**Определение радиолитической стабильности конформационно-подвижных экстрагентов для переработки ОЯТ на примере водорастворимых дигликольамидов c помощью DFT расчетов**

***Яблонский М.Д.***

*Студент, 4 курс специалитета*

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

*химический факультет, Москва, Россия*

*E-mail: maks618@mail.ru*

Ключевой проблемой современной ядерной энергетики является накопление большого количества отработавшего ядерного топлива (ОЯТ). Захоронение ОЯТ несет в себе необходимость сооружать защитные многобарьерные системы, способные сохранять защитные свойства на протяжении 105–106 лет. Химическая предобработка ОЯТ перед захораниванием с отделением минорных актиноидов и прочих продуктов распада позволяет сократить время хранения на 2–3 порядка. Одним из основных методом предобработки ОЯТ является жидкость-жидкостная экстракция.

К экстракционным системам, в частности к экстрагентам, роль которых играют органические соединения, предъявляется большой список требований, одним из важнейших является радиолитическая устойчивость. Экспериментальная проверка веществ на соответствие этим требованиям связана с дозовой нагрузкой на персонал, что делает перспективным направление расчетного предсказывания данных параметров методами квантовой химии.

Одним из перспективных семейств лигандов для экстракции являются дигликольамиды. Молекулы, содержащие 1–2 атома углерода в боковой цепи (TMDGA, TEDGA, MeTEDGA, Me2TEDGA) являются водорастворимыми, благодаря чему в экстракции они используются для регенерации экстрагента.

Вследствие относительно малой концентрации лиганда в экстракционных системах, в основном молекулы растворителя являются источником заряженных частиц и радикалов, впоследствии атакующих молекулы лиганда. Одной из основных концепций описания устойчивости молекул к радиолизу считается концепция локальной реакционной способности — способности каждого атома молекулы к химическим превращениям под действием частиц различных типов. В реальных системах органическая молекула находится во множестве конформаций, отвечающих глобальному и различным низколежащим локальным минимумам и имеющих различную стерическую доступность активных центров. Исходя из этого, мы разработали код генерации конформаций с отбором наиболее низколежащих по энергии и конформационно-различных, объединив его с учетом реакционной способности и стерической доступности через теорию функционала плотности DFT. Результирующий подход объяснил продукты радиолиза дигликольамидных лигандов и с высокой точностью описал экспериментальные значения константы радиолиза.

*Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова.*