

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 13.8 – физика конденсированного состояния.

Диссертационная работа М.Х. Ходиева посвящена изучению механизма образования Н-комплексов производных триазолов в зависимости от природы заместителей в азольном кольце с помощью методов ИК спектроскопии и квантово-химических расчетов.

Изучение водородной связи (Н-связи) как одного из наиболее распространенных в природе вида межмолекулярных взаимодействий постоянно находится в центре внимания исследователей, работающих в различных областях науки.

Как следует из автореферата, к наиболее существенным научным результатам, полученным лично соискателем, обладающим научной новизной, можно отнести: 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; положение о том, что изменения спектральных свойств N-H-групп связаны с изменением электронной плотности групп, образующих Н-связь; предложение механизма, объясняющего изменение донорно-акцепторных свойств родственных гетероциклических соединений производных триазолов при введении в молекулярный цикл новых структурных элементов, который заключается в том, что введение заместителей оказывает индукционное и мезомерное влияние на исходную равновесную электронную конфигурацию N-H групп соединения, выявление вкладов электростатической и ковалентной составляющих в образовании Н-комплексов молекулами бензотриазола.

Степень достоверности результатов, полученных автором, - высокая, так как обеспечивается корректностью постановки и формализации задачи, использованию классических теорий, принятых общепризнанных допущений и ограничений, применением апробированных методов решения и анализа. Основные результаты, сформулированные в работе, доложены М.Х. Ходиевым на международных, российских и региональных научных конференциях и получили одобрение.

К недостаткам автореферата следует отнести следующее:

1. В таблице 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.

Недостатки, выявленные в автореферате диссертации, касаются оформления и не ставят под сомнение значимость ее основных научных результатов.

Таким образом, содержание автореферата позволяет сделать следующий вывод. Диссертация Ходиева Масрура Хомидходжаевича на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук является самостоятельной завершенной научно-квалификационной работой, содержащей решение актуальной фундаментальной задачи, которая заключается в том, что изменение электронной и геометрической структуры производных триазолов путем введения в молекулярной цикл новых структурных элементов приводит к изменению их протондонорной и протонакцепторной способности. Наблюдаемые изменения спектроскопических и донорно-акцепторных свойств гетероциклических соединений связаны с индукционным и мезомерным влиянием вводимых структурных элементов на равновесную электронную конфигурацию функциональных N-H- групп.

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.

Доктор физико-математических наук,
проректор Самаркандского
государственного университета
по научной работе и инновациям



Х.А. Хушвактов

Подпись д. ф.-м. н. Х.А. Хушвактова
удостоверяю начальник по кадрам САМДУ



С.Абдуллаева