

Отзыв на диссертационную работу

Карпова Кирилла Викторовича

на тему: “De novo дизайн комплексообразователей трехвалентных f-элементов”

по специальности 1.4.13 Радиохимия

Кирилл Викторович начал свою научную работу в 2012 году на физическом факультете МГУ. В 2016 году защитил бакалаврскую выпускную квалификационную работу на тему “Комбинаторный дизайн комплексонов для разделения редкоземельных элементов на основе производных фенантролинов”, а в 2018 году – магистерскую диссертацию на тему: “Компьютерный дизайн высокоселективных экстрагентов для разделения редкоземельных элементов на основе квантово-химических расчетов и моделей “структура-свойство””. Для обучения в аспирантуре К.В. Карпов поступил на химический факультет МГУ на кафедру радиохимии. В аспирантуре К.В. Карпов продолжил исследования численных методов для оценки и разработки перспективных комплексообразователей металлов, расширив область исследований на трехвалентные актиниды. Поставленная задача имеет как прикладной, так и фундаментальный характер. С одной стороны, работа посвящена разделению трехвалентных актинидов и лантанидов в рамках переработки отработавшего ядерного топлива. С другой стороны, в рамках работы решалась фундаментальная задача поиска взаимосвязи между структурой органического лиганда и свойствами его комплекса с трехвалентными f-элементами.

За время выполнения работы Карпов К.В. овладел навыками работы с методами квантовой химии, включая быстрые полуэмпирические методы для расчета больших систем и ab initio методы для учета тонких химических эффектов, с помощью которых были определены свойства органических лигандов и их комплексных соединений с металлами. Также Карповым К.В. были использованы и разработаны методы на основе машинного обучения для предсказания свойств лигандов и комплексов, а также для дизайна структур новых соединений. Карпов К.В. успешно овладел экспериментальными методами – жидкостной экстракцией, альфа- и гамма-спектрометрией.

В целом, Карпов К.В. зарекомендовал себя как трудолюбивый, внимательный и самостоятельный исследователь, что позволило выполнить работу на высоком научном уровне.

Диссертационная работа Карпова К.В. соответствует критериям Положения о присуждении ученых степеней МГУ, соответствует паспорту специальности 1.4.13 Радиохимия (химические науки) и рекомендуется к защите в соответствующем диссертационном совете МГУ (МГУ.014.6).

Научный руководитель:

Доцент кафедры радиохимии

Химического факультета

МГУ имени М.В. Ломоносова

кандидат химических наук

02.02.2026

А.А. Митрофанов