

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Путкова Андрея Евгеньевича  
«Электронное строение и структура рентгеновских фотоэлектронных  
спектров диоксидов актиноидов  $AnO_2$  ( $An = Th, Pa, Cm - Lr$ )»,  
представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по  
специальности 1.4.13 – Радиохимия

Результаты исследования электронного строения соединений актиноидов и его связи с различными характеристиками рентгеновских спектров могут быть в принципе использованы на всех этапах получения атомной энергии. Поэтому диссертация Путкова А.Е., посвященная изучению электронного строения и структуры рентгеновских фотоэлектронных спектров (РФЭС) диоксидов актиноидов  $AnO_2$  ( $An = Th, Pa, Cm - Lr$ ), является очень актуальной в контексте нового этапа развития атомной энергетики РФ в рамках концепции замкнутого ядерного цикла.

В работе получены оригинальные результаты. На основе анализа сложной структуры спектров РФЭС остовных электронов кристаллической пленки  $ThO_2$  в работе подтверждается, что структура спектров валентных электронов в основном связана с образованием молекулярных орбиталей. С использованием подхода, развитого ранее научным руководителем диссертанта Ю.А. Тетериним с соавторами, показано, что в  $AnO_2$  ( $An = Pa, Cm - Lr$ ) сложная структура спектров РФЭС в диапазоне энергий связи электронов от 0 до  $\sim 50$  эВ связана с образованием внешних валентных и внутренних валентных молекулярных орбиталей,  $An$  бр- и  $O$  2s-электроны участвуют в химической связи. Построены схемы молекулярных орбиталей  $AnO_2$  ( $An = Pa, Cm - Lr$ ), необходимые для расшифровки рентгеновских спектров, и рассчитаны спектры РФЭС валентных электронов этих диоксидов. Проанализированы общие закономерности формирования электронного строения и особенностей химической связи в диоксидах ряда актиноидов  $AnO_2$  ( $An = Th - Lr$ ) с учетом литературных данных для диоксидов  $AnO_2$  ( $An = Th, U - Am$ ). Найдено, что ионы тория в муратаитовой керамике находятся в устойчивой фазе по отношению к выщелачиванию природными водами.

Отмечу, что результаты, полученные в настоящей работе, важны для развития рентгеновских методов. Особая практическая значимость состоит в создании удобной визуализированной версии компьютерной программы «RDVwin1.0» для проведения расчетов электронного строения соединений любых химических элементов, включая актиноиды, релятивистским методом дискретного варьирования. Ценность полученных результатов и высокий уровень проведенных исследований подтверждается публикацией шести

научных статей в ведущих журналах, 12 тезисов докладов и получением одного свидетельства о государственной регистрации программы для ЭВМ.

По работе можно сделать следующие замечания:

1. При использовании теоретических методов к решению таких сложных задач, как оксиды актиноидов всегда важно использовать разные теоретические подходы для анализа выполненных расчетов, однако в данной работе такого анализа я не увидел.
2. Хотя разработка «оконной» версии программы для расчета электронного строения молекул и кластеров любых элементов, безусловно, очень удобна для пользования при выполнении расчетов, я бы не стал ставить этот пункт на первое место в секции «Основные результаты и выводы».

Высказанные замечания, однако, не влияют на положительную оценку работы.

Анализ текста автореферата позволяет судить о том, что работа Путкова А.Е. удовлетворяет требованиям пунктов 2.1–2.5 «Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В.Ломоносова», предъявляемым к кандидатским диссертациям, а сам автор, Путков Андрей Евгеньевич, заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.13 – Радиохимия.

Титов Анатолий Владимирович,

доктор физико-математических наук,

руководитель Отделения перспективных разработок

и заведующий лабораторией квантовой химии

Федерального государственного бюджетного учреждения

«Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова

Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»,

профессор кафедры квантовой механики физического факультета СПбГУ

*Адрес места работы:*

188300, Ленинградская обл., г. Гатчина, мкр. Орлова роща, д. 1, ФГБУ

«Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова

Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»

<http://www.qchem.pnpi.ru>

*Контактные данные:*

Электронная почта: [titov\\_av@pnpi.nrcki.ru](mailto:titov_av@pnpi.nrcki.ru)

Телефон: +7 (81371) 310–55

Согласен на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Подпись руки Титова А.В. заверяю:

(указывается должность и ФИО лица, заверившего отзыв, и ставится печать организации гербовая, если имеется).