ru  
тел:+7926-675-4946

  
Титов Алексей  
Александрович  
08.06.2026г

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской академии наук (ИНЭОС РАН). <https://ineos.ac.ru/>

119334, Москва, ул. Вавилова, д. 28, стр. 1.

УЧЁНЫЙ СЕКРЕТАРЬ  
К.Х.Н. ГУЛАКОВА



## ОТЗЫВ

*на автореферат диссертации Чэн Ляньюе «Исследование процессов переноса протона в производных бензо[h]хинолина и 5-хлорурациле методами квантово-химического моделирования», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 Физическая химия (химические науки)*

Диссертационная работа Чэн Ляньюе является теоретическим научным исследованием, которое посвящено систематическому изучению процессов переноса протона в производных бензо[h]хинолина и 5-хлорурациле с использованием методов квантово-химического моделирования. Выбор темы сочетает фундаментальные возможности физической химии в теоретических исследованиях с необходимостью решения важных прикладных задач, к которым относится дизайн новых функциональных материалов и разработка молекулярных сенсоров. В ходе выполнения работы для достижения поставленной цели автором были сформулированы ряд задач, которые были успешно решены. С помощью квантово-химического моделирования автор установил закономерности влияния характера замещения в производных 10-NBQ на их спектральные свойства. Детально был проанализирован механизм действия высокоселективного флуоресцентного зонда на основе производных 10-NBQ по обнаружению ионов  $F^-$ , а также изучен эффект регуляции процесса ESIPT в молекуле 9,10-NBQ под влиянием полярности растворителя. На примере 5-хлорурацила автором было проведено сравнение каталитической эффективности воды, метанола и муравьиной кислоты в реакции межмолекулярного переноса протона. В результате был предложен механизм реакции межмолекулярного переноса в 5-хлорурациле.

Однако при решении этой задачи автору следовало более детально обосновать выбор катализаторов протонного переноса.

На всех этапах исследования автором применялись современные методы квантово-химического моделирования для расчета и анализа ключевых характеристик: структуры изучаемых молекул, их спектральных характеристик, параметров водородных связей, энергетических барьеров реакций, кинетических закономерностей процесса. Полученные Чэн Ляньюе результаты работы не только вносят вклад в фундаментальные теоретические исследования химии важных гетероциклических соединений, но также представляют основу для направленного дизайна флуоресцентных сенсорных материалов, которые могут найти применение в биохимии и медицине.

На основании вышесказанного можно сделать вывод, что 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 её автор, Чэн Ляное, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 Физическая химия.

Хозина Елена Вадимовна

кандидат физико-математических наук (02.00.04)

старший научный сотрудник лаборатории сорбционных процессов

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской академии наук

Почта: elena-khozina@rambler.ru

Адрес: Ленинский пр. 31 корп.4, Москва, 119071

Телефон: +7 (495) 952-25-68



09.06.2026г.

Подпись к.х.н., с.н.с. Хозиной Е.В. подтверждаю:


Варшавская Ираида Германовна

Секретарь Ученого совета

кандидат химических наук

тел.: +7 (495) 952 20 71, +7 (495) 955 44 37

e-mail: [usekretar@phyche.ac.ru](mailto:usekretar@phyche.ac.ru)



09.06.2026 г.

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации **Чэн Лянюе** «Исследование процессов переноса протона в производных бензо[h]хинолина и 5-хлорурациле методами квантово-химического моделирования», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 Физическая химия (химические науки)

Диссертационная работа Чэн Лянюе посвящена изучению процессов переноса протона в производных бензо[h]хинолина и 5-хлорурациле. Основным методом исследования выбрано квантово-химическое моделирование. Проведено систематическое исследование ключевых научных вопросов, включая разработку ближних инфракрасных флуоресцентных сенсоров, механизм действия флуоресцентных зондов на ионы фтора, а также закономерности регуляции переноса протона под влиянием эффектов растворителя. Тема исследования тесно связана с передовыми направлениями исследований в области физической химии. Перенос протона, являющийся фундаментальной проблемой молекулярных фотофизических и фотохимических процессов, а изучение механизмов его регуляции имеет важное теоретическое и практическое значение для разработки флуоресцентных сенсорных материалов и дизайна функциональных органических молекул. Цели работы сформулированы четко, поставленные задачи являются обоснованными и соответствуют области исследований и академическим требованиям специальности 1.4.4 «Физическая химия».

С помощью методов квантово-химического моделирования автор установил закономерности влияния структуры и состава производных бензо[h]хинолина на их спектры поглощения и флуоресценции. Подтверждено, что введение электронодонорной группы  $-NH_2$  в положение  $C_7$  и ряда электроноакцепторных групп в положение  $C_4$  молекулы 10-HBQ приводит к значительному батохромному сдвигу спектров, причем степень сдвига коррелирует с электроноакцепторной способностью заместителя в положении  $C_4$ . Это открывает путь к точной структурной модификации для оптимизации ближней инфракрасной флуоресценции. Автором детально проанализирован механизм высокоселективного распознавания ионов  $F^-$  флуоресцентным зондом на основе 10-HBQ, что представляет собой теоретическую основу для создания новых флуоресцентных сенсоров на ионы фтора. Чэн Лянюе систематически исследовал взаимосвязь процесса ESIPT в молекуле 9,10-HBQ со свойствами растворителя. Установлено, что растворители с низкой полярностью способствуют процессу ESIPT, а высокополярные — подавляют его. На примере 5-хлорурацила автором показан каталитический механизм межмолекулярного переноса протона под действием различных растворителей. Доказано, что муравьиная кислота, стабилизируя переходное состояние, демонстрирует наилучший каталитический эффект, чем молекулы воды и метанола.

Полученные результаты отличаются детальностью и достоверностью, выводы полностью соответствуют поставленным задачам.

Работа соответствует требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата химических наук, согласно п. 2.2 раздела II Положения о



## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации **Чэн Ляньюе** «Исследование процессов переноса протона в производных бензо[h]хинолина и 5-хлорурациле методами квантово-химического моделирования», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 Физическая химия (химические науки)

Выполненная Чэн Ляньюе диссертационная работа посвящена теоретическому исследованию процессов переноса протона в производных бензо[h]хинолина и 5-хлорурациле с использованием методов квантово-химического моделирования. Целью работы было исследование механизмов переноса протона и создания теоретической базы для последующей разработки флуоресцентных сенсоров и специализированных функциональных материалов на основе химических молекул. Работа находится на стыке ключевых направлений физической и органической химии, где квантово-химический анализ процессов переноса протона является связующим звеном между молекулярной структурой и макроскопическими свойствами. Полученные автором результаты имеют важное значение для развития теоретических основ физической химии и для их последующего применения в области создания новых функциональных материалов, используемых при проведении биохимических и медицинских исследований, а также в экологическом мониторинге.

В ходе выполнения диссертационной работы автором впервые с помощью квантово-химического моделирования установлена взаимосвязь «структура-свойство» в ряду производных 10-NBQ на примере их спектральных характеристик. Подтверждено, что согласованное введение электронодонорных и электроноакцепторных групп позволяет точно контролировать батохромный сдвиг спектров в ближнюю ИК-область, что предоставляет возможность оптимизации фотофизических свойств этих флуоресцентных материалов. Автором детально раскрыт механизм специфического распознавания ионов  $F^-$  флуоресцентным зондом на основе 10-NBQ. С позиции квантовой химии объяснена внутренняя связь между реорганизацией водородных связей и эмиссией в ближней ИК-области, что дает принципиально новую расчетную модель для молекулярного дизайна флуоресцентных сенсоров. Впервые количественно оценены закономерности влияния растворителей различной полярности на прочность внутримолекулярной водородной связи и энергию электронного перехода, что дополняет теорию влияния растворителя на перенос протона в жидких средах, а также проанализирован механизм катализа межмолекулярного переноса протона в 5-хлорурациле. Обнаружено, что модель согласованного переноса двух протонов с участием молекулы муравьиной кислоты обладает существенными преимуществами и открывает новые пути для контроля реакций переноса протона с помощью растворителя.

Сделанные в автореферате диссертации выводы подкреплены строгими квантово-химическими расчетами, полученные результаты согласуются с имеющимися экспериментальными и теоретическими литературными данными, что подтверждает их научную достоверность и надежность. Мелкие неточности в оформлении (использование обозначения «ккал» вместо «кДж») не влияют на положительную оценку представленной работы.

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 её автор, Чэн Ляньюе, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 Физическая химия.

к.х.н., доц., доцент кафедры промышленной экологии  
ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический  
университет им. Д.И. Менделеева»

И.А. Иванцова  
09.01.2026  
Подпись Иванцова  
заверяю  
И.В.С. Мещеряков

