

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Петра Валерьевича Конарева
«Развитие и применение методов анализа данных малоуглового
рентгеновского рассеяния многокомпонентными биологическими
системами»,

представленной на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8 – «Физика конденсированного состояния»

Важнейшей особенностью метода малоуглового рентгеновского рассеяния является возможность анализа внутренней структуры упорядоченных, частично упорядоченных и разупорядоченных систем, что позволяет получать структурную информацию о системах с хаотическим распределением неоднородностей электронной плотности на надмолекулярном уровне в нанометровом диапазоне размеров. Метод дает возможность получать адекватные структурные характеристики различных дисперсных материалов в их естественной среде и в любом агрегатном состоянии, то есть анализировать структуру синтезируемых комплексов и композитов без какой-либо их предварительной обработки и подготовки к измерениям, исключая таким образом нежелательные структурные изменения в образцах при манипуляции с ними.

В диссертации П.В. Конарева рассматриваются методологические аспекты алгоритмов и программ анализа данных малоуглового рентгеновского и нейтронного рассеяния (МУРР/МУРН) для расчета объемных долей компонентов в белковых и липидных смесях, распределений частиц по размерам, а также определения формы неизвестных промежуточных состояний макромолекул в растворах по данным рассеяния. Особое внимание в работе уделяется способам оценки информативности данных МУРР/МУРН, что очень важно, поскольку решаемая обратная задача зачастую плохо обусловлена, что создает дополнительные препятствия для получения решений, имеющих физический смысл.

Большой интерес представляют результаты оценки эффективности работы *ab initio* алгоритмов, полученные автором для макромолекулярных комплексов типа «белок-нуклеиновая кислота», т.е. частиц с неоднородной электронной плотностью. Показано, что использования одной экспериментальной кривой в этом случае недостаточно. Итеративный алгоритм (программа DENSS) не позволяет корректно восстанавливать внутреннюю структуру комплексов и приводит к систематически повышенной плотности в ее центральной части. Одновременно продемонстрирована надежность восстановления трехмерной формы частиц программой MONSA (использующей многофазный *ab initio* алгоритм) по набору экспериментальных кривых МУРР/МУРН.

Автором реализован набор графических приложений, позволяющих проводить интерактивное моделирование данных МУРР/МУРН, как в случае монодисперсных, так и полидисперсных изотропных систем. Стоит подчеркнуть, что моделирование в интерактивном режиме дает дополнительные степени свободы пользователям и позволяет подбирать оптимальные значения параметров используемой модели. Время, требуемое для обработки и сопоставления полученных трехмерных структур, играет заметную роль в процессе анализа данных, поэтому его оптимизация также является важной задачей. В этой связи, представленный в работе новый подход по суперпозиции макромолекулярных моделей с использованием разложения на сферические гармоники и критерием корреляции в обратном пространстве, более чем в 10 раз ускоривший расчеты по сравнению с имеющимися алгоритмами, позволил существенно расширить возможности для интерактивного моделирования.

По представленным в автореферате данным о работе можно судить как о высококачественном теоретическом и экспериментальном исследовании с применением разработанных автором подходов и программ обработки кривых рассеяния МУРР/МУРН. Получены новые интересные и важные результаты, связанные с определением структуры изучаемых макромолекул и их комплексов.

К замечаниям технического характера следует отнести:

1. На странице 12 пропущена буква «Н» в сокращенном названии метода «МУРН»: «Для набора экспериментальных данных МУРР/МУР можно построить его усеченное приближение...».
2. На странице 26 имеется опечатка в предложении «Также показано, что количество мультислойных везикул в растворе уменьшается с увеличением количеством проходов через поликарбонатные мембраны...» вместо слова «количеством» следует читать «количества».
3. На странице 38 имеется огреха в предложении «Впервые удалось выявить случайно-столкновительный механизм...» Слово «столкновитель-ный» следует писать без дефиса «столкновительный».

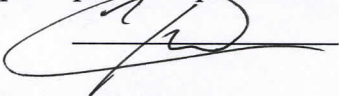
Однако, перечисленные замечания носят частный характер и не снижают научной значимости работы.

Результаты диссертационной работы прошли апробацию на многочисленных российских и международных конференциях, в том числе на зимних школах и специализированных конференциях НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ. По теме диссертации опубликовано 117 печатных работ в рецензируемых журналах, рекомендованных ВАК. Без сомнения, представленная работа соответствует требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени доктора физико-математических

наук, а ее автор, Конарев Петр Валерьевич, заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8. «Физика конденсированного состояния».

«05» марта 2024 г.

Григорьев Сергей Валентинович



Доктор физико-математических наук
по специальности 01.04.07. «Физика конденсированного состояния»,
главный научный сотрудник
Федерального государственного бюджетного учреждения
«Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова
Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»
(НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ)

Адрес: 188300, Ленинградская обл., г. Гатчина, мкр. Орлова роща, д. 1
Телефон: +7(81371) 46561
e-mail: grigoryev_sv@pnpi.nrcki.ru

Подпись Григорьева С.В. удостоверяю

Ученый секретарь
НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ
кандидат физ.-мат. наук



С.И. Воробьев