



УТВЕРЖДАЮ  
Генеральный директор  
АО «НПО ГОСИ им. С. И. Вавилова»  
А.П.Тарасов  
«17 июня» 2026 г.

### ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

АО «НПО Государственный оптический институт им. С. И. Вавилова»  
на диссертационную работу Сивохиной Марии Михайловны

«Экспериментальные и теоретические исследования валентных и ионно-парных состояний ван-дер-Ваальсовых комплексов и кластеров  $Rg_nICl$ ,  $Rg = He, Ne, Ar, n \geq 1$ », представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности:  
1.3.6 – Оптика.

Несмотря на довольно большое количество научно-технических публикаций разных научно-технических групп в РФ и за рубежом в области материаловедения, касающихся изучения валентных и ионно-парных состояний ван-дер-Ваальсовских комплексов в разных системах, настоящая работа позволяет заполнить пробел в наших знаниях при изучении комплексов и кластеров, содержащих двухатомные молекулы интергалогенов. Работа своевременно поставлена, актуальна и перспективна. Диссертационная работа полностью отвечает направлению 1.3.5.6. Новые оптические материалы, оптические элементы фотоники, интегральная оптика, голография, нанофотоника, метаматериалы и метаповерхности - из Программы фундаментальных и поисковых исследований РФ (Распоряжение Правительства Российской Федерации от 31 декабря 2020 г. № 3684-р, Москва).

Диссертационная работа Сивохиной Марии Михайловны «Экспериментальные и теоретические исследования валентных и ионно-парных состояний ван-дер-Ваальсовых комплексов и кластеров  $Rg_nICl$ ,  $Rg = He, Ne, Ar, n \geq 1$ » выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет» и посвящена исследованию характеристик валентных и ионно-парных (ИП) состояний ван-дер-ваальсовых (ВДВ) комплексов  $RgICl$  ( $Rg = He, Ne, Ar$ ) и малых молекулярных ансамблей  $He_nICl$  ( $n = 2 - 4$ ). Изучены экспериментально и теоретически заселение и распад ВДВ комплексов  $RgICl$  в валентных  $A1, A'2$ , и ИП  $E0^+$ ,  $\beta1, D'2$  состояниях.

#### 1. Актуальность темы исследований.

ВДВ комплексы с атомами инертных газов,  $Rg$ , являются удобными модельными системами для исследования слабых межмолекулярных взаимодействий, механизмов

передачи энергии и связи, наблюдаемой спектроскопической картины с характеристиками поверхности потенциальной энергии (ППЭ): наличием нескольких минимумов, величиной потенциальных барьеров между ними и локализацией волновых функций. Особый интерес в этом ряду вызывают комплексы, содержащие двухатомные молекулы интергалогенов, в частности  $RgICl$ , спектроскопические свойства и динамика которых отличаются от комплексов типа  $RgX_2$ , содержащих гомоядерные двухатомные молекулы,  $X_2$ . ВДВ комплексы в валентных состояниях изучаются уже более 50-ти лет. Несмотря на прогресс в развитии квантово-химических методов, их точность по-прежнему нуждается в экспериментальной проверке и уточнении, особенно для электронно-возбужденных и ИП состояний, остающихся наименее изученными как экспериментально, так и теоретически.

Представленная диссертационная работа носит комплексный характер и выполнена на стыке теоретических и экспериментальных исследований. Эта междисциплинарная работа вносит существенный вклад в развитие молекулярной спектроскопии слабосвязанных систем и способствует решению задачи по описанию динамики многоатомных систем, что делает ее актуальной.

## **2. Содержание диссертационной работы**

Диссертация изложена на 209 страницах и состоит из введения, четырех глав, заключения, списка сокращений и основных условных обозначений, а также списка литературы из 148 наименований.

**Введение** диссертации посвящено описанию целей и задач работы, обоснованию актуальности, новизны и практической ценности работы. Перечислены положения, выносимые на защиту, и описано содержание работы.

**В первой главе** диссертации приводится литературный обзор научно-технических результатов по теме диссертации. Проводится сравнительный анализ доступных экспериментальных и теоретических данных по изучению ВДВ комплексов  $RgICl$  ( $Rg = He, Ne, Ar$ ) в валентных и ИП состояниях, а также кластеров  $He_nICl$ . Подробно рассмотрены геометрия, виды межмолекулярных взаимодействий, энергии связи отдельных электронных состояний в зависимости от геометрии. Рассмотрен процесс распада комплексов, а также приведен обзор экспериментальных исследований по определению времени жизни в возбужденных состояниях.

**Во второй главе** диссертации описан применяемый инструментарий. Показана техника эксперимента и методики анализа экспериментальных данных. Приведен обзор экспериментальных методов исследования ВДВ комплексов. Представлена экспериментальная установка и методики (определения истинных спектров

---

люминесценции; определение коэффициентов ветвления (относительных вероятностей) каналов распада; методы определения энергий связи и анализа временных зависимостей интенсивности люминесценции). Описаны экспериментальные особенности формирования сверхзвуковых молекулярных пучков (СЗВП), а также выбор оптимальных условий для наблюдения люминесценции комплексов и продуктов их распада.

**В третьей главе** описана методика построения ППЭ комплексов  $RgICl$  ( $Rg = He, Ne, Ar$ ) для валентных ( $X/A/A'$ ) и ИП ( $E, \beta, D'$ ) состояний. Описаны методы расчета, которые связывают геометрию комплексов в различных электронных состояниях с наблюдаемыми полосами в спектрах. Энергии связи и волновые функции уровней  $RgICl$  определялись с использованием программного пакета *WavePacket* в среде *Matlab* и программного кода Heidelberg – метода МСТДН (*Multi Configuration Time Dependent Hartree method*).

**В четвертой главе** представлены и обсуждаются экспериментальные и теоретические результаты, сгруппированные по объектам исследования. Приводится анализ экспериментальных и теоретических спектров люминесценции комплексов  $RgICl$  ( $Rg = He, Ne, Ar$ ), определение энергии связи комплексов в валентных и ИП состояниях. Предложена интерпретация полученных результатов по заселению и распаду ВДВ комплексов  $RgICl$  в валентных и ИП состояниях на основании согласованности энергетической картины данных, полученных экспериментально и теоретически. Определены спектроскопические характеристики комплексов  $RgICl$  ( $Rg = He, Ne, Ar$ ) в валентных ( $X0^+, A1, A'2$ ) и ИП ( $E0^+, D'2, \beta1$ ) состояниях. Исследован процесс преддиссоциации кластеров  $He_nICl$ .

**В заключении** подведены итоги и сделаны основные выводы по результатам, полученным в ходе выполнения диссертационной работы.

Диссертация четко структурирована, материал логически выстроен, изложен понятно и доступно. Во Введении обоснована актуальность темы диссертации, четко обозначены цели и задачи работы, описана научная значимость и новизна.

### **3. Оценка новизны и достоверности результатов**

**Новизна** диссертационной работы обусловлена тем, что в представленной работе впервые измерены спектры люминесценции комплексов  $NeICl$  и  $ArICl$  в ИП состояниях, а также продуктов колебательной и электронной преддиссоциации комплексов  $RgICl$ . В работе определены энергии связи комплексов  $RgICl$  в валентных и ИП состояниях, а также коэффициенты ветвления каналов распада комплексов в ИП состояниях. Кроме

---

того, к системам  $RgICl$  адаптирована модель IDIM PT1 и исследованы границы ее применимости. Полученное согласие свидетельствует о перспективности этой модели для применения к другим слабосвязанным системам, в том числе многоатомным.

#### **4. Практическая значимость результатов исследования.**

**Практическая ценность работы** заключается в использовании полученных результатов (экспериментальные спектры возбуждения люминесценции, спектры действия и спектры люминесценции комплексов  $RgICl$ , значения коэффициентов ветвления и энергии связи) в качестве опорных данных для дальнейшего уточнения теоретических моделей, параметризации ППЭ или тестирования расчетных методов применительно к слабосвязанным ВДВ комплексам, включая моделирование спектров.

#### **5. Замечания**

Несмотря на общее положительное заключение о диссертации необходимо сделать несколько замечаний:

1. Диссертация велика по объему. Обзор литературы занимает 43 страницы. Некоторые ее разделы, например, Дипольный момент  $ICl$ , (с. 16-20), Формирование сверхзвукового молекулярного пучка и оценка его параметров (с.61-73), Изотопы и изотопомеры (с.89-92) можно было бы сократить.
2. Представляло бы интерес более детальное обсуждение, насколько полученные закономерности  $RgICl$  можно переносить на другие слабосвязанные комплексы.
3. При анализе преддиссоциации кластеров  $He_nICl$  можно было бы шире обсудить, насколько однозначно установлен именно каскадный механизм распада и какие экспериментальные признаки его подтверждают.
4. В тексте диссертации, зачастую, Латинские символы не наклонены. Например, в параграфе 1.2.2 при описании таблицы 1.2.1 (стр.31 диссертации) используемые Латинские символы не наклонены, как в самом описании таблицы, так и в «теле» таблицы; также в тексте используется русскоязычное написание размерности, а в той же таблице 1.2.1 – англоязычное. Аналогичное наблюдение сделано для всего текста диссертации: в тексте используется русскоязычное написание размерностей, а в графиках, модельных рисунках и таблицах – англоязычное.

#### **6. Заключение**

Диссертационная работа Сивохиной Марии Михайловны «Экспериментальные и теоретические исследования валентных и ионно-парных состояний ван-дер-Ваальсовых комплексов и кластеров  $Rg_nICl$ ,  $Rg = He, Ne, Ar, n \geq 1$ » представляет собой большое

---

экспериментальное и теоретическое исследование, и является завершённым научным трудом, выполненным на высоком методическом уровне. Новизна и достоверность результатов не вызывают сомнений. Результаты, выводы и основные положения, выносимые на защиту, в достаточной степени обоснованы. Автореферат соответствует основному содержанию и выводам диссертации. Публикации соискателя в полной мере отражают исследования, проведенные в диссертационной работе. Указанные замечания не снижают хорошего впечатления от диссертации и не умаляют ее значимости.

Диссертационная работа Сивохиной Марии Михайловны «Экспериментальные и теоретические исследования валентных и ионно-парных состояний ван-дер-Ваальсовых комплексов и кластеров  $Rg_nICl$ ,  $Rg = He, Ne, Ar, n \geq 1$ » была обсуждена на семинаре в АО «НПО ГОИ им.С.И.Вавилова» (НТС, Протокол №4 от 3 июня 2026 г.). В обсуждении участвовали 16 специалистов, в том числе, д.т.н.К.В.Дукельский, д.хим.н. М.Д.Михайлов, д.т.н.А.В.Бурдин и д.физ.-мат.н.Н.В.Каманина. Выражено положительное отношение к работе и дано согласие выступить в качестве ведущей организации по диссертационной работе М.М. Сивохиной.

На основании изложенного считаем, что диссертационная работа Сивохиной М. М. «Экспериментальные и теоретические исследования валентных и ионно-парных состояний ван-дер-Ваальсовых комплексов и кластеров  $Rg_nICl$ ,  $Rg = He, Ne, Ar, n \geq 1$ » отвечает всем требованиям Положения о присуждении ученых степеней в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Физико-техническом институте им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, а соискатель Сивохина Мария Михайловна заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.6 – «Оптика».

Отзыв ведущей организации на диссертационную работу Сивохиной М. М. подготовлен доктором физико-математических наук, начальником отдела «Фотофизика наноструктурированных материалов и устройств» Научного отделения №2, Каманиной Наталией Владимировной (эл.адрес: [nvkamanina@mail.ru](mailto:nvkamanina@mail.ru)). *ЧКет*

Сведения об организации:

Акционерное общество "Научно-производственное объединение Государственный оптический институт им. С.И. Вавилова"

192171, Санкт-Петербург г, ул.Бабушкина, д.36, к.1

Тел.: +7 812 386-73-16

e-mail: [info@goi.ru](mailto:info@goi.ru)

<http://www.goi.ru/>

*Подпись руки Каманиной Натальи Владимировны*  
*ведущей организации*

