

## 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**

Диссертационная работа Карпова К.В. посвящена актуальной проблеме – созданию вычислительного подхода для направленного дизайна новых экстрагентов трехвалентных f-элементов, необходимых для переработки отработанного ядерного топлива. Автором проделана большая работа по сбору экспериментальных данных, разработке моделей машинного обучения (включая гибридные графовые нейросети и трансферное обучение) и созданию генеративного алгоритма на основе генетического поиска. Практическая значимость работы подтверждена экспериментальной проверкой предсказаний для новых лигандов.

Автореферат написан логично, основные результаты опубликованы в 4 статьях в рецензируемых журналах (в том числе J. Phys. Chem. Lett., Inorg. Chem.), что соответствует требованиям МГУ.

Замечания и вопросы по автореферату:

Для гибридной модели (стр. 10–11) используется представление металлов через метод `skiatom`, дообученный на данных по актинидам. Стоило указать насколько велик был объём обучающей выборки для минорных актинидов (Am, Cm, Bk, Cf).

Опечатки и технические ошибки (неполный список):

На странице 7 в предложении «взаимосвязь между дескрипторами и селективностью» опечатка в слове «декрипторами»

На странице 8 в предложении «были карбо- новые кислоты» опечатка в слове «карбоновые».

На рисунке 3 допущена опечатка. Вместо «уникальные молекул» должно быть «уникальные молекулы».

### Заключение

Считаю, что диссертационная работа Карпова Кирилла Викторовича «De novo дизайн комплексообразователей трехвалентных f-элементов» 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).

Доктор химических наук,

Главный научный сотрудник лаборатории № 103 Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской академии наук» (ИНЭОС РАН)

Чусов Денис Александрович

18.05.2026

