

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 212.285.09 НА БАЗЕ
ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО АВТОНОМНОГО
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ «УРАЛЬСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ ПЕРВОГО ПРЕЗИДЕНТА РОССИИ Б.Н.
ЕЛЬЦИНА», МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ
ФЕДЕРАЦИИ, ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ
КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 11 октября 2016 г. № 11

О присуждении Зайцевой Полине Владимировне, гражданство Российской Федерации, ученой степени кандидата химических наук.

Диссертация «Изучение термохимических процессов атомизации элементов и образования молекул в традиционных атомизаторах (на примере рения, фтора и хлора)» по специальности 02.00.02 – Аналитическая химия принята к защите 06 июля 2016 г., протокол № 7 диссертационным советом Д 212.285.09 на базе ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина», Минобрнауки России; 620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19; созданного приказом Минобрнауки России № 105/нк от 11.04.2012 г.

Соискатель, Зайцева Полина Владимировна, 1989 года рождения. В 2012 году окончила ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина» по специальности «Химическая технология материалов современной энергетики»; в 2015 году окончила очную аспирантуру ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина» по специальности 02.00.02 – Аналитическая химия; работает в должности ведущего инженера кафедры физико-химических методов анализа ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», Минобрнауки России.

Диссертация выполнена на кафедре физико-химических методов анализа Физико-технологического института ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», Минобрнауки России.

Научный руководитель – доктор химических наук, профессор, Пупышев Александр Алексеевич, ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», Физико-технологический институт, кафедра физико-химических методов анализа, профессор.

Официальные оппоненты:

Бурылин Михаил Юрьевич, доктор химических наук, профессор, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Кубанский государственный университет», г. Краснодар, кафедра аналитической химии, профессор;

Майорова Анна Владимировна, кандидат химических наук, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт металлургии Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург, лаборатория аналитической химии, научный сотрудник, дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Казанский (Приволжский) федеральный университет», г. Казань – в своем положительном заключении, подписанном Таюрским Дмитрием Альбертовичем, доктором физико-математических наук, профессором, заведующим кафедрой общей физики, и Захаровым Юрием Анатольевичем, кандидатом физико-математических наук, доцентом кафедры общей физики, указала, что диссертационная работа Зайцевой Полины Владимировны по актуальности решаемой проблемы, объему проведенных исследований, уровню их обсуждения научной значимости соответствует требованиям п. 9 Положения о присуждении ученых степеней, и может рассматриваться как завершенная научно-квалификационная работа, в которой содержится решение научной задачи, имеющее существенное значение для развития

атомно-абсорбционной и молекулярно-абсорбционной спектрометрии, а ее автор, Зайцева П.В., заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.02 – Аналитическая химия.

Соискатель имеет 12 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации – 12 работ, опубликованных в рецензируемых научных изданиях – 4.

Другие публикации представлены в виде 1 статьи и тезисов 7 докладов международных (1) и российских (7) научных конференций. Общий объем опубликованных по теме диссертации работ 6,158 п.л., авторский вклад – 2,082 п.л.

Наиболее значительные научные работы по теме диссертации:

1. Зайцева, П.В. К вопросу определения рения методами пламенной атомно-абсорбционной и атомно-эмиссионной спектрометрии / **П.В. Зайцева**, А.А. Пупышев, О.В. Евдокимова, К.Ю. Шуняев // Аналитика и контроль. – 2012. – Т. 16, № 1. – С. 30–38 (1.04 п.л./0.26 п.л.).

2. Зайцева, П.В. Термодинамическое моделирование процессов электротермической атомизации рения в графитовой печи / **П.В. Зайцева**, А.А. Пупышев // Аналитика и контроль. – 2012. – Т. 16, № 4. – С. 415–419 (0.5 п.л./0.25 п.л.).

3. Зайцева, П.В. О механизме образования молекул SrF при электротермическом молекулярно-абсорбционном определении фтора / **П.В. Зайцева**, А.А. Пупышев, Ю.А. Курмачёв // Аналитика и контроль. – 2014. – Т. 18, № 3. – С. 287–301 (1.73 п.л./0.58 п.л.).

4. Zaitceva, P.V. Theoretical study of the formation mechanism of molecules CaF for fluoride determination using electrothermal molecular absorption spectrometry / **P.V. Zaitceva**, А.А. Pupyshv // Analytics and Control. – 2016. – Т. 20, № 1. – С. 34–40 (0.8 п.л./0.4 п.л.).

На автореферат поступили положительные отзывы от:

1. **Дмитриева Олега Сергеевича**, доктора технических наук, профессора, заведующего кафедрой физики, и **Барсукова Владимира Ивановича**, кандидата химических наук, доцента, доцента кафедры физика ФГБОУ ВО «Тамбовский государственный технический университет», г. Тамбов. В отзыве имеются вопросы и замечания:

– По стр. 7: Почему термодинамическое моделирование температур пламён и термодинамическое моделирование поведение рения выполнены с помощью различных программных комплексов? Из текста автореферата непонятно, чем обусловлен такой выбор объектов исследования: рений, фтор, хлор.

– По стр. 10. Как в расчетах учитывалось образование разбавленных конденсированных растворов?

– По стр. 14. Была ли выполнена экспериментальная проверка теоретических данных влияния матричных компонентов пробы на эффективность образования молекул SrF?

2. Темердашева Зауаля Ахлоовича, доктора химических наук, профессора, заведующего кафедрой аналитической химии факультета химии и высоких технологий, и **Романовского Константина Андреевича**, кандидата химических наук, старшего преподавателя кафедры аналитической химии факультета химии и высоких технологий ФГБОУ ВО «Кубанский государственный университет», г. Краснодар. В отзыве имеется замечание: в автореферате отсутствует информация, о процедуре подготовки использованных модификаторов, а их действие в методе атомно-абсорбционной спектроскопии с электротермической атомизацией в значительной мере зависит от способа их нанесения.

3. Вотякова Сергея Леонидовича, академика РАН, доктора геолого-минералогических наук, главного научного сотрудника лаборатории физических и химических методов исследования ФГБУН Институт геологии и геохимии им. академика А.Н. Заварицкого Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург. В отзыве имеются вопросы и замечания:

– В тексте не указано, при изучении каких объектов анализа разработанный теоретический алгоритм изучения термохимических процессов может быть полезен?

– Необходимо уточнить кратность превышения концентрации химического агента в исследуемой пробе по отношению к аналиту и процедуру смешения аналита с химическим агентами, в случае отсутствия или

присутствия в недостаточном количестве последнего в анализируемом объекте.

4. **Немца Валерия Михайловича**, доктора технических наук, профессора, ведущего научного сотрудника физического факультета ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный университет», г. Санкт-Петербург. Без замечаний.

5. **Дегтева Михаила Ивановича**, доктора химических наук, профессора, заведующего кафедрой аналитической химии, и **Аликиной Екатерины Николаевны**, кандидата химических наук, доцента кафедры аналитической химии ФГБОУ ВО «Пермский государственный национальный исследовательский университет», г. Пермь. Без замечаний.

6. **Кубраковой Ирины Витальевны**, доктора химических наук, заведующей лабораторией геохимии и аналитической химии благородных металлов ФГБУН Ордена Ленина и Ордена Октябрьской Революции Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского Российской академии наук, г. Москва. Без замечаний.

7. **Седых Эвелины Максимовны**, кандидата химических наук, старшего научного сотрудника, заведующей сектором лаборатории методов исследования и анализа веществ и материалов ФГБУН Ордена Ленина и Ордена Октябрьской Революции Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН, г. Москва. В отзыве имеются вопросы и замечания:

– В автореферате не указаны длины волн аналитических линий (или область) максимума молекулярных полос.

– Желательно более подробно изложить построение градуировочных графиков для определения фтора и хлора по молекулярным спектрам.

8. **Силькиса Эммануила Гершовича**, кандидата технических наук, заведующего сектором «Многоканальные системы регистрации» ФГБУН Институт спектроскопии Российской академии наук, г. Москва, г. Троицк. В отзыве имеются вопросы и замечания:

– Стр.7. Почему не использовали один программный комплекс (TERRA или HSC) для термодинамического моделирования термохимических процессов атомизации рения в пламенах и графитовой печи?

– Стр. 9. Почему именно образование газообразных молекул SrF в графитовой печи было выбрано для разработки алгоритма термодинамического моделирования?

9. **Гильмутдинова Альберта Харисовича**, доктора физико-математических наук, профессора, ректора ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технический университет им. А.Н. Туполева», г. Казань. В отзыве имеются вопросы и замечания:

– Следовало бы количественно показать степень согласия теоретически рассчитанных и экспериментально измеренных значений, представленных на рисунках 7 и 8.

10. **Заксас Натальи Павловны**, кандидата химических наук, старшего научного сотрудника лаборатории спектроскопии неорганических соединений ФГБУН Институт неорганической химии Сибирского отделения Российской академии наук им. А.В. Николаева, г. Новосибирск. Без замечаний.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается их компетентностью в области атомно-абсорбционного анализа и термодинамического моделирования в приложении к задачам аналитической химии, что подтверждается публикациями в рецензируемых российских и международных научных изданиях.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

– впервые теоретически **определены** термохимические процессы пламенной и электротермической атомизации рения и установлены причины низкой чувствительности его атомно-абсорбционного определения в пламенах и графитовой печи;

– **разработан** алгоритм теоретического изучения методом термодинамического моделирования термохимических процессов

образования двухатомных молекул галогенов (на примере фтора и хлора) в графитовой печи;

– впервые теоретически **определены** термохимические процессы образования в графитовой печи фтор- и хлорсодержащих молекул, пригодных для молекулярно-абсорбционного определения фтора и хлора;

– **доказана** перспективность использования разработанного алгоритма изучения термохимических процессов образования двухатомных молекул галогенов, не рассмотренных в диссертационной работе, а также фосфора и серы с целью оптимизации методических условий анализа.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

– впервые теоретически методом термодинамического моделирования **изучены** термохимические процессы атомизации рения в различных пламенах (ацетилен-кислород, ацетилен-динитрооксид, ацетилен-воздух и водород-кислород) и графитовой печи;

– **показана** правильность разработанного алгоритма изучения термохимических процессов получения двухатомных молекул галогенов в графитовой печи сопоставлением теоретических результатов с большим числом опубликованных и собственных экспериментальных данных по электротермическому молекулярно-абсорбционному определению фтора и хлора;

– **применительно к проблематике диссертации результативно использованы** метод равновесного термодинамического моделирования и метод молекулярно-абсорбционного анализа с электротермической атомизацией;

– **изучены** термохимические процессы образования двухатомных фтор- (CaF , BaF , AlF) и хлорсодержащих (InCl , SrCl) молекул в графитовой печи.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

– **разработан** алгоритм теоретического изучения термохимических процессов образования двухатомных молекул галогенидов, используемых для молекулярно-абсорбционного определения галогенов;

– **определены** причины низкой чувствительности пламенного и электротермического атомно-абсорбционного определения рения;

– **определены** возможности и ограничения разработанного алгоритма термодинамического моделирования по описанию и прогнозированию термохимических процессов образования двухатомных молекул в графитовой печи в молекулярно-абсорбционной спектроскопии.

Оценка достоверности результатов исследования выявила, что:

– для экспериментальных работ использовано современное аналитическое оборудование, а для теоретических расчетов – надежные программные комплексы с собственными базами термодинамических данных;

– теоретические положения согласуются с результатами проведенных соискателем экспериментов, выполненных теоретических расчетов и имеющимися литературными данными по исследуемым вопросам;

– идея базируется на обобщении передового мирового и российского опыта в области атомно-абсорбционного и молекулярно-абсорбционного анализа, а также на анализе полученных экспериментальных данных;

– установлено качественное и количественное совпадение результатов, полученных автором экспериментально и представленных в отечественных и зарубежных литературных источниках;

– использованы современные методики сбора и обработки информации в базах данных Scopus, Web of science, PubMed, поисковой системы Google Scholar научной электронной библиотеки eLIBRARY.

Личный вклад соискателя заключался в постановке и проведении научных экспериментов, анализе и систематизации полученных результатов, а также в подготовке публикаций по выполненной работе.

Диссертационная работа Зайцевой Полины Владимировны является завершенной научно-квалификационной работой, в которой содержится решение научной задачи теоретического изучения методом термодинамического моделирования и прогнозирования термохимических процессов атомизации элементов и образования молекул в традиционных атомизаторах, имеющей существенное значение для развития атомно-

абсорбционной и молекулярно-абсорбционной спектromетрии и разработки методик молекулярно-абсорбционного определения галогенов в исследуемых объектах анализа.

На заседании 11 октября 2016 года диссертационный совет принял решение присудить Зайцевой П.В. ученую степень кандидата химических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 22 человек, из них 7 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 29 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за – 22, против – нет, недействительных бюллетеней – нет.

Председатель

диссертационного совета

Бекетов Аскольд Рафаилович

Ученый секретарь

диссертационного совета

Семенщев Владимир Сергеевич

11 октября 2016 г.

