

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

Диссертационная работа Путкова Андрея Евгеньевича «Электронное строение и структура рентгеновских фотоэлектронных спектров диоксидов актиноидов AnO_2 ($An = Th, Pa, Cm - Lr$)» вызывает большой фундаментальный и практический интерес и выполнена в рамках направления – анализ фундаментальных закономерностей формирования электронного строения, физико-химических свойств и характера химической связи соединений актиноидов на основе результатов расшифровки сложной структуры рентгеновских спектров и релятивистских расчетов.

В данной работе основное внимание уделено сложной структуре спектров РФЭС валентных электронов и установлению корреляции параметров такой структуры с различными физико-химическими свойствами диоксидов актиноидов AnO_2 ($An = Th, Pa, Cm - Lr$). Получены оригинальные результаты, имеющие высокое фундаментальное значение. В частности, рассчитаны электронное строение, структура спектров РФЭС валентных электронов и построены схемы молекулярных орбиталей (МО) AnO_2 ($An = Pa, Cm - Lr$). В релятивистском приближении установлено участие $An 5f, 6p$ АО в химической связи в AnO_2 ($An = Pa, Cm - Lr$). В работе показано, что сложная структура спектров РФЭС валентных электронов диоксидов актиноидов AnO_2 ($An = Th, Pa, Cm - Lr$) главным образом связана с образованием МО. Установлено, что ионы тория в муратаитовой керамике расположены в центре куба, вершины которого образуют восемь ионов кислорода (симметрия D_{4h}). Кроме того, с учетом литературных данных для AnO_2 ($An = Th, U - Am$) проведен анализ общих закономерностей формирования электронного строения, структуры спектров РФЭС и природы химической связи в ряду диоксидов актиноидов AnO_2 ($An = Th - Lr$).

Несомненно, результаты диссертационной работы имеют высокую практическую значимость. Диссертантом создана «оконная» версия («RDVwin1.0») программы для расчета электронного строения молекул и кластеров релятивистским методом дискретного варьирования. Практическая ценность работы состоит также в развитии метода рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии при изучении соединений актиноидов.

Диссертация представляет собой широкое исследование и достоверность полученных данных не вызывает сомнений. Результаты работы отражены в 6 статьях, опубликованных в международных рецензируемых научных изданиях, индексируемых международными базами данных (RSCI, Web of Science и Scopus), а также в 12 тезисах докладов на российских и международных научных конференциях. Кроме того, получено 1 свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ.

В качестве замечания отметим, что из текста автореферата неясно, имеются ли экспериментальные доказательства образования внешних валентных (ВМО) и внутренних валентных молекулярных орбиталей (ВВМО) в диоксидах актиноидов методами, кроме РФЭС?

Это замечание не умаляет значимости полученных результатов и не влияет на положительную оценку работы. Она является законченным научно-исследовательским трудом, выполненным автором на высоком экспериментальном и теоретическом уровне. Диссертантом получены научные результаты, которые следует квалифицировать как новое крупное научное достижение. Автореферат написан четким и ясным языком, аккуратно оформлен.

Объем выполненных исследований, актуальность темы, новизна и значение полученных в диссертации результатов свидетельствуют о том, что представленная работа соответствует требованиям пп. 2.1–2.5 «Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В.Ломоносова», предъявляемым к кандидатским диссертациям, а

Путков Андрей Евгеньевич заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.13 – Радиохимия.

Тананаев Иван Гундарович

Доктор химических наук

Чл.-корр. РАН

Заместитель генерального директора по научной работе

Федерального исследовательского центра Кольского научного центра

Российской академии наук, и.о. директора ИХТРЭМС КНЦ РАН

184209, Мурманская область, г. Апатиты, ул. Ферсмана, д. 14

www.ksc.ru

e-mail: i.tananaev@ksc.ru

Телефон: +7 929 239 28 60

«10» мая 2023 г.



(подпись)

Подпись *Тананаева И.Г.*
ПО МЕСТУ РАБОТЫ УДОСТОВЕРЯЮ

/ Начальник общего отдела
ФИЦ КНЦ РАН

И.В. Коструев
«10» мая

И.В. КОСТРУЕВ
2023 ГОДА

