

## Отзыв

на автореферат диссертации Ходиева Масрура Хомидходжаевича на тему «ИК-спектроскопия и квантово-химический расчёт Н-комплексов производных триазола», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – физика конденсированного состояния.

Колебательные спектры и электронная структура гетероциклических соединений весьма чувствительны к межмолекулярному взаимодействию и изменению окружающей среды. В связи с этим исследование гетероциклических соединений методами колебательной спектроскопии является надёжным и хорошо апробированным способом наблюдения за состоянием Н-связей, поскольку в ИК-спектрах проявляются колебания отдельных групп и связей молекул.

В последние годы для анализа и интерпретации экспериментальных данных, полученных с помощью инфракрасной спектроскопии, широко используются методы квантово-химических расчетов. Сочетание методов инфракрасной спектроскопии и квантово-химических расчетов позволяет более глубоко понять природу колебаний отдельных функциональных групп в сложных молекулярных системах и особенно динамику их изменения при образовании Н-связей.

В автореферате представлены основные научные результаты, полученные в работе, их апробация и возможное использование. Также в автореферате представлена структура диссертации и краткое содержание ее разделов.

Диссертация М.Х. Ходиева посвящена изучению зависимости донорно-акцепторных свойств гетероциклических соединений ряда некоторых азолов при присоединении к ним «новых» структурных фрагментов относительно исходных соединений, а также выявление электростатического и ковалентного вкладов в образование Н-комплексов.

Следует отметить следующие интересные результаты, которые определяют научную новизну работы.

1. Установление низкочастотного смещения полосы поглощения N-H групп при введении в пиррольный цикл производных триазолов различных структурных элементов, в результате которого происходит изменение их донорно-акцепторных способностей;
2. Демонстрация того, что изменение спектральных свойств N-H-групп связано с изменением электронной плотности групп, образующих Н-связь;

3. Предложение механизма, объясняющего изменение донорно-акцепторных свойств родственных гетероциклических соединений производных триазолов при введении в молекулярный цикл новых структурных элементов.

Отмечено, что практическая ценность работы заключается в возможности использования результатов исследования в различных технологических процессах с участием гетероциклических соединений, а именно, в таких областях как фармакология, парфюмерии, производство красителей, синтез биологически активных веществ и т.д.

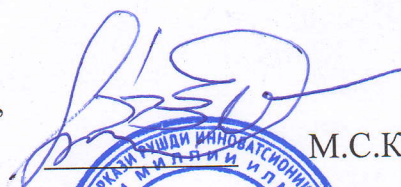
К написанному в автореферате имеется следующий вопрос. Автор считает, что водородная связь в димере 1,2,4-триазола, по-видимому, образуется между атомом водорода N(1)-H и атомом N(4) соседней молекулы (рис.7.). Что можно сказать, возможна ли H-связь между атомом N(9) и атомом H(7).

Автореферат написан ясным и понятным языком. Хорошо оформлен. К его недостаткам следует отнести отсутствие точного указания (реперов) волновых чисел (рис.3,8,9). Однако отмеченный недостаток существенно не влияет на качество работы, которая своей цельностью производит очень положительное впечатление.

На основании полученных результатов можно сделать заключение, что диссертационная работа «ИК-спектроскопия и квантово-химический расчёт H-комплексов производных триазола», представленная на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1,3,8-физика конденсированного состояния, полностью удовлетворяет критериям пп. 9-14 Положения о порядке присуждения учёных степеней (Постановление Правительства Российской Федерации от 24.09.2013, № 842), а ее автор - Ходиев Масрур Хомидходжаевич - заслуживает присуждения искомой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1,3,8-физика конденсированного состояния.

Ведущий научный сотрудник  
сектора моделирования динамических  
процессов Центра инновационного  
развития науки и новых технологии НАНТ,  
кандидат физ.-мат. наук

Подпись к. ф.-м. н. М.С. Курбониёна заверяю  
Инспектор по кадрам ЦИРН и Т НАНТ



М.С.Курбониён



Б.Сангинова

10.05.2022.2.