**Установление координации актинил-катионов с полидентантными N,O-донорными лигандами**

***Гуторова С.В.1***

*Аспирант, 3 год обучения*

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

*химический факультет, Москва, Россия*

*E-mail: svetlana.gutorova@chemistry.msu.ru*

Обращение с отработавшим ядерным топливом – сложная химико-технологическая задача. Масштабно применяемым процессом переработки ОЯТ является PUREX-процесс, выделить и разделить уран и плутоний, который может быть в дальнейшем направлен на получение смешенного уран-плутониевого топлива (МОКС-топлива). Однако, PUREX-процесс имеет ряд недостатков, в связи с чем разрабатываются различные альтернативные подходы для переработки ОЯТ. Понимание особенностей комплексообразования ионов актинидов с выбранными лигандами в растворе необходимо для установления детального механизма экстракции и разработки «идеального» экстрагента. N,O-донорные лиганды на основе фенантролина **L1** и **L2** и пиридина **L3** (Рис. 1) являются перспективными экстрагентами для группового извлечения актинидов из растворов ОЯТ. Ранее было показано, что такие экстрагенты в условиях избытка лиганда над металлом образуют комплексы со стехиометрией 1:1 со структурой ионной пары {[UO2**L**(NO3)]+(NO3)-} и Th**L**(NO3)4. При этом в условиях избытка металла над лигандом показано, что уранил-катион с тетрадентаными лигандами **L1** образует комплексы состава {[UO2**L1**NO3]+[UO2(NO3)3]-}. Целью данной работы было установить взаимосвязь «структура экстрагента – структура комплекса с f-элементом – экстракционные свойства» для три- и тетрадентантных лигандов на основе пиридина и фенантролина с U(VI) и Th(IV).

 

Рис. 1. Структурные формулы изучаемых в работе лигандов на основе фенантролина (L1, L2) и пиридина (L3).

В первую очередь построили изотермы насыщения по U(VI) и Th(IV) для **L2** и **L3** и показали, что только для пары U(VI)-L2 наблюдается образование комплексов со стехиометрий U:L 2:1 в органической фазе. Th(IV) экстрагируется три- и тетра-дентантными лигандами по сольватному механизму с образованием комплексов 1:1.

Далее на примере тетрадентаного лиганда **L1** исследовали влияние полярности растворителя на экстракцию макроколичеств U(VI), а также возможность совместной экстракции U(VI) и Th(IV). Показали, что в растворителях разной полярности: октанол, хлороформ, метанитробензотрифторид и нитробензол – образуются комплексы состава {[UO2**L1**NO3]+[UO2(NO3)3]-}. Кроме того, показали возможность совместной экстракции U(VI) и Th(IV) с образованием комплексов состава {[UO2**L1**NO3]+[Th(NO3)5]-}.

Строение комплексных соединений подтверждали совокупностью спектроскопических методов (УФ-видимая спектрофотометрия, рентгеноструктурный анализ, спектроскопия рентгеновского поглощения, Рамановская спектроскопия) и квантово-химическими расчетами методом теории функционала электронной плотности.

*Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ грант No23-73-30006.*