

**ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА  
24.1.029.01 (Д002.034.01) НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО  
БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ НАУКИ ИНСТИТУТ АНАЛИТИЧЕСКОГО  
ПРИБОРОСТРОЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК (ИАП РАН), Г. САНКТ-  
ПЕТЕРБУРГ**

ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ ДОКТОРА НАУК

аттестационное дело № \_\_\_\_\_

решение Диссертационного совета от «25» марта 2022 г. № 3

о присуждении Панчуку Виталию Владимировичу, гражданину Российской Федерации, ученой степени доктора физико-математических наук.

Диссертация «Развитие ядерной гамма-резонансной и рентгеновской спектроскопии на основе хемометрических подходов» по специальности 1.3.2. – Приборы и методы экспериментальной физики принята к защите 26.11.2021 г., протокол № 5 Диссертационным советом 24.1.029.01 (Д002.034.01) на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института аналитического приборостроения Российской академии наук (ИАП РАН), 190103, Санкт-Петербург, а/я 207, приказ 714/нк от 02.11.2012 г.

**Соискатель:** Панчук Виталий Владимирович, 1980 года рождения, В 2002 г. окончил Санкт-Петербургский государственный университет; в 2005 году защитил диссертацию на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.02 – «Аналитическая химия» (присуждена 20.10.2005 г. Диссертационным советом Санкт-Петербургского государственного университета).

Диссертация 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.

**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».

**Официальные оппоненты:**

1. Камзин Александр Сергеевич, доктор физико-математических наук, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, ведущий научный сотрудник.

2. Серегин Павел Павлович, доктор физико-математических наук, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена» профессор.
3. Монахова Юлия Борисовна, доктор химических наук, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского», профессор

дали положительные отзывы на диссертацию.

**Ведущая организация** Федеральное государственное бюджетное учреждение «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П.Константинова» НИЦ «Курчатовский институт», г. Санкт-Петербург, в своем положительном заключении, подписанном руководителем отделения перспективных разработок Титовым Анатолием Владимировичем, доктором физико-математических наук, утвержденном заместителем директора по научной работе Ворониным Владимиром Владимировичем, указала, что диссертация Панчука В.В. соответствует всем требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени доктора физико-математических наук, а соискатель заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.2., отметила следующие замечания.

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 мессбуэровской

спектроскопии применимы только для абсорбционного варианта метода, или могут быть расширены на эмиссионную мессбуэровскую спектроскопию;

- могут ли разработанные для лабораторных РФА спектрометров способы улучшения качества получаемых результатов быть применены к синхротронным источникам.

Соискатель имеет **77** (семьдесят семь) опубликованных работ, в том числе по теме диссертации **20** (двадцать) работ, опубликованных в рецензируемых научных изданиях **20** (двадцать). Из них **7** (семь) работ входят в перечень ВАК РФ (без учета статей из базы SCOPUS), **12** (двенадцать) публикаций индексируются в международной библиометрической базе SCOPUS (из них **9** (девять) относятся к квартилю Q1), а также **1** (одна) глава в коллективной монографии. Материалы диссертации докладывались на **11** (одиннадцати) всероссийских и международных научных конференциях.

К наиболее значительным работам, отражающим основное содержание диссертации, относятся:

1. Debus B. On the potential and limitations of multivariate curve resolution in Mössbauer spectroscopic studies / Debus B., **Panchuk V.**, Gusev B., Savinov S., Popkov V., Legin A., Semenov V., Kirsanov D. // *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*. - 2020. - V. 198. - статья № 103941. – Режим доступа: <https://www.sciencedirect.com/journal/chemometrics-and-intelligent-laboratory-systems>
2. **Panchuk V.** Application of chemometric methods to XRF-data – A tutorial review / Panchuk V., Yaroshenko I., Legin A., Semenov V., Kirsanov D. // *Analytica Chimica Acta*. - 2018. –V. 1040. - P. 19-32.
3. Popkov V.I. Effect of spatial constraints on the phase evolution of YFeO<sub>3</sub>-based nanopowders under heat treatment of glycine-nitrate combustion products / Popkov V.I., Almjasheva O.V., Nevedomskiy V.N., **Panchuk V.V.**, Semenov V.G., Gusarov V.V. // *Ceramics International*. - 2018. - V. 44 (17). - P. 20906-20912.
4. **Panchuk V.** Signal Smoothing with PLS Regression / Panchuk V., Semenov V., Legin A., Kirsanov D. // *Analytical Chemistry*. - 2018. - V. 90(9). - P. 5959-5964.
5. **Panchuk V.** Calibration transfer between different analytical methods / Panchuk V., Kirsanov D., Oleneva E., Semenov V., Legin A. // *Talanta*. - 2017. - V.170. - P. 457-463.
6. **Panchuk V.V.** Determination of the oxidation state of iron by X-ray fluorescence spectroscopy using chemometric approaches / Panchuk V.V., Rabdano N.O., Goidenko A.A., Grebenyuk A.V., Irkaev S.M., Semenov V.G. // *Journal of Analytical Chemistry*. - 2017. - V.72(6). - P. 662-670.

7. Debus B. Three-point multivariate calibration models by correlation constrained MCR-ALS: A feasibility study for quantitative analysis of complex mixtures / Debus B., Kirsanov D.O., **Panchuk V.V.**, Semenov V.G., Legin A. // *Talanta*. - 2017. - V.163. - P.39-47.
8. Гребенюк А.В. Оптимизация геометрических условий проведения абсорбционного мессбауэровского эксперимента / Гребенюк А.В., Иркаев С.М., **Панчук В.В.**, Семенов В.Г. // *Научное приборостроение*. - 2017. - Т.27. - № 1. - С.66-71.
9. Бутаева Е.В. Новый алгоритм количественного анализа в мессбауэровской спектроскопии / Бутаева Е.В., Гребенюк А.В., Иркаев С.М., **Панчук В.В.**, Семенов В.Г. // *Научное приборостроение*. - 2016. - Т.26. - №2. - С.54-59.
10. Kirsanov D. Improving precision of X-ray fluorescence analysis of lanthanide mixtures using partial least squares regression / Kirsanov D., **Panchuk V.**, Goydenko A., Khaydukova M., Semenov V., Legin A. // *Spectrochimica Acta - Part B Atomic Spectroscopy*. - 2015. - V.113. - P.126-131.
11. Kirsanov D. A sample-effective calibration design for multiple components / Kirsanov D., **Panchuk V.**, Agafonova-Moroz M., Khaydukova M., Lumpov A., Semenov V., Legin A. // *Analyst*. - 2014. - V.139(17). - P.4303-4309.
12. Семенов В.Г. Оптимальная дискретизация скоростной шкалы при измерении мессбауэровских спектров / Семенов В.Г., Иркаев С.М., **Панчук В.В.** // *Научное приборостроение*. - 2013. - Т.23. - №3. - С.36-43.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы:

1. От Камзина Александра Сергеевича, доктора физико-математических наук, ведущего научного сотрудника, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, лаборатория квантовой электроники. Вопросы и замечания:
  - 1). В работе показаны возможности метода многомерного разрешения кривых для серийной обработки мессбауэровских спектров. Будет ли этот метод так же эффективен при обработке отдельных спектров?
  - 2). 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?
  - 3). Применим ли способ конвертации данных между инструментами, основанными на

различных физических принципах, описанный в пятой главе, для межлабораторных сравнительных испытаний?

4). 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?

5). 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»?

2. От Серегина Павла Павловича, доктора физико-математических наук, профессора, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена». Замечания:

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. Непонятно, 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 неудивительно, поскольку выполнена на кафедре аналитической химии). Но вопрос - где патенты, свидетельства о внедрении и т.п.?

3. От Монаховой Юлии Борисовны, доктора химических наук, профессора, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского». Замечания:

1). Были ли проведены работы по влиянию мешающих ионов при проведении количественного анализа с построением градуировочной зависимости на легкодоступных образцах сравнения, отличающихся по составу от анализируемых? Как проводился выбор реальных образцов руды в этом случае?

2). Метод MCR не единственный метод выделения спектров индивидуальных источников из сигнала смеси. Метод независимых компонент способен решить ту же задачу даже в случае существенного перекрытия сигналов отдельных компонент. Можно ли ожидать улучшения метрологических характеристик методик при использовании этого метода моделирования спектров?

3). Автореферат, рисунок 2b,c. Почему концентрационный профиль четвертого компонента имеет отрицательные интервалы? Было бы логичным наложить ограничение неотрицательности в этом случае.

4). Глава 4. Для определения лантанидов в работе были использованы два экспериментальных метода - РФА-ЭД и РФА-ПВО. Возможно ли ожидать повышения точности количественного анализа при одновременном ПЛС моделировании обоих наборов данных? Была ли апробирована эта методика на реальных объектах?

5). Какое максимальное число компонент можно выделить из спектров РФА методом MCR? Существуют ли другие ограничения при работе с этим методом?

6). Глава 7. Сколько образцов было измерено для построения модели идентификации степени окисления железа методом SIMCA? На графике МГК счетов представлено только 12 объектов. Достаточно ли этого количества для SIMCA?

7). В выводах к работе хотелось бы видеть непосредственные количественные характеристики полученных результатов. Например, во сколько раз уменьшилась погрешность при использовании ПЛС-сглаживания; во сколько раз увеличилась точность анализа следовых количеств аналита в многоэлементных образцах с сильными интерференционными помехами и т.д.

4. От Мушниковой Николая Варфоломеевича, доктора физико-математических наук, академика РАН, директора и Клейнерман Надежды Михайловны, кандидата физико-математических наук, старшего научного сотрудника, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт физики металлов имени М.Н. Михеева» Уральского

отделения Российской академии наук. Замечание:

наличие нерасшифрованных символов и аббревиатур, встречающихся в автореферате. Так, не указаны обозначения символов  $n$  и  $p$  в Таблице 1, а также символов  $N$  и  $P$  в таблице 3. Не расшифрованы аббревиатуры SVD на стр.12 и МГК на стр. 22. Для неспециалиста в хемометрических методах неясно, какие параметры, обозначенные как ГК1 и ГК2 отложены по осям на рис. 5. Это затрудняет восприятие материала автореферата.

5. От Богомолова Андрея Юрьевича, доктора химических наук, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Самарский государственный технический университет», и.о. заведующего кафедрой «Аналитическая и физическая химия». Замечания:

1). Не вполне согласен с формулировкой, что «методы хемометрики - это методы машинного обучения в контексте химических исследований», как это, например, сказано на стр. 3 автореферата. Эти два направления в анализе данных развивались независимо в различных областях, имеют собственный инструментарий, методологию и объекты анализа. И, несмотря на некоторое сближение этих направлений, связанное с появлением «больших данных» в химии, не следует записывать хемометрику в положение принадлежности.

2). Известно, что результатом применения метода многомерного разрешения кривых, описанного в главе 3, является область решений, а не единственное решение (обратная задача). Этот эффект известен как «вращательная неопределенность» (*rotational ambiguity*) и представляет собой одно из главных ограничений метода. Поскольку в работе производится оценка возможностей метода в отношении анализа данных мессбауэровской спектроскопии, было бы важно оценить область неопределенности (есть такие методы) для данного типа данных и для использованных граничных условий (*constraints*). На стр. 16 автореферата высказано разумное предложение - разработать специальные «мессбауэровские» граничные условия, учитывающие особенности данных. Жаль, что это не было сделано - это украсило бы работу, особенно вместе с оценкой снижения неопределенности решения.

6. От Померанцева Алексея Леонидовича, доктора физико-математических наук, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук», главный научный сотрудник. Замечание:

используемые автором термины и обозначения являют собой причудливую смесь русских и английских слов. Можно догадаться, что RE это относительная ошибка, а СКОП – это RMSEP. При этом Principal Component Analysis стал МГК, а Multivariate Curve Resolution так и остался MCR. Думаю, что надо было выбрать один язык для хемометрических терминов.

Я бы остановился на английском из-за бедности русского тезауруса в хемометрике.

7. От Андреевой Марины Алексеевны, доктора физико-математических наук, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», ведущего научного сотрудника. Без замечаний.

8. От Калинина Бориса Дмитриевича, доктора технических наук, ведущего научного сотрудника и Савельева Сергея Константиновича, кандидата технических наук, генерального директора, ООО «Прецизионные технологии». Замечания:

1). Выполненные соискателем работы могут найти применение в аналитической химии, что отмечено в первом же предложении автореферата.

К сожалению, соискатель не публиковал свои работы в отечественных журналах по аналитической химии (Журнал аналитической химии, Заводская лаборатория, Аналитика и контроль). Доклады на трёх аналитических конференциях в 2015, 2017, 2019 гг. (и четвёртый доклад в 2021 г.) могут пройти незамеченными.

Как следствие этого, в автореферате встречаются неудачные употребления терминов. Вопрос о правомерности использования соискателем термина «методология» может быть дискуссионным. В прикладном смысле, если соискатель рассматривает методологию как комплекс принципов и подходов исследовательской деятельности, на которые опирается исследователь в ходе получения и разработки знаний в рамках конкретной дисциплины (аналитической химии), то использование этого термина условно правомерно. Однако методология – это наука о методе и в настоящей работе применимо только к методам ядерной гамма-резонансной и рентгеновской спектроскопии. Поэтому выражения «... методологии обработки получаемых данных», «методов хемометрики в контексте химических исследований», «методов машинного обучения» на третьей странице реферата, «... метода проекций на латентные структуры» на пятой странице автореферата, «... метода многомерного разрешения» на седьмой странице реферата неудачные. Также неудачными являются выражения «анализируемых элементов» и «... при количественном анализе следовых количеств». Здесь вместо слов «анализируемых» и «анализе» уместны слова «определяемых» и «определении». Неудачные терминологические выражения есть и в Заключение: пп. 1, 2, 3, 6. Следует отметить, что это единичные случаи; в основном в тексте автореферата корректное употребление терминов.

Результаты в табл. 2 на стр. 18 автореферата недостаточно информативны; под термином «линейная регрессия» обычно подразумевается двухчленное уравнение и любой способ учета



(в данном случае наложения спектральных линий) даст значительное улучшение результатов. Если использовалось многочленное линейное уравнение (наложение спектральных линий – эффект первого порядка), то это уравнение следовало привести, поскольку идет сравнение «с традиционно-применяемыми методами обработки данных» (п. 3 Заключения).

2). Положения, выносимые на защиту, излишне многословны и более подходят для Практической значимости.

9. От Пашковой Галины Валерьевны, кандидата химических наук, старшего научного сотрудника и Чубарова Виктора Маратовича, кандидата химических наук, научного сотрудника, ЦКП «Геодинамика и геохронология», Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт земной коры» Сибирского отделения Российской академии наук. Замечания:

1). Одной из целей работы является – «разработать общую схему анализа методом рентгенофлуоресцентной спектromетрии 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 – «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 рассеянное от образца подавлено в направлении детектора.

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».

Все отзывы положительные.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается большим опытом работы в областях рентгенофлуоресцентного анализа, мессбауэровской спектроскопии и хемометрики, различным вопросам которых посвящена диссертация.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

**показано** теоретически и экспериментально, что применение разработанных автором хемометрических алгоритмов позволяет в 5-10 раз снизить порог обнаружения или/и погрешность определения содержания примесных элементов методом рентгенофлуоресцентного анализа и обеспечить серийную обработку спектров с целью извлечения качественной и количественной информации о химическом состоянии резонансных атомов методом мессбауэровской спектроскопии;

**реализован** новый метод фильтрации шумов в спектрах, основанный на регрессии с проецированием на латентные структуры, который позволяет в несколько раз улучшить отношение сигнал / шум спектральных линий без существенного искажения их параметров (ширины, положения, амплитуды). Предложенный метод позволяет сократить время проведения измерений в мессбауэровской спектроскопии, а в рентгенофлуоресцентном анализе уменьшить погрешности определения содержания следовых количеств компонентов;

**предложен** способ проведения количественного анализа в абсорбционной мессбауэровской спектроскопии, основанный на применении легкодоступных образцов сравнения, который позволяет определять содержание резонансного изотопа в различных формах с меньшей погрешностью по сравнению с предложенным ранее безэталонным способом;

**предложен** способ дизайна многокомпонентных смесей, основанный на равномерном распределении точек в концентрационном пространстве, который позволяет создавать оптимальные многомерные градуировочные модели с заданным числом градуировочных образцов;

**установлены** преимущества и условия применения хемометрических методов обработки

данных в мессбауэровской и рентгеновской спектроскопии. Так, например, метод многомерного разрешения кривых позволяет извлекать качественную и количественную информацию из мессбауэровских спектров, однако требуется дальнейшее развитие предложенного способа для включения специальных ограничений. Применение регрессии на основе проецирования на латентные структуры позволяет в несколько раз увеличить точность определения содержания элементов в случае сильного перекрытия и низкого качества спектральных линий, однако существенно не улучшает точность получаемых результатов в отсутствие указанных выше проблем;

**апробирован** способ преобразования аналитических сигналов одного инструмента в формат другого инструмента, который позволяет применять одни и те же градуировочные модели для определения содержания аналитов различными методами, что в перспективе позволит создавать универсальные градуировочные модели для широкого круга методов и существенно сократить трудоемкость анализов. В качестве примера рассмотрено определение степени окисления методом рентгенофлуоресцентного анализа с применением хемометрических методов.

**Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:**

1. **Проанализированы** возможности хемометрических методов обработки данных для извлечения качественной и количественной информации об элементном составе и их химическом состоянии методами рентгеновской и мессбауэровской спектроскопии.
2. **Предложены** новые способы определения содержания примесных элементов методом рентгенофлуоресцентного анализа; определения химических состояний исследуемых элементов методами рентгеновской и мессбауэровской спектроскопии; фильтрации шумов в спектральных данных; переноса данных между методами, основанными на различных физических принципах.
- 3 **Решена** задача серийной обработки мессбауэровских спектров для определения локально неоднородных состояний резонансных атомов с помощью метода многомерного разрешения кривых с помощью создания универсальных градуировочных моделей путем конвертации экспериментальных данных для методов, основанных на различных физических принципах.
4. **Предложена** новая схема определения концентраций следовых количеств металлов в водных растворах методом энергодисперсионного рентгенофлуоресцентного анализа с применением хемометрических подходов.

5. **Доказана** возможность применения метода проецирования на латентные структуры для фильтрации спектральных данных.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

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. Предложенный способ количественного анализа в мессбауэровской спектроскопии **позволил уменьшить в несколько раз** погрешность количественного определения различных форм аналита в реальных объектах, а также **упростить** проведение анализа по сравнению с ранее используемым способом. Применение метода многомерного разрешения кривых в мессбауэровской спектроскопии **позволило реализовать серийную обработку спектров** и, тем самым, **упростить** извлечение качественной и количественной информации о химическом состоянии анализируемых атомов и **повысить** надежность получаемых результатов. Применение регрессии на основе проецирования на латентные структуры (ПЛС-регрессии) для количественного анализа в РФА **позволило в 5-10 раз уменьшить погрешность** при определении следовых количеств элементов в водных растворах. Разработанный способ конвертации данных между методами, основанными на различных физических принципах, **позволит создавать универсальные градуировки** для определения содержания аналитов при использовании разных аналитических инструментов и методов. Предложенный подход определения степени окисления аналита в твердых средах методом РФА с использованием серийно-выпускаемых спектрометров **существенно расширяет возможности метода** в плане его использования для анализа веществ. Способ построения многомерных регрессионных моделей с использованием минимального числа градуировочных образцов для определения содержания аналитов **позволяет существенно сократить трудоемкость и стоимость анализа** образцов сложного состава. Разработанный способ фильтрации спектральных данных, основанный на ПЛС-регрессии, **позволил в несколько раз увеличить соотношение сигнал/шум спектральных линий** без существенного искажения их формы и уменьшить погрешности количественного анализа с использованием градуировочных моделей. Разработанный метод может найти применение для фильтрации шумов в спектральных, хроматографических, электрохимических и других методах.

**Оценка достоверности результатов исследования выявила:**

что научные положения, выводы и рекомендации, содержащиеся в диссертационной работе, подтверждаются корректностью применения используемых математических подходов; большим объемом экспериментальных данных, 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; статистической обработкой результатов анализа; результатами практической апробации разработанных методик анализа. Построение математических моделей и обработка полученных данных были осуществлены с использованием адекватного программного обеспечения.

**Личный вклад соискателя заключается в:**

- постановке цели и формулировке задач исследования;
- разработке предлагаемых в работе способов проведения качественного и количественного элементного и вещественного анализа методами рентгеновской и мессбауэровской спектроскопии;
- разработке схем измерения мессбауэровских и рентгенофлуоресцентных спектров и проведения их измерений;
- разработке алгоритмов моделирования данных для первичного исследования возможностей хемометрических методов;
- обработке экспериментальных данных хемометрическими алгоритмами и полученных результатов статистическими методами;
- формулировке выводов и подготовке материалов для опубликования.

На заседании 25.03.2022 г. Диссертационный совет принял решение присудить Панчуку Виталию Владимировичу степень доктора физико-математических наук.

При проведении тайного голосования Диссертационный совет в количестве **18** человек, из них **18** докторов наук, участвовавших в заседании, из **21** человека, входящих в состав совета, дополнительно введены на разовую защиту **0** человек, проголосовали: за – **17**, против – **1**, недействительных бюллетеней – **нет**.

Председатель Диссертационного совета,  
д.т.н. проф.

Ученый секретарь Диссертационного совета,  
д.ф.-м.н.

25.03.2022 г.  
М.П.



В.Е. Курочкин

А.Л. Буляница