**Радиолитическая деградация экстрагентов на основе дигликольамидов для разделения Am(III) и Eu(III): теория и эксперимент**

***Яблонский М.Д. 1***

*Студент, 6 курс специалитета*

*1Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,*

*химический факультет, Москва, Россия*

*E-mail: maks618@mail.ru*

Жидкость-жидкостная экстракция является одним из основных методов предобработки отработавшего ядерного топлива (ОЯТ), накопление которого является ключевой проблемой ядерной энергетики. Одним из важнейших требований, предъявляемых к экстракционным системам, в частности к органическим экстрагентам, является радиационная устойчивость. Экспериментальная проверка данного свойства связана с дозовой нагрузкой на персонал, что делает перспективным направление расчетного предсказывания данных параметров методами квантовой химии.

Вследствие малых концентраций экстрагента процесс радиолиза можно рассматривать как взаимодействие с активными частицами растворителя, образованными под действием ионизирующего излучения. Основным методом расчета реакционной способности является теория граничных орбиталей Фукуи в совокупности с учетом стерической доступности уязвимых фрагментов. Условием применимости данного подхода является соответствие рассматриваемых конформаций экстрагента реальным. Для задачи конформационного поиска был адаптирован метаэвристический алгоритм искусственной пчелиной колонии.

Верификация обновленного подхода на экспериментальных данных в данной работе была проведена для дигликольамидов ТОДГА и KRC-107 (Рис. 1.). Растворы данных лигандов в ацетонитриле концентрации 10-3 М подвергли облучению до поглощенной дозы 200 кГр. Изменение концентрации лигандов и продукты радиолиза определяли методом ВЭЖХ-МС. В качестве сравнения выступали растворы, находящиеся в идентичных условиях без воздействия излучения. Для изучения экстракционных свойств при радиолизе растворы лигандов в Ф3 (3-нитробензотрифторид) концентрации 1.1·10-1 М подвергались облучению до поглощенной дозы 65 кГр, после чего проводилась экстракция Am(III) и Eu(III) из раствора 3М HNO3.

 

Рис. 1. Структурные формулы ТОДГА и KRC-107

Теоретически наиболее уязвимые положения в молекулах сравнивали с экспериментальными продуктами радиолиза. Количественную характеристику реакционной способности молекул сравнивали с их константами радиолиза. Примененный подход показал высокую корреляцию с экспериментальными данными. Показана зависимость коэффициентов распределения и разделения для Am и Eu от поглощенной дозы.