

**Отзыв научного руководителя на диссертацию  
Марии Михайловны Сивохиной  
«Экспериментальные и теоретические исследования валентных и ионно-  
парных состояний ван-дер-Ваальсовых комплексов и кластеров  $Rg_nCl$ ,  
 $Rg = He, Ne, Ar, n \geq 1$ »  
представленную на соискание степени кандидата физико-  
математических наук по специальности 1.3.6 «Оптика»**

Диссертация Сивохиной М.М. посвящена детальному исследованию спектроскопических характеристик, а также заселения и распада валентных и ионно-парных (ИП) состояний ван-дер-Ваальсовых (ВДВ) комплексов,  $RgCl$ ,  $Rg = He, Ne, Ar$  и кластеров  $He_nCl$ ,  $n = 2 - 4$ . Для их исследования применялся метод двухступенчатого двухцветного лазерного возбуждения ВДВ комплексов и кластеров, охлажденных до температур порядка 1 К в сверхзвуковых молекулярных пучках. Измерялись спектры возбуждения люминесценции продуктов преддиссоциации  $RgCl(ИП)$ ,  $He_nCl$ , а также люминесценции самих  $RgCl(ИП)$ , спектры действия, спектры «накачка-зондирование» (pump-probe), временные зависимости интенсивностей люминесценции. Отличительной особенностью работы явилось измерение «истинных», исправленных на спектральную зависимость чувствительности системы конденсор/монокроматор/ФЭУ спектров люминесценции, что позволяло определять вероятности каналов распада  $RgCl(ИП)$  и даже колебательные распределения продуктов распада. К настоящему времени подобная методика используется только в нашей лаборатории.

Для описания поверхностей потенциальной энергии (ППЭ) комплексов, волновых функций состояний и определения их энергий связи использовался метод двухатомных фрагментов в молекуле в рамках теории возмущений первого порядка (ДФВМ ТВ1), IDIM PT1 (*the diatomics-in-molecule, first-order perturbative approximations*). Для расчетов энергий связанных уровней  $RgI^{35}Cl$ , а также спектров возбуждения люминесценции  $RgCl(ИП \rightarrow$  валентные состояния) и спектров люминесценции комплексов использовался программный код метода MCTDH (*Multi Configuration Time Dependent Hartree method*).

В процессе работы над диссертацией Сивохина М.М. выполнила анализ литературы, участвовала в измерениях спектров возбуждения люминесценции, люминесценции и действия комплексов, а также обработке полученных экспериментальных данных. Теоретическая обработка и интерпретация данных осуществлялась совместно с С.С. Лукашовым и И.И. Мартыновым. ППЭ исследуемых электронных состояний были разработаны и получены И.И. Мартыновым, совместно с которым Сивохина М.М. работала над сопоставлением экспериментальных данных и результатов расчётов. Моделирование спектров возбуждения люминесценции, люминесценции и действия с использованием программного пакета MCTDH на основе рассчитанных ППЭ выполнено М.М. Сивохиной. Она участвовала в написании статей.

Сивохина М.М. является соавтором пяти статей, опубликованных в журналах первого и второго квартилей индексируемых в Scopus и Web of Science все - по теме диссертации.

Сивохина М.М. проявила себя как квалифицированный вдумчивый специалист, владеющий большим количеством методов анализа экспериментальных данных. Она безусловно заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.6 «Оптика».

Научный руководитель  
доктор физико-математических наук,  
профессор

Личную подпись  
А.М. Правилова  
заверяю  
И.О. начальника отдела кадров №2  
И.И. Константинова



А.М. Правиллов