

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Зайцевой Полины Владимировны на тему «Изучение термохимических процессов атомизации элементов и образования молекул в традиционных атомизаторах (на примере рения, фтора и хлора)», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.02 – Аналитическая химия

Изучение термохимических процессов атомизации элементов и образования молекул в традиционных атомизаторах является актуальной задачей. В диссертационной работе Зайцевой П. В. атомизация элементов рассмотрена на примере рения, а образование молекул - на примере фтора и хлора. Выбор таких объектов понятен и обоснован.

Теоретически термохимическое поведение рения в пламенах и графитовой печи ранее не было изучено из-за отсутствия надежных термодинамических данных по ренийсодержащим веществам. Зайцевой П.В. теоретически показаны ограничения атомно-абсорбционного определения рения в пламенах и графитовой печи.

В последнее время опубликовано большое количество экспериментальных работ по молекулярно-абсорбционному определению фтора и хлора, что позволило Зайцевой П.В. проверить разработанный ею алгоритм термодинамического моделирования термохимических процессов образования молекул не только по собственным экспериментальным данным. Несомненным достоинством разработанного алгоритма является возможность расчета полного химического состава компонентов пробы в графитовой печи на соответствующих этапах температурно-временной программы преобразования пробы. Данные составы позволяют сделать вывод о происходящих процессах, установить пути перехода определяемых элементов в газовую fazу графитовой печи, прогнозировать температуры стадий пиролиза и образования молекул, прогнозировать действие химических модификаторов и т.д. В работе приведен подробный алгоритм термодинамического моделирования, определены ограничения его использования и даны рекомендации по использованию его аналитиками. Стоит отметить, что разработанный алгоритм термодинамического моделирования термохимических процессов образования молекул может быть применен не только для

рассмотренных в диссертационной работе фтора и хлора, но и для других галогенов, а также фосфора и серы.

Основные результаты работы диссертационной работы опубликованы в 4 статьях в журнале, входящем в Перечень ВАК, а также докладывались и обсуждались на конференциях специалистов.

По автореферату следуют сделать следующие замечания:

1. Стр. 7. Почему не использовали один программный комплекс (TERRA или HSC) для термодинамического моделирования термохимических процессов атомизации рения в пламенах и графитовой печи?
2. Стр. 9. Почему именно образование газообразных молекул SrF в графитовой печи выбрано для разработки алгоритма термодинамического моделирования?

Несмотря на замечания, по содержанию и объему диссертационная работа Зайцевой Полины Владимировны отвечает требованиям п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 г., № 842, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.02 – Аналитическая химия.

Силькис Эммануил Гершович,
к.техн. наук, зав. сектором «Многоканальных систем регистрации».

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт спектроскопии Российской академии наук (ИСАН), 108840 г. Москва,
г.Троицк ул. Физическая, 5 , Институт спектроскопии РАН.
8-495-851-08-71, silkis @isan.troitsk.ru

27 сентября 2016 г.

 / Силькис Э.Г/



Э.Г.Силькиса заверяю :
секретарь Института спектроскопии РАН

 / Перминов Е.Б/