

## 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)

Работа Зайцевой Е.А. посвящена разработке нового метода классификации жидких неподвижных фаз, основанного на теоретическом описании межмолекулярных взаимодействий, и применению предложенного метода для выбора стационарных фаз при решении задач повышения селективности аналитической газовой хроматографии. Известно, что наиболее распространенные на практике методы классификации неподвижных фаз на основе определения удерживания ряда маркерных соединений (методы Роршнайдера, МакРейнольдса, Абрахама и др.) обладают рядом недостатков, главными из которых является значительная трудо-, време- и ресурсозатратность, поэтому выполненное автором развитие теории межмолекулярных взаимодействий общего типа в аморфных средах в рамках модели адсорбции полярных веществ на полярных неподвижных с последующей разработкой нового метода характеристики селективности и классификация неподвижных фаз в газовой хроматографии является **актуальной задачей** современной аналитической химии. Разработанная Зайцевой Е.А. компьютерная программа STARNMAP, позволяющая классифицировать молекулы сорбатов на основании значений гидрофильности, а также рассчитывать параметры селективности неподвижных фаз на основании экспериментальных данных по логарифмическим индексам удерживания, а также предложенный графический способ классификации стационарных фаз, позволяющий осуществлять выбор наиболее селективной к целевому соединению неподвижной фазы, позволяют решать важнейшие **практические** задачи, сократить время оптимизации условий разделения, уменьшить расход реагентов. Зайцевой Е.А. впервые предложена математическая модель взаимодействия «стационарная фаза- сорбат» с учетом вкладов неполярной, полярной ковалентной и водородной связей и приведено математическое определение двух независимых характеристик селективности стационарной фазы: полярности, представляющей собой значение квадрата дипольного момента, приведенного к значению обобщенного заряда, и гидрофильности, которая описывает как отношение вероятности образования водородной связи к обобщенному заряду. Зайцевой Е.А. также решены прямая и обратная задачи моделирования: предложены способы расчета параметров селективности на основании структурных данных (по структурной формуле стационарной фазы) и на базе экспериментальных данных о хроматографическом удерживанию модельных соединений. В связи с этим работа Зайцевой Е.А. несомненно **обладает научной новизной**.

По материалам диссертации Зайцевой Е.А. опубликовано 20 печатных работ, в том числе 10 статей: 5 статей в журналах, индексируемых Scopus (входит в Перечень ВАК при Минобрнауки России); 3 статьи в журналах Перечня ВАК при Минобрнауки России и 2 статьи в журналах, индексируемых в базе РИНЦ. Результаты исследований были представлены на конференциях различного уровня, в том числе международных, по результатам выступлений опубликовано 10 тезисов докладов.

Диссертационная работа Зайцевой Е.А. отвечает требованиям, предъявляемым к кандидатской диссертации (пункт 9. «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утверждённого постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 года с изменениями, внесенными постановлением Правительства Российской Федерации № 335 от 21 апреля 2016 года), а ее автор заслуживает присуждения 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).

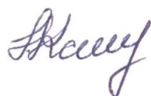
Главный научный сотрудник лаборатории спектральных и хроматографических исследований Института нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской академии наук, доктор химических наук



Курганов Александр Александрович  
1.09.2021  
[kurganov@ips.ac.ru](mailto:kurganov@ips.ac.ru)  
8 (495) 647 59 27 доб. 291

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

Ведущий научный сотрудник лаборатории спектральных и хроматографических исследований Института нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской академии наук, кандидат химических наук



Канатьева Анастасия Юрьевна  
1.09.2021  
[kanatieva@ips.ac.ru](mailto:kanatieva@ips.ac.ru)  
8 (495) 647 59 27 доб. 113

Я, Канатьева А.Ю., даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Подпись д.х.н. Курганова А.А., к.х.н. Канатьевой А.Ю. заверяю

Ученый секретарь ИНХС РАН

Д.х.н.



Костина Ю.В.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Ордена Трудового Красного Знамени Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской академии наук (ИНХС РАН)

Почтовый адрес: 119991, ГСП-1, г. Москва, Ленинский проспект, д. 29  
Контактный телефон: 8 (495) 954-42-75  
e-mail: [tips@ips.ac.ru](mailto:tips@ips.ac.ru)

