

## 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)

В методе газовой хроматографии используются жидкие неподвижные фазы как фактор разделения смеси. В зависимости, в первую очередь, от полярности происходит их выбор для наиболее эффективного разделения различных классов химических соединений, где ключевым свойством является селективность по отношению к компонентам разделяемой смеси. Этот выбор может осуществляться эмпирическими или полуэмпирическими методами. Однако общий недостаток существующих методов – слабая обоснованность. Этот недостаток можно ликвидировать с использованием теории межмолекулярных взаимодействий, которая использована в представленной диссертации.

Использована теория обобщенных зарядов, с помощью которой рассчитывается адсорбция широкого класса веществ на неполярных адсорбентах с использованием разработанной математической модели межмолекулярных взаимодействий. На основе этой модели был разработан теоретический метод в решении проблемы повышения селективности газовой хроматографии.

Основные результаты заключаются в согласованности разработанного метода с известной теорией Роршнайдера, МакРейнольдса и Абрахама и применение нового метода характеристики в решении задач аналитической газовой хроматографии.

Важным результатом является также решение прямой и обратной задач моделирования, позволяющие рассчитывать характеристики неподвижной фазы из структурной формулы и хроматографических данных.

Разработанный подход был использован для выбора наиболее селективных неподвижных фаз при анализе трудной для анализа системы – геометрических изомеров метиловых эфиров жирных кислот.

Единственным **замечанием** по автореферату является недостаточное внимание к оценке погрешности теоретических расчетов по сравнению с экспериментом при решении сложных задач газовой хроматографии по выбору неподвижных фаз, что, впрочем, простительно для молодого теоретика.

В целом, моя оценка работы Е.А.Зайцевой является высокой. Она выполнена на высоком теоретическом уровне и имеет возможное продолжение по развитию этого подхода. Защищаемые положения обоснованы сочетанием математического моделирования и эмпирических данных при разработке эффективного метода оценки селективности неподвижных фаз. Основные выводы по результатам работы достоверны и обоснованы.

Это дает основание утверждать соответствие представленной диссертации Е.А.Зайцевой «Метод описания селективности жидких неподвижных фаз в аналитической хроматографии полярных органических соединений и их изомеров» критериям, установленным п. 9-11, 13, 14 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 г. № 842 (с изменениями

в постановлении Правительства РФ от 21.09.2016 № 335). Диссертация Елены Александровны Зайцевой соответствует специальности на соискание ученой степени кандидата химических наук 02.00.02 – аналитическая химия (1.4.2 по новой номенклатуре), 02.00.04 – физическая химия (1.4.4 по новой номенклатуре).

Веницианов Евгений Викторович  
доктор физико-математических наук  
профессор

зав. лабораторией охраны вод ФГБУН Института водных проблем РАН  
119333 Москва, ул. Губкина, 3.

[info@iwp.ru](mailto:info@iwp.ru)

[eugeny.venitsianov@gmail.com](mailto:eugeny.venitsianov@gmail.com)

499-135-7190

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

14.09.2021 г.

Подпись руки *Е.В. Веницианов* М.П.  
заверяю: *О.Н. Киселева*  
зав. канцелярией *О.Н. Киселева*  
**ИВП РАН**



*Евгений*

(подпись)