

Отзыв на автореферат

Диссертации Свяжина Артема Дмитриевича

«РЕНТГЕНОВСКИЕ АБСОРБЦИОННЫЕ И ЭМИССИОННЫЕ СПЕКТРЫ И ЛОКАЛЬНАЯ АТОМНАЯ И ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА СПЛАВОВ И СОЕДИНЕНИЙ НА ОСНОВЕ ЖЕЛЕЗА, КОБАЛЬТА И МОЛИБДЕНА»,

представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния

Диссертационная работа Свяжина А.Д. посвящена получению и интерпретации экспериментальных рентгеновских спектров поглощения с высоким разрешением и спектров эмиссии, а также проведению *ab initio* расчетов спектров поглощения и разработке схемы настройки кристаллов-анализаторов спектрометра.

Широкое использование рентгеновской спектроскопии для исследования перспективных соединений молибдена и сплавов Гейслера, несомненно, является актуальным. Особенностью данной работы является проведение не только экспериментальных исследований, но и применение теоретических подходов для установления их электронных и магнитных свойств.

Следует отметить, что достоверность результатов, представленных в диссертации, обеспечивается не только усовершенствованной настройкой спектрометров, согласием полученных экспериментальных спектров с литературными данными, но и использованием хорошо проверенных методов и современных программных пакетов для обработки экспериментальных результатов и теоретических расчетов.

Значимость результатов проведенных исследований для науки и практики определяется тем, что они помогут в дальнейшем правильно трактовать особенности спектров поглощения молибдена с высоким энергетическим разрешением, а также могут служить основой для анализа L_3 спектров других элементов $4d$ ряда. Кроме того, применение $K\alpha_{1,2}$ спектров для оценки магнитных моментов атомов железа существенно упростит подобные исследования по сравнению с $K\beta_{1,3}$ спектрами и расширит возможности применения рентгеновской эмиссионной спектроскопии внутренних уровней.

Найденные в работе связь между локальной структурой и спектральными особенностями в оксидах молибдена, а также корректное теоретическое моделирование L_3 спектров поглощения молибдена в рамках одноэлектронного приближения, не имеют аналогов в литературе, и поэтому научная новизна работы не вызывает сомнения.

При чтении автореферата у меня возник вопрос об оценке перекрытия t_2 и e орбиталей с $2p$ состояниями кислорода. Автор пишет, что в ряде соединений молибдена большее перекрытие

имеет место для t_2 орбиталей, тогда как в MoO_3 – для орбиталей e-типа (стр. 13). На каком основании сделаны эти выводы из материала автореферата не ясно. На мой взгляд, относительного положения спектральных пиков для такого заключения недостаточно. Возможно, у автора были симметричные соображения или на это указывали результаты расчета, однако в автореферате эти моменты не отражены.

Указанный вопрос не снижает хорошего впечатления, которое оставляет диссертация. Работа в целом представляет собой серьёзное научное исследование, выполненное на высоком научно-методическом уровне, направленное на решение важных и практически значимых задач. Полученные результаты обобщают и значительно расширяют существующие представления об электронном строении соединений d - металлов. Используемая терминология, язык и стиль автореферата соответствуют стандартам, принятым в научной литературе.

Считаю, что диссертационная работа «Рентгеновские абсорбционные и эмиссионные спектры и локальная атомная и электронная структура сплавов и соединений на основе железа, кобальта и молибдена» удовлетворяет всем требованиям «Положения о присуждении ученых степеней» утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 № 842 (ред. от 11.09.2021), предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, Артем Дмитриевич Свяжин, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

Рыжков Михаил Владимирович

в.н.с. лаборатории квантовой химии и спектроскопии, доктор химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия, старший научный сотрудник

ФГБУН Институт химии твердого тела Уральского Отделения Российской академии наук (ИХТТ УрО РАН), 620990, ГСП, Российская Федерация, г.Екатеринбург, ул. Первомайская 91, Телефон: (343)3623554 E-mail:ryz@ihim.uran.ru

21 сентября 2023 г.

Подпись М.В.Рыжкова заверяю:

Ученый секретарь ИХТТ УрО РАН, к.х.н.

Е.А. Богданова

Я, Рыжков Михаил Владимирович, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета и их дальнейшую обработку.

Сотрием отпечатки 21.09.2023г.
А.С. / Свяжин А.Д.