

Министерство образования и науки Российской Федерации
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)
Химический факультет
Кафедра аналитической химии

ДОПУСТИТЬ К ПРЕДСТАВЛЕНИЮ ГЭК
Руководитель ООП
д-р физ.-мат. наук, доцент
И.А. Курзина
« 14 » 05 2019 г.



НАУЧНЫЙ ДОКЛАД

об основных результатах подготовленной научно – квалификационной работы (диссертации)

МОДЕЛИРОВАНИЕ УСЛОВИЙ ПРОВЕДЕНИЯ ПРЯМОГО ДУГОВОГО СПЕКТРАЛЬНОГО АНАЛИЗА И РАЗРАБОТКА НОВЫХ ПОДХОДОВ К ОПРЕДЕЛЕНИЮ ЭЛЕМЕНТНОГО СОСТАВА ОБЪЕКТОВ СО СЛОЖНОЙ МАТРИЦЕЙ

по основной образовательной программе подготовки научно-педагогических кадров в
аспирантуре
направление подготовки 04.06.01 – Химические науки

Бабенков Денис Евгеньевич

Научный руководитель
д-р. техн. наук, профессор
В.И. Отмахов
В.И. Отмахов
подпись
« 13 » 05 2019 г.

Автор работы
аспирант
Д.Е. Бабенков
Д.Е. Бабенков
подпись

Актуальность работы

Метод дуговой атомно-эмиссионной спектроскопии с многоканальным анализатором эмиссионных спектров (ДАЭС с МАЭС) является одним из немногих аналитических методов, позволяющих проводить прямой спектральный анализ порошковых и твердофазных проб различных материалов. Анализ может проводиться из малых навесок, не менее 10 мг, путём прямого определения элементов большей части таблицы Менделеева в интервале от 0,01 до 1000 мг/кг. Данные характеристики значительно превосходят альтернативный рентгено-флуоресцентный метод анализа (РФЛА) твердофазных материалов. ДАЭС с МАЭС более прост в исполнении и более экономичен.

Проведение прямого спектрального анализа методом ДАЭС с МАЭС, как и для большинства аналитических методов, отягощено матричными влияниями. Матричный эффект – эффект, подразумевающий влияние элементов/веществ основы на аналитический сигнал примесей и микропримесей.

К объектам со сложной матрицей можно отнести объекты растительного и животного происхождения, ряд органических и неорганических синтетических объектов, типа полимеров, керамик, стёкол, а также геологические породы и руды. В анализе всех этих объектов огромную роль играют связь примесей с матричными компонентами, их неравномерное распределение в объёме вещества и вариативность состава пробы. Поэтому зачастую методики выполнения измерений данным методом имеют узкую направленность на объект и не обладают чётко выраженной схематичностью и прослеживаемостью действий для достижения оптимального результата анализа.

В данной работе рассмотрены и предлагаются конкретные механизмы по анализу различных объектов со сложной матрицей методом ДАЭС с МАЭС.

Цель работы

Разработка механизмов оптимизации определения элементного состава широкого класса объектов со сложной матрицей с целью последующей

разработки и аттестации методик на основании моделирования условий проведения дугового атомно-эмиссионного спектрального анализа с многоканальным анализатором эмиссионных спектров.

Задачи

1. Исследовать природу анализируемых объектов с целью конкретизации возможных проблем при их спектральном анализе.
2. Изучить закономерности и возможности проведения теоретического моделирования при формировании аналитических сигналов и установить их связь с конкретными условиями проведения спектрального анализа.
3. Исследовать возможность проведения теоретического моделирования путем преобразования фундаментальных зависимостей оценки параметром плазмы.
4. Предложить теоретическую модель плазмы дугового разряда для оценки процессов, влияющих на формирование аналитического сигнала.
5. Рассчитать хемометрические параметры плазмы и оценить состояние атомов в плазме дугового разряда.
6. Провести метрологическую оценку показателей качества измерений при спектральном анализе исследуемых объектов с учетом теоретических и экспериментальных подходов.
7. Предложить алгоритмы методик исследуемых объектов.

Научная новизна

1. Модернизированы, улучшены и обновлены имеющиеся теоретические данные, характеризующие метод ДАЭС с МАЭС.
2. Подробно рассмотрены некоторые ранее неизученные практические взаимосвязи аналитического сигнала и метрологических показателей с условиями проведения анализа.
3. Разработаны новые подходы к моделированию и оценке ряда показателей проведения анализа.

Практическая значимость работы

Разработанные подходы могут быть использованы в аналитических лабораториях для создания новых или модернизации старых методик анализа различных объектов, а также для оптимизации процедуры выполнения анализа.

Защищаемые положения

1. Теоретическое моделирование процессов, протекающих в плазме дугового разряда при формировании аналитического сигнала (модель плазмы).
2. Экспериментальные возможности управления состоянием анализируемых атомов и ионов при формировании аналитических сигналов.
3. Метрологическая оценка показателей качества измерений анализируемых объектов с учетом теоретических и экспериментальных подходов.
4. Алгоритмы методик исследуемых объектов со сложной матрицей

Достоверность научных положений обусловлена представительным объёмом изученной литературы и проведённых экспериментов, использованием современного поверенного аналитического оборудования аккредитованной лаборатории, метрологической обработкой результатов.

Личный вклад автора состоял в изучении литературных данных, планировании и проведении экспериментальной части работы. Обсуждение полученных результатов проводилось совместно с научным руководителем.

Публикации

Основное содержание диссертации опубликовано в 16 научных работах, 4 из них в рецензируемых научных изданиях, рекомендуемых ВАК, и 12 публикаций в материалах международных и всероссийских конференций.

Апробация работы

Основные положения и результаты работы представлены на международных и всероссийских конференциях, семинарах, симпозиумах: Всероссийская с международным участием научная конференция

«Полифункциональные химические материалы и технологии» (Томск, 2013), XXI международная конференция студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов-2014» (Москва, 2014), Международная научная конференция «Полифункциональные химические материалы и технологии» (Томск, 2015), XIII Международная конференция студентов, аспирантов и молодых учёных «Перспективы развития фундаментальных наук», (Томск, 2016), XIV Международная конференция студентов, аспирантов и молодых учёных «Перспективы развития фундаментальных наук», (Томск, 2017), XVIII Международная научно-практическая конференция студентов и молодых учёных «Химия и химическая технология в XXI веке» им. проф. Л.П. Кулёва (Томск, 2017), XVI Международный симпозиум «Применение анализаторов МАЭС в промышленности» (Новосибирск, 2018).

Структура и объём диссертации

Диссертация изложена на 120 страницах машинописного текста, включает 19 таблиц, 32 рисунка и состоит из введения, 5 глав, выводов и цитируемой литературы, включающего 125 наименований.

Основное содержание работы

В **литературном обзоре** описываются перспективы применения метода дуговой атомно-эмиссионной спектроскопии с многоканальным анализатором эмиссионных спектров, история развития метода, особенности, ключевые принципы и основы метода, области, в которых он нашёл наиболее широкое применение и соответствующие им объекты анализа. Также описываются объекты анализа со сложной матрицей, особенности их анализа, применяемые методики и методы, известные подходы и проблемы.

Экспериментальная часть

Аппаратура, реактивы, стандарты

В работе были применены современные аналитические методы элементного и фазового анализа.

Дуговой атомно-эмиссионный спектральный анализ с использованием спектрального комплекса «Гранд» с МАЭС (Россия, 2006).

В соответствии с п. 3.2 «*Регламента размещения текстов выпускных квалификационных работ в электронной библиотеке Научной библиотеки ТГУ*» выпускная квалификационная работа аспиранта: Научный доклад об основных результатах подготовленной научно – квалификационной работы (диссертации) «*Моделирование условий проведения прямого дугового спектрального анализа и разработка новых подходов к определению элементного состава объектов со сложной матрицей*» Бабенкова Д.Е. размещается в репозитории с изъятием некоторых разделов в соответствии с решением правообладателя.

Руководитель ООП



И.А. Курзина

Отчет о проверке на заимствования №1



Автор: denis_babenkov@list.ru / ID: 6459681

Проверяющий: (denis_babenkov@list.ru / ID: 6459681)

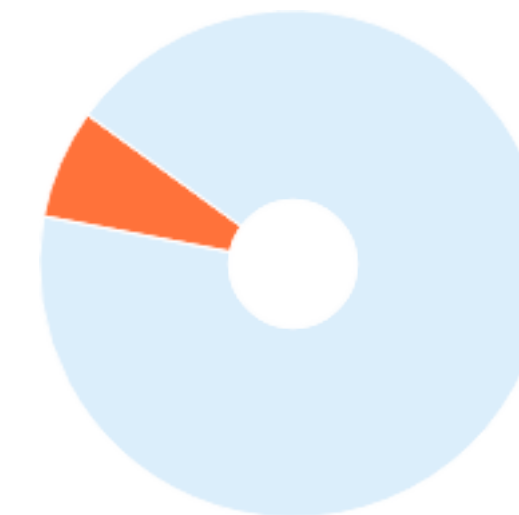
Отчет предоставлен сервисом «Антиплагиат»- <http://users.antiplagiat.ru>

ИНФОРМАЦИЯ О ДОКУМЕНТЕ

№ документа: 2
 Начало загрузки: 17.05.2019 18:53:26
 Длительность загрузки: 00:00:01
 Имя исходного файла: НД Бабенков 17.05.19
 Размер текста: 1461 кБ
 Символов в тексте: 35291
 Слов в тексте: 4064
 Число предложений: 364

ИНФОРМАЦИЯ ОБ ОТЧЕТЕ

Последний готовый отчет (ред.)
 Начало проверки: 17.05.2019 18:53:28
 Длительность проверки: 00:00:02
 Комментарии: не указано
 Модули поиска: Модуль поиска Интернет



Заимствования — доля всех найденных текстовых пересечений, за исключением тех, которые система отнесла к цитированиям, по отношению к общему объему документа.
 Цитирования — доля текстовых пересечений, которые не являются авторскими, но система посчитала их использование корректным, по отношению к общему объему документа. Сюда относятся оформленные по ГОСТу цитаты; общепотребительные выражения; фрагменты текста, найденные в источниках из коллекций нормативно-правовой документации.
 Текстовое пересечение — фрагмент текста проверяемого документа, совпадающий или почти совпадающий с фрагментом текста источника.
 Источник — документ, проиндексированный в системе и содержащийся в модуле поиска, по которому проводится проверка.
 Оригинальность — доля фрагментов текста проверяемого документа, не обнаруженных ни в одном источнике, по которым шла проверка, по отношению к общему объему документа.
 Заимствования, цитирования и оригинальность являются отдельными показателями и в сумме дают 100%, что соответствует всему тексту проверяемого документа.
 Обращаем Ваше внимание, что система находит текстовые пересечения проверяемого документа с проиндексированными в системе текстовыми источниками. При этом система является вспомогательным инструментом, определение корректности и правомерности заимствований или цитирований, а также авторства текстовых фрагментов проверяемого документа остается в компетенции проверяющего.

№	Доля в отчете	Источник	Ссылка	Актуален на	Модуль поиска
[01]	2,84%	https://esu.citis.ru/dissertation/RSB79JHCOJC3GGSCW0LGREPX	https://esu.citis.ru	10 Мая 2018	Модуль поиска Интернет
[02]	2,66%	Отмахов Владимир Ильич Химический факультет	http://chem.tsu.ru	28 Фев 2018	Модуль поиска Интернет
[03]	1,09%	Анализ углеродистых геологических пород методами масс-спектрометрии с индуктивно-связанной...	http://rud.exdat.com	раньше 2011	Модуль поиска Интернет

Еще источников: 3

Еще заимствований: 0,88%