

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Кузнецовой Ольги Владимировны
«Поляризационный эффект в современной концепции внутримолекулярных взаимодействий», представленной на соискание ученой степени доктора химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия (химические науки)

Диссертационная работа Кузнецовой О.В. посвящена решению актуальной проблемы современной физической химии, связанной с формированием концепции внутримолекулярных взаимодействий в заряженных «неклассических» системах на основе учета поляризационных эффектов заместителей, а также выявлению и исследованию основных закономерностей влияния данного эффекта на физико-химические свойства органических, элементоорганических и координационных соединений.

Для решения указанной проблемы диссертантом был выбран широкий круг объектов исследования, включая ион-радикалы, катионы, межмолекулярные и внутримолекулярные металлоорганические и координационные комплексные соединения донорно-акцепторного типа, а также комплексы переходных металлов и индивидуальные соединения элементов главных групп.

В результате проведенных широкомасштабных исследований Кузнецовой О.В. разработана концепция взаимосвязи поляризационного эффекта заместителей с физическими и химическими свойствами комплексов переходных металлов и ион-радикалов, а также межмолекулярных и внутримолекулярных комплексов донорно-акцепторного типа. Полученные результаты позволяют углубить существующие научные представления об электронном строении органических, элементоорганических и координационных соединений. В частности, доказано, что ион-радикалы, межмолекулярные и внутримолекулярные металлоорганические и координационные комплексы донорно-акцепторного типа, а также комплексы переходных металлов можно рассматривать как «неклассические» системы, для которых характерно подчинение принципу линейности свободных энергий.

Диссертантом в соавторстве с научным консультантом профессором Егорочкиным А.Н. впервые установлено значимое влияние поляризационного эффекта заместителей на свойства и характеристики исследуемых объектов, изученные с помощью комплекса физико-химических методов, среди которых ИК- и ЯМР-спектроскопия, электронная спектроскопия поглощения и испускания, ЭПР и ЯКР, Мёссбауэровская спектроскопия, рентгеноэлектронная спектроскопия, электрохимия и калориметрия, а также методы современной квантовой химии. Фактически в представленной работе впервые дана количественная оценка поляризационного вклада в общее изменение физических и химических свойств «неклассических» систем под влиянием ряда заместителей. При этом выяснено, что вклад поляризационного эффекта может превышать 50%, преобладая над индуктивным эффектом и сопряжением. Установлено, что поляризационный эффект возрастает с увеличением поляризуемости заместителей и заряда на реакционном (индикаторном) центре.

Проведенные исследования носят комплексный характер и логично сочетают экспериментальные результаты с квантово-химическими расчетами и моделированием.

Принципиальных замечаний по работе нет.

По результатам проведенных диссертационных исследований автором опубликовано 33 статьи в рецензируемых российских и иностранных журналах, входящих в международные базы цитирования и перечень изданий, рекомендованных ВАК, которые в полной мере отражают основное содержание диссертации, а также подтверждают достоверность выполненных исследований, научную новизну результатов и их

практическую значимость. Кроме того, значительная часть полученных результатов вошла в состав коллективной монографии, соавтором которой является Кузнецова О.В.

На основании вышеизложенного считаю, что диссертация Кузнецовой О.В. является научно-квалификационной работой, в которой на основании выполненных автором исследований развито новое научное направление, что позволяет классифицировать данную диссертацию как важное научное достижение в области физической химии с определенными перспективами практического применения.

Несомненно, что диссертационная работа Кузнецовой О.В. «Поляризационный эффект в современной концепции внутримолекулярных взаимодействий», удовлетворяет требованиям, предъявляемым к докторским диссертациям в соответствии с «Положением о порядке присуждения ученых степеней», утвержденным постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г. (пункты 9-14), а ее автор, Кузнецова Ольга Владимировна, заслуживает присуждения ученой степени доктора химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Член-корреспондент Российской академии наук
04.04.2018.

Д.Ф.Гришин

Контактная информация и сведения об оппоненте:
Гришин Дмитрий Федорович - доктор химических наук по специальностям: 02.00.03 - органическая химия и 02.00.06 - высокомолекулярные соединения; профессор по кафедре органической химии; член-корреспондент РАН по специальности «Органическая химия»; заведующий кафедрой химии нефти и нефтехимического синтеза химического факультета Национального исследовательского Нижегородского государственного университета им.Н.И.Лобачевского (603950 Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23, сл.т. (831) 462 3550, электронная почта: grishin@ichem.unn.ru)

Подпись Д.Ф.Гришина заверяю.
Начальник
Туреева Н.Н.

