

## 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)

Согласно классической теоретической органической химии внутримолекулярное взаимодействие между заместителем X и реакционным центром R<sub>c</sub> в ароматических системах складывается из индуктивного эффекта и сопряжения, а в сложных случаях и стерического эффекта. Эти воззрения наталкиваются на ряд затруднений в случае серий соединений общего вида  $XBR_c^q$  с заряженным реакционным центром и мостиком В малой длины.

Диссертанткой в соавторстве с профессором А.Н. Егорочкиным было установлено, что данные затруднения объясняются игнорированием ион-дипольного взаимодействия (поляризационного эффекта). Как известно, в классической теории строения понятие поляризационного эффекта отсутствовало. В связи с этим систематическое исследование влияния поляризационного эффекта в различных сериях ион-радикалов, металлоорганических и координационных комплексов, а также выявление основных закономерностей влияния заместителей в «неклассических» системах является актуальной фундаментальной задачей.

В диссертационной работе Кузнецовой О.В. проанализированы не только многочисленные экспериментальные данные результатов физико-химических методов исследований (ИК и ЯМР спектроскопии, электронной спектроскопии поглощения и испускания, ЭПР и ЯКР, Мёссбауэровской спектроскопии, рентгеноэлектронной спектроскопии, электрохимии, калориметрии), но также привлечены и расчетные данные, полученные с помощью квантовой химии. Автором предложен подход, основанный на корреляционном анализе, который позволяет доказать влияние поляризационного эффекта в каждой конкретной серии и количественно оценить его вклад. Показано, что в отдельных случаях вклад поляризационного эффекта превышает 50% , преобладая над индуктивным эффектом и сопряжением.

По автореферату имеется следующее замечание:

Соединения в сериях, которые рассматриваются автором для доказательства влияния поляризационного эффекта, содержат заместители X. Однако из текста автореферата не всегда понятно, что из себя представляет X – это донорный или акцепторный заместитель, в каждой серии одинаковые заместители или каждый раз авторы имеют дело с разным набором заместителей.

