

Отзыв на автореферат
диссертации Крюковой Алёны Евгеньевны
«Комбинированный подход к поиску распределений размеров сферических наночастиц по данным малоуглового рентгеновского рассеяния»,
представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. – физика конденсированного состояния.

Диссертационная работа Крюковой А.Е. может рассматриваться как научно-квалификационная работа, в которой содержится решение актуальных задач, имеющих важное практическое значение в различных областях науки – как в физике, так и биологии, медицине, промышленности. Основным экспериментальным методом в представленной работе является метод малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР). Метод МУРР применяют к структурам различных размеров, как к маленьким белкам и полипептидам, так и к макромолекулярным комплексам, которые могут быть изучены с помощью современного оборудования в условиях, которые максимально приближены к естественным.

Диссертационная работа посвящена исследованиям на устойчивость восстановления распределений частиц по размерам, что является, несомненно, актуальной задачей, т.к. в методе МУРР остро стоит проблема неоднозначности решений и произвольности в определении стартовых значений параметров.

Условно работу можно разделить на три части. Первая часть – это установление зависимости восстановления решения от типа шума в данных малоуглового рассеяния. В результате показано, что умеренный пуассоновский шум в данных малоуглового рассеяния способствует нахождению решения. Вторая часть посвящена подходу, позволяющему оценить стартовые значения параметров путем сочетаний основных алгоритмов, используемых в МУРР: методами регуляризации, прямого поиска гистограммы и в виде суперпозиции гладких аналитических функций. Третья часть посвящена поиску устойчивых диапазонов стартовых значений параметров. Обращает на себя внимание детальный анализ двумерных карт успешных стартовых значений параметров, позволивший в результате выбрать наиболее эффективный метод минимизации, которым оказалась впервые предложенная комбинация градиентного метода Бройдена-Флетчера-Гольдфарба-Шанно и метода моделирования отжига. Основным результатом работы является предложенный метод с повышенной областью сходимости.

Достоверность работы определяется большим количеством систематических исследований, применением предложенного подхода к исследованию реальных объектов, убедительной демонстрацией эффективности работы данного подхода, а также использованием просвечивающей электронной микроскопии в качестве дополнительного метода исследования в работе.

Считаю, что по актуальности, научной новизне и личному вкладу автора диссертационная работа на тему «Комбинированный подход к поиску распределений размеров сферических наночастиц по данным малоуглового рентгеновского рассеяния», представленная на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – физика конденсированного состояния полностью соответствуют Положению о присуждении ученых степеней, утвержденному постановлением Правительства РФ № 842 от 24 сентября 2013 г., а ее автор, Крюкова Алёна Евгеньевна, заслуживает присуждения степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – «Физика конденсированного состояния».

Отдел хроматографического анализа,
Кандидат химических наук, ведущий научный сотрудник

Ксенофонов Александр Леонидович

119234, г. Москва, ГСП-1, Ленинские горы МГУ 1, стр. 73, НИИ ФХБ им.
А.Н.Белозерского, МГУ им. М.В. Ломоносова

Телефон: 8 495 939-54-08

e-mail: alexksenofon@gmail.com

На обработку персональных данных согласен

26.09.2022

Подпись сотрудника МГУ Ксенофопова А. Л. заверяю

М.П.

