



НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР «КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ»

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
«Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»
(НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ)

мкр. Орлова роща, д. 1, г. Гатчина, Ленинградская область, 188300
Телефон: (81371) 4-60-25, факс: (81371) 3-60-25. E-mail: dir@rpi.nrcki.ru
ОКПО 02698654, ОГРН 1034701242443, ИНН 4705001850, КПП 470501001

УТВЕРЖДАЮ

Заместитель директора по научной работе
НИЦ «Курчатовский институт – ПИЯФ»

№ 26



В.В.Воронин/

« 16 » сентября 2022 г.

ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

Федерального государственного бюджетного учреждения «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова» НИЦ «Курчатовский институт» на диссертацию ПАНЧУКА Виталия Владимировича «РАЗВИТИЕ ЯДЕРНОЙ ГАММА-РЕЗОНАНСНОЙ И РЕНТГЕНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ НА ОСНОВЕ ХЕМОМЕТРИЧЕСКИХ ПОДХОДОВ», представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.2 – приборы и методы экспериментальной физики

Диссертация В.В.Панчука посвящена разработке хемометрических методов для расширения аналитических возможностей рентген-флуоресцентного анализа и мессбауэровской спектроскопии с одновременным

улучшением аналитических характеристик методик выполнения вещественного и фазового анализа. В ней продемонстрированы возможности метода главных компонент, метода проекций на латентные структуры, метода многомерного разрешения кривых, и других методов для повышения чувствительности рентген-флуоресцентного анализа (РФА); серийной обработки мессбауэровских спектров с целью извлечения качественной и количественной информации; создания методологии рентген-флуоресцентного анализа состава вещества; 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.

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 (в частности метод 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. Несмотря 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.

В диссертации В.В.Панчука найдены новые подходы к проведению количественного и качественного анализа методами мессбауэровской и рентгеновской спектроскопии. 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. Разработанные методы обработки экспериментальных данных могут быть рекомендованы для использования и внедрения в отраслевых лабораториях и научно-исследовательских организациях, использующих в своей практике методы РФА и МС (ФТИ им. А.Ф. Иоффе, ИФМ УрО РАН, ГЕОХИ РАН, ИЗК СО РАН, ИФМ РАН, предприятия и организации Росатома). Кроме того, материалы диссертации могут быть использованы в образовательной деятельности в МГУ, СПбГУ, КФУ.

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 рентген-флуоресцентного 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 рентген-флуоресцентного анализа; использования метода проекций на латентные структуры для фильтрации спектральных данных.

Достоверность полученных результатов обеспечивается корректностью применяемых для решения поставленных задач математических подходов и адекватного программного обеспечения; 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, прошли апробацию на научных конференциях и известны специалистам. Тема диссертации В.В.Панчука, применяемые методы исследования, полученные результаты и выносимые на защиту положения полностью соответствуют выбранной специальности 01.04.01 – приборы и методы экспериментальной физики в области физико-математических наук.

Недостатки диссертации В.В.Панчука являются продолжением ее достоинств. Работа имеет четкую практическую направленность, но прикладные аспекты исследования остались без должного внимания. Найденные в диссертации оригинальные решения, как методические, так и программные могли бы быть оформлены как «интеллектуальные достижения» (патентование, государственная регистрация программ), что повысило бы вероятность их практического использования. В диссертации есть терминологические неточности, так, например, рентгеновская спектроскопия отождествляется с рентген-флуоресцентным анализом. Формулировки положений и выводов не всегда конкретизированы, например «... может существенно увеличить точность анализа...» или «... ПЛС фильтрация шумов позволяет значительно улучшить отношение сигнал/шум без существенного искажения параметров...». Хотелось бы увидеть в диссертации дискуссию об универсальности предлагаемых подходов, а именно:

- из диссертации неясно, насколько предложенные во второй и третьей главе способы оптимизации эксперимента и проведения количественного анализа в мессбауэровской спектроскопии применимы только для абсорбционного варианта метода, или могут быть расширены на эмиссионную мессбауэровскую спектроскопию;
- могут ли разработанные для лабораторных РФА спектрометров способы улучшения качества получаемых результатов быть применены к синхротронным источникам.

Эти замечания никак не влияют на общую положительную оценку работы. В целом она, безусловно, соответствует всем требованиям ВАК РФ к докторским диссертациям, в том числе п.9. «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 №842, а ее автор, В.В.Панчук, заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.2 – приборы и методы экспериментальной физики.

Диссертация ПАНЧУКА Виталия Владимировича «РАЗВИТИЕ ЯДЕРНОЙ ГАММА-РЕЗОНАНСНОЙ И РЕНТГЕНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ НА ОСНОВЕ ХЕМОМЕТРИЧЕСКИХ ПОДХОДОВ» докладывалась и обсуждалась на семинаре Отделения перспективных разработок НИЦ Курчатовский институт – ПИЯФ 10.11.2021 и проект отзыва утвержден на заседании УС ОПР 16.02.2022, протокол № 2.

Руководитель Отделения
перспективных разработок
д.ф.-м.н.

А.В. Титов

Контактные данные:

188300, Ленинградская обл., г. Гатчина, мкр. Орлова роща, д. 1, НИЦ

«Курчатовский Институт» - ПИЯФ

Телефон: +7(81371)460-25; +7(81371)460-47

Адрес электронной почты: dir@pnpri.nrcki.ru