

## ОТЗЫВ

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

*Актуальность работы.* Автореферат диссертационной работы Хатымовой Ляйсан Зявдатовны посвящен исследованию механизмов образования долгоживущих отрицательных молекулярных ионов (ДОМИ), образующихся в нескольких резонансных состояниях, при надтепловых энергиях электронов на примере тетрацианохинодиметана (TCNQ) и полиароматических соединений (перилена, тетра- и пентацена), так как ДОМИ этих соединений могут находиться в резонансных состояниях по энергии выше первого триплетного состояния материнской молекулы (как и в случае атома гелия) и ни одна из известных гипотез не объясняет этот феномен. Таким образом, актуальность диссертационной работы не вызывает сомнений, так же как ее теоретическая и практическая значимость (в последнем случае результаты работы важны для более глубокого понимания образования и распада отрицательных ионов в процессах переноса электрона в устройствах молекулярной электроники). Для выполнения диссертационной работы были использованы методы масс-спектрометрии отрицательных ионов, УФ-, фотоэлектронной спектроскопии (ФЭС) и квантово-химические расчеты (КХР), с помощью которых для определения природы резонансных состояний ДОМИ, механизмов их образования была проведена корреляция их энергий с энергиями молекулярных орбиталей нейтральных молекул, материнских по отношению к исследуемым отрицательным ионам. Цели и задачи диссертационной работы четко сформулированы и выполнены в полной мере, о чем свидетельствует достоверность результатов работы, подтвержденная их воспроизводимостью в условиях использованных экспериментальных и теоретических методов. Научная новизна диссертационной работы заключается в том, что предложен механизм увеличения времени жизни резонансных состояний отрицательных ионов, согласно которому создаются условия для образования ДОМИ при надтепловых энергиях электронов, также с помощью УФ-спектроскопии оптического поглощения был зарегистрирован первый триплет молекулы TCNQ, энергия которого была ранее не известна.

### *Замечания по автореферату.*

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.

Поставленные вопросы и замечания не снижают высокое теоретическое и прикладное значение полученных результатов.

### *Заключение.*

Полученные результаты имеют теоретическое и практическое значение, работа выполнена на высоком научно-методическом уровне, что гарантирует достоверность полученных данных. Работа хорошо апробирована и отражена в публикациях. Автореферат полностью удовлетворяет требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, и соответствует критериям, изложенным в п. 9–11 и п. 13, 14 Постановления Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 «О порядке присуждения ученых степеней», а автор работы Хатымова Ляйсан Зявдатовна заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по научной специальности 1.4.4. – Физическая химия.

Абдуллин Марат Фаритович, кандидат химических наук (02.00.04 – Физическая химия, 02.00.03 – Органическая химия), старший научный сотрудник лаборатории физико-химических методов анализа. E-mail: elmolek@anrb.ru; тел.: 89899532018.

Уфимский институт химии – обособленное структурное подразделение Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук; 450054, Республика Башкортостан, г. Уфа, просп. Октября, 71; тел. 8(347)2355560; E-mail: chemorg@anrb.ru; [http://ufaras.ru/?page\\_id=14041&ysclid=macbkotq74772830735](http://ufaras.ru/?page_id=14041&ysclid=macbkotq74772830735)

Я, Абдуллин Марат Фаритович, даю согласие на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета 24.2.479.04, и их дальнейшую обработку.

19 мая 2025 г.

 / Абдуллин Марат Фаритович

Подпись М.Ф. Абдуллина заверяю

Ученый секретарь УФИХ УФИЦ РАН



 / Выдрина Валентина Афанасиевна