

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Смирновой Анастасии Андреевой «Моделирование комплексобразования и радиоллиза экстрагентов для переработки отработавшего ядерного топлива на основе концепции локальной реакционной способности», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.13 – радиохимия

Диссертационная работа А.А. Смирновой посвящена разработке единого подхода к прогнозированию радиолитической устойчивости экстрагентов и их эффективности в процессе переработки ОЯТ на основе квантово-химических расчетов. **Актуальность** работы связана с тем, что на сегодняшний день для поиска эффективных экстрагентов необходимо синтезировать большое количество экстрагента, проверить его экстракционные свойства и затем его радиолитическую стабильность. Данная процедура является долгой и ресурсозатратной. Задачей данной работы является разработка модели для прогнозирования экстрагента, обладающей необходимыми качествами. **Практическая значимость** подтверждена автором экспериментально на примере нового комплекса лиганда 9-(пирролидин-1-илкарбонил)-1,10-фенантролин-2-ила с амидными пирролидиновыми заместителями в положениях 2,9 и нитрильными группами в положениях 4,7 с нитратом европия (III).

Научная новизна работы заключается в новом методе количественной оценки радиолитической устойчивости соединений только на основе структурной формулы. Впервые показана важность учета генерации конформаций и усреднения электронных свойств молекул по всем конформациям для моделирования их радиолитической стабильности. С помощью квантово-химических расчетов впервые объяснено влияние заместителей в фенантролиновой структуре на эффективность и селективность их связывания с катионами f-элементов за счет изменения подвижности заряда ароматической системы. Впервые показана важность учета стерической доступности атомов в молекулах для объяснения и определения продуктов радиоллиза, в том числе дано объяснение устойчивости к гамма-облучению дигликольамидов при их метилировании.

Достоинствами данной работы является уникальный новый метод количественной оценки радиолитической стабильности соединений на основе концепции локальной реакционной способности, что позволяет сравнивать устойчивость к радиоллизу органических молекул и определять основные продукты радиоллиза. Предложенные подходы и разработанные модели позволяют оценить перспективность использования лиганда в технологическом процессе переработки ОЯТ на этапе разделения лантаноидов, америция и кюрия за разумное время и без необходимости использования суперкомпьютера.

По автореферату диссертации имеется ряд вопросов и замечаний, которые не уменьшают общего положительного мнения о работе:

1. Определение концентрации в лигандах при облучении проводили только одним методом – ВЭЖХ-МС. (стр.7 автореферата)
2. Устойчивость образцов проверяли только при гамма-радиолизе, другие формы облучения не рассматривали. (стр.7 автореферата)

Настоящая работа по актуальности, постановке цели и полученным результатам исследований полностью удовлетворяет требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, Смирнова Анастасия Андреевна, заслуживает присуждения ей искомой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.13 – радиохимия.

Старший преподаватель кафедры
технологии редких элементов и
наноматериалов на их основе, к.х.н. по
специальности «Радиохимия»

Н.Д. Голецкий

Контактная информация:

Тел. (921) 3079780

e-mail: koljan0310@yandex.ru

Адрес: 190013, Россия, Санкт-Петербург, Московский проспект, дом 24-26/49
литера А

Подпись старшего преподавателя кафедры технологии редких элементов и
наноматериалов на их основе, к.х.н. Н.Д. Голецкого заверяю

*Юлия Владимировна
Смирнова*

