

ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

о диссертации ГОРБУНОВА МИХАИЛА СЕРГЕЕВИЧА
**«Физические основы процессов возникновения фона при
возбуждении рентгеновской флуоресценции»**,
представленной на соискание ученой степени кандидата
физико-математических наук по специальности 01.04.07 –
физика конденсированного состояния

Возникающий при регистрации спектров рентгеновской флуоресценции фон определяет предельные характеристики рентгеноспектрального анализа, в частности, нижнюю границу определяемых содержаний. Сопутствующие регистрации артефакты, особенности функции отклика детектора могут существенно осложнить интерпретацию спектральной информации, например, привести к ложному обнаружению элементов, отсутствующих в образце, вызвать неконтролируемые систематические погрешности в количественном рентгенофлуоресцентном анализе. Проблема осложняется тем, что в формировании фона при возбуждении рентгеновской флуоресценции вносят вклад различные по природе физические процессы. К ним относятся когерентное и некогерентное рассеяние рентгеновского излучения, особенности формирования сигнала в детекторах различного типа, возникновение собственной флуоресценции деталей спектрометра, образование в детекторе потоков фото-, оже-электронов, электронов отдачи. На величину фона может также оказывать влияние геометрия эксперимента и ряд других факторов. Существовавшие до настоящего времени исследования, посвященные формированию фона при рентгеновской флуоресценции, обычно были посвящены отдельным процессам, вносящим вклад в формирования фонового сигнала. Предлагаемые при этом физические модели процессов отличались значительной упрощенностью, в частности, не учитывался вклад многократных процессов. Недостаточная изученность фундаментальных процессов формирования фона существенно тормозит развитие рентгеновской спектроскопии в целом и рентгенофлуоресцентного анализа в частности.

Диссертация М.С. Горбунова в значительной степени восполняет этот пробел. В ней представлены результаты комплексного исследования формирования фона при возбуждении рентгеновской флуоресценции, учитывающее большинство значимых процессов, предложены более адекватные физические модели и решения, обеспечивающие снижение отношения сигнал/фон.

Учитывая сказанное, **считаю диссертацию М.С. Горбунова актуальной, а сам факт выполнения данной работы исключительно своевременным.**

Диссертация М.С. Горбунова имеет традиционное построение: состоит из введения, четырех глав, заключения, списка публикаций по теме диссертации, включающего 21 ссылку, и списка литературы, содержащего 156 источников. Работа изложена на 125 страницах текста.

Во введении (стр. 5 - 8) дана общая характеристика работы, обоснована актуальность темы диссертации, рассмотрена цель и задачи работы, сформулированы положения, выносимые на защиту, рассмотрены научная новизна и практическая значимость работы.

Первая глава диссертации (стр. 9 - 46) представляет собой обзор литературы, посвященный критическому анализу существующих представлений о формировании аналитического сигнала и фона в рентгеновской спектроскопии. Рассмотрены современные представления об основных процессах взаимодействия рентгеновского излучения и потоков электронов с веществом, источники первичного рентгеновского излучения (радиоактивные изотопы и рентгеновские трубки), детекторы рентгеновского излучения. Дан критический анализ существующих моделей процессов при формировании фона в рентгеновской спектроскопии. Сделан принципиально важный вывод о перспективности использования для расчетов рентгеновских спектров метода имитационного моделирования (метода Монте-Карло) по сравнению с рассмотрением этих процессов на основе кинетического уравнения. В заключение обзора (стр. 46) сформулированы цели и задачи работы.

Во второй главе диссертации (стр. 47 - 64) представлены результаты исследований вклада фото-, оже- и комптоновских электронов, возникающих при возбуждении рентгеновской флуоресценции (далее они в диссертации называются свободными электронами), в формирование фона в аппаратуре с волновой дисперсией. Получено выражение для спектра тормозного излучения свободных электронов (соотношения (2.4), (2.8), (2.11) и (2.13)). Теоретически и экспериментально показано, что для легких элементов (Z менее 11) вклад в формирование фона тормозного излучения свободных электронов может превосходить вклад тормозного излучения рентгеновской трубки. Построена модель формирования фонового сигнала с учетом вклада тормозного излучения свободных электронов, флуоресценции кристалла-анализатора, диффузного рассеяния рентгеновского излучения на кристалле-анализаторе, вклада высших порядков дифракции первичного излучения на кристалле анализаторе и аддитивного вклада различных не идентифицированных факторов (излучение деталей спектрометра, естественный радиационный фон, шумы электронной аппаратуры и др.). Предложенная модель подтверждена результатами экспериментов.

В третьей главе диссертации (стр. 65 - 98) приведены результаты моделирования функции отклика полупроводниковых детекторов рентгеновского излучения. Для описания процессов взаимодействия излучения с детектором автором разработана программа имитационного моделирования (метод Монте-Карло), учитывающая процессы фотопоглощения, когерентного и некогерентного рассеяния, генерацию тормозного излучения свободных электронов, неполного сбора заряда. В результате с помощью модели удалось описать формирование пика полного поглощения, пика потерь, плато потерь, низкоэнергетичного «плеча» неполного сбора заряда. Получены функции отклика для кремниевого и германиевого полупроводниковых детекторов. Полученные результаты находятся в удовлетворительном соответствии с экспериментальными данными. На основе разработанной модели формирования фона получена функция отклика для двуслойного полупроводникового детектора (кремний-германий), оценена его эффективность, уровень фона и сделан вывод о перспективности реализации такого детектора.

В четвертой главе диссертации (стр. 99 - 105) приведены результаты оценки влияния геометрических особенностей полупроводникового энергодисперсионного спектрометра на формирование сигнала и фона при учете многократного рассеяния. Полученные результаты сопоставлены с экспериментальными данными при возбуждении рентгеновской флуоресценции радиоизотопным источником ^{241}Am . Экспериментальные и теоретические результаты находятся в удовлетворительном соответствии.

В заключении (стр. 106 - 107) сформулированы основные результаты диссертации.

Все полученные в диссертации научные результаты являются **новыми**. Среди новых результатов данной диссертации **считаю необходимым выделить следующие:**

1. Модель и алгоритм расчета функции отклика полупроводникового энергодисперсионного детектора рентгеновского излучения (глава 3 диссертации).
2. Результаты расчета функции отклика двуслойного полупроводникового (кремний-германий) энергодисперсионного детектора (глава 3).
3. Учет вклада тормозного излучения фото-, оже- и комптоновских электронов в интенсивность фонового сигнала вблизи линий легких элементов (Z менее 11).

Достоверность результатов диссертации не вызывает сомнений, поскольку они подтверждены данными экспериментов, выполненных диссертантом, корректными теоретическими оценками, сравнением с имеющимися литературными данными.

Практическая ценность результатов данной диссертации заключается в том, что разработанный подход к моделированию формирования фона при возбуждении рентгеновской флуоресценции может быть использован как при создании новых детекторов

и спектрометров рентгеновского излучения, так и при оптимизации геометрии эксперимента для существующих спектрометров. В перспективе это может привести к существенному снижению пределов обнаружения в рентгенофлуоресцентном анализе.

Автореферат диссертации правильно и достаточно полно отражает ее содержание.

Основные результаты диссертации опубликованы. По материалам диссертации опубликовано 11 статей в рецензируемых журналах, которые входят в «Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертации на соискание ученой степени доктора и кандидата наук» (X-ray Spectrometry, Научное приборостроение, Журнал аналитической химии, Известия высших учебных заведений. Физика). Результаты работы неоднократно докладывались на Всероссийских и Международных конференциях (опубликовано 8 тезисов докладов). Получен патент РФ.

В работе имеются **отдельные недостатки:**

1. При разработке модели формирования функции отклика полупроводникового детектора (глава 3 диссертации) автор учитывает ряд особенностей, обусловленных процессами в самом кристалле детектора (неполный сбор заряда, формирование пика потерь и пр.), но при этом вне рассмотрения оказывается возможность возникновения суммарных пиков (пиков, расположенных вблизи значений энергии, равных сумме энергий ярких пиков спектра), вызванных неполной режекцией наложений импульсов при больших нагрузках спектрометра. Неполная режекция, хотя и возникает уже на этапе обработки сигнала, вносит вклад в амплитудный спектр и может трактоваться как составная часть функции отклика. Другой особенностью энергодисперсионной регистрации спектров рентгеновской флуоресценции при полихроматическом возбуждении является возможность возникновения так называемых дифракционных пиков, дающих вклад в регистрируемый спектр. Эта возможность также не учтена при формировании модели.

2. Имеются отдельные мелкие замечания. Не вполне ясно, для какого по составу образца приведено спектральное распределение тормозного излучения на рис. 2.3 (стр. 53 диссертации). В тексте на стр. 53 он назван натриевым, в подписи под рисунком 2.3 – кальциевым. Второе, вероятно, правильно, если ориентироваться на положение скачка поглощения. На стр. 67 диссертации приведена формула $AsGa$, речь, судя по всему, идет об арсениде галлия. В таком случае, элемент с меньшей электроотрицательностью должен стоять на первом месте, т.е. $GaAs$.

Отмеченные недостатки носят частный характер и не затрагивают существа основных положений диссертации, выносимых на защиту и не могут повлиять на общую высокую оценку работы.

Диссертация М.С. Горбунова соответствует специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния». Представленные в диссертации результаты относятся к области исследований, предусмотренной пунктом 4 Паспорта специальности 01.04.07: «Теоретическое и экспериментальное исследование воздействия различных видов излучений, высокотемпературной плазмы на природу изменений физических свойств конденсированных веществ» и соответствует отрасли наук «физико-математические науки».

Диссертация М.С. Горбунова является законченной научно-квалификационной работой, содержащей решение задачи – установление механизма возникновения фона при возбуждении рентгеновской флуоресценции в конденсированных веществах, имеющей важное значение для развития физики конденсированного состояния.

Диссертация М.С. Горбунова удовлетворяет требованиям п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. N 842, а также требованиям пп. 10-14 указанного Положения.

Автор работы – Михаил Сергеевич Горбунов – заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 - «Физика конденсированного состояния».

Официальный оппонент

Филиппов Михаил Николаевич.

Ученая степень: доктор физико-математических наук по специальности 02.00.02 – аналитическая химия.

Ученое звание: профессор.

Основное место работы: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской академии наук.

Должность: заведующий лабораторией химического анализа.

Почтовый адрес: 119991, Москва, Ленинский проспект, 31.

Телефон: +7(495) 633-85-09.

Адрес электронной почты: fil@igic.ras.ru

Согласен на
обработку
персональных
данных

02.12.2016 г.

Филиппов М.Н.

