

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА
24.1.029.01 (Д002.034.01) НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ НАУКИ ИНСТИТУТ АНАЛИТИЧЕСКОГО
ПРИБОРОСТРОЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК (ИАП РАН),
Г. САНКТ-ПЕТЕРБУРГ
ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА
НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от «11» февраля 2026 г. № 1

о присуждении Кучко Артёму Владимировичу, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Разработка математических методов интерпретации данных малоуглового рентгеновского рассеяния от полидисперсной системы наночастиц» по специальности 1.3.2 – Приборы и методы экспериментальной физики принята к защите 19.11.2025 г., протокол № 15, диссертационным советом 24.1.029.01 (Д002.034.01) на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института аналитического приборостроения Российской академии наук (ИАП РАН), 198095, Санкт-Петербург, ул. Ивана Черных, д.31-33, лит. А, приказ от 02.11.2012 № 714/нк.

Соискатель: Кучко Артём Владимирович, 1986 года рождения, в 2010 г. окончил государственное образовательное учреждения высшего профессионального образования «Санкт-Петербургский государственный университет информационных технологий, механики и оптики», присуждена квалификация инженер по специальности «Информационные системы и технологии», диплом № ВСГ 4100825, выдан 16.01.2010.

Кучко Артём Владимирович обучался в аспирантуре в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего профессионального образования «Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики»

по специальности 05.13.18 «Математическое моделирование численные методы и комплексы программ».

В 2024-2025 гг. был прикреплен к лаборатории оптики заряженных частиц и математического моделирования (лаб.221) ИАП РАН для проведения диссертационного исследования и подготовки диссертационной работы (приказ № 164 от 01.11.2024 г.).

В настоящее время Кучко Артём Владимирович занимается научной работой в инициативном порядке.

Диссертация выполнена в ИАП РАН.

Научный руководитель: Смирнов Александр Витальевич, кандидат физико-математических наук, старший преподаватель физического факультета федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский университет ИТМО».

Официальные оппоненты:

Волков Владимир Владимирович, доктор химических наук, главный научный сотрудник лаборатории рефлектометрии и малоуглового рентгеновского рассеяния Института кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ «Кристаллографии и Фотоники» представил на диссертацию и автореферат **положительный отзыв**, в котором содержатся следующие замечания:

1. В главе 3, сравнение истинной и предполагаемой модели происходит на основе интегральной относительной погрешности функции распределения объемных долей. Однако на практике важны также оценки точности и стабильности восстановления таких характерных особенностей функций распределения, как положения и полуширины пиков. В работе такой анализ отсутствует.

2. Алгоритм выбора значений весовых коэффициентов при отдельных критериях в формуле (4.9) обобщающего критерия TOTAL описан недостаточно четко.

3. Не приведены результаты сравнения с известной программой GNOM из свободно распространяемого пакета ATSAS, которая позволяет находить объемные распределения для ряда формфакторов рассеивателей методом регуляризации на метрике первой производной по решению. Можно было бы несколько расширить

сравнение с современными зарубежными программными пакетами (например, IRENA, SASfit) для более четкого позиционирования новизны SAXSEV.

4. В работе итерационный метод опробован для интерпретации данных малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР) от плотной полидисперсной системы сферических частиц с потенциалом взаимодействия твердых сфер. Нет апробации для систем с другими формами частиц.

Монахов Вадим Валериевич, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры вычислительной физики Санкт-Петербургского государственного университета представил на диссертацию и автореферат **положительный отзыв**, в котором содержатся следующие замечания:

1. В разделе 2.3 на с.27 в методе байесовского анализа в качестве численного метода выбран метод трапеций. Но лучше выбрать метод средних прямоугольников, который является методом наивысшей алгебраической степени точности и обеспечивает погрешность в 2 раза меньше, чем метод трапеций. Для этого достаточно сдвига границы интегрирования на 0.5 интервала, поэтому проведенный автором анализ останется почти без изменений. При этом входные данные останутся те же, а число операций при реализации метода даже несколько уменьшится, 6 .

2. На с. 48. указано, что разработанное автором приложение реализовано на языке Python 3. Но это медленный интерпретируемый язык. Не указано, какие характерные длины обрабатываемых массивов, какое характерное время расчетов для такого объема данных, и есть ли связанные с этим ограничения на размеры обрабатываемых данных.

3. На с.50. говорится об оптимальных значениях регуляризатора - но значения 0 и 1.0, указанные для части из них, по-видимому, недостижимы. Но не говорится о допустимых интервалах и необходимости их предварительного задания.

4. На с. 50-56. в разделе 4.5 (и вообще в главе 4) ничего не сказано, как подбираются или выбираются форма рассеивателя и параметры анизотричности. Нет сравнения с результатами стандартных программ для этого порошка в качестве примера преимущества разработанного ПО. Было бы полезно, если бы будущие

версии ПО выдавали рекомендации, в какой степени возможно использование стандартных методов.

5. Результаты применения итерационного метода интерпретации данных малоуглового рентгеновского рассеяния приведены только для одной серии образцов.

Оппонент отметил, что работа написана грамотным профессиональным языком, однако в ее оформлении все же встречаются отдельные недостатки и опечатки:

1. На с.9. при обосновании практической значимости в словах про программный пакет SAXSEV не сказано, кем разработан, и роль автора в его разработке. Нет ссылок на публикацию [53] и сайт пакета.

2. На с. 49. опечатка “Выбора оптимального регуляризатора сильно зависит от сетки аргументов”.

3. На с. 51. опечатка “порождающие интенсивность, выпадающая из полосы погрешности”.

4. На с. 64. опечатка “сделанод”. 5. На с.105 в цитировании работы [155] 2014 года неверно указано ДАН СССР. Правильно: ДАН. В 2014 году издание ДАН СССР уже не издавалось.

Ведущая организация – Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук» в своем положительном заключении, утвержденном директором, доктором физико-математических наук, профессором Ивановым Сергеем Викторовичем, подписанном заведующим Лабораторией профилированных кристаллов, кандидатом физико-математических наук, доцентом Николаевым Владимиром Ивановичем и сотрудниками группы Дифрактометрии и малоуглового рассеяния рентгеновских лучей кандидатом физико-математических наук Шарковым Михаилом Дмитриевичем и кандидатом физико-математических наук Бойко Михаилом Евгеньевичем, указала, что диссертация Кучко А.В. соответствует всем требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, а соискатель заслуживает присуждения ученой степени кандидата

физико-математических наук по специальности 1.3.2, и отметила следующие замечания:

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, приведенную во второй главе.

3. Программные пакеты, поставляемые с аппаратурой для измерения МУРР, при характеристике 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.

Соискатель имеет **8 (восемь)** опубликованных работ. Из них по теме диссертации **5 (пять)**, в т.ч. из Перечня ВАК **3 (три)**.

К наиболее значительным работам, отражающим основное содержание диссертации, относятся публикации в журналах, состоящих в Перечне ВАК:

1. **Кучко А.В.**, Смирнов А.В. Расчет функции распределения объемов наночастиц и удельной поверхности методом статистической регуляризации из индикатрисы рентгеновского малоуглового рассеяния // Наносистемы: физика, химия, математика. — 2012. — Т. 3. — № 3. — С. 76–91.

2. **Кучко А.В.**, Смирнов А.В. SAXSEV 2.1 кроссплатформенное приложение для анализа данных рентгеновского малоуглового рассеяния от полидисперсных систем // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. — 2015. — Т. 15. — № 2. — С. 267–274.

3. **Kuchko A.V.**, Smirnov A.V. Iterative method of reconstructing the size distribution function of spherical nanoparticles based on the intensity of the small-angle

На автореферат диссертации поступили следующие отзывы:

- 1) От Члена-корреспондента Российской академии наук, доктора химических наук, профессора, главного научного сотрудника лаборатории новых неорганических материалов Федерального государственного учреждения науки Физико-технического института им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук (г. Санкт-Петербург) **Гусарова Виктора Владимировича**.

Вопросы:

1. Проводилось ли сравнение полученной в результате моделирования функции распределения объемных полей по радиусам гирации с данными просвечивающей электронной микроскопии или динамического светорассеяния исследованных порошков?
 2. Может ли быть применён разработанный метод моделирования и пакет SAXSEV для анализа распределения по размерам нанопор в объемном материале?
- 2) От доктора химических наук, заведующего сектором ФГБУ «Ордена Ленина и ордена Трудового Красного Знамени» научно-исследовательского института синтетического каучука имени академика С.В. Лебедева» (Санкт-Петербург) **Возняковского Александра Петровича**.

Замечание:

Для повышения практической значимости было бы целесообразно иметь дополнительное приложение к с документацией к пакету SAXSEV.

- 3) От кандидата физико-математических наук, старшего научного сотрудника Лаборатории полимерных биоматериалов и систем филиала государственного бюджетного учреждения «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» - Института высокомолекулярных соединений (г. Санкт-Петербург) **Соколовой Марии Петровны**.

Вопросы к тексту автореферата:

1. Применима ли разработанная методика интерпретации данных для исследования мембранных материалов и сегментированных полимеров, имеющих доменную структуру
 2. Не ясно насколько существенно влияет доля заполнения пространства рассеивающим веществом на вычисляемое значение удельной поверхности.
- 4) От кандидата физико-математических наук, исполняющего обязанности заведующего кафедрой общей и экспериментальной физики, доцента, Российского государственного педагогического университета им. А. И. Герцена
(г. Санкт-Петербург) **Темнова Дмитрия Эдуардовича.**

В качестве недостатка отмечено:

- Непонятно, почему при разработке метода интерпретации данных МУРР с учетом интерференционных вкладов рассмотрена только шарообразная форма частиц.
- 5) От доктора технических наук, профессора физико-технического факультета Национального Исследовательского университета Информационных технологий, механики и оптики (г. Санкт-Петербург) **Стафеева Сергея Константиновича.**

Замечания:

1. Недостаточно информативно проведено сравнение результатов разработанных им методов вычисления функции распределения из данных МУРР с данными из других натуральных экспериментов.
2. В автореферате не отражено, насколько выбранные для интерпретации данных МУРР модели единичных рассеивателей соответствуют реальным физическим системам.

Все отзывы на автореферат диссертации положительные.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается их большим опытом работы в области исследования наноструктур с помощью малоуглового рентгеновского рассеяния, исследования методов синтеза наноматериалов, вычислительной физики, методов решения некорректных задач и

математического моделирования, что подтверждается публикациями, в которых рассматриваются вопросы, связанные с тематикой диссертационного исследования соискателя.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

представлена модель рассеяния полидисперсной системой наночастиц разных форм и анизотричности в форме интегрального уравнения, использующая универсальную функцию распределения объемных долей по радиусам гирации;

адаптирован метод байесовского анализа для решения указанного интегрального уравнения на произвольной сетке значений радиусов гирации с введением оценочной функции, определяющей степень существенности не имеющих физического смысла отрицательных значений модельного решения и критериями правильности выбора сетки;

с помощью вычислительного эксперимента для систем наночастиц, имеющих три различные формы с высокой степенью симметрии и анизотричность в интервале от 0,5 до 2, **показано**, что при погрешности в исходной интенсивности $MURP \leq 1\%$, погрешность восстановления функции распределения объемных долей, вычисленной с помощью адаптированного метода байесовского анализа, не превышает 4%, и неопределенность функции распределения, найденная в рамках разработанного подхода, правильно оценивает эту погрешность;

предложен способ вычисления площади удельной поверхности и ее погрешности на основе функции распределения объемных долей для моделей полидисперсной системы из частиц, имеющих высокую степень симметрии (эллипсоид вращения, прямой цилиндр и прямоугольный параллелепипед) для произвольной анизотричности;

показано, что сравнение независимых данных об удельной поверхности системы наночастиц и значений площади удельной поверхности, вычисленных по индикатрисе $MURP$ для набора модельных форм (эллипсоид, цилиндр, параллелепипед) и анизотричностей рассеивателей, позволяет выбрать наиболее вероятную форму и анизотричность рассеивателей;

разработан программный пакет (на языке Python), реализующий метод байесовского анализа для решения обратной задачи моделирования полидисперсной системы наночастиц и вычисление удельной поверхности, ассоциированной с модельной функцией распределения объемных долей по радиусам гирации, тестирование **показало** эффективность его применения на имитационных и экспериментальных кривых МУРР;

показано, что для плотной полидисперсной системы шарообразных частиц, вычисление функции распределения объемных долей по радиусам гирации из интенсивности МУРР без учета межчастичной интерференции приводит к существенным ошибкам;

предложен итерационный метод, в котором для случая плотной полидисперсной системы одновременно с функцией распределения объемных долей по радиусам гирации вычисляется структурный фактор, отвечающий искомому распределению ;

предложена для случая плотных полидисперсных систем наночастиц методика предварительной обработки натуральных кривых интенсивности МУРР, необходимая для устранения искажений кривой, обусловленных наличием в реальной системе больших агломератов частиц и внутрочастичных неоднородностей атомарного размера;

доказана эффективность итерационного метода вычисления функции распределения объемных долей по радиусам гирации на экспериментальных кривых интенсивности МУРР от порошковых образцов состава $ZrO_2+Y_2O_3$, синтезированных в широком диапазоне соотношения компонентов (при массовой доле Y_2O_3 от 2.7 до 44%).

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что применительно к проблематике диссертации эффективно, с получением обладающих новизной результатов:

предложен подход к интерпретации данных МУРР, основанный на универсальной функции распределения объемных долей по радиусам гирации, впервые позволяющий сравнивать функции распределения размеров для частиц разных форм (эллипсоид, цилиндр, параллелепипед) и произвольных

анизометричностей, тем самым существенно расширяющий набор моделей полидисперсной системы наночастиц и возможности выбора наиболее точной модели;

разработан метод байесовского анализа для решения обратной задачи моделирования полидисперсной системы наночастиц с критериями выбора сетки радиусов гирации и оптимального значения регуляризатора, позволяющий повысить точность вычисления функции распределения и оценить ее неопределенность;

подтверждена эффективность метода валидации модели полидисперсной системы наночастиц на основе оценок характеристик удельной поверхности и ее неопределенности, позволяющего уверенно проверять гипотезы о форме частиц-рассеивателей;

предложен итерационный метод одновременного вычисления функции распределения и структурного фактора на основе данных МУРР от плотных полидисперсных систем наночастиц, позволяющий учитывать вклад межчастичной интерференции в интенсивность рассеяния, и тем самым расширяющий возможности интерпретации данных МУРР для систем с большой долей заполнения объема рассеивающим веществом.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

1. Апробирован метод байесовского анализа для решения обратной задачи моделирования полидисперсных систем наночастиц на основе данных МУРР с использованием универсальной функции распределения объемных долей по радиусам гирации.

Практическое применение: разработанный метод интерпретации данных МУРР от разреженных систем может быть использован для вычисления функции распределения объемных долей наночастиц в разреженных порошковых и слабопористых материалах, а также в наноструктурированных наполнителях в составе композитных материалов.

Преимущество: предложенный подход с использованием универсальной функции распределения объемных долей по радиусам гирации значительно расширяет набор классов моделей полидисперсных систем наночастиц.

2. Разработан для широкого класса моделей метод валидации модели системы наночастиц на основе удельной поверхности и ее неопределенности, вычисленных по экспериментальной индикатрисе МУРР.

Практическое применение: разработанный метод валидации модели может быть использован для изучения морфологии наночастиц в составе комплексного исследования.

Преимущество: метод позволяет идентифицировать форму частицы с использованием независимой информации об удельной поверхности частиц.

3. Разработан итерационный метод совместного вычисления функции распределения и структурного фактора для интерпретации индикатрисы МУРР от полидисперсных систем с большой долей заполнения объема рассеивающим веществом.

Практическое применение: итерационный метод вычисления из интенсивности МУРР функции распределения объемных долей от плотных полидисперсных систем применим для порошковых и сильно пористых материалов.

Преимущество: позволяет учесть межчастичные интерференционные вклады в интенсивность МУРР.

Полученные в ходе выполнения работы результаты могут быть востребованы в научных и образовательных организациях РФ, специализирующихся по дифракционным исследованиям материалов, таких как:

1. Национальный исследовательский центр Курчатовский институт, г. Москва;
2. Институт кристаллографии имени А. В. Шубникова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», г. Москва;
3. Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова;
4. Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)», Московская область, г. Долгопрудный;

5. Объединённый институт ядерных исследований, Московская область, г. Дубна;
6. Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау Российской академии наук, Московская область, г. Черноголовка;
7. Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук, г. Москва;
8. Физико-технический институт имени А.Ф. Иоффе Российской академии наук, г. Санкт-Петербург;
9. Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Ленинградская обл., г. Гатчина;
10. Санкт-Петербургский государственный университет;
11. Национальный исследовательский университет ИТМО, г. Санкт-Петербург;
12. Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина), г. Санкт-Петербург;
13. Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, г. Санкт-Петербург;
14. Новосибирский государственный университет;
15. Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Свердловская область, г. Екатеринбург;
16. Институт ядерной физики им. Г.И. Будкера Сибирского отделения Российской академии наук, г. Новосибирск и др.

Оценка достоверности результатов исследования выявила, что научные положения, выводы и результаты, содержащиеся в диссертации, подтверждаются использованием признанных, апробированных и обоснованных математических методов, комплексным характером выполненных вычислительных экспериментов с использованием свободного программного обеспечения.

Разработанный программный пакет успешно был использован для: изучения морфологии частиц нанопорошка диоксида циркония, порошков, создаваемых в системах $ZrO_2-Gd_2O_3$ и $ZrO_2-Y_2O_3$ при гидротермальных условиях; моделирования

структуры порошков из углеродных частиц, полученных с помощью восстановления карбидных наноматериалов, порошковых наполнителей из наночастиц детонационных наноалмазов и оксида кремния в составе композитного материала. Результаты применения разработанных в диссертации методов при комплексном исследовании указанных полидисперсных систем наночастиц показали хорошее согласие с результатами методов, независимых от МУРР.

Основные результаты докладывались и обсуждались на следующих конференциях:

1. XL – XLIII, научных и учебно-методических конференциях Университета ИТМО (2011-2014 гг., г. СПб)
2. I, III и X Конгрессы молодых Ученых (2012, 2014, 2021гг., г. СПб)

Личный вклад соискателя:

- Анализ литературных источников по теме диссертации.
- Введение функции распределения объемных долей по радиусам гирации и участие в постановке задачи моделирования при помощи этой функции полидисперсной системы по данным МУРР.
- Получение основного уравнения, связывающего интенсивность МУРР с функцией распределения объемных долей по радиусам гирации для различных типов единичных рассеивателей.
- Выбор метода решения обратной задачи восстановления функции распределения объемных долей по интенсивности малоуглового рассеяния от полидисперсной системы наночастиц.
- Модификация метода байесовского анализа для вычисления распределения объемных долей по радиусам гирации и разработку метода выбора оптимальных параметров модели на основе системы критериев.
- Разработка метода определения типа модели рассеивателя на основе экспериментальных данных об удельной поверхности.
- Разработка итерационного метода решения задачи для систем шарообразных частиц с учетом межчастичных интерференционных вкладов в интенсивность рассеяния.

- Проектирование и разработка пакета программ для вычисления функции распределения объемных долей по радиусам гирации по данным МУРР, а также web-приложения для хранения данных натурального и модельного экспериментов.
- Проведение и интерпретация результатов имитационных экспериментов, показывающих эффективность предложенных методов.
- Обработка и анализ полученных данных.
- Подготовка научных публикаций по тематике исследования совместно с соавторами.
- Представление результатов работы на конференциях.

На заседании 11 февраля 2026 года диссертационный совет принял решение присудить **Кучко Артёму Владимировичу** ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 16 человек, из них 16 докторов наук, участвовавших в заседании, из 21 человека, входящих в состав совета, дополнительно введены на разовую защиту 0 человек, проголосовали: за – 16, против – нет, недействительных бюллетеней – нет.

Председатель
диссертационного совета
д.т.н., профессор



В.Е. Курочкин

Ученый секретарь
диссертационного совета
д.ф.-м.н.

А.Л. Буляница

Дата оформления заключения

11 февраля 2026 г.

М.П.