

ОТЗЫВ

**официального оппонента о диссертации Панчука Виталия Владимировича
«РАЗВИТИЕ ЯДЕРНОЙ ГАММА-РЕЗОНАНСНОЙ И РЕНТГЕНОВСКОЙ
СПЕКТРОСКОПИИ НА ОСНОВЕ ХЕМОМЕТРИЧЕСКИХ ДХОДОВ»,**

представленной на соискание

ученой степени доктора физико-математических наук

по специальности 1.3.2 – Приборы и методы экспериментальной физики

Диссертационная работа Виталия Владимировича Панчука посвящена разработке хемометрических подходов для расширения аналитических возможностей рентгенофлуоресцентного анализа и мессбауэровской спектроскопии. Иными словами, работа посвящена разработке получения новых данных с помощью математических методов обработки и анализа большого количества экспериментальных данных и поиску различного рода закономерностей между ними. Предполагалось также попытаться улучшить аналитические характеристики рентгенофлуоресцентной и мессбауэровской спектроскопий при их использовании для элементного и фазового анализов материалов.

Актуальность избранной темы

Рентгенофлуоресцентный анализ является не разрушающим, и экспрессным методом, пригодным для исследования вещества в любом агрегатном состоянии – все это делают этот метод эффективным для решения проблем аналитической химии в материаловедении, экологии, геологии, минералогии, археологии и др. Однако, как и любая экспериментальная методика, для использования рентгенофлуоресцентного анализа в современных исследованиях материалов, содержащих большое число

химических элементов, требуются новые методические решения, повышение чувствительности и расширение аналитических возможностей. Хотя область аналитического применения мессбауэровской спектроскопии существенно меньше, но использование мессбауэровской спектроскопии вместе с рентгенофлуоресцентным анализом позволяет детально характеризовать элементный и фазовый состав анализируемого материала. *Таким образом, тема диссертационной работы Виталия Владимировича Панчук удовлетворяет критерию актуальности.*

Новизна исследования, полученных результатов, выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертации.

Наиболее очевидными элементами научной новизны диссертационной работы являются:

- предложены новые математические подходы к обработке данных рентгенофлуоресцентного анализа и мессбауэровской спектроскопии;
- разработан новый подход к проведению количественного анализа методом мессбауэровской спектроскопии с использованием образцов сравнения, отличающихся по составу от анализируемых образцов;
- обоснован способ конвертации экспериментальных данных между методами, основанными на различных физических принципах для создания универсальных градуировочных моделей;
- разработан хемометрический подход для определения степени окисления элементов методом рентгенофлуоресцентного анализа;

Значимость для науки и практики полученных автором результатов представляется несомненным поскольку они имеют принципиальное значение для разработки и поиска новых подходов к проведению количественного и качественного анализа методами мессбауэровской и рентгеновской спектроскопий. Оказалось возможным:

- сократить трудоемкость и время выполнения анализов;
- повысить чувствительность и расширить аналитические возможности методов;
- уменьшить в несколько раз погрешность количественного определения различных форм аналита в объектах;
- автоматизировать процесс обработки мессбауэровских спектров;
- создать универсальные градуировки для определения содержания аналитов с помощью разнообразных аналитических инструментов.

Степень достоверности и обоснованности научных положений, выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертации обеспечивается корректностью применяемых для решения поставленных задач математических подходов; большим объемом экспериментальных данных, подтверждающих основные выводы и научные положения, полученных с использованием современных инструментальных средств; использованием стандартных, аттестованных референтными методами образцов известного состава как для построения применяемых в работе моделей, так и для их проверки; а также результатами практической апробации разработанных методик анализа. Построение математических моделей и обработка полученных данных были осуществлены с использованием адекватного программного обеспечения.

Достоверны и обоснованы положения, выносимые на защиту.

Апробация работы. Материалы диссертации представлены на 11 всероссийских и международных научных конференциях. По результатам работы опубликованы 20 печатных работ (среди которых 12 статей в журналах, входящих в базы данных Web of Science или Scopus; 7 статей в других в журналах, рекомендованных ВАК для защиты диссертаций; и 1 глава в коллективной монографии).

Следует рекомендовать использовать результаты и выводы диссертации в организациях, ведущих научные и прикладные исследования в области физики высокотемпературной сверхпроводимости (Физико-техническом институте РАН (Санкт-Петербург), Санкт-Петербургском государственном университете, Московском государственном университете, Санкт-Петербургском политехническом университете Петра Великого).

Структура диссертационной работы.

Диссертационная работа состоит из Введения, восьми глав и раздела Заключение.

Во введении сформулированы цель и задачи диссертационной работы, рассмотрены актуальность, научная новизна и практическая значимость работы.

В первой главе дается общая характеристика методов рентгенофлуоресцентного анализа и мессбауэровской) спектроскопии и сформулирован подход для улучшения аналитических характеристик и возможностей указанных методов, который заключается в применении современных методов обработки многомерных данных (хеометрических методов). На основании обзора литературы, сформулированы конкретные задачи, решаемые в настоящей работе.

Во второй главе рассмотрена методология проведения количественного анализа методом абсорбционной мессбауэровской спектроскопии. Предлагается оптимизировать проведения мессбауэровского эксперимента, используя градуировочной зависимости аналитического сигнала от концентрации резонансных атомов с помощью образцов сравнения, отличающихся по составу от анализируемых образцов. Рассмотрена оптимизация условий проведения мессбауэровского эксперимента, что позволило существенно сократить время эксперимента без потери качества получаемой информации. Предложен алгоритм по оптимизации мессбауэровского эксперимента в геометрии

поглощение. В этой же главе предлагается алгоритм мессбауэровского эксперимента для проведения количественного анализа, который был апробирован при определении различных форм железа в стандартных и железосодержащие руды образцах.

В третьей главе рассматриваются возможности применения многомерного разрешения кривых для обработки серии мессбауэровских спектров. Возможности метода иллюстрируются на трех сериях модельных и реальных спектров.

В четвертой главе рассмотрена возможность повышения чувствительности энергодисперсионной рентгенофлуоресцентной спектроскопии за счет применения метода проецирование на латентные структуры на примере количественного элементного анализа раствора смеси лантанидов низкой концентрации. Эффективность дизайна была продемонстрирована на модельных и реальных спектрах трех- и четырехкомпонентных смесей.

В пятой главе рассматривается способ конвертация экспериментальных данных между различными аналитическими инструментами, основанными на различных физических принципах. Полученные результаты преобразования как модельных, так и реальных спектральных данных демонстрируют, что метод прямой стандартизации может быть использован для конвертации аналитических сигналов между двумя различными аналитическими методами.

В шестой главе продемонстрированы возможности хемометрической обработки данных для определения степени окисления аналита. В настоящей работе возможности такого подхода были изучены на примере определения степени окисления железа.

Глава 7 посвящена изучению возможностей применения многомерного разрешения кривых для анализа сложных смесей с малым числом градуировочных образцов..

В главе 8 предложен метод сглаживания спектральных данных, основанный на методе проецирования на латентные структуры. Цель этой процедуры заключается в увеличении соотношения сигнал/шум в спектре, что позволяет повысить качество спектра и впоследствии получить более точные и воспроизводимые результаты при окончательной обработке спектров в ИК-спектроскопии, масс-спектроскопии, рентгено-флуоресцентной спектроскопии и т.д.

В заключении обобщены основные результаты работы и выводы

Диссертационная работа не лишена и ряда недостатков:

1. В первой главе предлагается методология оптимизации абсорбционного мессбауэровского эксперимента, однако эта проблема рассматривалась многими учеными, не вполне понятно в чем новизна этой части работы.
2. Предлагаемый способ серийной обработки мессбауэровских спектров, основанный на многомерном разрешении кривых, был апробирован на наборах спектров, в которых параметры мультиплетов отдельных состояний резонансных атомов практически не изменяются. На практике параметры мультиплетов могут изменяться достаточно сильно, например такая ситуация возникает при исследовании процессов релаксации. Не понятно как при этом будет работать предложенный подход.
3. Не вполне ясен смысл процедуры переноса данных между методами. Даже если в перспективе на основе данного подхода удастся создать универсальную градуировку, которую можно будет использовать на различных приборах, то

для переноса все равно потребуются стандартные образцы. Не проще ли в таком случае будет построить отдельную градуировку на каждом приборе?

4. Предложенный в главе 4 способ количественного анализа на основе ПЛС-регрессии был апробирован только на определении содержания лантанидов в растворах. Для каких еще объектов можно будет применять данный подход?

5. Диссертационная работа носит явно прикладной характер с уклоном в аналитическую химию (что не удивительно поскольку выполнена на кафедре аналитической химии). Но вопрос - где патенты, свидетельства о внедрении и т.п.

Однако отмеченные недостатки не снижают высокий уровень выполненного диссертационного исследования.

Оценка содержания диссертации и ее завершенности

Работа представляет собой завершенное научное исследование, выполнена на высоком экспериментальном уровне, в литературном обзоре представлены современные модели, и эти модели широко используются соискателем для описания собственных экспериментов.

Автореферат отражает содержание диссертации.

Таким образом, диссертация Панчука Виталия Владимировича является научно-квалификационной работой, в которой содержится решение крупной научной проблемы, а именно разработаны и реализованы хемометрические подходы для расширения аналитических возможностей рентгенофлуоресцентной и мессбауэровской спектроскопий с одновременным улучшением аналитических характеристик методик выполнения элементного и фазового анализа. имеющая значение для развития приборов и методов экспериментальной физики, что соответствует требованиям п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г. № 842, предъявляемым к

диссертациям на соискание ученой степени доктора наук, а ее автор заслуживает присуждения искомой ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.2 – Приборы и методы экспериментальной физики.

доктор физико-математических наук,
профессор,



Серегин Павел Павлович

профессор кафедры «Физической электроники» Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Российский государственный педагогический университета им. А.И. Герцена»

контактная информация

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Российский государственный педагогический университета им. А.И. Герцена»

191186, Санкт-Петербург, набережная реки Мойки, д. 48

Тел.: +79213100200

E-mail: ppseregin@mail.ru

РГПУ им. А.И. Герцена

подпись *П. П. Серегин*



Великий документовед
для персонала
и социальной работы

В.В. Рубячак

удостоверяю *02* *02* *2019* года

Отдел персонала и социальной работы

Управления кадров и социальной работы