

Отзыв на автореферат диссертации
Волкова Владимира Владимировича

**"Спектроскопия и малоугловое рассеяние в решении обратных задач
исследования многокомпонентных систем",**

представленной на соискание учёной степени доктора химических наук по
специальности 01.04.18 – кристаллография, физика кристаллов
в диссертационный Совет Д 002.114.01

Одним из важнейших направлений в области химических и физических наук является создание новых материалов. Технологии их получения совершенствуются и усложняются, требуются материалы с новыми функциональными свойствами, усложняются их химический состав и структура, все шире используются композиты и смеси. Это требует постоянного усовершенствования и методов их изучения. И первое с чем сталкиваются исследователи – необходимость установления и уточнения химического состава и структуры с применением неразрушающих методов. Успешное решение задач интерпретации данных экспериментов возможно только при анализе результатов, полученных альтернативными и взаимодополняющими методами исследований, основанных на применении различных физических воздействий на изучаемые объекты. Отсюда следует актуальность, научная и практическая значимость задач, решаемых в представленной Волковым В.В. диссертационной работе. Основными задачами работы являются: разработка методов спектроскопического анализа неразделяемых многокомпонентных смесей химических соединений и методов анализа данным рентгеновского и нейтронного малоуглового рассеяния для определения структурных параметров наноразмерных частиц в моно- и многокомпонентных системах.

Сложность данной работы состоит еще и в математической неустойчивости решений соответствующих обратных задач, связанной с их возможной неоднозначностью и плохой математической обусловленностью, что потребовало не только тщательной проработки алгоритмов, но и

выработки методических рекомендаций по их использованию. Этот момент имеет важнейшее значение и обуславливает общую методическую канву представленной работы. Для оценки надежности получаемых результатов автор рекомендует проведение предварительного моделирования с анализом вариаций решения, которое должно не просто дополнять, но являться частью разработанных методологических подходов. Разработанные автором алгоритмические подходы спектроскопического анализа применены и для обработки данных малоуглового рассеяния, что говорит о структурном единстве работы.

Применение разработанных алгоритмов автор демонстрирует на решениях модельных примеров с подробным обсуждением особенностей решений. Для оценки качества результатов предложен ряд процедур, основанных на сравнении независимо получаемых решений с применением рекомендуемых критериев сходства или различия, как статистических, так и эмпирических.

Все разработанные автором подходы проверены им на большом количестве модельных примеров. Автор демонстрирует, что при спектроскопическом анализе модельных смесей рассчитанные спектральные контуры компонентов показывают хорошее согласие с априори известными. Вышесказанное позволяет сделать вывод об обоснованности и достоверности представленных в работе результатов, выводов и рекомендаций, которые представляют несомненную научную и практическую значимость.

Автореферат четко отражает постановку задачи, методику исследований, большой объем проделанной работы и полученные результаты. Однако по тексту автореферата можно сделать несколько замечаний:

1. В общей характеристике работы было уместным более четко отразить связь между общими моментами предложенных методов спектроскопического и структурного анализа данных и их отношения к области химических наук.

2. В оформлении автореферата имеются технические ошибки (например, в нумерации основных результатов и выводов).

Указанные недостатки не влияют на общую высокую оценку работы. По тексту автореферата можно сделать вывод, что диссертация В. В. Волкова представляет собой законченную научно-квалификационную работу, теоретические и практические аспекты которой можно рассматривать как новое достижение в области исследования состава и структуры вещества. Методические разработки по изучению структуры неупорядоченных систем являются важным дополнением к кристаллографическим методам исследования вещества. Тематика диссертации, несмотря на ее физико-математический характер, полностью относится к хорошо развитой к настоящему времени области химии — хемометрике.

Учитывая актуальность выполненных исследований, научную новизну и практическую значимость считаю, что представленная диссертационная работа удовлетворяет всем требованиям Постановления правительства Российской Федерации о порядке присуждения ученых степеней от 24.09.2013 г. № 842, предъявляемым к докторским диссертациям, а ее автор — Волков Владимир Владимирович — заслуживает присуждения ученой степени доктора химических наук по специальности 01.04.18 — "Кристаллография, физика кристаллов".

Профессор кафедры нейтронографии
физического факультета МГУ им. М.В.Ломоносова
доктор физико-математических наук
Гончаров Сергей Антонович

17 марта 2014 г



119991, ГСП-2, Москва
Ленинские горы, МГУ им. М.В.Ломоносова
Дом 1, строение 2, Физический Факультет
Тел. (495) 939 2492
gsa@srd.sinp.msu.ru

Подпись Гончарова С.А. заверяю:

Светлана А. С.