

Заключение диссертационного совета МГУ.014.6
по диссертации на соискание ученой степени кандидата наук
Решение диссертационного совета от «21» декабря 2022 г. № 76

О присуждении **Смирновой Анастасии Андреевны**, гражданке Российской Федерации ученой степени кандидата химических наук.

Диссертация «Моделирование комплексообразования и радиолиза экстрагентов для переработки отработавшего ядерного топлива на основе концепции локальной реакционной способности» по специальности 1.4.13 - Радиохимия принята к защите диссертационным советом 9 ноября 2022 года, протокол № 68.

Соискатель Смирнова Анастасия Андреевна, 1995 года рождения, в 2019 году окончила специалитет химического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения «Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова». На данный момент Смирнова Анастасия Андреевна является аспиранткой 4 года обучения Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова» на кафедре радиохимии химического факультета по направлению 04.06.01 – «Химические науки», специальность 1.4.13 – «Радиохимия».

Соискатель работает на химическом факультете Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова» с 2022 года в должности лаборанта.

Диссертация выполнена в лаборатории Дозиметрии и радиоактивности окружающей среды кафедры радиохимии химического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова».

Научный руководитель - кандидат химических наук **Митрофанов Артем Александрович**, старший научный сотрудник химического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова».

Официальные оппоненты:

Зубавичус Ян Витаутасович, доктор физико-математических наук, заместитель директора по научной работе центра коллективного пользования «Сибирский кольцевой источник фотонов» Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Федеральный исследовательский центр Институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук»;

Смирнов Игорь Валентинович доктор химических наук, старший научный сотрудник/доцент, ученый секретарь-начальник отдела ученого секретаря Акционерного общества «Радиевый институт имени В.Г. Хлопина»;

Лысенко Константин Александрович, доктор химических наук, профессор РАН, заведующий лабораторией строения конденсированных систем кафедры физической химии химического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова» -

дали положительные отзывы на диссертацию.

Соискатель имеет 17 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации 15 работ, из

них 4 статьи, опубликованных, в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ по специальности «1.4.13» - Радиохимия.

1. **Smirnova, A.** A search of a quantitative quantum-chemical approach for radiolytic stability prediction / A. Smirnova, A. Mitrofanov, P. Matveev, T. Baygildiev, V. Petrov // *Phys. Chem. Chem. Phys.* – 2020. – V.22. – P. 14992-14997 (WoS, Scopus, Q1, IF 3.95, 80%).
2. Egorova, B. V. Investigating the Bismuth Complexes with Benzoazacrown Tri- and Tetra-Acetates / B. V. Egorova, E. V. Matazova, G. Yu. Aleshin, A. D. Zubenko, A. V. Pashanova, E. A. Konopkina, A. A. Mitrofanov, **A. A. Smirnova**, A. L. Trigub, V. A. Karnoukhova, O. A. Fedorova, S. N. Kalmykov // *Eur. J. Inorg. Chem.* – 2021. – V.33. – P. 3344-3354 (WoS, Scopus, Q2, IF 2.55, 30%).
3. Matveev, P. I. Testing a simple approach for theoretical evaluation of radiolysis products in extraction systems. A case of N,O-donor ligands for Am/Eu separation / P. I. Matveev, A. A. Mitrofanov, V. G. Petrov, S. S. Zhokhov, **A. A. Smirnova**, Yu. A. Ustynyuk, S. N. Kalmykov // *RSC advances.* – 2017. – V.7. – P.55441-55449 (WoS, Scopus, Q1, IF 4.04, 40%).
4. Borisova, N. Screening of the Structure of Americium Extractants Based on a 2,2'-Bipyridyl Scaffold: a Simple Way to a N₂O₂-Tetradentate Ligands Library for Rational Design of An/Ln Extractants / N. E. Borisova, A. V. Ivanov, P. I. Matveev, **A. A. Smirnova**, E. V. Belova, S. N. Kalmykov, B. F. Myasoedov // *Chemistry Select.* – 2018. – V.3. – P.1983–1989 (WoS, Scopus, Q2, 2.31, 30%).

На диссертацию и автореферат поступило 3 дополнительных отзыва, все положительные.

Выбор официальных оппонентов обосновывался тем, что Зубавичус Ян Витаутасович обладает высокой компетенцией в области исследований с применением синхротронных методов анализа, в том числе соединений, содержащих актиноиды и лантаноиды; Смирнов Игорь Валентинович является специалистом в области радиохимии ядерно-топливного цикла и химии актинидов, Лысенко Константин Александрович – специалист в области квантово-химических расчетов и вычислительной химии.

Диссертационный совет отмечает, что представленная диссертация «Моделирование комплексообразования и радиолиза экстрагентов для переработки отработавшего ядерного топлива на основе концепции локальной реакционной способности» на соискание ученой степени кандидата химических наук является научно-квалификационной работой, в которой на основании выполненных автором исследований изложены новые научно обоснованные подходы к изучению вопросов радиолитической устойчивости и комплексообразования, на основании выполненных автором исследований решены вопросы, имеющие значение для развития радиохимии: 1) Установлено, что эффективность связывания экстрагентов на основе 1,10-фенантролина с катионами трехвалентных f-элементов зависит от заместителей в положениях 4,7 и 2,9 ароматической структуры и определяется изменением подвижности заряда в ароматической системе и на ионе металла. 2) Показано, что учет конформационного вклада критически важен для определения локальной реакционной способности молекул. 3) Разработан новый метод количественной оценки радиолитической стабильности соединений на основе концепции локальной реакционной способности позволяет сравнивать устойчивость к радиолизу органических молекул и определять основные продукты радиолиза. 4) Предложен подход к дизайну органических лигандов для радиохимической технологии на основе

концепции локальной реакционной способности, который позволяет прогнозировать радиолитическую устойчивость, изменение ковалентности связей и устойчивость комплексов лигандов с катионами f-элементов.

Диссертация «Моделирование комплексообразования и радиолиза экстрагентов для переработки отработавшего ядерного топлива на основе концепции локальной реакционной способности» представляет собой самостоятельное законченное исследование, обладающее внутренним единством. Положения, выносимые на защиту, содержат новые научные результаты и свидетельствуют о личном вкладе автора в науку, а именно: 1) Эффективность связывания экстрагентов на основе 1,10-фенантролина с катионами трехвалентных f-элементов зависит от заместителей в положениях 4,7 и 2,9 ароматической структуры и определяется изменением подвижности заряда в ароматической системе и на ионе металла. 2) Учет конформационного вклада критически важен для определения локальной реакционной способности молекул. 3) Разработанный метод количественной оценки радиолитической стабильности соединений на основе концепции локальной реакционной способности позволяет сравнивать устойчивость к радиолизу органических молекул и определять основные продукты радиолиза. 4) Предложенный подход к дизайну органических лигандов для радиохимической технологии на основе концепции локальной реакционной способности позволяет прогнозировать радиолитическую устойчивость, изменение ковалентности связей и устойчивость комплексов лигандов с катионами f-элементов.

Личный вклад автора заключается в следующем: автор принимала активное участие в постановке научных задач, синтезе комплексов органических лигандов с f-элементами, проведении экспериментов, подборе соответствующих вычислительных подходов, проведении теоретических расчетов, написании программного кода для обработки больших данных, обработке полученных результатов, разработке представляемых теоретических моделей и представлении их в печати. По теме диссертации было опубликовано четыре работы, во всех опубликованных работах вклад автора является определяющим.

На заседании «21» декабря 2022 года диссертационный совет принял решение присудить Смирновой Анастасии Андреевне ученую степень кандидата химических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 16 человек, из них 5 докторов наук по специальности 1.4.13 – «Радиохимия» (химические науки), участвовавших в заседании, из 23 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за - 16, против - 0, недействительных бюллетеней- 0.

Зам. председателя диссертационного совета,
доктор физико-математических наук

И.А. Пресняков

Ученый секретарь
диссертационного совета, к.х.н.

А.В. Северин

21 декабря 2022 года