

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Карпова Кирилла Викторовича
на тему «De novo дизайн комплексообразователей трехвалентных f-элементов»,
представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности
1.4.13 Радиохимия

Диссертационная работа Карпова К.В. посвящена исследованию высокоселективных комплексообразователей для трехвалентных f-элементов (лантаноидов и актиноидов), что является одной из ключевых задач современной радиохимии и технологии переработки отработавшего ядерного топлива. Применение методов *de novo* дизайна позволяет целенаправленно создавать лиганды с заданными свойствами, что открывает перспективы для более эффективного разделения f-элементов. Таким образом, тема исследования является актуальной для научных и практических задач современной радиохимии.

Исследование обладает достаточной научной новизной, так как автором проанализирована взаимосвязь свойств комплексообразователей и экспериментальных условий с фактором экстракционного разделения Am(III)/Cm(III) и разработаны подходы к предсказанию устойчивости комплексов с трехвалентными f-элементами. Предложен подход по поиску равновесной геометрии лигандов и модель *de novo* дизайна, основанная на эволюционном алгоритме.

Практическая значимость работы состоит в том, что разработанные подходы могут найти применение в создании новых технологий разделения минорных актиноидов и лантаноидов при переработке отработавшего ядерного топлива.

Положения, выносимые на защиту, и выводы по диссертации достаточно обоснованы и корректно сформулированы. Достоверность результатов обеспечена использованием апробированных теоретических методов и известных литературных данных, а также представлением результатов на многочисленных профильных конференциях и в статьях в рецензируемых научных изданиях.

Автореферат изложен логично, содержит все необходимые разделы: обоснование цели и задач, методы исследования, основные результаты, выводы. Представленный иллюстративный материал достаточен для понимания сути работы. В целом, работа достойна высокой оценки.

По автореферату диссертации имеются следующие вопросы и замечания, которые не являются принципиальными и не снижают научной ценности получаемых результатов:

1. Насколько представительными получаются результаты обучения для предсказательных моделей, учитывая неизбежную разнородность используемых массивов

данных различных исследователей (различия в условиях проведения экспериментов, погрешностей методов анализа и т.д.)?

2. Текст автореферата содержит опечатки, пунктуационные и орфографические ошибки, свидетельствующие о несколько небрежном оформлении документов.

Диссертационная работа Карпова Кирилла Викторовича соответствует требованиям пунктов 2.1–2.5 «Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова», предъявляемым к кандидатским диссертациям, а её автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.13 – Радиохимия (химические науки).

Начальник исследовательской лаборатории
ЦЗЛ по обращению и кондиционированию
радиоактивных отходов, к.т.н., доцент

Козлов Павел Васильевич