*-

УТВЕРЖДАЮ

Директор ФТИ им. А.Ф. Иоффе

проф., д.ф.-м.н. Иванов С.В.

«21» января 2026 года

Отзыв ведущей организации

«Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН»

на диссертационную работу

Кучко Артема Владимировича

«РАЗРАБОТКА МАТЕМАТИЧЕСКИХ МЕТОДОВ ИНТЕРПРЕТАЦИИ ДАННЫХ МАЛОУГЛОВОГО РЕНТГЕНОВСКОГО РАССЕЯНИЯ ОТ ПОЛИДИСПЕРСНОЙ СИСТЕМЫ НАНОЧАСТИЦ»,

представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.2 – «Приборы и методы экспериментальной физики»

Работа Кучко А.В. посвящена решению задачи моделирования морфологических и размерных параметров рассеивателей в полидисперсной системе на основе индикатрисы (кривых дифракционного рассеяния) малоуглового рассеяния рентгеновских лучей (МУРР). В рамках подхода, использующего универсальную для всех рассеивателей функцию распределения объемных долей частиц в образце по радиусам инерции, разработан метод численного решения интегрального уравнения, к которому сводится решаемая задача. Для интерпретации данных МУРР в случае полидисперсных систем с высокой долей заполнения объема рассеивающим веществом доказана необходимость учета интерференционных вкладов в интенсивность рассеяния и разработан метод коррекции таких вкладов. Разработан программный пакет для настройки полученного метода с учетом особенностей используемых кривых дифракционного рассеяния и априорной информации об исследуемой системе, спроектированы база данных и Web-приложение для удаленного организованного хранения, визуализации и анализа данных натурного и модельного эксперимента по регистрации МУРР и результатов моделирования полидисперсных систем.

Актуальность и новизна диссертационной работы

Решаемая проблема имеет большую практическую значимость. Для исследования полидисперсных систем, имеющих в своем составе наноразмерные неоднородности (частицы,

поры с размерами от 1 до 100 нм), применяют методику МУРР (малоуглового рассеяния рентгеновских лучей). Существующие методы решения задачи структурного моделирования таких систем на основе данных МУРР, особенно в случае заметных экспериментальных погрешностей, ограничиваются раздельным рассмотрением разных форм рассеивателей и подбором параметров для априорно заданного аналитического вида распределения размеров в системе. Возникающие при этом ошибки априорного выбора в принципе не могут быть выявлены и проанализированы в рамках используемого метода. Решение задачи в универсальной постановке, позволяющей без жестких априорных ограничений идентифицировать вид распределения размерных параметров рассеивателей независимо от их формы, до настоящей работы отсутствовало.

Научная новизна работы состоит в том, что впервые для полидисперсной системы не только поставлена, но и эффективно решена обратная задача моделирования функции распределения объемных долей частиц по радиусам инерции для разных форм рассеивающих объектов на основе данных МУРР.

Наиболее значимые научные результаты и их достоверность

В работе был существенно модифицирован один из методов решения некорректных задач — метод байесовского анализа — для решения основного интегрального уравнения, связывающего структурные характеристики полидисперсной системы и экспериментальную интенсивность дифракционных кривых МУРР. Модификация была произведена с учетом особенностей решаемой задачи. Был разработан вариант метода регуляризации для сетки аргумента с переменным шагом, что является существенным дополнительным регуляризатором исходной некорректной задачи и позволяет найти адекватные решения в случае большого динамического диапазона интенсивности МУРР. В основной метод был включен многокритериальный выбор наиболее вероятного решения, учитывающий требования неотрицательности искомого решения и наличие информации о полимодальности распределения размеров.

Предложен алгоритм вычисления удельной поверхности и ее неопределенности для моделируемой системы, позволяющий идентифицировать форму рассеивающего объекта. В результате диссертанту удалось разработать эффективный алгоритм решения обратной задачи моделирования полидисперсной системы по данным МУРР, что, несомненно, является актуальным как с научной, так и с практической точки зрения.

Реализованы кроссплатформенное приложение, позволяющее выполнять необходимые трудоемкие математические преобразования и производить настройку разработанных алгоритмов, а также база данных и интерактивное Web-приложение для хранения исходной информации о рассеивающих системах и результатов моделирования их структуры.

Достоверность основных положений и выводов работы подтверждается математической строгостью на этапе постановки и решения задачи, а также демонстрацией качества численного решения обратной задачи.

Практическая значимость диссертационного исследования

Практическая значимость работы подтверждена в Лаборатории оптики заряженных частиц и математического моделирования ИАП РАН, где производилась апробация разработанных методов и программ. В лаборатории были получены экспериментальные кривые дифракционного рассеяния МУРР от порошковых образцов из наночастиц сложных оксидов циркония и гадолиния, порошков наноуглерода, пленочных полимерных образцов полипропилена с включениями из наночастицами аморфного диоксида кремния. Затем для перечисленных образцов были численно построены структурные модели на основе разработанных алгоритмов.

Программное обеспечение по определению фазовых характеристик материала на основе данных МУРР может применяться в различных научных и образовательных учреждениях РФ, специализирующихся по дифракционным исследованиям материалов, например:

- Физико-технический институт имени А. Ф. Иоффе Российской академии наук, г. Санкт-Петербург;
- Национальный исследовательский центр Курчатовский институт, г. Москва;
- Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Ленинградская обл., г. Гатчина;
- Институт кристаллографии имени А. В. Шубникова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», г. Москва;
- Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, г. Москва;
- Санкт-Петербургский государственный университет, г. Санкт-Петербург;
- Национальный исследовательский университет ИТМО, г. Санкт-Петербург;
- Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)», Московская область, г. Долгопрудный;
- Объединённый институт ядерных исследований, Московская область, г. Дубна;
- Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина), г. Санкт-Петербург;
- Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, г. Санкт-Петербург;
- Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау Российской академии наук, Московская область, г. Черноголовка;
- Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук, г. Москва;
- Новосибирский государственный университет, г. Новосибирск;

— Уральский федеральный университет им. Б. Н. Ельцина, Свердловская область, г. Екатеринбург;

— Институт ядерной физики им. Г.И. Будкера Сибирского отделения Российской академии наук, г. Новосибирск и др. .

Разработанный в диссертационной работе метод может быть использован и для решения других некорректных задач, связанных с решением интегральных уравнений.

Замечания по диссертационной работе и автореферату

1. Из текста диссертации неясно, были ли попытки проверки разработанного метода на имитационных кривых МУРР для систем с бимодальным распределением объемных долей рассеивателей. Для исследования диапазона применимости метода такая проверка представляет интерес.

2. В четвертой главе вместе с описанием программного пакета описываются числовые критерии для выбора оптимального значения параметра регуляризации. Эти критерии составляют существенную часть разработанного метода решения исследуемой обратной задачи, и их описание логичней было бы дать сразу после описания метода байесовского анализа, приведенного во второй главе.

3. Программные пакеты, поставляемые с аппаратурой для измерения МУРР, при характеризации полидисперсных систем традиционно используют распределения количества частиц по определенному размерному параметру, например: распределение количества шарообразных частиц по диаметру. Поэтому для сравнения результатов моделирования полидисперсных систем разными методами представляется необходимым добавление в разработанное приложение программных модулей, осуществляющих пересчет найденного решения в распределения указанного типа.

Отмеченные замечания не умаляют ценности проведенной работы.

Заключение

Диссертационная работа Кучко Артема Владимировича «Разработка математических методов интерпретации данных малоуглового рентгеновского рассеяния от полидисперсной системы наночастиц» удовлетворяет требованиям пп. 9–14 Положения о порядке присуждения ученых степеней, утвержденного Постановлением Правительства РФ № 842 от 24.09.2013 г. (ред. от 25.01.2024), соответствует паспорту специальности 1.3.2 «Приборы и методы экспериментальной физики» и требованиям ВАК РФ, а ее автор, Артем Владимирович Кучко, заслуживает присуждения степени кандидата физико-математических наук.

Отзыв подготовил Николаев Владимир Иванович, к.ф.-м.н., зав. Лабораторией профилированных кристаллов Отделения физики твердого тела (ОФТТ) ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН.

Настоящий отзыв составлен после ознакомления с текстом диссертации, автореферата и публикаций Кучко А.В. По результатам доклада Кучко А.В. на семинаре Лаборатории профилированных кристаллов ОФТТ ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН 11.12.2025 (протокол №2025-10) принято решение об утверждении отзыва на диссертационную работу Кучко А.В.

Заведующий Лабораторией профилированных кристаллов
ОФТТ ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН
к.ф.м.н. Николаев В.И.

Сотрудники ФТИ,
группа Дифрактометрии и малоуглового рассеяния рентгеновских лучей
к.ф.-м.н. Шарков М.Д.
к.ф.-м.н. Бойко М.Е.