

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**

Автореферат диссертации Новичкова Д.А. посвящён актуальной и научно значимой задаче — разработке и применению комплексного подхода к анализу L_3 -краевой структуры спектров рентгеновского поглощения соединений урана и нептуния для установления их электронного строения и локальной атомной структуры.

Актуальность работы обусловлена задачами современной радиохимии, связанными с развитием замкнутого ядерного топливного цикла, переработкой отработавшего ядерного топлива и необходимостью надежного контроля валентных состояний актинидов в твёрдых фазах и растворах. Особую значимость приобретают методы, позволяющие проводить исследования непосредственно в условиях радиохимической лаборатории без необходимости транспортировки образцов на синхротронные источники излучения.

Научная новизна работы заключается, прежде всего, в создании лабораторного XANES-спектрометра для регистрации L_3 -краёв поглощения актинидов и в демонстрации сопоставимости получаемых данных с синхротронными измерениями. В автореферате убедительно показано, что разработанная установка обеспечивает воспроизводимость формы края поглощения, положения белой линии и посткраевых особенностей, что позволяет проводить корректную идентификацию валентных состояний урана и нептуния.

Существенным достоинством работы является сочетание экспериментальных исследований с теоретическим моделированием (FEFF, FDMNES) и анализом плотностей электронных состояний. Установлены закономерности изменения положения L_3 -края при варьировании степени окисления урана и нептуния, показана роль 5f- и 6d-состояний в формировании спектральных особенностей, а также предложен алгоритм количественной оценки параметра кристаллического поля в изоструктурном ряду диоксидов актинидов AnO_2 .

Практическую значимость имеют результаты, полученные при моделировании XANES-спектров нептуния в условиях жидкостной экстракции. Продемонстрирована возможность по форме L_3 -края устанавливать изменение степени окисления и координационного окружения нептуния при переходе из водной в органическую фазу, что представляет интерес для анализа процессов переработки ОЯТ и поведения актинидов в многокомпонентных системах.

Результаты диссертации обладают высокой степенью достоверности, основаны на сопоставлении экспериментальных и расчётных данных, использовании апробированных программных комплексов и согласуются с современными литературными данными. Основные положения работы опубликованы в рецензируемых международных изданиях, включая журналы Q1-Q2, что подтверждает научную значимость полученных результатов.

Вместе с тем по тексту автореферата можно высказать ряд замечаний и вопросов:

1. В автореферате утверждается сопоставимость лабораторных и синхротронных данных, однако количественная оценка пределов применимости разработанного спектрометра (например, по чувствительности к малым концентрациям или к слабым структурным различиям) изложена кратко и могла бы быть представлена более детально.
2. При обсуждении алгоритма определения параметра кристаллического поля в ряду AnO_2 целесообразно было бы более чётко обозначить границы применимости модели идеализированной кубической симметрии и возможные ограничения при переходе к системам с пониженной симметрией.
3. В разделе, посвящённом моделированию экстракционных систем нептуния, представляет интерес вопрос о чувствительности метода XANES к одновременному присутствию нескольких координационных форм в растворе и о пределе их различимости при близких энергетических положениях посткраевых особенностей.

Высказанные замечания не носят принципиального характера и не снижают общей высокой оценки работы.

Считаю, что диссертационная работа Новичкова Даниила Андреевича 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 её автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.13 Радиохимия (химические науки).

Солдатов Александр Владимирович

Ученая степень: доктор физико-математических наук,

Ученое звание: профессор,

Должность: Научный руководитель направления,

Структурное подразделение: Международный исследовательский институт интеллектуальных материалов,

Полное наименование организации: Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Южный федеральный университет»,

«13» марта 2026 г.