

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Федоренко Анастасии Дмитриевны «Рентгеноэлектронное и рентгеноспектральное исследование электронного строения стабильных нитроксильных радикалов и комплексов переходных металлов на их основе» на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

В работе А.Д. Федоренко методами рентгеновской эмиссионной и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопий исследуется широкий ряд стабильных нитроксильных радикалов и комплексов меди с нитроксильными лигандами. В работе впервые проведено систематическое экспериментальное исследование рентгеновских флуоресцентных эмиссионных $K\alpha$ -спектров кислорода нитроксильных радикалов и их диамагнитных аналогов, что позволило получить детальную информацию об атомном парциальном составе и энергетическом положении занятых МО в широком интервале энергий, а также о характере взаимодействия атомов, входящих в состав исследуемых соединений. Следует отметить, что экспериментальные измерения соответствующих «мягких» рентгеновских эмиссионных спектров ($OK\alpha=25,8 \text{ \AA}$) с использованием лабораторного спектрометра представляет самостоятельную сложную экспериментальную задачу.

В работе наряду с РЭС изучены и РФЭ спектры $O1s$, $N1s$, $C1s$, $Cu2p_{3/2,1/2}$ и $Cu3s$ атомов, входящих в состав 15 радикалов и 12 комплексов. В настоящее время РФЭС в основном используется для определения величин интегральной электронной плотности (эффективных зарядов) на атомах в веществе. В работе показано, что для элементов второго периода (O, N, C), структура рентгеновских эмиссионных и рентгеноэлектронных спектров в значительной мере определяется сателлитами переноса заряда, в то время как влияние обменных взаимодействий неспаренного электрона и глубокой внутренней рентгеновской дырки незначительно. Важным элементом работы является учет влияния внутренней рентгеновской дырки на структуру РФЭС спектров $O1s$, $N1s$, $C1s$. Проведенные автором теоретические расчеты рентгеновских спектров в различных приближениях (с учетом и без учета влияния внутренней рентгеновской вакансии) представляют большой интерес для развития теоретических методов интерпретации рентгеновских спектров. Для интерпретации РФЭС $Cu2p_{3/2,1/2}$ - и $Cu3s$ -спектров в работе применяется двухконфигурационная модель, что позволило оценить спиновое состояние комплексов.

Считаю, что диссертационная работа «Рентгеноэлектронное и рентгеноспектральное исследование электронного строения стабильных нитроксильных радикалов и комплексов переходных металлов на их основе» удовлетворяет требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а Федоренко Анастасия Дмитриевна заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Профессор кафедры
"Теоретической и экспериментальной
физики" ФГБОУ ВПО "Дальневосточный
федеральный университет", д.х.н.

В.И. Вовна

В.И. Вовна

30.11.2015

690600, Владивосток, ул. Суханова, 8
тел. 8 (423) 265-24-47
эл. почта: vovna.vi@dvfu.ru

Подпись Вовны В.И.

Заверяю

Начальник отдела кадров
делопроизводства ДВФУ

30 //



Н.О. Рогова