

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 разработке новых подходов к оценке электронных взаимодействий широкого круга объектов исследования - ион-радикалов, межмолекулярных и внутримолекулярных металлоорганических и координационных комплексов донорно-акцепторного типа, а также комплексов переходных металлов. Актуальность выполненного исследования несомненна, поскольку особенности электронного и пространственного строения органических, элементоорганических и координационных соединений в совокупности могут определять их физические свойства и реакционную способность.

О.В. Кузнецовой в соавторстве с научным консультантом профессором А.Н. Егорочкиным впервые установлено значимое влияние поляризационного эффекта заместителей на физические и химические свойства этих систем, изученные с помощью широкого комплекса современных физико-химических методов и методов квантовой химии.

Доказано, что ион-радикалы, межмолекулярные и внутримолекулярные металлоорганические и координационные комплексы донорно-акцепторного типа, а также комплексы переходных металлов представляют собой «неклассические» системы. Важным признаком заряженных «неклассических» систем является наличие не только «классических» - индуктивного, резонансного, стерического эффектов, но и поляризационного эффекта, вклад которого во многих случаях соизмерим с вкладами индуктивных и резонансных эффектов.

Закономерности, выявленные в результате выполненной впервые количественной оценки поляризационного вклада в общее изменение физических и химических свойств «неклассических» систем под влиянием заместителей, положены в основу научной концепции внутримолекулярных взаимодействий в заряженных «неклассических» системах, позволяющей прогнозировать физико-химические параметры и оценивать достоверность имеющихся литературных данных.

Несомненным достоинством выполненной работы является изучение влияния поляризационного эффекта на токсичность и биологическую активность (противоопухолевую, фунгицидную, инсектицидную) 27 серий элементоорганических соединений с различными центральными атомами М (Hg, В, Si, Ge, Sn, Р). Образование донорно-акцепторных комплексов при взаимодействии элементоорганических соединений с биологическими мишенями приводит к возникновению избыточного заряда q на атоме М. Показано, что в некоторых случаях вклад поляризационного эффекта является преобладающим, достигая 70%. К сожалению, эти важные результаты не отражены ни в задачах исследований, ни в выводах. Об актуальности данного направления может свидетельствовать,

например, активное внимание исследователей к изучению C/Si/Ge-биоизостеризма аминокислот в современной медицинской химии. Выявлено, что замена углерода в аминокислотах на кремний или германий может служить полезным инструментом для улучшения биологических свойств пептидов.

Кузнецовой О.В. выполнено комплексное, систематическое исследование, результаты которого вносят существенный вклад в области физической, органической химии и химии координационных соединений. Полученные результаты позволяют значительно углубить существующие научные представления об электронном строении органических, элементоорганических и координационных соединений.

По актуальности, объему выполненных исследований, научной и практической значимости полученных результатов, опубликованных в коллективной монографии, 33 статьях в ведущих российских и зарубежных журналах, материалах конференций, диссертационная работа «Поляризационный эффект в современной концепции внутримолекулярных взаимодействий», соответствует требованиям ВАК РФ, предъявляемым к докторским диссертациям, (пп. 9–14 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства РФ №842 от 24 сентября 2013 г.), а ее автор, **Кузнецова Ольга Владимировна**, несомненно, заслуживает присвоения ученой степени доктора химических наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия.

Медведева Алевтина Сергеевна,

доктор химических наук по специальностям 02.00.03 – органическая химия и 02.00.08 – химия элементоорганических соединений, ведущий научный сотрудник, профессор

Иркутский институт химии им. А.Е. Фаворского СО РАН, ул Фаворского, 1

e-mail: amedved@irioch.irk.ru

тел. 8(3952)42-60-85

17.04.2018

Подпись А.С. Медведевой заверяю
Ученый секретарь ИриХ СО РАН

К.х.н., с.н.с. Н.Н. Комарова

