

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Карпова Кирилла Викторовича

«De novo дизайн комплексообразователей трехвалентных f-элементов»,  
представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по  
специальности 1.4.13 Радиохимия

**Актуальность.** Экстракционное разделение f-элементов представляет собой ресурсоемкую задачу. Повышение эффективности регентов в данном процессе позволит сделать ядерное топливо более доступным, а технологии его обогащения более экологичными. При этом поиск оптимальных экстракционных агентов представляет собой трудоемкий и долгий исследовательский процесс. Синтез каждого нового органического соединения — отдельное исследование. Высокопроизводительный скрининг требует высокой степени автоматизации, что трудно осуществить в случае поиска среди различных классов органических соединений, условия получения которых сильно разнятся. Вычислительные методы компьютерной химии на основе автоматизации представлений радиохимии представляет выгодное дополнение к эксперименту, позволяющее многократно ускорить наиболее значимые открытия.

**Научная новизна.** Проведенный впервые количественный анализ позволил оценить влияние характеристик экстрагента на эффективность и селективность экстракции, получить уникальную модель структура-свойство для константы устойчивости металл-лиганд, и создать наиболее эффективную генеративную модель для дизайна перспективных комплексообразователей f-элементов.

**Практическая значимость.** Созданная база данных комплексообразователей трехвалентных f-элементов с экспериментальными значениями констант устойчивости комплексов станет важным источником информации (справочником) для радиохимиков и технологов, а также послужит тестовым набором данных для дальнейшего развития методов машинного обучения в приложении к радиохимии. Достигнутые точности моделей для прогнозирования условий экстракции и константы устойчивости комплексов с f-элементами в настоящий момент представляют собой бенчмарками в компьютерной радиохимии. Генеративные модели комплексообразователей f-элементов в настоящий момент очень редки, и создание каждой новой модели представляет огромный шаг в развитии данной области знаний.

**Содержание и структура автореферата.** Автореферат содержит все необходимые разделы, достаточно подробен и содержателен. Обоснование цели и задач опирается на научно-технологический запрос, литературный обзор, богатый опыт исследований организации, на базе которой выполнена работа. Все основные результаты представлены, в достаточной мере развернуты и проиллюстрированы. Сделаны состоятельные выводы, обоснованные полученными результатами и современными представлениями радиохимии и компьютерной химии. Примечательно, что рассмотренные предложенные модели дают среднеквадратичную оценку логарифма константы устойчивости в несколько раз меньшую по сравнению предыдущими моделями других авторов. По результатам исследований опубликованы четыре научные статьи в авторитетных изданиях, что говорит о высоком уровне и большом объеме проделанной работы.

Единственный вопрос по автореферату касается уточнения собранных данных и применимости разработанных моделей: учитывалось ли возможное влияние присутствующих примесей и ионной силы в растворе?

### **Заключение**

Диссертация Карпова Кирилла Викторовича соответствует нормативам пп. 2.1–2.5 Положения о порядке присуждения ученых степеней в МГУ, предъявляемым к кандидатским работам. Соискатель заслуживает присвоения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.13 – Радиохимия (химические науки).

Я, Александров Евгений Викторович, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

ФИО (полностью) Александров Евгений Викторович

Ученая степень доктор химических наук (1.4.4 – Физическая химия)

Ученое звание нет

Должность Директор

Структурное подразделение Центр НТИ «Цифровое материаловедение: новые материалы и вещества»

Полное наименование организации федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет)»

Дата «04» июня 2026 г.