

Заключение

комиссии Диссертационного совета Д 002.109.01 при ГЕОХИ РАН
о возможности принятия к защите диссертационной работы Зайцевой Елены Александровны на тему «**Метод описания селективности жидких неподвижных фаз в аналитической хроматографии полярных органических соединений и их изомеров**», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.02 – аналитическая химия (1.4.2 в новой редакции) и 02.00.04 – физическая химия (1.4.4 в новой редакции)

Диссертационная работа Зайцевой Е.А. посвящена разработке нового метода классификации неподвижных фаз в газо-жидкостной хроматографии и его применения для повышения селективности анализа органических веществ. **Актуальность и важность решенных задач не вызывает сомнений.**

Автором предложена теоретическая модель межмолекулярных взаимодействий, включающая в себя 3 независимых члена, описывающих неполярные, полярные и водородные связи, на основе которой разработан новый метод классификации неподвижных фаз в газовой хроматографии, названный методом трехпараметрической характеристики. Предложены математические определения характеристик полярности и гидрофильности веществ. Разработаны способы решения прямой и обратной задач моделирования межмолекулярных взаимодействий в газовой хроматографии, позволяющие рассчитывать характеристики НФ из структурной формулы и хроматографических данных, соответственно. Для решения обратной задачи моделирования создана компьютерная программа STAPHMAP. Предложен графический способ характеристики в виде карты селективности НФ – диаграммы, построенной в координатах полярность-гидрофильность. Найдена зависимость характеристик фаз на основе полиэтиленгликоля от молекулярной массы полимера. Выведены критерии выбора неподвижных фаз, наиболее подходящих для разделения геометрических изомеров метиловых эфиров жирных кислот. Объяснен механизм сорбции сложных эфиров на гидрофильных фазах. Разработанный метод позволяет осуществлять выбор селективных НФ для разделения веществ с близкими свойствами. Диссертационная работа вносит значительный вклад в теорию газовой хроматографии.

Тема и содержание работы соответствуют профилю Совета по специальности 02.00.02 – аналитическая химия (1.4.2 в новой редакции) конкретным областям исследований, предусмотренных паспортом этой специальности: пункт 5 – математическое обеспечение химического анализа и 02.00.04 – физическая химия (1.4.4 в новой редакции), конкретным областям исследований, предусмотренных паспортом этой специальности: пункт 4 - теория растворов, межмолекулярные и межчастичные взаимодействия и пункт 10 - связь реакционной способности реагентов с их строением и условиями осуществления химической реакции.

Соискателем опубликованы 5 статей в журнале, индексируемом в базе данных Scopus (входит в Перечень ВАК Минобрнауки России); 3 статьи в научных журналах, входящих в Перечень ВАК Минобрнауки России; 2 статьи в журналах, индексируемых в базе РИНЦ; 10 тезисов докладов. Таким образом, **требования к количеству публикаций выполнены; материал диссертации адекватно отражен в опубликованных работах.**

Список цитируемой литературы включает 142 источника. Литературные ссылки необходимы для обзора состояния исследований по тематике диссертационной работы, грамотной постановки цели и задач, обоснованного обсуждения полученных результатов. Автореферат диссертации и публикации в полной мере отражают содержание диссертационной работы и раскрывают её основные положения.

Требования к публикации основных научных результатов, предусмотренные п.11 - 13, а также требования п. 10 и 14 Положения, выполнены полностью. Текст диссертации, представленный в диссертационный совет, идентичен тексту диссертации, размещенному на официальном сайте ГЕОХИ РАН

По своей актуальности, уровню поставленных и решенных задач, объёму и качеству экспериментальных данных, новизне и значимости полученных научных результатов работа Зайцевой Е.А. полностью соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, установленным в п. 9 "Положения о порядке присуждения ученых степеней" (Постановление правительства РФ от 24 сентября 2013 г № 842 в ред. от 01.10.2018, с изм. от 26.05.2020), и является научно-квалификационной работой, в которой содержится решение научной задачи повышения селективности газохроматографического анализа, имеющей большое значение для развития теории аналитической химии и физической химии.

Диссертационная работа Зайцевой Елены Александровны на тему **«Метод описания селективности жидких неподвижных фаз в аналитической хроматографии полярных органических соединений и их изомеров»**, может быть принята советом к защите на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.02 – аналитическая химия (1.4.2 в новой редакции) и 02.00.04 – физическая химия (1.4.4 в новой редакции).

В соответствии с Положением о порядке присуждения ученых степеней" (Постановление правительства РФ от 24 сентября 2013 г № 842 в ред. от 01.10.2018, с изм. от 26.05.2020) и Положением о совете по защите диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук (Приказ Министерства образования и науки № 1093 от 10 ноября 2017 года) Комиссия рекомендует дополнительно ввести в диссертационный совет Д 002.109.01 на защиту диссертации Зайцевой Е.А. **трех человек по специальности – 02.00.04 – физическая химия (химические науки):**

1. **Каргова Сергея Игоревича**, д. хим.наук, профессора кафедры физической химии химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова, члена диссертационного совета МГУ.02.04 по физической химии в МГУ имени М.В. Ломоносова. Специальность в совете – 02.00.04 – физическая химия, химические науки.
2. **Иванова Владимира Александровича**, д. хим.наук, с.н.с., зам. зав. кафедрой физической химии химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова. 2005-2018 гг – зам. председателя диссертационных советов по физической химии Д 501.001.50 и МГУ.02.02 в МГУ имени М.В. Ломоносова
3. **Хохлова Владимира Юрьевича**, д. хим.наук, профессора, профессора кафедры аналитической химии и ведущего научного сотрудника кафедры оптики и спектроскопии Воронежского государственного университета, члена диссертационного совета Д 212.038.08 по физической химии и электрохимии в Воронежском государственном университете. Специальность в совете – 02.00.04 – физическая химия (химические науки)

Комиссия рекомендует утвердить в качестве оппонентов:

Рудакова Олега Борисовича – д.х.н., профессора, кафедра химии и химической технологии материалов, Воронежский государственный технический университет.

Ланина Сергея Николаевича – д.х.н., профессора, кафедра физической химии, химический факультет, МГУ имени М.В. Ломоносова.

в качестве ведущей организации:

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физической химии и электрохимии им. А.Н.Фрумкина Российской академии наук (ИФХЭ РАН), г. Москва

Выбор оппонентов и ведущей организации обоснован тем, что они являются известными специалистами, область их научных исследований пересекается с темой диссертации. Известны своими работами в области хроматографии, аналитической и физической химии.

Председатель комиссии:

Г.н.с., зав. лабораторией
Сорбционных методов
ГЕОХИ РАН, д.хим.наук



Хамизов Руслан Хажсетович


Члены комиссии:

Г.н.с., зав. лабораторией
концентрирования, д.хим.наук



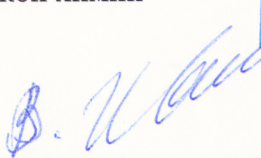
Марютина Татьяна Анатольевна

В.н.с. кафедры аналитической химии
Химического факультета
МГУ им. М.В.Ломоносова, д.хим.наук



Ревельский Александр Игоревич

С.н.с., зам. зав. кафедрой физической химии
химического факультета
МГУ имени М.В. Ломоносова,
д. хим.наук



Иванов Владимир Александрович

Подпись руководителя
удостоверяю
Зав. канцелярией ГЕОХИ РАН



Личную подпись
ЗАВЕРЯЮ
Ларионова Н.С.
Науч. отдела депозитария
химического факультета



*Рудакова Руслана Хажсетовича
Марютина Татьяна Анатольевна
Хамизов*