

ОТЗЫВ официального оппонента
на диссертацию на соискание ученой степени
кандидата химических наук Смирновой Анастасии Андреевны
на тему: «Моделирование комплексообразования и радиолиза
экстрагентов для переработки отработавшего ядерного топлива на
основе концепции локальной реакционной способности»
по специальности 1.4.13 – «Радиохимия»

Диссертационная работа Смирновой Анастасии Андреевны посвящена теоретическому и экспериментальному исследованию радиолитической устойчивости и механизмов связывания с f-элементами органических лигандов, используемых при переработке отработавшего ядерного топлива и фракционировании высокоактивных отходов.

Актуальность выбранной темы связана с исключительной важностью замыкания ядерно-топливного цикла путем переработки отработавшего ядерного топлива и фракционирования высокоактивных отходов - необходимыми условиями обеспечения безопасности и высокой эффективности ядерной энергетики. Полученные диссертантом **новые** результаты имеют как **прикладную** значимость для разработки новых экстрагентов для разделения актиноидов и лантаноидов, так и **теоретическую значимость**, связанную с разработкой новых теоретических моделей на основе квантово-химических вычислений для прогнозирования свойств новых лигандов.

Для решения поставленных задач диссертантом был проведен комплекс экспериментальных исследований перспективных экстрагентов и теоретическое моделирование их свойств. Для построения адекватной модели был получен набор экспериментальных данных по гамма-облучению лигандов и проанализированы процессы, происходящие при радиолизе. Современные физико-химические методы анализа, включающие в себя разновидности рентгеноабсорбционной спектроскопии (XANES, EXAFS),

осуществлённые на источниках синхротронного излучения, позволили грамотно подобрать необходимый расчетный метод. Такой подход, безусловно, обоснован, а диссертант демонстрирует глубокое понимание физико-химических основ используемых методов и границы применимости разработанных методов.

Полученные диссертантом результаты изложены достаточно четко и последовательно, сопровождаются грамотно подобранными иллюстративными материалами. Научные положения, выносимые на защиту, убедительно обоснованы. Сформулированные выводы логичным образом вытекают из представленного материала, их **достоверность и высокая научная значимость** не вызывают сомнений.

Диссертация включает в себя введение, литературный обзор, экспериментальную часть, главу, посвященную обсуждению полученных результатов, выводов, список литературы и приложения. Диссертация изложена на 130 страницах, включая 15 таблиц и 64 рисунка, список литературы содержит 178 наименований. Содержание автореферата соответствует диссертации.

Диссертационная работа Смирновой А. А. прошла необходимую апробацию в научном сообществе. Всего по теме диссертации опубликовано 4 статьи, а также сделано 11 докладов на конференциях.

По диссертации и автореферату имеется несколько замечаний.

- 1) При изучении радиолиза органических соединений диссертант использовала ацетонитрил - водорастворимый растворитель, редко используемый в радиохимии. В первую очередь нужно было изучить радиолиз этого растворителя и идентифицировать продукты его радиолиза. Вместо этого был исследован радиолиз ацетилацетона, но в перечне основных результатов работы (с. 112 диссертации и с. 21 автореферата) упомянут и ацетонитрил и ацетилацетон.

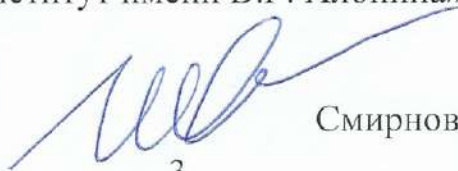
- 2) В работе получены оригинальные данные по константам радиолиза и радиационно-химическому выходу ряда известных экстрагентов и комплексонов. Почему не проведено сравнение полученных данных с литературными данными по радиолизу этих же экстрагентов?
- 3) В табл. 6 диссертации (с. 82) приведены расчетные значения двойного дескриптора для молекулы ТБФ (усреднение по 100 конформациям) и эти значения для трех идентичных эфирных атомов кислорода ТБФ заметно различаются. С чем это может быть связано?
- 4) В названиях органических экстрагентов и комплексонов (табл. 2 диссертации и Приложение к автореферату) очень много ошибок.

Вместе с тем, указанные замечания не умаляют значимости диссертационного исследования. Диссертация отвечает требованиям, установленным Московским государственным университетом имени М.В.Ломоносова к работам подобного рода. Содержание диссертации соответствует паспорту специальности 1.4.13 – «Радиохимия» (по химическим наукам), а также критериям, определенным п.п. 2.1-2.5 Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В.Ломоносова, а также оформлена, согласно приложениям № 5, 6 Положения о диссертационном совете Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова.

Таким образом, соискатель Смирнова Анастасия Андреевна заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.13 – «Радиохимия».

Официальный оппонент:

доктор химических наук, ученый секретарь-начальник отдела ученого секретаря АО «Радиевый институт имени В.Г. Хлопина»



Смирнов Игорь Валентинович

Контактные данные:

тел.: +7 (812) 2975667, e-mail: igor_smirnov@khlopin.ru

Специальность, по которой официальным оппонентом защищена
диссертация: 02.00.14 – Радиохимия

Адрес основного места работы:

194021, Россия, г. Санкт-Петербург, 2-ой Муринский пр., 28

Акционерное общество «Радиевый институт имени В.Г. Хлопина»

Телефон: (812) 2975641

e-mail: radium@khlopin.ru

Подпись сотрудника АО «Радиевый институт имени В.Г. Хлопина»
Смирнова Игоря Валентиновича удостоверяю:



Смирнов И. В.