

О Т З Ы В

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

Работа Зайцева С.М. предлагает автоматизированный алгоритм для качественного и количественного анализа сталей методом лазерно-искровой эмиссионной спектрометрии (ЛИЭС). Работа включает в себя создание спектральной базы данных, специфичной для эмиссионных спектров лазерной плазмы; моделирование этих спектров с использованием уравнений физики плазмы и радиационного переноса; автоматическую идентификацию спектральных линий в спектре неизвестных образцов, а также анализ большого набора образцов стали с помощью разработанного алгоритма. Актуальность данной диссертационной работы не вызывает сомнений; несмотря на то, что метод ЛИЭС известен и используется в течение вот уже полувека, он все еще не стал методом рутинного анализа в индустриях и заводских лабораториях. Его широкое внедрение по-прежнему требует более глубокого понимания физики лазерной плазмы, а также разработки аналитических протоколов и автоматизации. Как раз эти вопросы и адресует диссертация С.М. Зайцева.

Наиболее ценным в данной работе мне представляется сочетание модели лазерной плазмы с подробно изученной аппаратной функцией измерительного устройства (спектрометр плюс детектор). Автор разработал оригинальную программу, которая генерирует эмиссионные спектры, "пропускает" их через измерительный прибор и варьирует параметры плазмы, чтобы добиться близкого совпадения синтетического и экспериментального спектров. Именно использование модели позволяет надежно идентифицировать спектральные линии, используя информацию об их взаимных интенсивностях. Подобную информацию невозможно получить из известных спектральных баз данных, которые не учитывают специфичного характера эмиссии лазерной плазмы.

Еще один важный результат, который необходимо отметить. Подход, предложенный автором для анализа сложных спектров, подобных спектрам железа, позволяет быстро определять набор спектральных линий, подходящих для прецизионного спектрального анализа. Использование алгоритма избавляет химика-аналитика от проверки спектральных линий на предмет помех со стороны других, нежелательных линий, а также на предмет самопоглощения в линиях, которое вызывает сужение линейного динамического диапазона.

Нельзя также не отметить большой объем аналитической работы выполненной автором в рамках апробации метода. Было проанализировано большое количество образцов стали, в которых определялись концентрации легирующих элементов, Al, C, Cr, Mn, Si, Ti, V в диапазоне концентраций $\sim 10^{-3}$ -10 %.

Калибровка инструмента была выполнена как традиционным методом с использованием единичных линий элементов, так и все чаще применяемым в последнее время методом факторного анализа с использованием многих линий элементов и целых спектральных фрагментов. Правильность и точность определений с применением разработанного алгоритма поиска линий и калибровочных моделей соответствовала требованиям, предъявляемым при индустриальном анализе сталей. Это, безусловно, доказывает важность и актуальность данной работы и будет способствовать внедрению метода ЛИЭС в широкую аналитическую практику.

Небольшое замечание относится к варьируемым параметрам модели. Я бы обратил внимание автора на то, что фиксация массы в модели (0.5 нг) могла существенным образом влиять на расхождение модельных и экспериментальных температур показанных на Рис.8 в автореферате. Возможно, алгоритм мог бы быть улучшен с введением большего числа варьируемых параметров, таких, как, например, масса плазмы и ее размер.

Данное замечание не влияет на прекрасное впечатление от работы и не снижают ее научной и практической ценности. Диссертация С.М. Зайцева является законченным научным исследованием и соответствует всем требованиям ВАК, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.02 – аналитическая химия.

Старший научный сотрудник Федерального Института Исследования и Тестирования
Материалов, БАМ, Берлин, Германия

PhD, Dr

Игорь Борисович Горнушкин

Bundesanstalt für Materialforschung

und -prüfung, BAM

Richard-Willstätter-Straße 11

12489 Berlin

Telefon: +49 30 8104-1141

Fax: +49 30 8104-1147

Email: igor.gornushkin@bam.de



Richard-Willstätter-Straße 11
12489 Berlin