

**ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.2.479.04,  
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО  
БЮДЖЕТНОГО ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО  
ОБРАЗОВАНИЯ «УФИМСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ НАУКИ И ТЕХНОЛОГИЙ»  
МИНИСТЕРСТВА НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ  
ФЕДЕРАЦИИ, ПО ДИССЕРТАЦИИ  
НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК**

аттестационное дело № \_\_\_\_\_  
решение диссертационного совета от 5 июня 2025 г. № 50

О присуждении Хатымовой Ляйсан Зявдатовне, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук. Диссертация «Взаимодействие резонансных состояний и время жизни отрицательных молекулярных ионов в газофазных процессах присоединения медленных электронов к полиароматическим соединениям и TCNQ» по научной специальности 1.4.4. Физическая химия принята к защите 27 марта 2025 года (протокол № 46) диссертационным советом 24.2.479.04, созданным на базе федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский университет науки и технологий» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (450076, г. Уфа, ул. Заки Валиди, 32), приказ № 519/нк от 24.03.2023 г.

Соискатель, Хатымова Ляйсан Зявдатовна, 7 июня 1976 года рождения. В 2000 г. окончила Башкирский государственный университет по специальности «Физика» с присуждением квалификации «Физик». В 2023 г. окончила аспирантуру по очной форме обучения Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимский федеральный исследовательский центр Российской академии наук по направлению подготовки 03.06.01 Физика и астрономия с присвоением квалификации «Исследователь. Преподаватель-исследователь». Диплом об окончании аспирантуры выдан Федеральным государственным бюджетным научным учреждением Уфимский федеральный исследовательский центр Российской академии наук в 2023 г. Удостоверение о сдаче кандидатского экзамена по иностранному языку выдано Федеральным государственным бюджетным образовательным учреждением высшего образования «Башкирский государственный университет» в 2020 г. Справка об обучении со сведениями о сданном кандидатском экзамене по истории и философии науки выдана Федеральным государственным бюджетным образовательным учреждением

высшего образования «Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы» в 2023 г. Справка о сдаче кандидатского экзамена по научной специальности 1.4.4. Физическая химия (отрасль науки: физико-математические) выдана Федеральным государственным бюджетным образовательным учреждением высшего образования «Уфимский университет науки и технологий» в 2024 г.

Работает в должности младшего научного сотрудника лаборатории физики атомных столкновений Института физики молекул и кристаллов Федерального – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского Федерального исследовательского центра Российской академии наук Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Диссертация выполнена в лаборатории масс-спектрометрии отрицательных ионов и спектроскопии молекул Института физики молекул и кристаллов – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Научный руководитель – Хвостенко Ольга Григорьевна, доктор физико-математических наук (01.04.17 – Химическая физика, в том числе физика горения и взрыва), ведущий научный сотрудник лаборатории физики атомных столкновений Института физики молекул и кристаллов – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук.

#### **Официальные оппоненты:**

1. Буряк Алексей Константинович, член-корреспондент Российской академии наук, доктор химических наук (02.00.04 – Физическая химия), профессор, директор Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской академии наук»;

2. Акманова Гузель Рифкатовна, кандидат физико-математических наук (01.04.07 – Физика твердого тела), доцент, доцент кафедры общей физики федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский университет науки и технологий»

**дали положительные отзывы на диссертацию.**

**Ведущая организация** – Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Уфимский государственный нефтяной технический университет», г. Уфа, в своем

положительном отзыве, подписанном Гималтдиновым Ильясом Кадировичем – доктором физико-математических наук (01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы), профессором, членом-корреспондентом АН РБ, заведующим кафедрой «Физика»; Кантором Евгением Абрамовичем – доктором химических наук (02.00.13 – Химия нефти и нефтехимический синтез), профессором кафедры «Физика»; утвержденном Ибрагимовым Ильдусом Гамировичем доктором технических наук, профессором, проректором по научной и инновационной работе ФГБОУ ВО «Уфимский государственный нефтяной технический университет» указала, что по актуальности, научному уровню проведенных исследований, новизне и значимости полученных результатов, личному вкладу автора, достоверности и обоснованности выводов диссертационная работа Хатымовой Л.З. «Взаимодействие резонансных состояний и время жизни отрицательных молекулярных ионов в газофазных процессах присоединения медленных электронов к полиароматическим соединениям и TCNQ» соответствует требованиям п.п. 9-11, 13, 14 постановления Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 «О порядке присуждения ученых степеней», а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по научной специальности 1.4.4. Физическая химия.

Соискатель имеет 24 научных труда, в том числе 5 статей в ведущих зарубежных рецензируемых журналах, индексируемые в базах данных Web of Science и Scopus, 4 статьи в отечественном издании, которое входит в международные реферативные базы данных и системы цитирования (RSCI), 15 работ в трудах международных и всероссийских конференций.

Общий объем публикаций по теме диссертации 10,2 п.л., авторский вклад – 2,7 п.л. В диссертации отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем работах.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

*Статьи в ведущих зарубежных рецензируемых журналах, индексируемых в базах данных Web of Science и Scopus:*

1. Khvostenko, O.G. Resonance electron capture by perylene molecules. Relation with negative differential conductance/ O.G. Khvostenko, V.G. Lukin, L.Z. Khatymova, G.M. Tuimedov, Yu. Sarvadii, A. K. Gatin, M.V. Grishin // Chem. Phys. Lett. – 2024. – V. 853. – P. 141537: 1-8.

2. Khvostenko, O.G. Correlation between the negative differential conductance of single molecules and gas-phase long-lived negative ions formed during resonant electron capture by the same molecules / O.G. Khvostenko, V.G. Lukin, M.V. Grishin, S.Yu. Sarvadii, A.K. Gatin, G.M. Tuimedov, L.Z.

Khatymova, E.E. Tseplin, S.N. Tseplina // Chem. Phys. Lett. – 2023. – V. 824. – P. 140562: 1-9.

3. Khvostenko, O.G. Long-lived negative molecular ions of TCNQ formed by the resonant capture of electrons with above zero energies / O.G. Khvostenko, L.Z. Khatymova, V.G. Lukin, R.R. Kinzyabulatov, G.M. Tuimedov, E.E. Tseplin, S.N. Tseplina // Chem. Phys. Lett. – 2018. – V. 711. – P. 81-86.

4. Khvostenko, O.G. The Lowest triplet of tetracyanoquinodimethane via UV-vis absorption spectroscopy with Br-containing solvents / O.G. Khvostenko, R.R. Kinzyabulatov, L.Z. Khatymova, E.E. Tseplin // J. Phys. Chem. A. – 2017. – V. 121. – P. 7349-7355.

5. Khvostenko, O.G. Electronically excited negative ion resonant states in chloroethylenes / O.G. Khvostenko, V.G. Lukin, G.M. Tuimedov, L.Z. Khatymova, R.R. Kinzyabulatov, E.E. Tseplin // J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. – 2015. – V. 199. – P. 1-9.

*Статьи в отечественных изданиях, которые входят в международные реферативные базы данных и системы цитирования (RSCI):*

6. Хвостенко, О.Г. Смешение состояний одной симметрии в отрицательных ионах / О.Г. Хвостенко, Л.З. Хатымова, В.Г. Лукин // Известия Российской академии наук. Серия физическая. – 2020 – Т. 84, № 5. – С. 667-670.

7. Хатымов Р.В., Хатымова Л. З., Муфтахов М.В. О резонансном захвате электронов молекулами вблизи порога ионизации. // Известия РАН. Серия Физическая, 2021. – Т. 85, № 8. – С. 1142-1147.

8. Хатымова, Л.З. Диссоциация отрицательных молекулярных ионов тетрацианохинодиметана (TCNQ) на поверхности камеры ионизации при резонансном захвате медленных электронов / Л.З. Хатымова, В.Г. Лукин, Г.М. Туймедов, О.Г. Хвостенко // Химия высоких энергий. – 2019. – Т. 53, № 1. – С. 45-53.

9. Хатымова, Л.З. Синглетные и триплетные переходы в УФ-спектрах оптического поглощения пентацена / Л.З. Хатымова, Р.Р. Кинзябулатов, О.Г. Хвостенко // Химия высоких энергий. – 2018. – Т. 52, № 1. – С. 24-30.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы:

1. **Ведущей организации** – Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Уфимский государственный нефтяной технический университет», г. Уфа. Отзыв положительный.

Имеются замечания и вопросы: 1) На с. 25 диссертации приведено: «Азобензол образует ДОМИ при  $E_{эл} = 0$  и 0,95 эВ (Рисунок 1.28). Его

**изомеры - азоксибензолы** также демонстрируют ДОМИ в надтепловой области энергий. Например, **молекула *m*-аминоазобензола** – при  $E_{эл} = 0; 1,1$  эВ (Рисунок 1.29)» (выделено авторами отзыва). Однако, азобензол и азоксибензолы не являются изомерами, а *m*-аминоазобензол (правильнее было бы назвать его по-русски *m*-аминоазобензолом) – не изомер, а замещенное производное самого азобензола. 2) Соискателем использованы основные базисные наборы 6-31G и 6- 311G. Возможно, что с помощью диффузных функций, можно получить более адекватное описание анионов. 3) Соискатель отмечает, что используемый метод B3LYP, несмотря на все его достоинства, завышает абсолютные значения энергий ЗМО на величину ~ 2 эВ. Остается неясным, почему проигнорирован негибридный функционал PBE, который не обладает этим свойством. 4) На с. 77 диссертации приводятся данные об «использовании перилена в качестве **оптически активного центра** в материалах, применяемых для создания оптоэлектронных устройств» (выделено авторами отзыва). Неясно, что имеется в виду: молекула перилена, как известно, ахиральна. 5) Список литературы оформлен не единообразно: где-то даются полные названия журналов, а где-то – сокращенные, причем речь – об одних и тех же журналах (ссылки 47, 48, 81 и 87, а также 84 и 89), большинство названий журналов указано обычным шрифтом, но некоторые (70) – курсивом. Встречаются опечатки (ссылка 54), в ряде случаев (63, 71, 100) в ссылках на журнальные статьи указывается название соответствующего издательства, но не на все.

2. **Официального оппонента**, член-корреспондента Российской академии наук, доктора химических наук, профессора, директора Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН», Буряка Алексея Константиновича. Отзыв положительный.

Имеются замечания и вопросы: 1) Представляется целесообразным дать рекомендации по аналитическому применению полученных данных об устойчивости отрицательных ионов полиароматических соединений. 2) Возможно ли перенести полученные данные об устойчивости отрицательных ионов изученных полиароматических соединений на другие полиароматические соединения. 3) Можно ли на основе комплекса методов исследований, предложенных в Вашей работе, создать метод по прогнозированию стабильности отрицательно заряженных ионов.

3. **Официального оппонента**, кандидата физико-математических, доцента, доцента кафедры общей физики Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский

университет науки и технологий» Акмановой Гузель Рифкатовны. Отзыв положительный.

Имеются замечания и вопросы: 1) В работе недостаточно ясно раскрыто содержание преобразований, в которых может участвовать ион надтепловой области, получивший прибавку к своему времени жизни за счет квантово-механического смешения с долгоживущим ионом. 2) Не приведены какие-либо данные о методах, позволяющих оценить увеличение времени жизни изначально короткоживущего иона за счет смешивания с долгоживущим. 3) На рисунках, показывающих корреляцию между ионами и пиками отрицательной дифференциальной проводимости, можно видеть, что максимумы этих двух особенностей, как правило, не совпадают, что выглядит как нарушение заявленной корреляции. 4) В тексте встречаются орфографические ошибки и стилистические погрешности; также недостатком, затрудняющим чтение автореферата, является отсутствие структурных формул изученных соединений, строение которых обозначено только их названиями.

4. Доктора химических наук, профессора, профессора кафедры «Физика» Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский государственный нефтяной технический университет» Кузнецова Валерия Владимировича. Отзыв положительный.

Имеются замечания и вопросы: 1) Для достижения целей работы соискатель активно использует целый ряд квантовохимических приближений: B3LYP/6-31G, B3LYP/6-311G, B3LYP/6- 311+G, B3LYP/6-311+G(d,p), TD B3LYP/6-311+G и TD B3LYP/6-311+G(d,p) (с. 8, 14 и 16). Хотелось бы увидеть краткое обоснование выбора используемых подходов. 2) На с. 11-12 автореферата упоминается о наличии корреляции между резонансными состояниями из спектра РЭ и энергиями ионизации из ФЭС (рис. 2). Данное положение отражено и в выводе 4. Хотелось бы уточнить, что понимается под корреляцией в данном случае: чисто качественная зависимость либо речь об установленных количественных соотношениях, характеризуемых определенным коэффициентом корреляции.

5. Доктора физико-математических наук, профессора, профессора Института электроники и телекоммуникаций Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого» Цыбина Олега Юрьевича. Отзыв положительный.

Имеются вопросы: 1) Имеется ли возможность использовать предложенный механизм увеличения времени жизни ионов, основанный на

смещении электронных состояний иона одной симметрии с вкладом долгоживущего иона основного электронного состояния, для поиска и оценки новых веществ, перспективных в приложениях с формированием долгоживущих отрицательных ионов? 2) Какое значение может иметь для дальнейших исследований в области физической химии новая методика, использованная при регистрации триплетной полосы в УФ спектре оптического поглощения?

6. Доктора физико-математических наук, доцента, профессора кафедры материаловедения и физики металлов Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский университет науки и технологий» Михайлова Геннадия Петровича. Отзыв положительный.

Имеются замечания: 1) В работе аргументировано утверждается важность процесса колебательной релаксации для объяснения аномально долгих времен жизни ОМИ. К сожалению, отсутствуют данные скоростей или времен колебательной релаксации исследованных ионов для оценки вклада перераспределения энергии.

7. Кандидата химических наук, заведующего кафедрой физической химии Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева» Райтмана Олега Аркадьевича. Отзыв положительный. Вопросов и замечаний нет.

8. Кандидата химических наук, старшего научного сотрудника лаборатории физико-химических методов анализа Уфимского института химии – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук Абдуллина Марата Фаритовича. Отзыв положительный.

Имеются замечания и вопросы: 1) На стр. 3 автореферата указано, что в 1913 г. Дж. Томсон впервые зарегистрировал изотопы отрицательных ионов неона. В его работе касательно этого результата (Thomson, J. J. (1913). Bakerian Lecture: Rays of Positive Electricity. Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 89(607), 1-20.) говорится о положительно заряженных ионах. Наблюдал ли Дж. Томсон действительно отрицательные ионы? 2) На стр. 11 автореферата указано, что орбиталь № 53 показана на рис. 2в, но на самом рисунке (стр. 12 автореферата) обозначения орбиталей заканчиваются номером 52. 3) Совпадение экспериментальных результатов и результатов КХР в отнесении резонансных состояний перилена не уменьшает степень их надежности и достоверности, тем не менее,

дополнение их данными ФЭС и УФ-спектроскопии, как и в случае TCNQ, придало бы работе более полный и законченный вид.

9. Кандидата химических наук, ведущего инженера лаборатории физико-химических методов анализа Уфимского института химии - обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук Шишлова Николая Михайловича. Отзыв положительный.

Имеются замечания и вопросы: 1) В первом предложении автореферата на стр. 3 утверждается, что отрицательные ионы известны еще с начала 20 века .... Представляется, что ОИ, например, в солях ( $\text{Cl}^-$ ,  $\text{Br}^-$ ,  $\text{RCOO}^-$  и др.), были известны уже Фарадею и Аррениусу. 2) На стр. 4 говорится о концентрации избыточной энергии в основном на одной из колебательных мод многоатомной молекулы "(на координате реакции)". Чем выделяется в молекуле координата реакции? Могут ли сразу возбуждаться 2 или больше мод? 3) На стр. 11 говорится об орбитали № 53 на Рисунке 2в. Видимо это опечатка. На рис. 2 фигурирует орбиталь 52, которая и является НВМО. 4) Непонятно, как образуются отрицательные ионы в растворах TCNQ с поглощением при 1,45 эВ в отсутствии явных доноров электрона (см. рис. 1). В подписи к рис. 1 также говорится и о полосе поглощения (при 2,5 эВ) отрицательного иона циклического димера – откуда взялся этот димер? К сожалению, полный электронный спектр аниона TCNQ в растворе в автореферате не приводится и не обсуждается. Мое твердое убеждение - молекула этанола с потенциалом ионизации 10,47 эВ не может отдать электрон молекуле TCNQ со сродством к электрону 2,8 эВ.

10. Доктора физико-математических наук, старшего научного сотрудника лаборатории химии высоких энергий и катализа Института нефтехимии и катализа – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук Тухбатуллина Адиса Анисовича. Отзыв положительный.

Имеются замечания и вопросы: 1) По тексту автореферата дробные части отделены запятыми, в точных науках общепринятым считается отделять дробную часть точкой. 2) Не дается расшифровка ЗМО и ВМО. Видимо, имеется в виду – занятая молекулярная орбиталь и вакантная молекулярная орбиталь? 3) В автореферате следовало вместо ПАУ перечислить конкретные соединения, рассмотренные в работе. По тексту не совсем понятно, для каких ПАУ получены спектры отрицательных ионов

молекул, например, стр. 11 (...для *TCNQ* и *ПАУ*), стр. 12 (...сделано в случае *ПАУ*), стр. 13 (...полученными для *ПАУ*)?

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается их высокой профессиональной квалификацией, наличием публикаций по проблематике, связанной с темой диссертации, компетенциями в вопросах, имеющих отношение к теме работы. Ведущая организация и оппоненты не имеют совместных проектов и публикаций с соискателем.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований к наиболее значимым результатам необходимо отнести следующее:

– **предложен** механизм объясняющий аномально высокие времена жизни отрицательных молекулярных ионов тетрацианохинодиметана и полиароматических углеводородов в резонансных максимумах, лежащих по энергии выше первого триплета материнской молекулы, обусловленного смешением состояний одной симметрии с вкладом долгоживущего иона основного состояния.

– **определен** механизмы резонансного захвата электронов молекулами *TCNQ* и полиароматических углеводородов, в области энергий 0 – 15 эВ, и показано, что в них задействованы все известные механизмы захвата электронов молекулами: колебательно-возбужденный фешбаховский резонанс, резонанс формы, электронно-возбужденный фешбаховский резонанс, межболочечный резонанс.

– **проведено** отнесение экспериментальных резонансных состояний отрицательных молекулярных ионов, регистрируемых в *TCNQ* и полиароматических углеводородах, на основе расчёта электронного спектра иона основного состояния с учетом корреляций между резонансными состояниями и данными фотоэлектронной и УФ спектроскопии.

– **впервые** зарегистрировано значение энергии нижнего триплетного состояния *TCNQ* при 1,96 эВ с помощью УФ спектроскопии оптического поглощения при использовании растворителей с тяжелым атомом (Br), высокой концентрации исследуемого вещества и кюветы с большой длиной оптического пути.

– **установлено**, что пирен не образует долгоживущие отрицательные молекулярные ионы при надтепловых энергиях электронов ввиду отсутствия в этом соединении сочетания необходимых условий – образования низкоэнергетичного иона-квартета и смешения какого-либо состояния с долгоживущим нулевым ввиду несовпадения симметрий.

Практическая значимость и ценность результатов обусловлена тем, что:

– получены новые теоретические знания о временах жизни отрицательных молекулярных ионов, образующихся в автоионизационных состояниях в газофазных процессах резонансного захвата молекулами медленных электронов, о механизме задержки автоотщепления добавочного электрона от ионов, обусловленном квантовомеханическим смешением электронных состояний.

– возможность использовать результаты в области молекулярной электроники, функционирующей на уровне взаимодействия электрона с одиночной молекулой, где перенос электрона и время его пребывания на молекуле, через которую течет ток, имеют общие черты с процессами газофазного резонансного захвата.

**Достоверность** представленных в диссертационной работе результатов подтверждается совпадением расчетных и экспериментальных данных в пределах погрешности. Квантово-химические расчеты хорошо воспроизводят взаимное расположение и площади под пиками полос из фотоэлектронных спектров, абсолютные значения полос УФ спектров, пиков отрицательных ионов из спектров резонансного захвата электронов.

**Обоснованность** научных положений, сформулированных в диссертации, обеспечена детальным подходом к анализу полученных экспериментальных данных, их интерпретацией, выполненной на основе теоретических основ использованных физических методов, применением современных квантово-химических методов расчета молекулярных систем.

**Личный вклад** соискателя состоит в непосредственном участии во всех стадиях научно-исследовательского процесса: от постановки задач до проведения экспериментальных работ и проведении квантово-химических расчетов, подготовки публикаций. Все выводы основаны на данных, полученных автором. В указанных публикациях автор принимал участие в постановке задачи, обсуждении полученных результатов и оформлении работ. Диссертационная работа написана автором самостоятельно.

Диссертационный совет пришел к выводу о том, что в диссертации:

- соблюдены установленные Положением о порядке присуждения ученых степеней критерии, которым должна отвечать диссертация на соискание ученой степени кандидата технических наук;

- отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем ученой степени работах, в которых изложены основные научные результаты диссертации;

- соискатель ссылается на авторов и источники заимствования.

В ходе защиты диссертации были высказаны следующие критические замечания и вопросы: 1) У вас цель работы – изучение причин аномального

долгого времени жизни. Значит, если есть аномально высокое время жизни, то есть и нормальное. Вопрос: существует ли нормальное, и что оно собой представляет? 2) В третьем выводе вашей работы сказано, что долгоживущие отрицательные молекулярные ионы, регистрируемые в полиароматических углеводородах при  $E_{эл} = 0,4 - 0,8$  эВ, образуются по механизму резонанса формы с последующим безызлучательным переходом в ион основного электронного состояния, который становится долгоживущим за счет колебательной релаксации. В то же время, в пятом пункте выводов говорится, что пирен не образует долгоживущих надтепловых ионов, в том числе и по причине отсутствия у него колебательной релаксации. Вопрос: каким образом может так случиться, что у какого-то соединения нет колебательной релаксации? Или, здесь требуется сочетание факторов?

Соискатель Хатымова Л.З. ответила на задаваемые ей в ходе заседания вопросы и привела собственную аргументацию: 1) Да, время жизни, которое можно назвать нормальным, существует, это – время жизни, которое характерно для отрицательных молекулярных ионов, образующимся при нулевой энергии электронов (нулевые ионы), и это время жизни достаточно велико, чтобы соответствующие ионы регистрировались напрямую масс-спектрометрическим методом. Но ионы, образующиеся при энергиях выше нулевой (надтепловые), как правило, имеют гораздо меньшее время жизни и потому напрямую обычно не регистрируются. Тем не менее, в редких случаях, в некоторых соединениях надтепловые ионы образуются с большим временем жизни, подобным времени жизни нулевых ионов. Тогда эти надтепловые ионы тоже регистрируются, а их большое время жизни называют аномальным. 2) Ионы, которые образуются примерно до 1 эВ близки по энергии к иону основного состояния. То есть, считается, что такой ион при энергии до 1 эВ образуется сначала по механизму резонанса формы и потом переходит в ион основного состояния, и вся энергия захваченного электрона переходит в колебательную релаксацию, за счет чего ион становится долгоживущим. Пирен, в отличие от других изученных соединений, не участвует в таком переходе, что является одним из нескольких требуемых факторов. Существенно также его маленькое сродство к электрону, которое указывает, насколько выгодно молекуле присоединить электрон. У пирена оно составляет всего 0,5 эВ, в то время как у других соединений гораздо больше.

На заседании 05.06.2025 г. диссертационный совет принял решение: за решение научной задачи, заключающейся в установлении причин экспериментально наблюдаемого аномально долгого времени жизни отрицательных молекулярных ионов, образующихся в процессах

резонансного захвата электронов в надтепловой области электронной энергии, расположенной выше первого триплета материнской молекулы, и имеющей существенное значение для физической химии, присудить Хатымовой Ляйсан Зявдатовне ученую степень кандидата физико-математических наук по научной специальности 1.4.4. Физическая химия.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 14 человек, из них 6 докторов физико-математических наук по профилю защищаемой диссертации, участвовавших в заседании; из 17 человек, входящих в состав совета, дополнительно введены на разовую защиту 0 человек, проголосовали: за – 14, против – 0.

Председатель

диссертационного совета

д.х.н., профессор

Мустафин Ахат Газизьянович

Ученый секретарь

диссертационного совета

д.ф.-м.н., доцент

Исмагилова Альбина Сабирьяновна



05.06.2025 г.