

Заключение диссертационного совета МГУ.014.6  
по диссертации на соискание ученой степени кандидата наук  
Решение диссертационного совета от «25» марта 2026 г. № 186

О присуждении Новичкову Даниилу Андреевичу, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата химических наук.

Диссертация «Спектроскопия рентгеновского поглощения соединений U и Np: электронное строение и локальная атомная структура» по специальности 1.4.13 Радиохимия (химические науки) принята к защите диссертационным советом «11» февраля 2026 протокол № 178.

Соискатель Новичков Даниил Андреевич, 1995 года рождения, в 2025 году окончил очную аспирантуру кафедры радиохимии химического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова» по направлению 04.06.01 – «Химические науки».

Соискатель работает в должности младшего научного сотрудника лаборатории дозиметрии и радиоактивности окружающей среды кафедры радиохимии химического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова».

Диссертация выполнена в лаборатории дозиметрии и радиоактивности окружающей среды кафедры радиохимии химического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова».

Научный руководитель - доктор химических наук, академик РАН **Калмыков Степан Николаевич**, заведующий кафедрой радиохимии химического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова».

Официальные оппоненты:

**Зубавичус Ян Витаутасович** – доктор физико-математических наук, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр «Институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук», центр коллективного пользования "Сибирский кольцевой источник фотонов", главный научный сотрудник;

**Гуржий Владислав Владимирович** – доктор геолого-минералогических наук, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования

Санкт-Петербургский государственный университет, Институт наук о Земле, кафедра кристаллографии, профессор;

**Шадрин Андрей Юрьевич** – доктор химических наук, старший научный сотрудник, частное учреждение по обеспечению научного развития атомной отрасли «Наука и инновации», заместитель директора - директор направления радиохимии - дали положительные отзывы на диссертацию.

Выбор официальных оппонентов основывался тем, что **Зубавичус Ян Витаутасович** является признанным специалистом в области спектроскопии рентгеновского поглощения, обладающим высокими компетенциями в области источников синхротронного излучения а так же методов основанных на источниках рентгеновского излучения; **Гуржий Владислав Владимирович** является высококвалифицированный экспертом в области структурных исследований и исследований соединений урана; **Шадрин Андрей Юрьевич** является заслуженным специалистом в области радиохимии и обращении с радиоактивными отходами. Публикации официальных оппонентов близки по своей направленности к теме рассматриваемой диссертационной работы.

Соискатель имеет 12 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации 4 статьи, все опубликованные в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ по специальности 1.4.13 Радиохимия (химические науки):

1. **Novichkov D.**, Laboratory-based X-ray spectrometer for actinide science / Novichkov D., Trigub A., Gerber E., Nevolin I., Romanchuk A., Matveev P., Kalmykov S. // Journal of Synchrotron Radiation. - 2023. - V. 30 - № 6. - pp. 1114–1126. EDN: FAHJVJ (Импакт-фактор 2,4 (JIF), 0,75 п.л./ 70%);
2. **Novichkov D.**, Experimental and Theoretical X-ray Absorption Near Edge Structure Study of  $UO_x$  Systems at the U  $L_3$  Edge / Novichkov D., Poliakova T., Nevolin I., Averin A., Smirnova A., Matveev P., Kalmykov S. // The Journal of Physical Chemistry A. - 2024. - V. 128 - № 50. - pp. 10808–10817. EDN: YOEAEU (Импакт-фактор 2,6 (JIF), 0,62 п.л./ 65%);
3. Krot A., Redox transformations and cation-cation interactions of neptunium in organic solutions / Krot A., Borisova N., **Novichkov D.**, Trigub A., Fedoseev A., Sivolap A., Grigoriev M., Kalle P., Petrov V., Kalmykov S., Matveev P. // Inorganic chemistry frontiers. - 2025. - V. 12 - № 7. - pp. 2759–2771. EDN: DYEAIIF (Импакт-фактор 6,4 (JIF), 0,81 п.л. 30%);
4. **Novichkov D.**, The role of neptunium oxidation states and coordination in shaping XANES spectra at the Np  $L_3$  absorption edge / Novichkov D., Poliakova T., Fedoseev A., Averin A., Matveev P., Mitrofanov A., Kalmykov S. // Physical Chemistry Chemical Physics. – 2026. - V 28. - № 3. - pp. 2711–2724. DOI: 10.1039/D5CP02139A (Импакт-фактор 2,9 (JIF), 0,87 п.л. 70%).

На автореферат поступило 5 дополнительных отзывов, все положительные.

Диссертационный совет отмечает, что представленная диссертационная работа на соискание ученой степени кандидата химических наук является научно-квалификационной работой, в которой на основании выполненных автором исследований решены вопросы, имеющие значение для развития радиохимии, а именно, **впервые**: (1) создан лабораторный

XANES спектрометр, предназначенный для исследования валентных состояний, электронной структуры и локального окружения актинидов на  $L_3$  краях поглощения в условиях радиохимической лаборатории; (2) изучены разные кислородосодержащие соединения урана и нептуния, выявленные на основе анализа экспериментальных данных и теоретических расчетов электронной структуры, которые в результате спектрального моделирования позволили установить характерные спектральные признаки и надежно идентифицировать различные степени окисления; (3) осуществлено теоретическое XANES-моделирование нептуния в условиях жидкостной экстракции с участием полидентантных экстрагентов. Установлены спектральные особенности, отражающие изменение степени окисления и первой координационной сферы атома Np.

**Теоретическая и практическая значимость.** Результаты работы расширяют представления о взаимосвязи электронной структуры, формальной степени окисления и локального координационного окружения урана и нептуния, устанавливаемой на основе анализа  $L_3$  краевой структуры XANES-спектров. Разработанный подход вносит вклад в развитие методов интерпретации спектров рентгеновского поглощения актинидов с учётом структурных факторов. Практическая значимость определяется возможностью применения полученных результатов для анализа валентного состояния и координации нептуния в экстракционных системах. А также интерпретации данных лабораторных XANES-измерений в задачах переработки ядерного топлива и обращения с радиоактивными отходами.

Диссертация представляет собой самостоятельное исследование, обладающее внутренним единством. **Положения, выносимые на защиту**, содержат новые научные результаты:

1. Разработанный методический подход к регистрации XANES-спектров на лабораторном рентгеновском спектрометре обеспечивает измерение  $L_3$ -краев поглощения урана и нептуния с точностью, достаточной для надёжной идентификации валентного состояния, анализа электронной структуры и локального атомного окружения.
2. Установленные сдвиги основного края поглощения, а также особенности посткраевых осцилляций для смешановалентных оксидов урана и соединений нептуния в твердой фазе на  $L_3$  крае поглощения XANES коррелируют с изменением эффективного заряда атома и локальной атомной координацией.
3. В изоструктурном ряду диоксидов актинидов  $AnO_2$  параметр кристаллического поля может быть количественно определён с использованием алгоритма, основанного на теории многократного рассеяния.
4. Переход нептуния из водной в органическую фазу при комплексообразовании с полидентантными экстрагентами сопровождается детектируемым и воспроизводимым

изменением XANES  $L_3$  спектра, которое служит прямым спектроскопическим индикатором изменения формальной степени окисления и перестройки координационного атомного окружения.

**Личный вклад автора** состоит в обзоре литературных данных, подготовке образцов к измерениям, разработке методического подхода для измерения актинидов, проведении экспериментов по спектроскопии рентгеновского поглощения, подборе оптимальных вычислительных алгоритмов к моделированию XANES-спектров, обработке и интерпретации полученных результатов, а также в формулировке научных выводов и обсуждении полученных результатов, написании текстов статей, тезисов конференций. Вклад автора в совместных публикациях основополагающий.

На заседании «25» марта 2026 года диссертационный совет принял решение присудить Новичкову Даниилу Андреевичу ученую степень кандидата химических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 17 человек, из них 5 докторов наук по специальности 1.4.13 Радиохимия (химические науки), участвовавших в заседании, из 23 человек, входящих в состав, проголосовали: за - 17, против - 0, недействительных бюллетеней - 0.

Заместитель председателя диссертационного совета,  
доктор биологических наук, профессор

\_\_\_\_\_ Максимов Г.В.

Ученый секретарь диссертационного совета,  
кандидат химических наук

\_\_\_\_\_ Северин А.В.

«25» марта 2026 г.