

ОТЗЫВ

научного руководителя о работе Цивильского Ильи Владимировича, представившего диссертацию «**Улучшение метрологических характеристик атомно-абсорбционного метода контроля состава веществ путем оптимизации параметров атомизаторов на основе трехмерного моделирования**» на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 05.11.13 – «Приборы и методы контроля природной среды, веществ, материалов и изделий».

Диссертационное исследование посвящено математическому моделированию физико-химических процессов, протекающих в электротермических испарителях и атомизаторах с целью улучшения метрологических и аналитических характеристик атомно-абсорбционных спектрометров.

Актуальность темы обусловлена необходимостью исследования пространственно-временных неоднородностей температуры, давления и плотности молекулярных и атомных паров в таких сложных системах. Ранее установлено, что это приводит к существенному снижению правильности спектрометрического анализа, однако в настоящий момент не существует модели, детально учитывающей эти факторы, влияющие на метрологические характеристики аналитической системы.

В ходе работы над диссертацией автором разработана трехмерная численная модель, учитывающая геометрию исследуемой системы и ключевые физико-химические процессы: нагрев атомизатора электрическим током; газовую динамику снаружи и внутри атомизатора; термохимические реакции разложения исследуемого вещества; скорость поступления вещества в газовую фазу; динамику облака атомов внутри атомизатора; распределение интенсивности излучения осветительной системы; регистрируемую прибором атомную абсорбцию, в зависимости от детектора излучения.

Впервые решена полная задача нагрева электротермического испарителя с продольным нагревом Varian ETV; электротермического атомизатора с поперечным нагревом для атомно-абсорбционного спектрометра SIMAA 6000 фирмы Perkin Elmer; смоделирован сигнал атомной абсорбции с различными типами фотодетекторов для химических элементов с различными механизмами атомизации: серебро, медь, индий. В ходе численных экспериментов автором проведена успешная верификация газо-динамической части модели на основе

известных экспериментальных данных о температурных распределениях в твердой и газовой фазе; на основе экспериментов теневой спектральной визуализации верифицированы рассчитанные пространственные распределения атомов внутри атомизатора.

Практическая значимость работы заключается в том, что впервые проведена оптимизация оригинального двустадийного тигельно-спирального атомизатора. Улучшение аэродинамики тигля графитового испарителя вкупе с варьированием режимов работы увеличило эффективность доставки атомов исследуемого вещества на спираль до 97%. Оптимизация положения пучка просвечивающего излучения в атомизаторе повысило детектируемую атомную абсорбцию в пике на 21%. Перечисленные меры привели к повышению на 12,5% теоретической чувствительности атомно-абсорбционного анализа со стандартным пространственно-интегрирующим детектором, а также повышению воспроизводимости анализа за счет улучшения стабильности условий атомизации. При анализе реальных образцов с помощью модифицированного атомизатора, измеренные значения содержания Zn, Cd, Cr, V соответствуют истинным значениям в пределах погрешности измерения. Модифицированный атомизатор использован ООО «Наноспек» в ходе разработки блока для атомно-абсорбционного анализа универсального спектрометрического комплекса «Униспек-200А», внесенного в государственный реестр средств измерений.

По теме диссертации опубликовано 8 статей в рецензируемых журналах, входящих в перечень ВАК РФ (из них индексируемых в системе Scopus: 4, Web of Science: 4, РИНЦ: 10, максимальный импакт-фактор издания: 3.176), и 10 тезисов докладов на Российских и международных конференциях.

Полученные результаты были успешно апробированы на престижных отечественных и международных конференциях: XII Solid Sampling Colloquium with Atomic Spectrometry (XII SSC). Санкт-Петербург (2006 г.); VII European Furnace Symposium on AAS, Санкт-Петербург, (2006 г.); XXXV Colloquium Spectroscopicum Internationale V, Xiamen, China (2007 г.); 34 Federation of Analytical Chemists and Spectroscopy Societies; XVIII Менделеевский съезд по общей и прикладной химии, Санкт-Петербург, (2008 г.); Sixth International Symposium on Modern Principles of Air Monitoring and Biomonitoring, Geilo, Norway, (2008 г.); «Прикладная Оптика-2010», Санкт-Петербург, (2010 г.); «Физика высокочастотных разрядов» ICPRFD, Казань, (2011 г.); 7th Nordic Conference on Plasma Spectrochemistry, Loen, Norway, (2014 г.). Исследования

поддержаны грантами РФФИ: 06-03-32887-а, 09-03-01002-а, 09-03-99014-р_офи,
а также гос. контракт с Министерством образования и науки РФ договор
№14.Z50.31.0023 от 04.03.2014 г.

Поставленные в работе цели и задачи выполнены в полном объеме. Все оригинальные результаты, представленные в работе, получены автором самостоятельно. Прделано законченное серьезное научное исследование, по объему и качеству полностью соответствующее требованиям положения ВАК РФ к кандидатским диссертациям. Считаю, что Цивильский И.В. заслуживает присуждения ученой степени кандидата технических наук.

Научный руководитель:

доктор физико-математических наук,
профессор

Гильмутдинов А.Х.

Подпись *Гильмутдинов А.Х.*
заверяю. Начальник управления
делами КНИТУ-КАИ

