

## **ОТЗЫВ**

**официального оппонента о диссертации на соискание ученой степени  
кандидата химических наук**

**Карпова Кирилла Викторовича на тему: «De novo дизайн  
комплексообразователей трехвалентных f-элементов» по специальности  
1.4.13 Радиохимия**

Диссертационная работа Карпова К. В. нацелена на решение актуальной и сложной проблемы — создание методологии компьютерного (de novo) конструирования органических лигандов, предназначенных для селективного выделения и разделения трехвалентных f-элементов (актинидов и лантанидов). Данное направление лежит на пересечении передовых методов радиохимии, вычислительной химии и технологий искусственного интеллекта и имеет ключевое значение для прогресса в области замкнутого ядерного топливного цикла и сокращения объемов радиоактивных отходов.

Актуальность выбранной темы обусловлена потребностью в выявлении новых, более эффективных и селективных экстрагентов для переработки отработавшего ядерного топлива (ОЯТ). Классический экспериментальный перебор соединений требует высоких ресурсных затрат и не способен покрыть всё многообразие химического пространства. Современные квантово-химические подходы, обеспечивая высокую точность, нуждаются в существенных вычислительных мощностях. В связи с этим формирование новых подходов, интегрирующих алгоритмы машинного обучения и генеративные модели для экспресс-поиска и генерации перспективных молекулярных структур с требуемыми характеристиками, представляется актуальным и согласуется с современными подходами в радиохимии и материаловедении.

Структура диссертации включает введение, четыре главы, заключение и библиографический список. Суммарный объем рукописи составляет 93 страницы, в ней содержится 40 иллюстраций и 10 таблиц. Список

цитируемых источников включает 170 наименований, что говорит о владении автором текущей проблематикой.

Во вводной части аргументирован выбор темы, определены цель и задачи исследования, сформулированы выносимые на защиту положения, освещены научная новизна, теоретическая и практическая ценность результатов, а также личный вклад соискателя.

Первая глава представляет собой детальный и систематизированный обзор литературы, затрагивающий современные стратегии обращения с ОЯТ и критерии, предъявляемые к новым экстрагентам. В этом разделе представлен анализ расчётных методов: от квантовой химии (включая методы волновой функции и теорию функционала плотности) до методов искусственного интеллекта — графовых нейросетей (GNN, MPNN), трансферного обучения и генеративных архитектур. Отдельный акцент сделан на опыте использования данных методик для описания процессов комплексообразования f-элементов. Обзорный раздел логично подводит к конкретизированной формулировке задач диссертационной работы.

Во второй главе освещены задействованные автором расчётные методики. Подробно описаны принципы проведения квантово-химических вычислений (DFT, полуэмпирические методы), методологические основы создания предсказательных моделей «структура-свойство» (QSAR/QSPR) с элементами трансферного обучения и гибридных нейросетевых архитектур, а также процедуры глобальной оптимизации (генетические алгоритмы, байесовская оптимизация). Приведённое изложение методик является исчерпывающим и обеспечивает их воспроизводимость.

Третья глава содержит экспериментальный блок исследования, охватывая перечень реагентов и материалов, техники проведения жидкостной экстракции и способы регистрации радионуклидов (гамма- и альфа-спектрометрия). Описание экспериментальных протоколов изложено ясно и отвечает принятым в радиохимической практике нормам.

Четвёртая глава выступает центральной и включает изложение и интерпретацию результатов. В ней поэтапно представлены: исследование корреляции жёсткости лигандов с их способностью к комплексообразованию; верификация и адаптация подхода с применением трансферного обучения для разработки моделей предсказания констант устойчивости; создание гибридной графовой нейросети, позволяющей принимать во внимание природу металла и предсказывать константы с высокой точностью; разработка алгоритма поиска равновесных геометрий малых органических молекул; итоги экспериментального тестирования разработанных моделей и использование генеративной модели для *de novo* создания новых комплексообразователей.

В заключении подведены ключевые итоги и сформулированы выводы по диссертации.

Научная новизна исследования Карпова К.В. не вызывает сомнений и состоит в следующих достижениях:

— впервые выполнен количественный анализ вклада таких параметров, как жёсткость, энергия предорганизации и электростатический потенциал в селективность лигандов на представительной выборке соединений и продемонстрирована недостаточность каждого из этих критериев в отдельности для надёжной количественной оценки селективности;

— методология трансферного обучения впервые системно апробирована и прошла валидацию для прогнозирования физико-химических характеристик малых молекул на малых выборках, что имеет принципиальное значение для задач радиохимии;

— сконструирована гибридная архитектура графовой нейросети (MPNN), впервые обеспечивающая предсказание констант устойчивости комплексов *f*-элементов с высокой точностью (ошибка порядка  $0.4 \lg K$ ) наряду с оценкой неопределённости прогноза;

— впервые разработана и внедрена генеративная модель для *de novo* дизайна соединений, связывающих трёхвалентные *f*-элементы, что позволило не

только предложить новые структуры, но и независимо воспроизвести описанный ранее в литературе эффект.

Результаты работы характеризуются оригинальностью, достоверностью и получены автором единолично или при его ведущей роли. Практическая ценность диссертации состоит в формировании готового набора вычислительных инструментов для скрининга и дизайна новых экстрагентов. Построенные предсказательные модели открывают возможность для виртуальной обработки тысяч соединений, а генеративная модель — для выдачи новых кандидатов на синтез, что сокращает временные и материальные издержки при создании технологий фракционирования высокоактивных отходов. Обоснованность и достоверность полученных результатов обеспечена применением передовых и взаимодополняющих расчётных подходов (квантовая химия, машинное обучение), верификацией моделей на репрезентативных литературных данных с использованием проверенных статистических подходов (кросс-валидация, внешние тестовые наборы) и экспериментальным подтверждением модельных прогнозов в ходе реальных экстракционных испытаний. Эксперимент подтвердил корректность установленного моделью порядка лигандов по их селективности.

Свидетельством состоятельности и признания результатов работы служит их апробация. Ключевые положения диссертации нашли отражение в 20 научных публикациях, из которых 4 — статьи в авторитетных международных рецензируемых изданиях, индексируемых в базах Web of Science и Scopus. Результаты представлялись на всероссийских и международных научных форумах, таких как конференция «Радиохимия» и Менделеевский съезд.

При высоком научном уровне выполненной работы, в отношении диссертации можно высказать несколько замечаний и уточняющих вопросов, которые, тем не менее, не оказывают влияния на её общую высокую оценку:

1. В работе встречаются немногочисленные опечатки («способ аугментации данных» на стр. 30 и др.
2. Из первых 30 ссылок обзора литературы более половины относятся к началу прошлого века, когда методы и подходы *de novo* либо даже не рассматривались, либо имели смысл, заметно отличающийся от современного.
3. В последние годы в анализе реакционной способности, основанном на расчетных подходах, наблюдается обоснованное избегание и даже аргументированная критика терминов «жесткие» и «мягкие» лиганды и их использование автором в фундаментальной диссертации нельзя считать удачным, тем более, что автор и сам отмечает, что корреляции между этими величинами не прослеживается, и также ставит под вопрос целесообразность использования жесткости в качестве основного дескриптора комплексообразования.

Диссертационная работа Карпова Кирилла Викторовича «*De novo* дизайн комплексообразователей трехвалентных f-элементов» является цельным научным трудом, вносящим заметный вклад в сферу исследований радиоактивных элементов – актинидов и находящуюся на стыке фундаментальных наук и прикладных аспектов применения радиохимии.

Диссертация отвечает требованиям, установленным Московским государственным университетом имени М. В. Ломоносова к работам подобного рода. Содержание диссертации соответствует специальности 1.4.13 Радиохимия (химические науки), а также критериям, определенным пп. 2.1-2.5 Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М. В. Ломоносова. Диссертационное исследование оформлено согласно требованиям Положения о совете по защите диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук Московского государственного университета имени М. В. Ломоносова.

Таким образом, соискатель Карпов Кирилл Викторович заслуживает присуждения ученой степени кандидата наук по специальности 1.4.13. Радиохимия.

Официальный оппонент:

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,

ГЕРМАН Константин Эдуардович

подпись

«25» мая 2026 г.