

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации **Зайцевой Елены Александровны**

«Метод описания селективности жидких неподвижных фаз в аналитической хроматографии полярных органических соединений и их изомеров», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальностям 02.00.02

(1.4.2 по новой номенклатуре) – Аналитическая химия, 02.00.04 (1.4.4 по новой номенклатуре) –
Физическая химия

Диссертационная работа Зайцевой Е.А. посвящена решению важной проблемы повышения селективности хроматографического разделения полярных веществ с близкими свойствами с использованием разработанного метода классификации неподвижных жидких фаз для газовой хроматографии. Решение данной проблемы является одной из важнейших задач аналитической химии, основным способом решения которой является выбор селективной неподвижной фазы для анализа различных классов соединений. Актуальность темы исследования не вызывает сомнения.

Используемые в газовой хроматографии жидкие неподвижные фазы (НФ) различаются по полярности и обладают различной селективностью по отношению к компонентам анализируемой смеси в зависимости от их свойств и полярности. В настоящее время в газовой хроматографии используют несколько классификаций НФ по полярности. К ним относятся метод Роршнайдера-МакРейнольдса, модель сольватационных параметров Абрахама, множество одномерных схем и др. К основным недостаткам существующих классификаций можно отнести их эмпиричность и трудоемкость. Газохроматографические системы слишком сложны для неэмпирических методов, а полуэмпирические методы, основанные на принципе аддитивности атом-атомных потенциалов, используют большое количество подгоночных параметров и не дают необходимой точности расчетов. Автором разработан новый оригинальный способ классификации хроматографических НФ, основанный на трехпараметрической модели межмолекулярных взаимодействий.

В работе уделено особое внимание теоретическому обоснованию модели межмолекулярных взаимодействий в системе сорбат-сорбент, учитывающей три независимых вклада: полярных взаимодействий, неполярных взаимодействий, водородных связей. На основании проведенных исследований автором предложено объяснение инверсии селективности НФ при разделении геометрических изомеров метиловых эфиров жирных кислот, и получены количественные критерии реализации двух механизмов сорбции.

Для решения сложной аналитической задачи хроматографического разделения близких по свойствам соединений, таких как геометрические изомеры, методом газовой хроматографии, на

первый план выходит выбор селективной неподвижной фазы. В работе предложен алгоритм расчета характеристик полярности и гидрофильности с использованием современных и разработанных автором компьютерных программ из структурной формулы НФ (прямая задача) и расчета характеристик селективности НФ из экспериментальных данных (обратная задача). На основании полученных данных строится карта селективности с осями «полярность – гидрофильность», позволяющая предсказать свойства фаз. Разработана компьютерная программа STARHMAP, которая позволяет рассчитать характеристики селективности НФ из экспериментальных данных по индексам удерживания Ковача. Выведены количественные критерии выбора НФ, наиболее подходящих для разделения геометрических изомеров метиловых эфиров жирных кислот. Предложенный автором подход позволяет решение сложные аналитические задачи газовой хроматографии по выбору НФ, обладающих высокой селективностью.

Полученные данные представляют значительный интерес и вносят большой вклад в развитие теории взаимодействий в газовой хроматографии. По теме диссертации опубликовано 20 печатных работ, из которых 8 статей опубликовано в журналах, индексируемых в реферативных международных базах данных Scopus и рекомендованных ВАК при Минобрнауки России, 2 статьи опубликованы в журналах, индексируемых в базе РИНЦ, а также опубликовано 10 тезисов докладов в материалах международных и российских конференций.

Всё вышеперечисленное свидетельствует о соответствии представленной диссертации критериям научной новизны и практической значимости.

По автореферату имеются следующие вопросы и замечания:

1. Проводилось ли обоснование выбора компьютерных программ для расчета физико-химических свойств молекул аналита и оценка погрешности расчета для сложных молекул? Так как для некоторых классов соединений компьютерная программа Chem3D рассчитывает с достаточно большой погрешностью даже температуру кипения.

2. Насколько корректно использование терминов «адсорбат» и «адсорбция» при рассмотрении механизма сорбции на жидких НФ, особенно при рассмотрении механизма В-сорбции?

3. В тексте автореферата не введены некоторые сокращения, например, МЭЖК, ТПХ, ПЭГ, РМР.

Указанные замечания не умаляют достоинств диссертационной работы.

Диссертационная работа Зайцевой Елены Александровны выполнена на высоком научном уровне и полностью соответствует требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, установленным "Положением о присуждении ученых

