

УТВЕРЖДАЮ:

Проректор по научной работе

/С.В.Микушев/

«13» апреля 2021 г.



ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет»

Диссертация «РАЗВИТИЕ ЯДЕРНОЙ ГАММА-РЕЗОНАНСНОЙ И РЕНТГЕНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ НА ОСНОВЕ ХЕМОМЕТРИЧЕСКИХ ПОДХОДОВ» выполнена на кафедре аналитической химии Института химии Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет» и в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте аналитического приборостроения РАН.

В период подготовки диссертации соискатель

ПАНЧУК Виталий Владимирович

работал на кафедре аналитической химии Института химии Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет» в должности доцента и по совместительству в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте аналитического приборостроения РАН в должности научного сотрудника.

В 2002 г. окончил Санкт-Петербургский государственный университет по специальности «Программное обеспечение вычислительной техники и автоматизированных систем». Ученая степень кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.02 – «аналитическая химия» присуждена 20.10.2005 г. диссертационным советом Санкт-Петербургского государственного университета.

Научный консультант Кирсанов Дмитрий Олегович, доктор химических наук, профессор кафедры аналитической химии Института химии Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет».

По итогам обсуждения принято следующее заключение.

Необходимость создания новых материалов и технологий требует постоянного совершенствования методов химического анализа состава сырья, промежуточных и конечных продуктов. Среди методов элементного анализа особое место занимают рентгеновская спектроскопия (рентгенофлуоресцентный анализ, РФА) и ядерная гамма-резонансная спектроскопия (мессбауэровская спектроскопия, МС). Сочетание этих методов позволяет получать взаимодополняющую информацию об анализируемом образце, что широко используется при анализе различных объектов в промышленности, материаловедении, экологии, геологии, минералогии, археологии, искусстве и т.д. Не смотря на широкий спектр разработанных к настоящему времени способов анализа в рамках этих методов, в условиях бурно развивающейся практики сохраняется необходимость поиска новых методических решений, и этим определяется актуальность темы диссертации.

Поставленные в диссертации задачи заключались в улучшении метрологических характеристик (снижения погрешностей анализа, повышении селективности и чувствительности) и в расширении аналитических возможностей используемых методов. Наиболее успешным оказался подход, основанный на развитии методологии обработки экспериментальных данных. Быстрый прогресс в области применения методов машинного обучения (методов хемометрики в контексте химических исследований) позволил существенно улучшить качество и количество аналитической информации, получаемой с помощью современных инструментальных методов за счет одновременного использования большого числа сигналов при обработке экспериментальных данных.

Диссертация В.В.Панчука посвящена разработке хемометрических подходов для расширения аналитических возможностей РФА и мессбауэровской спектроскопии с одновременным улучшением аналитических характеристик методик выполнения вещественного и фазового анализа. В ней продемонстрированы возможности метода главных компонент (МГК), метода проекций на латентные структуры (ПЛС), метода многомерного разрешения кривых (МРК), и других методов для повышения чувствительности РФА; серийной обработки мессбауэровских спектров с целью извлечения качественной и количественной информации; создания методологии вещественного анализа методом РФА; фильтрации спектральных данных; созданию подходов к разработке универсальных регрессионных моделей, позволяющих проводить количественный анализ с использованием данных, полученных от методов, основанных на различных физических принципах.

В диссертации найдены новые подходы к проведению количественного и качественного анализа методами мессбауэровской и рентгеновской спектроскопий. Найденные методические решения позволили сократить трудоемкость и время выполнения анализов, повысить чувствительность и расширить аналитические возможности методов без модернизации аналитического оборудования или усложнения процедуры анализа. Этим определяется практическая ценность результатов диссертации.

Научная новизна полученных результатов заключается в нахождении новых математических подходов к обработке данных, получаемых в РФА и МС; новом подходе к проведению количественного анализа методом мессбауэровской спектроскопии с использованием образцов сравнения, отличающихся по составу от анализируемых образцов; обосновании применимости метода многомерного разрешения кривых для серийной обработки мессбауэровских спектров реальных образцов с установлением основных преимуществ и ограничений метода; разработке общей схемы определения содержания следовых количеств металлов в водных растворах методом энерго-дисперсионного рентгенофлуоресцентного анализа с применением хемометрических подходов; обосновании способа конвертации экспериментальных данных между методами, основанными на различных физических принципах для создания универсальных градуировочных моделей; разработке хемометрических подходов для определения степени окисления элементов методом рентгенофлуоресцентного анализа; использования метода проекций на латентные структуры для фильтрации спектральных данных.

Достоверность полученных результатов 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.

Основные результаты диссертации, представляющие несомненную научную новизну, достаточно полно опубликованы. Личный вклад автора в работы, опубликованные в соавторстве с другими исследователями, который заключался в

постановке задач исследования, проведении экспериментальных измерений, построении математических моделей для обработки экспериментальных данных, обсуждении результатов и формулировании выводов, представляется определяющим.

Тема диссертации, методы исследования, результаты и положения выносимые на защиту полностью соответствуют выбранной специальности 01.04.01 – приборы и методы экспериментальной физики и отрасли физико-математических наук.

Диссертация

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

ПАНЧУКА Виталия Владимировича

рекомендуется к защите на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.01 — «Приборы и методы экспериментальной физики».

Проект заключения принят на заседании экспертной группы, сформированной распоряжением директора Центра экспертиз СПбГУ от 06.04.2021 №1154/1р в составе 4-х чел. Присутствовало на заседании 4 чел. Результаты голосования: «за» -4 чел., «против» - нет, протокол №1 от «09» апреля 2021 г.


(подпись председателя экспертной группы)

(Митропольский Иван Андреевич,
доктор физ.-мат. наук, профессор
кафедра ядерно-физических методов
исследования, профессор)

