

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Хатымовой Ляйсан Зявдатовны
«Взаимодействие резонансных состояний и время жизни отрицательных
молекулярных ионов в газофазных процессах присоединения медленных
электронов к полиароматическим соединениям и TCNQ», представленной на
соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по
научной специальности 1.4.4. Физическая химия

Автореферат диссертации Хатымовой Л.З. посвящен выявлению причин экспериментально наблюдаемого аномально долгого времени жизни отрицательных молекулярных ионов, образующихся в процессах РЗЭ в электронно-возбужденных состояниях в надтепловой области электронной энергии. Важность понимания резонансных процессов образования отрицательных ионов в газовой фазе, связанных, как с дальнейшим развитием теории РЗЭ, так и с совершенствованием устройств на базе молекулярной электроники и фотосистем, делает выбранную тему важной и актуальной.

Главным итогом рассматриваемой работы можно считать формирование основных положений, объясняющих механизм увеличения времени жизни отрицательных ионов резонансных состояний. Они базируются на смещении электронных состояний иона одной симметрии с вкладом долгоживущего иона основного электронного состояния. С этой целью соискателем изучены масс-спектры отрицательных ионов РЗЭ ряда полиароматических углеводородов, а также электронное строение их нейтральных молекул. Для выявления электронных состояний резонансных максимумов отрицательных молекулярных ионов TCNQ использованы расчеты электронного спектра иона OCM^- в приближении TD B3LYP/6-31G в сочетании с данными фотоэлектронной спектроскопии и УФ спектроскопии оптического поглощения. Одной из наиболее интересных на мой взгляд частей работы является регистрация первого триплета TCNQ – соединения, широко применяемого в электронике, при 1,96 эВ, энергия которого ранее не была известна.

Следует также отметить весьма представительный список публикаций в высокорейтинговых журналах, отражающих основное содержание диссертации.

Основные замечания по автореферату сводятся к следующему:

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) (сс. 8, 14 и 16). Хотелось бы увидеть краткое обоснование выбора используемых подходов.
2. На сс. 11-12 автореферата упоминается о наличии корреляции между резонансными состояниями из спектра РЗЭ 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, характеризующихся определенным коэффициентом корреляции.

Сказанное не умаляет значимости полученных результатов.

Закключение. В рамках исследования, выполненного на высоком научно-методическом уровне, обоснованы основные положения механизма увеличения времени жизни отрицательных ионов резонансных состояний, что важно для фундаментальной науки и практики. Работа хорошо апробирована и отражена в 9 статьях, опубликованных в высокорейтинговых журналах, и трудах 15 международных и всероссийских конференций. Автореферат адекватно отражает содержание работы. На основании вышеизложенного считаю, что диссертация Хатымовой Ляйсан Зявдатовны «Взаимодействие резонансных состояний и время жизни отрицательных молекулярных ионов в газофазных процессах присоединения медленных электронов к полиароматическим соединениям и TCNQ» представляет собой законченное научно-квалификационное исследование, результаты которого отвечают требованиям п. 9–11 и п. 13, 14 Постановления Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 «О порядке присуждения ученых степеней», предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по научной специальности 1.4.4. Физическая химия.

Кузнецов Валерий Владимирович, доктор химических наук (специальность 02.00.03 – Органическая химия), профессор кафедры «Физика» Уфимского государственного нефтяного технического университета.

E-mail: kuzmaggy@mail.ru; тел.: 8-903-31-26-775.

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Уфимский государственный нефтяной технический университет»;

450064, РБ, г. Уфа, ул. Космонавтов, 1; тел.: (347) 242-03-70,

e-mail: info@rusoil.net, адрес официального сайта организации: <http://www.rusoil.net>

«Я, Кузнецов Валерий Владимирович, согласен на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета 24.2.479.04, и их дальнейшую обработку.»

06.05.2025 г.

Подпись В.В. Кузнецова *удостоверяю*
Нач. ОРП



О.А. Дадаян