

**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**

В диссертационной работе представлен новый метод поиска распределений частиц по размерам для систем полидисперсных сферических частиц, отличающийся повышенной устойчивостью. Существующие методы не всегда позволяют получить однозначное и устойчивое решение. Так, чтобы определить функцию распределения с использованием метода регуляризации по Тихонову, часто приходится находить тонкий баланс между хорошим приближением данных малоуглового рассеяния и физически обоснованным распределением с гладким контуром, зависящем от параметра регуляризации. Кроме того, для данного метода требуется точное задание максимального размера частиц, что в ряде случаев затруднительно оценить при отсутствии априорной информации об исследуемой системе.

Актуальность работы обусловлена бурным развитием как инструментальной базы, так и алгоритмов анализа метода малоуглового рассеяния (МУР), ставшего одним из универсальных структурных методов исследования наночастиц. Особо следует отметить широкие возможности метода МУР в структурной биологии, в частности для определения трехмерной формы макромолекул в растворе и четвертичной структуры белковых комплексов.

В работе предложен подход, при котором на первом шаге оцениваются стартовые значения параметров (что очень актуально, особенно для систем, параметры которых заранее не известны). А на завершающем этапе используется модифицированная автором диссертации программа, использующая сочетание градиентного метода минимизации и метода моделирования отжига, и продемонстрировавшая свое превосходство над другими имеющимися реализациями программ с разными оптимизационными алгоритмами.

Показано, что предложенный в работе подход способствует нахождению более надежных решений при исследовании полидисперсных систем. Поскольку при поиске решений методом малоуглового рассеяния всегда присутствует неопределенность, то работа, направленная на поиск устойчивого решения очень актуальна и необходима.

В качестве замечания, носящего характер пожелания, хотелось бы более подробного описания причин выбора стартовых значений параметров для модельных систем, а также диапазона, в пределах которого проводился поиск решения.

На основе проведенных работ было опубликовано 8 статей в ряде научных журналов. Результаты представлены на 13 различных российских и международных конференциях. Научная новизна и практическая значимость работы подтверждена получением гранта РФФИ («Аспиранты»).

На основании автореферата можно заключить, что диссертация полностью соответствует требованиям ВАК, установленным Положением о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства РФ, а ее автор, Крюкова Алёна Евгеньевна, заслуживает присуждения степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – «Физика конденсированного состояния».

Научный сотрудник, к.х.н. Можяев Андрей Александрович

Лаборатория молекулярных технологий

Тел: 81950828052

E-mail: a.a.mozhaev@gmail.com

Место работы: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН, 117997, Москва, ГСП-7, ул. Миклухо-Маклая, 16/10.


«29» сентября 2022 г.

Даю согласие на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета и их дальнейшую обработку.

В.А.Олейников ДФМН

УЧЕНЫЙ СЕКРЕТАРЬ
ИБХ РАН



Подпись Можяева А.А. заверяю

