

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ОБЪЕДИНЁННОГО ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА  
99.0.057.02 НА БАЗЕ ТАДЖИКСКОГО НАЦИОНАЛЬНОГО  
УНИВЕРСИТЕТА, ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКОГО ИНСТИТУТА им. С.У.  
УМАРОВА НАН ТАДЖИКИСТАНА ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ  
УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № \_\_\_\_\_

решение диссертационного совета от 7 июня 2022 г., №8

О присуждении Ходиеву Масруру Хомидходжаевичу, гражданину Республики Таджикистан, учёной степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «ИК-спектроскопия и квантово-химический расчёт Н-комплексов производных триазола», по специальности 1.3.8-физика конденсированного состояния принята к защите 05 апреля 2022 г., протокол №5, диссертационным советом 99.0.057.02 на базе Таджикского национального университета, 734025, Душанбе, пр. Рудаки 17, Физико-технического института им. С.У. Умарова НАН Таджикистана, 734063, Душанбе, пр. Айни, 299, приказом Рособнадзора №622/нк от 7 ноября 2014 г.

В период подготовки диссертации соискатель Ходиев М.Х. проходил обучение в аспирантуре при кафедре оптики и спектроскопии Таджикского национального университета, работал в должностях старшего лаборанта и ассистента этой же кафедры.

Соискатель Ходиев М.Х., 1990 года рождения, в 2014 г. окончил Таджикский национальный университет по специальности «физика». В 2019 г. окончил очную аспирантуру при кафедре оптики и спектроскопии Таджикского национального университета. В настоящее время работает ассистентом кафедры оптики и спектроскопии.

Диссертация выполнена на кафедре оптики и спектроскопии ТНУ.

**Научные руководители:**

**Муллоев Нурулло Урунбоевич** - доктор физико-математических наук,

доцент;

**Лаврик Николай Львович**- доктор химических наук, ведущий научный сотрудник Института химической кинетики и горения им. В.В.Воеводского СО РАН.

**Официальные оппоненты:**

**Рутковский Константин Станиславович**- доктор физико-математических наук, профессор кафедры молекулярной спектроскопии Санкт-Петербургского государственного университета;

**Исобаев Музафар Джумаевич**-доктор химических наук, профессор, заведующий лабораторией органического синтеза Института химии им. В.И.Никитина НАН Таджикистана.

**Ведущая организация**-ФГБУН «Федеральный исследовательский центр «Институт катализа имени Г. К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук» в своём положительном отзыве, составленном профессором Паукштисом Е.А., указала:

По своему объёму, актуальности, научной новизне и практической значимости полученных результатов диссертационная работа Ходиева Масрура Хомидходжаевича на тему «ИК-спектроскопия и квантово-химический расчёт Н-комплексов производных триазола», отвечает требованиям пунктов 9-14 «Положения о порядке присуждения учёных степеней» ВАК РФ от 24.09.2013 г. за №842, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, а сам автор заслуживает присуждения ему искомой учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. – физика конденсированного состояния.

По материалам диссертации опубликовано 7 статей в рецензируемых журналах из Перечня ВАК РФ, 2 статьи в журналах из МБД и 16 статей и тезисов в сборниках трудов конференций.

Наиболее значимые работы по теме диссертации:

1. Муллоев Н.У., Ходиев М.Х., Лаврик Н.Л. ИК-спектроскопическое исследование и *ab initio* расчеты образования Н-комплексов 1,2,3-бензтриазола с

- протоно-акцепторными молекулами // Всероссийская науч. конф. с международным участием «Современные проблемы органической химии»: Сборник тезисов. Новосибирск, 2021.-С.86.
2. Муллоев Н.У., Ходиев М.Х., Маджидов Н.А., Лаврик Н.Л. Определение центра связывания в структуре молекул производных триазола при образовании межмолекулярной Н-связи методами ИК-спектроскопии и квантовой химии // Всероссийская науч. конф. с международным участием «Современные проблемы органической химии»: Сборник тезисов, Новосибирск, 2021.-С.87.
3. Муллоев Н.У., Ходиев М.Х., Исломов З.З., Лаврик Н.Л. Влияние структуры молекул производных триазола на эффективность образования межмолекулярной Н-связи // Журнал структурной химии, 2020.-Т.61.-№2.-С. 246-251.
4. Абдулов Х.Ш., Муллоев Н.У., Табаров С.Х., Ходиев М.Х. Квантово-химическое определение молекулярной структуры 1,2,4-триазола и расчет его ИК-спектра // Журнал структурной химии, 2020.-Т.61.-№4.-С. 540-544.
5. Муллоев Н.У., Ходиев М.Х., Файзиева М.Р., Исломов З.З., Файзиева М.Р. Протонодонорные способности гетероциклических соединений азольного ряда при изменении их электронного и геометрического строения // Вестник Таджикского национального университета. Серия естественных наук, 2019.-№4.-С.82-86.
6. Муллоев Н.У., Лаврик Н.Л., Ходиев М.Х. Изучение донорно-акцепторных взаимодействий производных 1,2,4-триазола методом ИК-спектроскопии // XXXI Симпозиум «Современная химическая физика». Туапсе, 15-22 сентября, 2019.-С.205.
7. Mulloev N.U., Lavrik N.L., Khodiev M., Islomov Z.Z. The study of the effect of the introduction of substituents into the 1,2,4-triazole molecule by IR spectroscopy // Chemical Physics of Molecules and Polyfunctional Materials. Russian-Japanese Conference: proceedings. Orenburg, 2018.-PP.62-64.
8. Муллоев Н.У., Ходиев М.Х. Самоассоциация и ИК-спектры некоторых производных триазолов в твердом состоянии // Доклады НАН Таджикистана, 2018.-Т.61.-№7-8.-С.645-650.

9. Муллоев Н.У., Ходиев М.Х. Межмолекулярные взаимодействия и акцепторные свойства некоторых азотсодержащих гетеросоединений по ИК-полосам поглощения групп NH-ассоциированных молекул // Вестник Таджикского национального университета. Серия естественных наук, 2018.-№4.-С.169-175.
10. Муллоев Н.У, М.Файзиева, М.Нуруллоев, З.З.Исломов, Юсупова Дж., Ходиев М.Х. Влияние структурных факторов на протоно-акцепторные способности гетероциклических соединений // Доклады НАН Таджикистана, 2016.-Т.59.-№3-4.-С.126-132.

На автореферат диссертации поступили отзывы от:

1. Профессора кафедры физической и коллоидной химии Национального исследовательского Томского государственного университета, доктора физ.-мат. наук Соколова И.В. Отзыв положительный. Замечаний нет.

2. Проректора по научной работе ФГБОУ ВО «Оренбургский государственный университет, доктора физ.-мат. наук, профессора Летуты Сергея Николаевича. Отзыв положительный. Имеется замечание:

1). Представленные на рис.2 расчётный и экспериментальный ИК-спектры 1,2,4-триазола, при удовлетворительном совпадении имеют различия в интенсивности отдельных полос. Хотелось бы видеть более чёткое объяснение этих различий.

3. ГНС Лаборатории процессов фотосенсибилизации ГБУН «Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН», доктора хим. наук Некипеловой Т.А. Отзыв положительный. Есть замечания:

1) Однако обсуждение образования димеров 1,2,4-триазола в кристаллическом состоянии существенно выиграло бы, если бы были приведены данные РСА для монокристалла этого соединения; 2) В подписи к рис. 11. Не понятно, что имеется в виду под «атомов В молекула акцептора».

4. Проректора Самаркандского государственного университета по научной работе и инновациям доктора физ.-мат. наук Х.А.Хушвактова. Отзыв положительный. Имеются замечания: 1) В табл. 1 при представлении энергетических параметров образования Н-комплексов не указано, по каким формулам

проводился расчёт; 2) На рис. 3,8 не указаны реперы волновых чисел.

5. ВНС Сектора моделирования динамических процессов Центра инновационного развития науки и новых технологии НАН Таджикистана, кандидата физ.-мат. наук М.С.Курбониён. Отзыв положительный. Есть замечания: 1) 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.). Возможна ли H-связь между атомом N(9) и атомом H(7)?.(рис.7.); 2) К недостаткам следует отнести отсутствие точного указания реперов волновых чисел (рис.3,8,9).

Выбор официальных оппонентов и Ведущей организации обосновывается тем, что:

**-официальный оппонент** профессор Рутковский К.С. является авторитетным учёным в области ИК-спектроскопии и квантово-химических расчётов органических соединений, имеет более 100 работ по данной тематике в ведущих российских и зарубежных изданиях. За последние 5 лет им опубликовано более 15 трудов по близкой к защищаемой диссертации тематике.

**-официальный оппонент** профессор Исобаева М.Дж. является признанным учёным в области органического синтеза и стереохимии. Является автором 2 монографий и более 200 научных трудов в ведущих российских и зарубежных журналах. За последние 5 лет им издано 5 статей по близкой тематике в российских и зарубежных журналах, получен один патент.

**-ведущая организация** ФГБУН Федеральный исследовательский центр «Институт катализа имени Г.К. Борескова» СО РАН является одним из ведущих мировых научных центров изучения водородной связи. Сотрудниками центра за последние 5 лет опубликовано свыше 80 работ в российских и зарубежных изданиях по близкой тематике.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований впервые:

**-установлено** низкочастотное смещение полосы поглощения N-H- групп при введении в пиррольный цикл производных триазолов различных струк-

турных элементов, в результате которого происходит изменение их донорно-акцепторных способностей;

**-показано**, что изменения спектральных свойств N-H-групп связаны с изменением электронной плотности групп, образующих H-связь;

**-предложен** механизм, объясняющий изменение донорно-акцепторных свойств родственных гетероциклических соединений производных триазолов при введении в молекулярный цикл новых структурных элементов, заключающийся в том, что введение заместителей оказывает индукционное и мезомерное влияние на исходную равновесную электронную конфигурацию N-H-групп соединения;

**-обнаружено** спектральное проявление образования ассоциаций различного состава и строения между молекулами производных триазола, обусловленных межмолекулярными водородными связями;

**-произведен** квантово-химический расчёт молекулярной структуры, зарядов на атомах, геометрических параметров и ИК-спектров поглощения производных триазолов;

**-исследовано** влияние образования водородных связей на параметры полос поглощения валентных колебаний NH-групп производных триазола;

**-показано**, что изменение исходного электронного и геометрического строения молекул производных триазола при введении новых структурных элементов в азольное кольцо оказывает поляризационное индукционное влияние на равновесную электронную конфигурацию NH-групп и, соответственно, на их донорно-акцепторную способность;

**-предложена** методика определения локализации активного протоно-акцепторного центра в молекулах производных триазола при образовании H-комплексов с использованием методов ИК-спектроскопии и квантовой химии;

**-выявлены** вклады электростатической и ковалентной составляющих в образовании H-комплексов молекулами 1,2,3-бензотриазола.

**Научно-практическая значимость** работы заключается в том, что полученные результаты способствуют более углублённому представлению элек-

тронного строения и свойств водородных связей и могут быть использованы в технологических процессах с участием гетероциклических соединений, в частности, в фармакологии, медицине, парфюмерии, химической технологии и синтезе биологически активных веществ.

**Достоверность** результатов подтверждается использованием стандартных методик, калиброванной измерительной аппаратуры, надёжной воспроизводимостью результатов, хорошим согласием с результатами других авторов.

**Личный вклад** автора является определяющим в постановке задач исследования, поиске и анализе литературных данных, подготовке объектов исследования, проведении экспериментов и теоретических расчётов, обработке результатов и их обсуждении, подготовке материалов к публикации.

Диссертационный совет пришёл к выводу, что диссертация представляет собой научно-квалификационную работу, которая соответствует критериям, установленным пп. 9-14 и 32 Положения о присуждения ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 30.01.2002г. №74 (в ред. постановления Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г., №842) и принял решение присудить Ходиеву Масруру Хомидходжаевичу учёную степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 18 человек, из них 6 докторов наук по специальности 1.3.8 – физика конденсированного состояния, участвовавших на заседании, из 24 человека, входящих в состав совета, проголосовали: за- 18, против- нет, недействительных бюллетеней- нет.

Председатель

диссертационного совета

Солихов Д.К.

Ученый секретарь  
диссертационного совета

Табаров С.Х.

07.06.2022 г.

