

Отзыв
на автореферат диссертации Зайцева Сергея Михайловича
«Анализ сталей методом лазерно-искровой эмиссионной спектроскопии с
применением термодинамического моделирования спектров плазмы», представленной на
соискание учёной степени кандидата химических наук
по специальности 02.00.02 – Аналитическая химия

Диссертационная работа Зайцева С.М. посвящена развитию метода лазерно-искровой атомно-эмиссионной спектроскопии на примере определения химического состава стали. Для этого рассмотрен довольно широкий круг вопросов, начиная от создания спектрометра и заканчивая выбором оптимальных режимов измерения спектра лазерно-индуцированной плазмы. В работе рассмотрены особенности формирования и состав спектра, причины уширения линий и особенности используемых приборов. Описана собранная с участием автора лабораторная установка, использованная для спектральных измерений. Приведены сведения о созданных в ходе данной работы программах для ЭВМ, позволяющих управлять узлами спектрометра и расшифровывать спектры. Получено аналитическое выражение для аппаратной функции спектрометра, представлен алгоритм автоматической идентификации линий элементов в спектрах. Смоделированы спектры образцов стали, приведено их сравнение со спектрами реальных образцов.

Использование лазерного излучения в химическом анализе позволяет решать широкий круг задач, в частности дистанционный и бесконтактный анализ промышленных материалов. Широкому распространению метода мешает ряд проблем, связанных с влиянием состава пробы, неоднородностью лазерно-индуцированной плазмы, высоким уровнем фонового сигнала, уширением, сдвигом и наложением аналитических линий в спектре. В связи с этим может быть затруднена идентификация линий элементов. Поэтому рассмотренные вопросы в диссертационной работе являются весьма актуальными.

Научная новизна работы состоит в разработанном алгоритме автоматической идентификации аналитических линий элементов, основанном на термодинамическом моделировании спектров плазмы и сопоставлении экспериментальных и рассчитанных спектров. С помощью моделирования спектров и изменения настроек спектрометра подобраны оптимальные условия для определения ряда элементов в образцах стали.

Работа имеет и практическую ценность, в ней теоретически обоснованы и оптимизированы условия, позволяющие с достаточной точностью определять химический состав образцов стали. Выбраны аналитические линии элементов, условия возбуждения и регистрации спектра, построены градуировочные зависимости, снижен инструментальный шум. Приведены метрологические характеристики метода.

Хочется отметить высокий научный уровень диссертационной работы. Обычно в аналитической химии одни специалисты создают приборы, другие - программное обеспечение, третьи разрабатывают методики для анализа конкретных материалов, а четвертые занимаются непосредственно химическим анализом. В этой многогранной работе представлены результаты экспериментов, создание прибора и программного обеспечения, моделирование, прогнозирование на основании модели и выбор оптимальных условий, позволивших значительно улучшить метрологические характеристики методики химического анализа исследованных образцов стали. Высокий уровень работы подтверждается также списком опубликованных работ, включающий в себя шесть статей в ведущих международных журналах, патент и два свидетельства о регистрации программы для ЭВМ.

После ознакомления с текстом автореферата диссертации у нас возникли следующие вопросы и замечания.

1) В работе имеется ряд опечаток: в подписи к рис. 9 вместо б) указано г); в табл. 4 не приведено, что означает сноска 1; в заголовке табл. 8 указано "высоклегированных", на с. 22 "графики объяснённой дисперсия остатков..." и т.д.

2) Имеется ряд неудачных словосочетаний: "предсказание концентрации" (следовало бы указать "расчёт или определение концентрации"), "неизвестный образец" (вместо "образец неизвестного состава").

3) Из текста автореферата не ясно, в табл. 4 речь идёт об одном образце, проанализированном в разных частях, или о трёх образцах (как следует из текста и заголовка таблицы)? В последнем случае приводить одно значение концентрации углерода, полученное с помощью анализатора CS-800, для всех трёх образцов не правильно.

4) При сравнении результатов, полученных по методике автора, с результатами метода РФА более корректным было бы использование лабораторного рентгенофлуоресцентного спектрометра с созданной градуировочной программой для анализа стали. Указанный портативный спектрометр "Niton XL3" обычно используют для сортировки материала при помощи программы "бесстандартного анализа", а не для точного лабораторного анализа.

Высказанные замечания не снижают научной и практической значимости представленной работы. Диссертация является научно-квалификационной работой, соответствующей требованиям Положения о порядке присуждения учёных степеней, утверждённого постановлением Правительства РФ № 842 от 24.09.2013 г, а её автор заслуживает присвоения учёной степени кандидата химических наук по специальности 02.00.02 – Аналитическая химия.

Директор Института ферросплавов и техногенного сырья им. акад. Н.П.Лякишева ФГУП "ЦНИИчермет им. И.П. Бардина", к.х.н. (02.00.04 - физическая химия)

Серёгин Александр Николаевич

Заведующий лабораторией химического анализа объектов ферросплавного производства ФГУП "ЦНИИчермет им. И.П. Бардина", к.х.н. (02.00.02 - аналитическая химия)

Волков Антон Иванович

Подписи тов. Серёгина А.Н. и Волкова А.И. заверяю

Учёный секретарь
ФГУП "ЦНИИчермет им. И.П. Бардина", к.т.н.

Москвина Т.П.

"31" октября 2016 г.

Государственный научный центр
Федеральное государственное унитарное предприятие
«Центральный научно-исследовательский институт чёрной металлургии им. И.П.Бардина»
105005, Москва, ул. Радио, д. 23/9, стр. 2
E-mail: ferrosplav@chermet.net Тел.: (495) 777-93-01.