

Сведения о ведущей организации

по диссертационной работе Хоссейнпура Ханмири Мохаммада
«Исследование метамиктных минералов как природных аналогов матриц для
иммобилизации актиноидов», представленной на соискание ученой степени
кандидата химических наук по специальности 02.00.14 – «Радиохимия»

Полное наименование организации в соответствии с уставом	Федеральное государственное бюджетное учреждение «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»
Сокращенное наименование организации в соответствии с уставом	НИЦ «Курчатовский институт» –ПИЯФ
Ведомственная принадлежность	НИЦ «Курчатовский институт»
Почтовый индекс, адрес организации	Россия, 188300, Ленинградская обл., г. Гатчина, мкр. Орлова роща, д. 1, НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
Веб-сайт	www.pnpi.nrcki.ru
Телефон	+7(81371) 460-25, +7(81371) 460-47
Факс	+7(81371) 460-47, +7(81371) 360-25
Адрес электронной почты	dir@pnpi.nrcki.ru
Список основных публикаций работников структурного подразделения, в котором подготовлен отзыв, по теме диссертации в рецензируемых научных изданиях за последние 5 лет (не более 15 публикаций):	
1. Семенов С.Г., Бедрина М.Е., Макарова М.В., Титов А.В., "Квантово-химическое исследование эндокомплекса Fe@C60", Журнал структурной химии. 2017. Т. 58. № 3. С. 475-479.	
2. Yuriy V. Lomachuk, Daniil A. Maltsev, Yuriy A. Demidov, Nikolay N. Mosyagin, Edward Fomin, Roman V. Bogdanov, Andrei V. Zaitsevskii, and Anatoly V. Titov, "Calculations of chemical shifts of x-ray emission spectra and effective states of Nb atom in the Niobates", Nonlinear Phenomena in Complex Systems, 20 , pp. 170 - 176 (2017).	
3. V.M. Shakhova, Yu.V. Lomachuk, Yu.A. Demidov, L.V. Skripnikov, N.S. Mosyagin, A.V. Zaitsevskii, A.V. Titov, "Chemical shifts of X-ray emission spectra and effective states of ytterbium in fluorides: embedded cluster modeling of YbF ₂ and YbF ₃ crystals", Rad. Applic., 3, 2, 3, 169–174 (2017).	

4. Semenov, S.G.; Bedrina, M.E.; Titov, A.V., "Квантовохимическое исследование бис- и тетрааксифталоцианинатов лютеция и иттербия", Журнал общей химии, **86(11)**, 1873-1877 (November 2016).
5. A.V. Zaitsevskii, L.V. Skripnikov, A.V. Titov, "Chemical bonding and effective atomic states of actinides in higher oxide molecules" Mendeleev Communications, **26 (4)**, 307-308 (July 2016).
6. Semenov, S.G.; Bedrina, M.E.; Titov, A.V., "Quantum-chemical study of ytterbium fluorides and of complex $F_2YbF_2CeF_2$ ", Russ. J. Gen. Chem., **86(6)**, 1215–1220 (June 2016).
7. Semenov, S.G.; Bedrina, M. E.; Egorov, N.V.; Titov, A.V., "Quantum-chemical study of lutetium, ytterbium, and gadolinium phthalocyaninates $PcLnCl$ ", Russ. J. Gen. Chem., **86(5)**, 1095-1101 (May 2016).
8. N.S. Mosyagin, A.V. Zaitsevskii, L.V. Skripnikov, A.V. Titov, "Generalized relativistic effective core potentials for actinides", Int. J. Quant. Chem., **116(4)**, 301-315 (February 15, 2016).
9. В.М. Шахова, С.Г. Семенов, А.В. Титов, "Квантовохимическая оценка релаксации равновесной структуры при радиохимических реакциях йодсодержащих молекул и ионов", Журнал общей химии, Т.85. Вып. 10, 1630-1636 (November 2015).
10. A. Zaitsevskii, "Plutonium and transplutonium element trioxides: molecular structures, chemical bonding, isomers", Phys. Chem. Chem. Phys., **17**, 24831 - 24836 (20 August 2015).
11. Anatoly V. Titov, Yuriy V. Lomachuk, Leonid V. Skripnikov, "Concept of effective states of atoms in compounds to describe properties determined by the densities of valence electrons in atomic cores", Phys. Rev. A **90**, 052522 (2014).
12. Andrei Zaitsevskii and W.H. Eugen Schwarz, "Structures and stability of $AnO(4)$ isomers, $An = Pu, Am, and Cm$: a relativistic density functional study", Physical Chemistry Chemical Physics, **16 (19)**, 8997–9001 (2014).
13. A. Zaitsevskii, "Molecular anions of uranium fluorides and oxides: First principle based relativistic calculations", Radiochemistry, **55**, 353–356 (2013).
14. R.V. Bogdanov, M.I. Skriplev, A.A. Petrunin, A.V. Titov, "The thermochemistry of uranium and cerium in native britholite", Journal of Nuclear Materials, **440(1–3)**, 440–444 (2013).
15. A. Zaitsevskii, N.S. Mosyagin, A.V. Titov, Yu.M. Kiselev, "Relativistic density functional theory modeling of plutonium and americium higher oxide molecules", J. Chem. Phys., **139**, 034307 (2013).

Ученый секретарь
НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ
кандидат физико-математических наук



С.И. Воробьев

«18» мая 2018 г.