

Отзыв

официального оппонента на диссертацию на соискание ученой степени доктора физико-математических наук Панчука Виталия Владимировича на тему: «Развитие ядерной гамма-резонансной и рентгеновской спектроскопии на основе хемометрических подходов» по специальности 1.3.2 – Приборы и методы экспериментальной физики

Актуальность темы

Разработка новых подходов к обработке данных в спектральных методах в значительной степени определяет их развитие, обеспечивая улучшение их метрологических характеристик и расширение аналитических возможностей. В последние годы наблюдается устойчивый интерес к применению хемометрических подходов для обработки данных в различных аналитических методах, где эти подходы демонстрируют существенно лучшую эффективность по сравнению с традиционными в этих методах способами обработки данных. Однако в таких широко распространенных методах, как ядерная гамма-резонансная (мессбауэровская) и рентгенофлуоресцентная спектроскопия хемометрические алгоритмы, не смотря на их огромный потенциал, к настоящему времени нашли лишь ограниченное применение. С этой точки зрения тема диссертационной работы Панчука В.В., посвященная развитию хемометрических принципов обработки данных в ядерной гамма-резонансной и рентгенофлуоресцентной спектроскопии является актуальной.

Полученные результаты и их новизна

В ходе проведенных исследований автором предложен оригинальный способ определения содержания резонансных атомов методом мессбауэровской спектроскопии и продемонстрированы его преимущества по сравнению с описанными в литературе подходами. Кроме того предложен способ серийной обработки мессбауэровских спектров на основе метода многомерного разрешения кривых с целью извлечения качественной и количественной информации анализируемых объектов.

Автором продемонстрирована возможность определение следовых содержаний элементов методом энергодисперсионной рентгенофлуоресцентной спектроскопии в сочетании с ПЛС-регрессией. При этом точность определения элементов становится сопоставима с более сложным и дорогим рентгенофлуоресцентным анализом в условиях полного внешнего отражения.

Доказана возможность переноса данных хемометрическими методами между спектрометрами, работающими на различных физических принципах.

Разработан новый метод сглаживания спектральных данных на основе алгоритма ПЛС-регрессии, позволяющий в несколько раз улучшать качество спектров без существенного искажения спектральных линий.

Предложен способ определения степени окисления железа методом рентгенофлуоресцентной спектрометрии на основе хемометрических подходов. Эффективность способа продемонстрирована на примере анализа реальных образцов сложного состава.

Все полученные автором результаты являются новыми и вносят существенный вклад в расширение экспериментальных возможностей методов мессбауэровской и рентгеновской спектроскопии.

Степень обоснованности научных положений и достоверность полученных результатов и выводов

Панчуком В.В. подробно изучены и критически проанализированы работы, опубликованные в открытой печати, посвященные применению хемометрических методов в Мессбауэровской и рентгенофлуоресцентной спектроскопии. На основании литературных данных автор диссертации обосновал цель исследования и применяемые методы, а также сформулировал общую направленность работы. Достоверность и обоснованность полученных результатов и выводов обеспечивается применением для получения экспериментальных данных современного оборудования, использованием корректных методик измерений, корректностью применяемых математических алгоритмов обработки экспериментальных данных, статистическим анализом получаемых результатов и представительными выборками образцов, обеспечивающих общность сделанных выводов. Достоверность полученных результатов также подтверждается тем, что

они отражены в научных работах, опубликованных в журналах мирового уровня, посвященных рассматриваемым в работе проблемам.

Практическая значимость полученных результатов

Проведенные автором исследования наглядно демонстрируют эффективность хемометрических подходов для извлечения аналитической информации из мессбауэровских и рентгенофлуоресцентных спектров, а предложенные способы анализа и разработанные алгоритмы могут лечь в основу методик анализа широкого круга объектов. Предложенная методология проведения оптимального мессбауэровского эксперимента и разработанный метод серийной обработки мессбауэровских спектров на основе многомерного разрешения, который позволяет существенно сократить трудоемкость и время обработки спектров, будут востребованы во многих экспериментальных лабораториях работающих в области мессбауэровских исследований.

Оформление диссертации и апробация результатов

Диссертационная работа состоит из введения; главы, посвященной обзору литературы, из которого логично вытекают основные задачи работы; семи глав, посвященных их решению; и заключения обобщающего основные результаты и выводы, полученные в работе. В целом диссертация написана понятным языком, а материал четко изложен. Результаты работы опубликованы 19 статьях, в рецензируемых журналах, рекомендованных Минобрнауки для защиты докторских диссертаций, в том числе и в индексируемых в библиографических базах Scopus и Web of Science и одной коллективной монографии. Основные результаты докладывались на многочисленных всероссийских и международных конференциях. Содержание автореферата соответствует содержанию диссертации.

Замечания и вопросы по диссертации

По прочтении диссертации возникли следующие вопросы:

- В работе показаны возможности метода многомерного разрешения кривых для серийной обработки мессбауэровских спектров. Будут ли этот метод так же эффективен при обработке отдельных спектров?

- Эффективность применения хемометрики для количественного анализа в РФА продемонстрирована на примере анализа низко концентрированных растворов, где матричные эффекты в основном проявляются в наложении спектральных линий. Будут ли предложенные способы эффективны для анализа образцов с более сложными матричными эффектами, связанными с поглощением и рассеянием рентгеновского излучения?

- Применим ли способ конвертации данных между инструментами, основанными на различных физических принципах, описанный в пятой главе, для межлабораторных сравнительных испытаний?

- В шестой главе предлагается способ определения степени окисления по РФА спектрам. Но использование химических сдвигов рентгеновских линий для решения этой задачи. В чем предлагаемый метод превосходит предложенные ранее способы определения степени окисления по сдвигам рентгеновских линий?

- В работе предлагается метод фильтрации шумов, который «позволяет значительно улучшить отношение сигнал / шум без существенного искажения параметров линии (ширина, положение, амплитуда)» (стр. 212-213 диссертации). Возникает вопрос, «значительно» это на сколько, и как понимать «без существенного»?

В качестве общего замечания к диссертации следует отметить отдельные технические небрежности и опечатки.

Указанные вопросы и замечания не снижают общей ценности диссертационной работы.

Заключение

Диссертационная работа Панчука Виталия Владимировича на тему “Развитие ядерной гамма-резонансной и рентгеновской спектроскопии на основе хемометрических подходов” является законченной научно-квалификационной работой выполненной на высоком уровне. Полученные в работе результаты и выводы являются обоснованными и достоверными, и их можно рассматривать как крупный вклад в развитие методов ядерной гамма-резонансной и рентгеновской

спектроскопии. Таким образом, диссертация полностью соответствует требованиям п.9. «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 №842, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.2 – приборы и методы экспериментальной физики.

Официальный оппонент,
ведущий научный сотрудник
Физико-технического института
им. А.Ф. Иоффе РАН,
доктор физико-математических наук

Камзин Александр Сергеевич.

Контактная информация:

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской Академии Наук,
194021, Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
Тел. +7(921)9666616
e-mail: ASKkam@mail.ioffe.ru

Юршиев
Камзина А.С.
удостоверено
Исполнитель секретаря
ФТИ им. А.Ф.Иоффе



Сазов М.И.