

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 – аналитическая химия (1.4.2 по новой номенклатуре), 02.00.04 – физическая химия (1.4.4 по новой номенклатуре)

Хроматография является одним из самых эффективных методов анализа многокомпонентных объектов. Успех использования аналитической хроматографии определяется селективностью сорбции целевых аналитов и динамикой хроматографического процесса. При этом важнейшей задачей аналитической хроматографии является достижение высокой селективности сорбции аналитов. Поэтому теоретические исследования в этом направлении являются чрезвычайно актуальными.

Прежде всего необходимо отметить, что несмотря на многочисленные работы по теории газовой хроматографии и методам классификации неподвижных фаз, сохраняются недостатки, связанные с их слабой обоснованностью, эмпиричностью и трудоемкостью. Необходимы более обоснованные теории на базе современных представлений о межмолекулярных взаимодействиях. Именно в этом направлении проведены исследования автором диссертационной работы. Автором развиты модели межмолекулярных взаимодействий с учетом вкладов в энергию неполярных и полярных взаимодействий и водородных связей, а также предложена более точная классификация неподвижных фаз. Все это позволило в конечном счете решить в ряде случаев проблему повышения селективности газовой хроматографии, в том числе при анализе структурных и геометрических изомеров полярных веществ.

В кратком отзыве нет возможности отразить все достижения автора. Можно только отметить ряд несомненных достижений защищаемой работы, определяющих ее новизну:

- Разработка нового метода трехпараметрической характеристики селективности неподвижных фаз с известной структурой, основанного на теоретическом количественном описании межмолекулярных взаимодействий, приводящих к неполярным, полярным и водородным связям сорбента с адсорбатами.
- Обнаружение на примере полиэтиленгликоля зависимости характеристик полярности и гидрофильности неподвижных фаз от массы полимера.
- Разработка программы STAPHMAP, позволяющей четко классифицировать адсорбаты по классам гидрофильности и проводить расчет селективности неподвижных фаз по индексам Ковача.
- Разработка подхода классификации и выбора газохроматографических неподвижных фаз на основе карты селективности с использованием принципа подобия свойств неподвижной фазы и адсорбата.
- Разработка представления о двух возможных механизмах удерживания адсорбата: А-сорбции (адсорбция со свободным перемещением по поверхности фазы) и В-сорбции (поглощение молекулы адсорбата макромолекулой полимера неподвижной фазы), на основе которого дано теоретическое объяснение инверсии селективности неподвижных фаз при газохроматографическом анализе геометрических изомеров мононенасыщенных жирных кислот.

К диссертанту имеется вопрос. Он для аналитов используется только термин адсорбат, тем самым утверждается, что в газо-жидкостных хроматографических системах имеет место только поверхностная сорбция и отсутствует объемная сорбция в жидкой фазе. Так ли это? Не лучше ли было использовать более общий термин «сорбат»?

Также в работе необходимо было четко дать различие понятий селективность хроматографической системы в целом (которую в общем случае определяют как свойства неподвижной фазы, так и свойства подвижной фазы) и селективность неподвижной фазы.

По автореферату работы у автора отзыва имеется только одно замечание. Используя в названии работы термин «селективность неподвижных фаз» в качестве основного предмета исследования автор в реферате не дает определение этого термина и количественной связи селективности с другими характеристиками хроматографического процесса, используемыми большинством хроматографистов (возможно это отражено в самой диссертации). Автор в реферате оперируя в основном понятием энергией взаимодействия адсорбатов с неподвижной фазой и выстроив стройную теорию ее количественного расчета, не замыкает ее расчетом селективности разделения, под которой обычно понимается мера способности хроматографической системы различать аналиты пробы. Обычно селективность разделения характеризуют коэффициентом селективности α . Разделение имеет место при $\alpha > 1$ и улучшается по мере его увеличения.

Предложенное автором строгое описание сорбции аналитов требует выполнение достаточно громоздких вычислений непривычных для большинства хроматографистов-практиков. Поэтому этот практически важный результат «тонет» в многочисленных промежуточных расчетах. Может показаться, что теоретические разработки автора диссертации представляют интерес только для теоретиков хроматографических процессов. Однако в век цифровых технологий при наличии необходимых программных средств это становится доступным для разработчиков новых хроматографических методик и открывает перед ними принципиально новые возможности.

В целом можно утверждать, что благодаря новым подходам, автор расширил наши познания в области теории сорбции в условиях газовой хроматографии. Новизна и достоверность полученных автором данных и выводов по работе не вызывают сомнений. Об этом свидетельствуют публикации автора и апробация работы на многочисленных научных конференциях.

Отмечая практическую важность работы, следует подчеркнуть, что результаты теоретических исследований автора и разработанная им компьютерная программа открывают новые возможности для разработок практически важных хроматографических методик. Можно рекомендовать автору в дальнейшем пропагандировать эти возможности среди хроматографистов.

Новизна и достоверность полученных автором данных и выводов по работе не вызывают сомнений. Об этом свидетельствуют публикации автора и апробация работы на многочисленных научных конференциях.

Зайцеву Е.А. можно уверенно считать высококвалифицированным специалистом, способным самостоятельно формулировать и выполнять научные исследования в различных областях хроматографии и физической химии сорбции.

Работа Зайцевой Е.А. соответствует высоким стандартам, предъявляемым ВАК РФ к кандидатским диссертациям по естественным наукам, и может служить примером плодотворных научных исследований.

Автор диссертационной работы Зайцева Елена Александровна является зрелым ученым и, несомненно, заслуживает присуждения ему искомой ученой степени кандидата химических наук по специальностям 02.00.02 – Аналитическая химия и 02.00.04 – Физическая химия.

Гладышев Павел Павлович
Доктор химических наук (02.00.04 – Физическая химия)
Профессор
Профессор кафедры химии, новых технологий и материалов
Государственный университет «Дубна»
141980, г. Дубна Московской обл., ул. Университетская, 17
Интернет сайт организации: <https://uni-dubna.ru/>
e-mail: pglad@yandex.ru
телефон: 8-926-84-71-557

Я, Гладышев Павел Павлович, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

«8» сентября 2021 г.



Подпись автора отзыва Гладышева Павла Павловича заверяю

Проректор по научной и инновационной деятельности

государственного университета «Дубна»



Ю.А. Крюков