

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

В диссертационной работе А.Е. Путкова методами РФЭС, РСП, EXAFS и КХ (квантовой химии) исследовано электронное и пространственное строение оксидов актиноидов. Эти соединения возникают на различных этапах получения атомной энергии, однако до настоящего времени не было достаточной информации об их электронном строении. Поэтому диссертация Путкова А.Е. представляется актуальной и востребованной.

В работе на основе расчетов методами КХ произведена полная интерпретация спектров РФЭС AnO_2 ($An = Pa, Cm-Lr$) и показано, что в формировании структуры спектров РФЭС в диапазоне энергий связи электронов 0 – ~50 эВ участвуют как внешние, так и внутренние валентные МО (молекулярные орбитали), образованные An $6p$ -и O $2s$ -электронами. Построены схемы МО AnO_2 ($An = Pa, Cm-Lr$), необходимые для расшифровки рентгеновских спектров, и рассчитаны спектры РФЭС валентных электронов этих диоксидов. С учетом ранее известных экспериментальных и рассчитанных методом РДВ спектров диоксидов AnO_2 ($An = Th, U - Am$) проанализированы общие закономерности формирования электронного строения и особенностей химической связи в диоксидах ряда актиноидов AnO_2 ($An = Th - Lr$). Найдено, что ионы тория в муратаитовой керамике находятся в центре куба, вершины которого образуют восемь ионов кислорода (симметрия D_{4h}).

Оценивая работу в целом, следует отметить важность полученных результатов для развития метода РФЭС применительно к соединениям актиноидов. Результаты диссертации отражены в 6 статьях в ведущих журналах, в 12 докладах на конференциях и в одном свидетельстве о государственной регистрации программы для ЭВМ.

В качестве замечаний можно отметить следующее:

1. Межатомное расстояние 3.5 Å в спектре EXAFS отнесено ко второй координационной сфере, но авторы совсем не обсуждают возможность формирования связи металл-металл.
2. Не совсем понятен смысл фразы в автореферате «Таким образом, на основе анализа сложной структуры спектров РФЭС основных

электронов кристаллической пленки ThO₂ подтверждено, что структура спектров валентных электронов главным образом связана с образованием МО». В первой части фразы речь идет об остовных электронах, а во второй – о валентных. Вторая часть фразы тривиальна.

Эти замечания не влияют на высокую оценку работы. Из текста автореферата можно сделать вывод о том 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.

Яржемский Виктор Георгиевич
Доктор физико-математических наук,
ведущий научный сотрудник лаборатории квантовой химии
Института общей и неорганической химии
им. Н.С. Курнакова РАН (ИОНХ РАН)
119991, г. Москва, Ленинский проспект, д. 31
<http://www.igic.ras.ru/>
e-mail: vgyarzh@mail.ru
Телефон: +7 910 405 33 49

«11» мая 2023 г.

Яржемский

М.П.

