

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Волкова Владимира Владимировича
"Спектроскопия и малоугловое рассеяние в решении обратных задач
исследования многокомпонентных систем", представленную на
соискание учёной степени доктора химических наук по специальности
01.04.18 – "Кристаллография, физика кристаллов" в диссертационный
Совет Д 002.114.01

Развитие методов неразрушающего химического и структурного анализа сложных систем, к которым можно отнести большинство разрабатываемых в настоящее время материалов, являются одной из актуальных и активно развиваемой областей в химии и физике. Все возрастающая сложность строения материалов требует не только комплексного применения взаимодополняющих методов исследования, но и повышения как возможностей методов исследования, так и обеспечения надежности результатов анализа. Эти моменты отражены в представленной диссертационной работе как базовые методологические аспекты и определяют ее **актуальность**. **Научная значимость** представленной В.В. Волковым работы определяется уже самой постановкой целей и задач. Компьютерный спектроскопический анализ неразделяемых смесей химических соединений разработан как общий подход к анализу многомерных аддитивных данных и применим в различных областях исследований, не только химических. Исследование надатомной организации неоднородностей в веществе по данным малоуглового рентгеновского и нейтронного рассеяния представлено методами определения структурных параметров наноразмерных частиц различной природы, органических и неорганических, в моно- и многокомпонентных системах. Широта возможных применений разработанных подходов, соответствующего программного обеспечения и качество получаемой информации об объектах

исследования делает полученные автором результаты **практически значимыми**.

Отличительной особенностью работы является и то, что все развитые методы снабжены приемами оценивания надежности результатов, что представляется особенно важным, если учесть неустойчивость решений рассматриваемых обратных задач. Часто этим пренебрегают и тогда результаты исследований необходимо сопоставлять с данными, полученными другими методами, что не всегда доступно. Все разработанные автором подходы к анализу экспериментальных данных отражают эти моменты, и автор специально указывает, что они составляют основу предложенной им методологии.

Все методы, программы и практические рекомендации по их использованию автор отработал на широком спектре модельных расчетов. Полученные результаты сравниваются в работе с априори известными данными, если таковые имеются, а в ряде случаев показано, как такие данные можно использовать для получения более надежных решений. Такой подход обеспечивает **обоснованность и достоверность** представленных в работе результатов, рекомендаций и конечных выводов.

Автореферат хорошо передает структуру и содержание работы, написан понятным языком. Однако, по тексту можно сделать несколько замечаний.

1. В выводах ошибка в нумерации: нет 4-го пункта. Данное замечание не является принципиальным, так как выводы соответствуют тексту введения, содержанию автореферата и выдвигаемым на защиту положениям.

2. В автореферате на странице 9 написано, что диссертация состоит из 6 глав, тогда как далее из текста видно, что работа оформлена в виде 2-х основных разделов и большого количества подразделов. Это является очевидной опечаткой автора в автореферате.

3. В подписи под рисунком 8 имеется ссылка на этот же рисунок, тогда как по смыслу должна быть ссылка на рисунок 7.

Указанные замечания не несколько не уменьшают достоинства диссертационной работы В. В. Волкова, которая выполнена на высоком научном уровне, является законченной научно-квалификационной работой. Теоретические и практические результаты, полученные автором, являются весомым вкладом в методологию исследования вещества сложного состава и строения, которая интенсивно развивается в современной химии и особенно в ее разделе, посвященном способам получения информации о составе и структуре вещества с помощью численных методов – хемометрике .

Отмеченные актуальность, новизна и практическая значимость полученных результатов позволяют утверждать, 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".

Ведущий научный сотрудник,
Профессор, доктор химических наук,
Лауреат Госпремии РФ в области науки,
Эляшберг Михаил Евхононович

ГЕОХИ РАН, 119991, ГСП-1, Москва В-334, ул. Косыгина 19
Телефон (499) 137-14-84
Электронная почта geokhi.ras@relcom.ru

Подпись, заверяю:

17 марта 2014 г.



Эляшберг Михаил Евхононович

17 марта / 2014 г /