

О Т З Ы В

на автореферат диссертации В.В. Панчука «Развитие ядерной гамма-резонансной и рентгеновской спектроскопии на основе хемометрических подходов», представленной на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.2 - Приборы и методы экспериментальной физики.

Развитие хемометрических подходов является актуальным современным направлением в аналитической химии, позволяя существенно расширять возможности аналитических методов, ставя перед собой целью улучшение аналитических характеристик методик выполнения вещественного анализа. В представленной диссертации рассмотрено развитие таких важных для вещественного анализа методов, как рентгеновская спектрометрия (в частности, рентгенофлуоресцентный анализ) и ядерный гамма-резонанс (Мессбауэровская спектроскопия). Несмотря на уже ставшее достаточно широким использование хемометрики для обработки аналитических данных, ее возможности до сих пор не вполне раскрыты, редко используются для рутинных анализов в лабораториях, поэтому представленная работа является важным шагом в этом направлении.

Научная новизна диссертационного исследования заключается в разработке новых оригинальных математических подходов к обработке данных, получаемых методами рентгенофлуоресцентной спектрометрии и Мессбауэровской спектроскопии, позволяющих упростить и автоматизировать процедуры анализа с использованием минимального числа градуировочных образцов для определения содержания аналитов в отличающихся по составу анализируемых пробах. Предложенные подходы апробированы при определении различных форм железа в рудных образцах, исследовании процесса формирования ортоферрита иттрия, изучении продуктов коррозии по длине трубы парогенератора, определении смеси растворов лантанидов в условиях спектральных наложений спектральных линий. Каждый из описанных примеров демонстрирует улучшение чувствительности и снижение погрешностей анализа по сравнению с ранее традиционно используемыми способами обработки данных.

Из замечаний к работе следует отметить:

- 1) Одной из целей работы является – «разработать общую схему анализа методом рентгенофлуоресцентной спектрометрии с применением хемометрических подходов, иллюстрируемую методикой анализа конкретного объекта». На наш взгляд, создание подобной схемы возможно только для конкретного типа аппаратуры. Так, например, для определения форм нахождения железа необходимо использовать рентгеновский спектрометр с волновой дисперсией и хорошим спектральным разрешением. Рассмотренная в работе проблема учета наложений спектральных линий лантанидов актуальна для энергодисперсионного рентгенофлуоресцентного спектрометра с низким спектральным разрешением аналитических линий.
- 2) Обзор работ, посвященных рентгенофлуоресцентному определению редкоземельных элементов, а также валентного состояния железа по линиям L-серии, выглядит не вполне полным. В защищаемом положении 6 указано о возможности определения валентного состояния элементов, хотя в работе речь идет только о железе, кроме того, вывод, что «разработанные в работе подходы можно распространить и на другие элементы» не очевиден, поскольку все элементы имеют свои особенности, даже близкие к железу переходные элементы

часто имеют больше двух распространенных степеней окисления, что может затруднить применение аналогичного подхода без дополнительных исследований.

3) Описание деталей метода РФА ПВО в тексте диссертации не вполне корректно, например:

- «падающее излучение не проникает в объем объекта, а полностью отражается от границы его раздела». На самом деле падающее излучение все-таки проникает в нанометровый слой подложки.

- «падающее излучение будет эффективно возбуждать флуоресцентное излучение атомов, входящих в образец, но при этом практически не будет от них рассеиваться». В действительности, рассеяние первичного излучения происходит, но благодаря геометрии спектрометра рассеяние от образца подавлено в направлении детектора.

Работа не свободна от погрешностей изложения:

4) Для метода Мессбауэровской спектроскопии введена аббревиатура ЯГРС, которая далее не используется, вместо этого используется аббревиатура МС, которая обычно расшифровывается как масс-спектрометрия.

5) Непонятно, что из себя представляют «легкодоступные образцы сравнения» и чем обусловлена доступность. Вместо «анализируемый элемент» рекомендуется использовать «определяемый элемент»

Данные замечания, на наш взгляд, не снижают научной важности представленного исследования. Глубина проработки вопросов, затронутых в диссертационной работе, свидетельствует о высокой квалификации автора. Достоверность научных результатов работы не вызывает сомнения и подтверждена публикациями в высокорейтинговых зарубежных журналах таких как Analytical Chemistry, Analytica Chimica Acta, Talanta, Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectrometry, а также в известных российских журналах, рекомендованных ВАК. Практическая значимость работы в области применения методов рентгенофлуоресцентного анализа и Мессбауэровской спектроскопии подтверждена соответствующими примерами.

Автор диссертационной работы Виталий Владимирович Панчук вполне заслуживает присуждения ему степени доктора наук по специальности 1.3.2 - Приборы и методы экспериментальной физики.

с.н.с. ЦКП «Геодинамика и геохронология» ИЗК СО РАН
канд. хим. наук

 Г.В. Папикова

н.с. ЦКП «Геодинамика и геохронология» ИЗК СО РАН
канд. хим. наук

 В.М. Чубаров

Пашкова Галина Валерьевна,
Институт земной коры СО РАН,
664033, г. Иркутск, ул. Лермонтова 128
+79148717154, pashkova.gv@yandex.ru

Чубаров Виктор Маратович,
Институт земной коры СО РАН,
664033, г. Иркутск, ул. Лермонтова 128
+79501156559, chubarov@igc.irk.ru

