

Заключение диссертационного совета МГУ.014.6
по диссертации на соискание ученой степени кандидата наук
Решение диссертационного совета от «10» июня 2026 г № 195

О присуждении Карпову Кириллу Викторовичу, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата химических наук.

Диссертация «De novo дизайн комплексообразователей трехвалентных f-элементов» по специальности 1.4.13 Радиохимия (химические науки) принята к защите диссертационным советом «25» марта 2026, протокол № 187.

Соискатель Карпов Кирилл Викторович, 1995 года рождения, обучался в очной аспирантуре кафедры радиохимии химического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова» с 02.10.2019 г. по 30.08.2023 г.

Соискатель работает в должности младшего научного сотрудника в лаборатории дозиметрии и радиоактивности окружающей среды кафедры радиохимии химического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова». Карпов Кирилл Викторович закреплен за кафедрой радиохимии химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова для подготовки диссертации с 12.01.2026 по 30.06.2026 (приказ № 164ас от 16.01.2026).

Диссертация выполнена в межкафедральной лаборатории интеллектуального химического дизайна кафедры радиохимии химического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова».

Научный руководитель – кандидат химических наук **Митрофанов Артем Александрович**, доцент кафедры радиохимии химического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова».

Официальные оппоненты:

Успенская Ирина Александровна – доктор химических наук, доцент, профессор кафедры физической химии химического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»;

Герман Константин Эдуардович – доктор химических наук, главный научный сотрудник с возложением обязанностей заведующего лабораторией химии технеция, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской академии наук;

Скорб Екатерина Владимировна – доктор химических наук, профессор, директор мегафакультета наук о жизни Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский университет ИТМО» –

дали положительные отзывы на диссертацию.

Выбор официальных оппонентов основывался на том, что Успенская Ирина Александровна является признанным специалистом в области физической химии, вычислительной химии и термодинамическом моделировании; Герман Константин Эдуардович – высококвалифицированный эксперт в области радиохимии, химии радиоактивных элементов и экстракционного разделения; Скорб Екатерина Владимировна является ведущим специалистом в области инфохимии и машинного обучения. Публикации официальных оппонентов близки по своей направленности к теме рассматриваемой диссертационной работы.

Соискатель имеет 20 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации 4 статьи, все опубликованные в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ по специальности 1.4.13 Радиохимия (химические науки) (личный вклад автора в публикацию указан в %):

1. Solov'ev V.P., Ustynyuk Yu.A., Zhokhova N.I., Karpov K.V. Predictive Models for HOMO and LUMO Energies of N-Donor Heterocycles as Ligands for Lanthanides Separation // Molecular Informatics. - 2018. - vol. 37, № 11. - 1800025. EDN: EMNYCD. Импакт-фактор 3.1(JIF), 0,75 п.л./ 50%.
2. Karpov K.V., Mitrofanov A.A., Korolev V., Tkachenko V. Size Doesn't Matter: Predicting Physico- or Biochemical Properties Based on Dozens of Molecules // The Journal of Physical Chemistry Letters. - 2021. - Vol. 12, № 38. - pp. 9213-9219. EDN: XXIZCO. Импакт-фактор 4.7(JIF), 0.7 п.л. / 70%.
3. Andreadi N.G., Zankov D., Karpov K.V., Mitrofanov A.A. Tree Parzen estimator for global geometry optimization: A benchmark and database of experimental gas-phase structures of organic molecules // Journal of Computational Chemistry. - 2022. - Vol. 43, № 21. - pp. 1434-1441. EDN: QNHKLX. Импакт-фактор 2,9 (JIF), 0,6 п.л. / 40%.
4. Karpov K.V., Mitrofanov A.A., Kalmykov S.N. On F-Element Extractant Design Using HSAB Theory // Inorganic Chemistry. - 2025. - Vol. 64, № 24. - pp. 11925-11930. EDN: BWTOWU. Импакт-фактор 4.7(JIF), 0,8 п.л. / 70%.

Личный вклад диссертанта состоял в анализе научной литературы, подготовке обзора, сбора данных для тренировки и тестирования моделей машинного обучения, разработке новых архитектур графовых нейронных сетей и подходов к их обучению, экспериментальной проверке полученных моделей и разработке генеративной модели по созданию новых комплексообразователей f-элементов. Вклад автора в совместные публикации основополагающий.

На автореферат поступило 4 дополнительных отзыва, все положительные.

Диссертационный совет отмечает, что представленная диссертационная работа на соискание ученой степени кандидата химических наук является научно-квалификационной работой, в которой на основании выполненных автором исследований

решены вопросы, имеющие значение для развития радиохимии, а именно, **впервые**: 1. Проведен количественный анализ вклада таких свойств, как жесткость, энергия предорганизации, электростатический потенциал в селективность лигандов для широкого круга соединений, и показано, что их сочетание с экспериментальными условиями позволяют предсказывать фактор разделения 2. Методология трансферного обучения систематически применена и валидирована для предсказания физико-химических свойств малых молекул в условиях крайне малых обучающих выборок 3. Создана гибридная архитектура графовой нейронной сети (MPNN) и на ее основе построены предсказательные модели «структура-свойства» для расчета константы устойчивости комплексов в стехиометрии 1:1 с точностью до 0.4 [lgK] 4. Показано, что с использованием разработанной генеративной модели можно получать структуры перспективных комплексообразователей, в том числе переоткрывать известные эффекты, например, увеличение селективности экстрагентов при введении в их структуру электроноакцепторных групп.

Практическая и теоретическая значимость работы состоит в следующем: 1. Создана база данных экспериментальных значений констант устойчивости комплексов с f-элементами, данные из которой могут использоваться для развития новых экстракционных систем 2. Полученные предсказательные модели могут в дальнейшем быть использованы при создании новых комплексообразователей f-элементов. 3. Определена взаимосвязь между селективностью экстрагента и его фундаментальными свойствами (жесткость, энергия предорганизации, электростатический потенциал); Показана возможность использования этих свойств для предсказания селективности. 4. Разработана методика трансферного обучения в отношении малых органических молекул и показана ее эффективность при построении предсказательных моделей машинного обучения 5. Разработана архитектура гибридной графовой нейронной сети, пригодная для создания высококачественных предсказательных моделей «структура-свойство».

Диссертация представляет собой самостоятельное исследование, обладающее внутренним единством. **Положения, выносимые на защиту**, содержат новые научные результаты и свидетельствуют о личном вкладе автора в науку:

1. Сочетание таких свойств лиганда как жесткость, энергия предорганизации и электростатический потенциал вместе с параметрами экстракционной системы может использоваться для предсказания селективности при разделении трехвалентных f-элементов.
2. Построенные модели “структура-свойство” для предсказания устойчивости комплексов с f-элементами показывают среднее качество в 0.4[lgK] на литературных данных и описывают результаты экстракционного эксперимента.
3. Создана генеративная модель на основе генетического алгоритма, интегрированная с предсказательной моделью констант устойчивости. Модель способна генерировать структуры перспективных комплексообразователей.

На заседании «10» июня 2026 года диссертационный совет принял решение присудить Карпову Кириллу Викторовичу ученую степень кандидата химических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 17 человек, из них 5 докторов наук по специальности 1.4.13 Радиохимия (химические науки), участвовавших в заседании, из 23 человек, входящих в состав, проголосовали: за - 17, против - 0, недействительных бюллетеней - 0.

Председатель диссертационного совета,
доктор химических наук, академик РАН

_____/Калмыков С.Н./

Ученый секретарь диссертационного совета,
кандидат химических наук

_____/Северин А.В./

«10» июня 2026 г.