

## ОТЗЫВ

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

Работа Ходиева Масрура Хомидходжаевича посвящена изучению спектральных, структурных и донорно-акцепторных свойств молекул производных триазолов. Производные триазолов нашли практическое применение как биологически активные вещества, препараты, обладающие антимикробной и спазмолитической активностью. Их используют в металлоорганических комплексах, ингибиторах коррозии и др. Реальные перспективы расширения практического использования производных триазолов служат достаточно убедительным обоснованием актуальности выбранной темы диссертационного исследования.

В ходе выполнения работы автором получены важные результаты, в перечне которых:

1. Квантово-химические расчёты молекулярной структуры производных триазола и их геометрических параметров, а также расчёт ИК-спектров производных триазола и отнесение их полос.

2. Установление связи изменения положения максимума полосы N-H исследованных соединений при введении заместителей разной природы с изменением электронной плотности колеблющейся N-H группы, образующей N-связь.

3. Определение вкладов электростатической и ковалентной составляющих в образование N-комплексов путем сопоставления величин низкочастотного сдвига полосы N-H (данные ИК спектроскопии) и изменения заряда на атомах молекул донора и акцептора протона (данные квантовохимических расчётов).

Заслуживают внимания представленные в работе данные, характеризующие N-комплексы. Результаты корректно интерпретируются автором в рамках современных физических представлений о межмолекулярных взаимодействиях в конденсированных средах.

Судя по автореферату, работа прошла достаточную апробацию, а ее основные результаты опубликованы в рейтинговых научных журналах.

Рукопись автореферата написана научным языком. Вместе с тем, отдельные результаты требуют более детального описания. Так, представленные на рис. 2 расчётный и экспериментальный ИК-спектры 1,2,4-триазола, при удовлетворительном совпадении, имеют различия в

