

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Новичкова Даниила Андреевича

«Спектроскопия рентгеновского поглощения соединений U и Np: электронное строение и локальная атомная структура», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.13 Радиохимия

Диссертация Новичкова Д.А. посвящена важной практической задаче – разработке комплексного подхода к анализу структуры спектров рентгеновского поглощения соединений U и Np, позволяющего получить качественно новую информацию о локальной кристаллической и электронной структуре рассматриваемых фаз. Актуальность поставленной цели и задач обусловлена практическим применением в ядерном топливном цикле, процессах переработки ОЯТ и экстракционных технологиях. Объектом исследования в работе выбраны оксиды урана и нептуния, входящие в класс актинидов, характеризующихся множественными устойчивыми степенями окисления и сложной электронной структурой. Автором предложено создать лабораторный спектрометр и провести его тестирование для измерения спектров выбранных актинидов, провести теоретический расчет суммарной плотности электронных состояний в них, разработать и апробировать алгоритм определения параметра кристаллического поля для изоструктурных соединений актинидов на основе анализа экспериментальных и расчётных спектров рентгеновского L₃-края поглощения, проанализировать влияние структуры координационного окружения атома нептуния, валентное состояние и выделить признаки, отражающие изменение формы XANES-спектров для анализа многокомпонентных экстракционных систем.

Обоснованность и достоверность заключительных выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертации:

Основные положения диссертации, выносимые на защиту, достаточно полно отражены в научных работах автора, а приведенные заключения и выводы прошли апробацию на специализированных российских и международных научных конференциях. Автором получен достаточный объем экспериментальных данных, а их достоверность подтверждается использованием взаимодополняющих методик изучения локальной структуры и применением разработанного подхода на подобных по кристаллической симметрии материалах AnO₂ (An = Th, U, Np, Pu, Am).

Научная и практическая значимость результатов и основных научных положений диссертации:

Научная значимость результатов и основных научных положений диссертации Новичкова Д.А. заключается в том, что впервые установлены закономерности влияния валентного состояния и локального атомного окружения в смешанно валентных оксидах урана и соединениях нептуния в твердой фазе на форму L₃-края поглощения XANES-спектров, предложен расчет количественного определения параметров кристаллического поля в диоксидах актинидов на основе анализа 6d-состояний с применением теории многократного рассеяния, установлены спектральные особенности, отражающие изменение степени окисления и первой координационной сферы атома Np. Практическая значимость работы заключается в создании лабораторного XANES спектрометра, предназначенного для исследования валентных состояний, электронной структуры и

локального окружения актинидов на L₃-краях поглощения в условиях радиохимической лаборатории и в применении полученных результатов для анализа валентного состояния и координации нептуния в экстракционных системах, а также при интерпретации данных лабораторных и синхротронных XANES-измерений в задачах переработки ядерного топлива и обращения с радиоактивными отходами.

Замечания по работе:

1. В автореферате, в разделе «Глава 3 (Результаты и обсуждения)» на стр. 9 написано «...рассмотрено применение моделирования XANES-спектров к сложным системам нептуния, включая сравнение спектров в твёрдой, водной и органической фазах, анализ влияния координационного окружения...». В части «твёрдой, водной и органических фазах» следовало бы переформулировать так как не существует отдельно водной или органической фазы. Возможно, подразумевалась жидкая фаза в водном и органическом растворе.

В заключении отмечу, что диссертационная работа Новичкова Даниила Андреевича «Спектроскопия рентгеновского поглощения соединений U и Np: электронное строение и локальная атомная структура» является законченной научной-исследовательской работой и соответствует требованиям пунктов 2.1-2.5 «Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова», предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.13 Радиохимия (химические науки).

Пащенко Александр Сергеевич
к.ф.-м.н. по специальности
01.04.07 – физика конденсированного состояния,
доцент,
заведующий лаборатории физики и технологии
полупроводниковых наногетероструктур
для СВЧ-электроники и фотоники
ФГБУН "Федеральный исследовательский центр Южный научный центр
Российской академии наук",

12 марта 2026 г.

/ Пащенко А.С./