

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

экспертной комиссии диссертационного совета

Комиссия диссертационного совета 24.1.092.01 по защите диссертаций на соискание ученой степени кандидата химических наук при ИОХ РАН в составе д.х.н., проф. Злотин С. Г. (председатель), д.х.н., проф. Ракитин О. А., д.х.н., проф. Томилов Ю. В., рассмотрев диссертацию и автореферат диссертации **Хораняна Тиграна Эдвардовича «Новые нитропиразолсодержащие ансамбли: синтез и свойства»**, (научный руководитель – д.х.н., Далингер И. Л.), представленную на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.3.- органическая химия, установила:

Диссертационная работа Хораняна Т. Э. «Новые нитропиразолсодержащие ансамбли: синтез и свойства» посвящена решению задач, представляющих несомненный научный и практический интерес.

Актуальность работы. В современном мире, где возрастает потребность в высокоэффективных и безопасных источниках энергии, разработка новых энергоёмких материалов становится одной из ключевых задач науки и техники. Нитропиразолы - перспективный класс соединений, обладающих уникальным сочетанием физико-химических свойств, такими как высокая термостабильность и энтальпия образования, в сочетании с пониженной чувствительностью к механическим воздействиям. Эти характеристики делают нитропиразолы привлекательными для создания новых энергоёмких материалов, которые могут найти разнообразное использование, как компоненты твердого ракетного топлива, пиротехнических составов и других энергетических конденсированных систем с улучшенными эксплуатационными характеристиками. Однако, несмотря на довольно широкие исследования химии нитропиразолов, многие аспекты их синтеза, модификации и изучения физико-химических свойств пока не охвачены.

Одной из основных современных тенденций в конструировании энергоёмких соединений является использование ансамблей из линейно-

связанных и аннелированных полиазотистых одинаковых и/или разнотипных гетероциклов, что позволяет путем варьирования типа гетероцикла и варианта их сочленения модифицировать их прикладные свойства. Несмотря на значительный интерес к нитропиразолам, на момент начала этой работы структуры подобного типа были представлены лишь единичными примерами. Это побудило нас к разработке подходов к синтезу и изучению пиразол-содержащих ансамблей гетероциклов, что потребовало провести расширенное фундаментальное исследование в области химии гетероциклических соединений. Большое внимание было уделено нами поиску практичных решений для создания перспективных материалов.

Разработка новых энергоёмких полиядерных ансамблей гетероциклов, включающих нитропиразольный фрагмент, которые могут стать основой для создания современных материалов с улучшенными характеристиками, является актуальным и важным направлением исследований.

Научная новизна и практическая значимость работы: в ходе выполнения работы были разработаны эффективные методы синтеза изомерных пиразолил-1,2,4-оксадиазолов. Созданы методы селективного введения дополнительных нитрогрупп в структуру пиразолил-1,2,4-оксадиазолов с использованием кислотного нитрования.

Разработан метод получения ансамблей 3-(1,2,4-триазолил)-4-нитрофуразанов, сочленённых с 3,4- и 3,5-динитропиразольным фрагментом, позволивший с высокой эффективностью синтезировать региоизомерные производные данного класса соединений.

Впервые разработаны селективные методы синтеза региоизомерных нитропроизводных пиразолил-фуроксанов.

Для *N*-незамещённых 4-фенил-6-*R*-пиразоло[3,4-*d*][1,2,3]триазолов впервые обнаружена возможность раскрытия 1,2,3-триазольного цикла в условиях кислотного нитрования с образованием соединений нового типа — 1-*R*-3-*R'*-4-дiazопиразол-5-нитриминов.

Впервые получен *N,N'*-незамещенный 6-нитропиразоло[3,4-*d*][1,2,3]триазол – перспективная аннелированная основа для синтеза новых энергоемких соединений.

Определены практически важные физико-химические и специальные характеристики полученных нитросоединений. Найдены соединения, обладающие оптимальным сочетанием высокой термической стабильности, положительной энтальпии образования, приемлемой плотности и высоких расчетных детонационных характеристик, что позволяет рекомендовать их для дальнейшего изучения в качестве потенциальных компонентов энергетических конденсированных систем. Выявлено влияние региоизомерии на свойства энергоемких ансамблей и установлены некоторые закономерности “структура-свойства”.

Степень достоверности обеспечивается тем, что экспериментальные работы и спектральные исследования синтезированных соединений выполнены на современном сертифицированном оборудовании, обеспечивающем получение надежных данных. Состав и структура соединений подтверждены данными спектроскопии ЯМР на ядрах ^1H , ^{13}C , $^{14(15)}\text{N}$, ^{19}F , ИК-спектроскопии, масс-спектрометрии (в том числе высокого разрешения), элементного анализа, а также рентгеноструктурного анализа.

Личный вклад соискателя состоит в поиске, анализе и систематизации литературных данных о методах синтеза гетероциклических ансамблей на основе нитропиразолов, разработке методологии синтеза, выделения и идентификации новых представителей этого типа, обработке и обсуждении полученных данных. Им осуществлена апробация отдельных этапов исследования на конференциях, подготавливались материалы к публикации.

Опубликованные материалы и автореферат полностью отражают основное содержание работы.

Диссертация отвечает требованиям, предъявляемым ВАК к работам на соискание степени кандидата химических наук, и может быть представлена к защите по специальности 1.4.3. – органическая химия.

Соискатель является соавтором 14 публикаций: 8 статей и 6 тезисов на всероссийских и международных конференциях. Все 8 статей опубликованы в журналах, включенных в международные базы цитирования Scopus и Web of Science, из них 6 по теме диссертации.

Исходя из вышеизложенного, можно утверждать, что по актуальности, объему, уровню выполнения, новизне полученных результатов диссертационная работа «Новые нитропиразолсодержащие ансамбли: синтез и свойства» Хораняна Т. Э. соответствует критериям пункта 9 Положения о порядке присуждения ученых степеней, утвержденным постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842, является научно-квалификационной работой. Экспертная комиссия рекомендует диссертационную работу Хораняна Т. Э. к защите на диссертационном совете 24.1.092.01 ИОХ РАН по присуждению ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.3. – органическая химия.

Рекомендуемые официальные оппоненты (д.х.н., Аверин А.Д., Химический факультет МГУ им. М. В. Ломоносова и к.х.н., Юдин Н. В. Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева) и ведущая организация (Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Казанский национальный исследовательский технологический университет») выбраны соответственно профилю диссертационной работы.

Решение диссертационного совета о приеме к защите кандидатской диссертации Хораняна Т. Э. по теме «Новые нитропиразолсодержащие ансамбли: синтез и свойства» принято 16 апреля 2025 года на заседании диссертационного совета 24.1.092.01.

д.х.н., проф. Злотин С. Г.

д.х.н., проф. Ракитин О. А.

д.х.н., проф. Томилов Ю. В.

Подписи д.х.н., проф. Злотина С. Г., д.х.н., проф. Ракитина О. А., д.х.н., проф. Томилова Ю. В. заверяю

Ученый секретарь ИОХ РАН, к.х.н.

И. К. Коршевец

16 апреля 2025

