

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Панчука Виталия Владимировича

«РАЗВИТИЕ ЯДЕРНОЙ ГАММА-РЕЗОНАНСНОЙ И РЕНТГЕНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ НА ОСНОВЕ ХЕМОМЕТРИЧЕСКИХ ПОДХОДОВ»,

представленной соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.2 - Приборы и методы экспериментальной физики.

Диссертационная работа Панчука В.В. посвящена решению одной из актуальных задач экспериментальной физики – развитие способов обработки экспериментальных результатов, получаемых методами ядерной гамма-резонансной и рентгеновской спектроскопии на основе хемометрических подходов, что способствует расширению аналитических возможностей этих методов с одновременным улучшением аналитических характеристик при выполнении количественного, вещественного и фазового анализа.

Соискатель последовательно сформулировал цели для решения и решил следующие задачи:

- Разработал общую схему способа проведения количественного анализа в методе мессбауэровской спектроскопии, включающей оптимизацию условий измерения спектров и их обработку, использование распространенных и легкодоступных образцов сравнения, что позволило проводить количественный анализ в мессбауэровской спектроскопии с меньшими погрешностями по сравнению с ранее известными способами.
- Обосновал применение способа ПЛС-регрессии для обработки рентгеновских спектров, что позволило увеличить точность определения следовых количеств аналита в многоэлементных образцах.

- Продемонстрировал возможность идентификации степени окисления железа и определении его доли путем хемометрической обработки рентгеновских спектров анализируемых образцов.
- Разработал способ переноса градуировочных моделей между различными аналитическими методами.
- Предложил и экспериментально апробировал оптимизацию способа многомерного разрешения кривых с корреляционными ограничениями (СС-MCR) для построения градуировочных моделей с малым числом градуировочных образцов.
- Предложил процедуру фильтрации спектральных сигналов на основе ПЛС регрессии и продемонстрировал, что в количественном анализе применение процедуры ПЛС фильтрации позволяет уменьшить погрешность при определении содержания аналита.

Научные работы соискателя имеют практическую завершённость. Результаты работы достаточно отражены в 19 статьях (среди которых 12 статей в журналах, входящих в базы данных Web of Science или Scopus; и 7 других в журналах, рекомендованных ВАК для защиты диссертаций), 1 глава в коллективной монографии.

По тексту автореферата можно сделать несколько замечаний; приведу два:

1. Выполненные соискателем работы могут найти применение в аналитической химии, что отмечено в первом же предложении автореферата.

- К сожалению, соискатель не публиковал свои работы в отечественных журналах по аналитической химии (Журнал аналитической химии, Заводская лаборатория, Аналитика и контроль). Доклады на трёх аналитических конференциях в 2015, 2017, 2019 гг. (и четвёртый доклад в 2021 г.) могут пройти незамеченными.

- Как следствие этого в автореферате встречаются неудачные употребления терминов. Вопрос о правомерности использования соискателем термина «методология» может быть дискуссионным. В прикладном смысле, если соискатель рассматривает методологию как комплекс принципов и подходов исследовательской деятельности, на которые опирается исследователь в ходе получения и разработки знаний в рамках конкретной дисциплины (аналитической химии), то использование этого термина условно правомерно. Однако методология – это наука о методе и в настоящей работе применимо только к методам ядерной гамма-резонансной и рентгеновской спектроскопии. Поэтому выражения «... методологии обработки получаемых данных», «методов хемометрики в контексте химических исследований», «методов машинного обучения» на третьей странице реферата, «... метода проекций на латентные структуры» на пятой странице автореферата, «...метода многомерного разрешения» на седьмой странице реферата неудачные. Также неудачными являются выражения «анализируемых элементов» и «... при количественном анализе следовых количеств» - здесь вместо слов «анализируемых» и «анализе» уместны слова «определяемых» и «определении». Неудачные терминологические выражения есть и в Заключение: пп. 1, 2, 3, 6. Следует отметить, что это единичные случаи; в основном в тексте автореферата корректное употребление терминов.
- Результаты в табл. 2 на стр. 18 автореферата не достаточно информативны; под термином «линейная регрессия» обычно подразумевается двухчленное уравнение и любой способ учета (в данном случае наложения спектральных линий) даст значительное улучшение результатов. Если использовалось многочленное линейное уравнение (наложение спектральных линий – эффект первого порядка), то это уравнение следовало привести, поскольку идет сравнение «с

традиционно-применяемыми методами обработки данных» (п. 3
Заключения).

2. **Положения выносимые на защиту** излишне многословны и более
подходят для **Практической значимости**.

Несмотря на сделанные отдельные замечания (в основном терминологические) по тексту автореферата, автореферат Панчука В.В. написан понятным языком, с последовательным изложением целей, задач и решений. Работа удовлетворяет требованиям ВАК, предъявляемым к докторским диссертациям, она выполнена на высоком научном и методическом уровне, её результаты найдут своё применение в аналитической химии, а соискатель заслуживает присвоения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.2 - Приборы и методы экспериментальной физики.

Ведущий научный сотрудник
ООО «Прецизионные технологии»
доктор технических наук
по специальности 02.00.02-аналитическая химия



Калинин Борис Дмитриевич

Адрес: 189412, Санкт-Петербург, ул. Швейцарская, д. 6, кв. 8.

Телефон: 8 965 067 7476; E-mail: kalinin_boris@mail.ru

Генеральный директор
ООО «Прецизионные технологии»
кандидат технических наук



С.К. Савельев

04 марта 2022 г.

