

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Саакяна Арама Вагановича «Развитие методов абсорбционной, флуоресцентной и рамановской спектроскопии с хемометрической обработкой данных для анализа жидких сред и аэрозолей» представленной на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 2.2.4 — Приборы и методы измерения (по видам измерений).

В последние годы наблюдается значительное расширение сфер применения молекулярной оптической спектроскопии, включая задачи контроля состава, идентификации и мониторинга сложных многокомпонентных образцов. Рост доступности высокочувствительных спектральных приборов привёл к увеличению объёма получаемых данных и поставил новые требования к их обработке — от выделения информативных спектральных признаков до построения воспроизводимых моделей классификации и количественного анализа. В этих условиях особую роль приобретают методы хемометрии и машинного обучения, позволяющие извлекать аналитически значимую информацию из регистрируемых спектров и обеспечивать сопоставимость результатов при изменении приборных и экспериментальных условий. С этой точки зрения диссертационная работа, посвящённая развитию методов абсорбционной, флуоресцентной и рамановской спектроскопии в сочетании с хемометрическими алгоритмами, является актуальной и соответствует запросам современной аналитической химии.

В числе основных результатов исследования, представленных в автореферате и обладающих научной новизной, следует выделить разработку и апробацию методических подходов к количественному анализу многокомпонентных жидких сред на основе спектров комбинационного рассеяния света с последующей хемометрической обработкой данных. В рамках работы предложены и реализованы методы обработки спектральных данных, позволяющие осуществлять градуировку фотометрической шкалы и количественное определение компонентов сложных смесей с учетом коррелированности спектральных признаков и влияния экспериментальных факторов.

Особое значение имеет разработанный метод градуировки фотометрической шкалы КР-спектрометров в приборно-независимых единицах с использованием образцов сравнения, обеспечивающий возможность сопоставления результатов измерений, выполненных на различных спектрометрах и при изменяющихся условиях эксперимента. Данный подход способствует повышению воспроизводимости и метрологической сопоставимости результатов рамановских измерений и расширяет возможности применения КР-спектроскопии для количественного анализа многокомпонентных систем.

ФБУ «НИЦ ПМ – Ростест»	
Вх. №	_____
Дата	11.02.2016 г.
Всего листов	_____
Осн. документа	_____
Приложение	_____

Достоверность и обоснованность полученных результатов обеспечиваются корректной постановкой и организацией экспериментальных исследований, использованием современных спектральных приборов утверждённых типов, обоснованным выбором информативных фрагментов спектров, а также применением регламентированных процедур предварительной обработки спектральных данных и адекватных алгоритмов хеометрики и машинного обучения, применяемых для решения поставленных аналитических задач. Корректность построенных моделей подтверждена применением комплексных процедур валидации, включая проверку их устойчивости и воспроизводимости на независимых тестовых выборках. Факт публикации результатов исследования в рецензируемых научных журналах из перечня ВАК Российской Федерации и их обсуждение на международных и всероссийских научных конференциях подтверждают научную состоятельность представленной работы.

Практическая значимость разработанных подходов заключается в возможности их интеграции в программное обеспечение аналитических приборов и применения для решения задач количественного анализа сложных жидких сред в лабораторных и прикладных условиях. Основные положения, выносимые на защиту, логически вытекают из представленных в диссертационной работе экспериментальных и теоретических результатов, а изложение материала в автореферате отличается последовательностью и внутренней согласованностью.

Несмотря на видимые достоинства, автореферат вызывает ряд вопросов и замечаний. Из автореферата неясна степень участия автора в разработке программы «ИнтелСпектр». С моей точки зрения было бы полезно сделать отнесение инфракрасных спектров черного углерода в диапазоне $450\text{--}200\text{ см}^{-1}$ к определенным функциональным группам. Это позволило бы дополнительно обсудить и усилить классификацию углеродных наночастиц по источнику происхождения. Кроме того, было бы полезно сравнить хеометрический метод анализа спектров алкогольной продукции с альтернативными методами (ВЭЖХ, капиллярный электрофорез), которые также требуют хеометрической обработки, чтобы лучше понять место предложенного метода в технологическом и санитарном контроле.

Сделанные замечания не уменьшают научной и практической ценности данной работы, а носят характер пожеланий по ее дальнейшему развитию.

Диссертационная работа Саакяна Арама Вагановича «Развитие методов абсорбционной, флуоресцентной и рамановской спектроскопии с хеометрической обработкой данных для анализа жидких сред и аэрозолей» является завершённым и

научно обоснованным исследованием. Полученные автором результаты отличаются новизной, соответствуют современному уровню развития аналитических методов измерений и обладают практической значимостью, в достаточной степени отражена в научной литературе. Работа является законченной научно-квалификационной работой, полностью отвечающей требованиям ВАК, предъявляемым требованиям, установленным Положением по порядку присуждения учёных степеней, утверждённом постановлением Правительства Российской Федерации №842 от 24.09.2013, а её автор достоин присуждения ему ученой степени кандидата технических наук по специальности 2.2.4 — «Приборы и методы измерения (по видам измерений)».

Николай Конкордиевич Зайцев, д.х.н., профессор,

Генеральный директор ООО «Эконикс-Эксперт»

Подпись Н.К.Зайцева заверяю:


09.02.2026
Зайцев Н.К.
зам. н. бухгалтера
ООО «Эконикс-Эксперт»