

О Т З Ы В

на автореферат диссертации Зайцева Сергея Михайловича «Анализ сталей методом лазерно-искровой эмиссионной спектроскопии 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. направлена на разработку алгоритмов автоматической идентификации атомных и ионных линий в спектре лазерной плазмы и методологии проведения количественного анализа сталей методом лазерно-искровой эмиссионной спектроскопии. Заметим, что широкое внедрение лазерно-искровой эмиссионной спектроскопии для экспрессного многоэлементного анализа в различных областях науки и промышленности сопровождается применением компактных спектрометров для регистрации спектров лазерной плазмы, при этом возникает проблема интерпретации спектральных данных вследствие сильного уширения и наложения атомных/ионных линий. Поэтому актуальность диссертационной работы Зайцева С.М. по разработке алгоритмов для идентификации спектральных переходов и развития методологии количественного анализа с целью повышения правильности и прецизионности спектральных методов анализа не вызывает сомнений.

Для решения поставленных задачи автором предложен алгоритм автоматической идентификации линий в спектрах лазерно-индуцированной плазмы, основанный на поиске наилучшим образом коррелирующего с экспериментальным модельного спектра при варьировании параметров плазмы (температура и электронная плотность), с учетом самопоглощения и различных типов уширения спектральных линий. Показано, что данный алгоритм позволяет получить хорошее совпадение модельных и экспериментальных спектров. Моделирование спектров лазерной плазмы позволило оптимальным образом выбрать аналитические линии с минимальных уровнем спектральных помех, что позволило повысить правильность результатов анализа.

Следует отметить, большой объем экспериментальной работы по созданию экспериментальной установки, на которой получены результаты диссертации, в том числе и создание программного обеспечения для управления и синхронизации всего сложного комплекса оборудования для возбуждения и регистрации спектров лазерной плазмы. Автор детально изучил особенности инструментального оборудования установки, что значительно повысило качество сравнения экспериментальных спектров и результатов моделирования.

Отметим оригинальный подход автора по определению углерода в сталях, при котором увеличение ширины щели спектрографа (ухудшение спектрального разрешения) приводило к улучшению правильности предсказания содержания углерода в два раза.

Все вышеуказанное позволяет судить о высоком научном и практическом уровне диссертационной работы Зайцева С.М. К материалу, изложенному в автореферате, можно сделать ряд небольших замечаний:

1. Трудно согласиться с утверждением на с. 4 в автореферата, что «в настоящий момент в спектральных базах данных не приводятся штарковские параметры для переходов». Например, в базе данных STARK-B (<http://stark-b.obspm.fr>) суммирована обширная экспериментальная и теоретическая литература для значений Штарковских коэффициентов уширения и сдвига для атомных и ионных линий. Также отметим, что библиографическая база данных по уширению спектральных линий (один из разделов базы данных по атомным переходам), представленная в NIST (<http://physics.nist.gov/cgi-bin/ASBib1/LineBroadBib.cgi>) позволяет получить ссылки на оригинальные работы, в которых приведены результаты расчета или экспериментального измерения коэффициентов Штарка, а также представлены регулярно публикуемые обзоры по сопоставлению данных.
2. в таблице 1 при описании профиля лазерного пучка автор использует термин «Гауссова модовая структура», который не используется в лазерной физике. «Модовая структура» предполагает расчет всех поперечных мод лазерного резонатора, здесь же автор, вероятно, хотел описать распределение поля в поперечном профиле пучка. В литературе принято описывать форму профиля пучка более простым способом, например Гауссов профиль или профиль близкий к одномодовому пучку TEM₀₀. Также в литературе рекомендуется указывать значение параметра качества лазерного пучка M².

Все вышесказанное позволяет судить о высоком научном и практическом уровне диссертационной работы Зайцева С.М., которая 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.

с.н.с. Научного центра волновых исследований
Института общей физики им. А.М. Прохорова
Российской академии наук
к.ф.-м.н.

Леднев Василий Николаевич

19991, ГСП-1, Москва, ул. Вавилова, д. 38,

ИОФ РАН

Тел. 8 499 503 87 58,

E-mail: lednev@kapella.gpi.ru



Подпись В.Н.
заверено
Зам. зав. отделом
16.11.2016

А.В. Свиридова