

УТВЕРЖДАЮ

ВРИО Директора ГЕОХИ РАН,

чл.-корр. РАН В.П. Колотов

«20» мая 2021 г.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Ордена Ленина и Ордена Октябрьской Революции Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского Российской академии наук

Диссертационная работа **«Метод описания селективности жидких неподвижных фаз в аналитической хроматографии полярных органических соединений и их изомеров»** выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Ордена Ленина и Ордена Октябрьской Революции Институте геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского Российской академии наук (далее – ГЕОХИ РАН).

В период подготовки диссертации **Зайцева Елена Александровна** являлась аспирантом и младшим научным сотрудником лаборатории сорбционных методов ГЕОХИ РАН.

В 2016 г. Зайцева Е.А. окончила Государственный университет «Дубна», г. Дубна, по специальности 04.04.01 Химия с присвоением квалификации магистра.

С 13 октября 2016 года по 12 октября 2020 года соискатель Зайцева Елена Александровна обучалась в очной аспирантуре ГЕОХИ РАН по направлению Химические науки, профиль Аналитическая химия. Диплом об окончании аспирантуры с приложением, включающим результаты обучения, выдан ГЕОХИ РАН 02 октября 2020 года. Справка о сдаче кандидатских экзаменов выдана ГЕОХИ РАН 25 февраля 2021 года.

Зайцева Е.А. работает в ГЕОХИ РАН: с ноября 2014 года по октябрь 2016 года в должности инженера-исследователя лаборатории сорбционных методов ГЕОХИ РАН, с октября 2016 по апрель 2017 года в должности и.о. младшего научного сотрудника лаборатории сорбционных методов. с ноября 2020 года Зайцева Е.А. работает в ГЕОХИ РАН в должности научного сотрудника лаборатории сорбционных методов.

Научный руководитель – доктор химических наук Долгоносов Анатолий Михайлович, ведущий научный сотрудник лаборатории сорбционных методов ГЕОХИ РАН.

(выписка из протокола расширенного семинара лаборатории сорбционных методов от 18 марта 2021 года)

Присутствовали 20 человек: академик, д.х.н. Мясоедов Б.Ф. (президиум РАН), чл.-кор. РАН, д.х.н. Колотов В.П., д.х.н. Федотов П.С., д.х.н. Долгоносов А.М., д.х.н. Хамизов Р.Х., д.ф.-м.н. Прудковский А.Г., к.х.н. Захарченко Е.А., к.х.н. Широкова В.И., к.х.н. Груздева А.Н., к.х.н. Крачак А.Н., к.х.н. Тютюнник О.А., к.х.н. Догадкин Д.Н., к.х.н. Сенин В.Г., к.ф.-м.н. Кузьмина Т.Г., Огнев В.Е., Жилкина А.В., Громяк И.Н. и другие сотрудники ГЕОХИ РАН.

Председатель: академик, д.х.н. Мясоедов Б.Ф.

Слушали: доклад Зайцевой Е.А. по диссертационной работе 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 специальностям 02.00.02 (1.4.2 – в новой редакции) – Аналитическая химия, 02.00.04 (1.4.4 – в новой редакции) – Физическая химия.

Краткое содержание доклада:

Главной целью работы стала разработка нового метода классификации жидких неподвижных фаз, основанного на теоретическом описании межмолекулярных взаимодействий, и его применение для выбора неподвижных фаз при решении задач повышения селективности аналитической газовой хроматографии. Были поставлены следующие задачи:

- развитие теории нового метода характеристики неподвижных фаз в решении задач аналитической газовой хроматографии
- разработка теоретических представлений о межмолекулярных взаимодействиях общего типа в аморфных средах в рамках модели адсорбции полярных веществ на полярных неподвижных фазах;
- разработка нового метода характеристики селективности и классификация неподвижных фаз;
- подтверждение внутренней непротиворечивости применяемой модели и согласованности разработанного метода с методом Роршнайдера-МакРейнольдса;
- применение нового метода характеристики неподвижных фаз в решении задач аналитической газовой хроматографии.

В докладе приведено решение поставленных целей и задач. Разработан метод трехпараметрической характеристики неподвижных фаз для повышения селективности аналитической газожидкостной хроматографии, предложена математическая модель взаимодействия неподвижной фазы с адсорбатом, учитывающая 3 вида вкладов в энергию: неполярную, полярную и водородную связи. Дано математическое определение двух взаимно независимых характеристик селективности неподвижных фаз: полярности и гидрофильности. 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.

Найдена закономерность в распределении точек полиэтиленгликолевых НФ на карте селективности, заключающаяся в зависимости их характеристик от массы полимера. Предложен графический способ характеристики в виде карты селективности НФ – диаграммы, построенной в координатах полярность-гидрофильность. Для решения обратной задачи моделирования была создана компьютерная программа STAPHMAP. Объяснен механизм сорбции сложных эфиров на гидрофильных неподвижных фазах и разработана модель сорбции путем захвата молекулы адсорбата макромолекулой НФ. Выведены критерии выбора НФ, наиболее подходящих для разделения геометрических изомеров метиловых эфиров жирных кислот, по строению и массе макромолекул НФ для газохроматографического разделения геометрических изомеров метиловых эфиров жирных кислот, что позволяет повысить селективность определения транс-жиров в продуктах питания.

После доклада Зайцевой Е.А. были заданы следующие **вопросы**:

Мясоедов Б.Ф.:

Чем ваш метод отличается от существующих?

Насколько перспективнее применение вашего метода?

Федотов П.С.:

Чем подтверждаются ваши выводы?

Какую часть экспериментальной работы вы выполнили самостоятельно?

Как вы объясняете механизм В-сорбции?

Колотов В.П.:

Как много экспериментальных данных подтверждают вашу теорию, касательно жирных кислот?

Расскажите подробнее про выбор наиболее селективной фазы. По каким критериям вы выбираете фазу для конкретной задачи разделения?

При обсуждении работы **выступили**:

д.х.н. Прудковский А.Г. (ГЕОХИ РАН) (рецензент, рецензия прилагается) – отметил, что диссертантом предложен оригинальный метод оценки свойств сорбентов для аналитической, учитывающий неполярные, полярные и водородные связи, основанный на теоретических оценках характеристик неподвижных фаз и их сродства к сорбируемым анализам с учетом их свойств. Работа хорошо иллюстрирована, написана чётким языком, включает достаточное количество формул и пояснений к ним. Выводы автора обоснованы. Рекомендовал работу к защите в диссертационном совете ГЕОХИ РАН.

Рецензию д.х.н. Ланина С.Н. (МГУ) зачитала секретарь семинара Е.А.Захарченко (рецензия прилагается) – в рецензии отмечено, что работа посвящена разработке нового метода классификации неподвижных фаз в газожидкостной хроматографии и его применения для повышения селективности

анализа органических веществ. Метод теоретически обоснован, подгоночных параметров не содержит, позволяет рассчитать характеристики неподвижных фаз по их структуре. Доказана непротиворечивость используемой модели и преемственность ее существующим методам классификации фаз. Рассмотрены интересные примеры априорного расчета характеристик популярных фаз на основе полиэтиленгликолей (ПЭГ) и замещенных силоксанов. Объяснен тонкий эффект инверсии селективности фаз к геометрическим изомерам жирных кислот. Предсказаны свойства фаз, которые являются наилучшими для анализа транс-жиров в пищевых продуктах. В работе были исправлены ранее сделанные замечания по отсутствию в названии уточнения по агрегатному состоянию неподвижных фаз, задачам, выводам, рассмотрены вопросы по механизмам удерживания адсорбатов. В новой версии работы большая часть замечаний учтена и прояснены заданные вопросы. Также считаю правильным добавление специальности 02.00.04 (1.4.4 – новая редакция) – физическая химия, так как эта область широко представлена в работе. Рекомендовал работу к защите в диссертационном совете ГЕОХИ РАН.

д.х.н. Долгонос А.М. (ГЕОХИ РАН) (научный руководитель) – отметил, что работа представляет большую теоретическую ценность, аналогов подобной работе в научном сообществе на данный момент нет. Отметил личные качества диссертанта как соответствующие квалифицированному специалисту. Рекомендовал работу к защите в диссертационном совете ГЕОХИ РАН.

чл.-корр. РАН, д.х.н. Колотов В.П. (ГЕОХИ РАН) – отметил практическую значимость работы и фундаментальность проведенных исследований. Обратил внимание на важность теоретических исследований в аналитической хроматографии, отметил уникальность работы. Сделал комментарии касательно формы представления материала. Рекомендовал работу к защите в диссертационном совете ГЕОХИ РАН.

академик, д.х.н. Мясоедов Б.Ф. – отметил, что с некоторыми доработками диссертация может быть допущена до защиты. Отметил уникальность данной работы. Однако подчеркнул необходимость более конкретного изложения материала в научном докладе, предложил сократить теоретическую часть и на первый план в представлении работы вынести аналитические задачи. Рекомендовал доработать доклад в соответствии со сделанными замечаниями. Рекомендовал работу к защите в диссертационном совете ГЕОХИ РАН.

д.х.н. Федотов П.С. (ГЕОХИ РАН) – отметил важность диссертационного исследования. Дал комментарии по поводу содержания доклада и представлению его в научном докладе. Подчеркнул, что диссертационная работа по объёму и качеству выполненных исследований, а также по обоснованности и достоверности полученных результатов соответствует критериям, предъявляемых к кандидатским диссертациям. Рекомендовал работу Зайцевой Е.А. к защите в диссертационном совете ГЕОХИ РАН.

По итогам обсуждения принято следующее **закключение:**

диссертационная работа Зайцевой Е.А. «Метод описания селективности жидких неподвижных фаз в аналитической хроматографии полярных органических соединений и их изомеров» может быть представлена к защите в диссертационном совете Д 002.109.01 в ГЕОХИ РАН на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.02 (1.4.2 – в новой редакции) – Аналитическая химия, 02.00.04 (1.4.4 – в новой редакции) – Физическая химия.

Постановили:

1. Диссертационная работа Зайцевой Е.А. «Метод описания селективности жидких неподвижных фаз в аналитической хроматографии полярных органических соединений и их изомеров» на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальностям 02.00.02 (1.4.2 – в новой редакции), 02.00.04 (1.4.4 – в новой редакции) – физическая химия выполнена с соблюдением требований, предъявляемых к кандидатским диссертациям, установленных в пунктах 9-11 и 13-14 Положения о порядке присуждения учёных степеней, утверждённого Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 N 842 (в редакции от 01.10.2018, с изменениями от 26.05.2020). В работе содержится решение проблемы повышения селективности газохроматографического анализа структурных и геометрических изомеров с помощью разработанного метода характеристики неподвижных фаз.

Содержание диссертации соответствует специальности 02.00.02 (1.4.2 – в новой редакции) – Аналитическая химия, в том числе областям исследований, предусмотренным следующими пунктами паспорта специальности: 2. Методы химического анализа (химические, физико-химические, атомная и молекулярная спектроскопия, хроматография, рентгеновская спектроскопия, масс-спектрометрия, ядерно-физические методы и др); 5. Математическое обеспечение химического анализа, а также специальности 02.00.04 (1.4.4 – в новой редакции) – Физическая химия (4. Теория растворов, межмолекулярные и межчастичные взаимодействия; 10. Связь реакционной способности реагентов с их строением и условиями осуществления химической реакции.

Актуальность темы заключается в необходимости решения одной из наиболее сложных задач аналитической химии - разделение структурных и геометрических изомеров полярных веществ методом газовой хроматографии. В аналитической практике для этих целей используют жидкие неподвижные фазы различной селективности по отношению к компонентам разделяемой смеси. В настоящее время для решения различных аналитических задач разработано и используется множество НФ разной полярности с известными свойствами. Поэтому актуальным на данный момент времени является не поиск новых соединений для использования в качестве неподвижной фазы, а разработка новых подходов к их классификации на основе известных свойств и теоретически обоснованный выбор неподвижной фазы для конкретных аналитических задач, обеспечивающий требуемую эффективность и селективность разделения аналитов. Главными недостатками известных на данный момент методов классификации фаз

на базе теории межмолекулярных взаимодействий (Роршнайдера, МакРейнольдса и Абрахама, а также множества одномерных схем), являются их слабая обоснованность, эмпиричность и трудоемкость. Это объясняется тем, что газохроматографические системы слишком сложны для неэмпирических методов. Полуэмпирические методы, основанные на принципе аддитивности атом-атомных потенциалов, используют большое количество подгоночных параметров и не дают необходимой точности расчетов. Наибольшую эффективность в описании межмолекулярных взаимодействий показала теория обобщенных зарядов, с помощью которой выводится неэмпирический вид потенциала Леннард-Джонса и рассчитывается адсорбция широкого класса веществ на неполярных адсорбентах. Т.о. развитие математической модели ММВ, включающей в себя вклады в энергию не только неполярных, но также полярных и водородных связей, а также разработка теоретически обоснованной и более точной классификации НФ на основе этой модели позволит предсказывать селективность неподвижных фаз в газовой хроматографии на основе математических расчетов, без проведения огромного количества трудоемких экспериментов.

Научная новизна заключается в следующем:

- Разработан новый теоретический метод классификации неподвижных фаз, названный методом трехпараметрической характеристики, который позволяет выбрать наиболее селективную неподвижную фазу, не прибегая к экспериментам с эталонными веществами.

- Предложена теоретическая модель межмолекулярных взаимодействий, включающая в себя 3 независимых члена, описывающих неполярные, полярные и водородные связи, на основе которой разработан новый метод классификации НФ в ГХ, названный методом трехпараметрической характеристики.

- Предложены математические определения характеристик полярности и гидрофильности веществ. Разработаны способы решения прямой и обратной задач моделирования ММВ в ГХ, позволяющие рассчитывать характеристики НФ из структурной формулы и хроматографических данных, соответственно.

- Разработан графический способ классификации хроматографических фаз в виде двумерного графика в координатах полярность-гидрофильность – карты селективности. Найдена закономерность в распределении точек полиэтиленгликолевых НФ на карте селективности – чем выше молекулярная масса полимера, тем ниже значения характеристик полярности и гидрофильности.

- Объяснен механизм сорбции сложных эфиров на гидрофильных фазах и разработана модель сорбции путем захвата молекулы адсорбата макромолекулой НФ. Выведены количественные критерии выбора НФ, наиболее подходящих для разделения геометрических изомеров МЭЖК.

Практическая значимость работы. Впервые предложен графический способ классификации неподвижных фаз в виде карты селективности – диаграммы, построенной в координатах полярность-гидрофильность. Разработанный теоретический метод позволяет осуществлять обоснованный выбор наиболее

селективных фаз при разделении структурных и геометрических изомеров. Создана компьютерная программа STARHMAP для расчета характеристик селективности из экспериментальных данных. Определены количественные критерии выбора НФ по строению и массе макромолекул для газохроматографического анализа геометрических изомеров метиловых эфиров жирных кислот. Разработанный подход был использован для выбора наиболее селективных неподвижных фаз при анализе геометрических изомеров метиловых эфиров жирных кислот.

Апробация работы. Результаты исследований были представлены на следующих конференциях: XIV конференция «Иониты-2014» и 3-ий симпозиум «Кинетика и динамика обменных процессов», 9-14 октября 2014 г, Воронеж; 22-ая научная конференция студентов, молодых специалистов и аспирантов Университета «Дубна», Секция Химия, 20 марта 2015 г, Дубна; 4-ый Всероссийский симпозиум с международным участием «Кинетика и динамика обменных процессов», 1-8 ноября 2015 г, Сочи, Краснодарский край; VII Всероссийская конференция «Физико-химические процессы в конденсированных средах и на межфазных границах — ФАГРАН-2015», 10-13 ноября 2015 г, Воронеж; 5-ый Всероссийский симпозиум с международным участием «Кинетика и динамика обменных процессов», 30 октября – 6 ноября 2016 г., Сочи, Краснодарский край; Третий съезд аналитиков России, 8-13 октября 2017 г, Москва; 3rd International Caparica Christmas Conference on Sample Treatment, 3-6 декабря 2018 г., г. Капарика, Португалия; 21-й Менделеевский съезд по общей и прикладной химии, 9-13 сентября 2019 г, Санкт-Петербург; 8-й Всероссийский симпозиум «Кинетика и динамика обменных процессов», 18-22 ноября 2019 г, Москва; IV Всероссийская конференция «Аналитическая хроматография и капиллярный электрофорез», 27 сентября – 03 октября 2020 г, Краснодар. Всероссийская конференция с международным участием «Физическая и аналитическая химия природных и техногенных систем» 14-15 апреля 2021 г, Дубна

Личный вклад автора. Все представленные в диссертационной работе результаты получены автором лично, либо при его непосредственном участии.

Вклад соавторов печатных работ. Долгоносов А.М – постановка цели и задач исследования, обсуждение результатов и построение самой работы и доклада.

Публикации. По результатам диссертационной работы опубликовано 7 статей, индексируемых в базе данных Web of Science и рекомендуемых ВАК, и 10 тезисов докладов на международных и российских конференциях.

2. Доработать выводы по диссертации, усилить аналитический аспект работы. Внести изменения в доклад с учетом замечаний и комментариев, сделанных участниками семинара.

3. Рекомендовать диссертационную работу Зайцевой Е.А. «Метод описания селективности жидких неподвижных фаз в аналитической хроматографии полярных органических соединений и их изомеров» на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальностям 02.00.02 (1.4.2 – в новой редакции) – Аналитическая химия и 02.00.04 (1.4.4 – в новой редакции) – Физическая химия к защите в диссертационном совете Д 002.109.01 в ГЕОХИ РАН.

4. Рекомендовать в качестве официальных оппонентов:

Рудакова Олега Борисовича – д.х.н., профессора, кафедры химии и химической технологии материалов, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования Воронежский государственный технический университет.

Ланина Сергея Николаевича – д.х.н., профессора, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова (МГУ), химический факультет, кафедра физической химии.

Зенкевича Игоря Георгиевича – д.х.н., профессора, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования Санкт-Петербургский государственный университет, Институт химии, Группа хроматографических и хромато-спектральных методов идентификации органических соединений.

5. Рекомендовать в качестве ведущей организации:

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

Воронежский государственный университет, г. Воронеж

Результаты голосования: «за» – 20, «против» – 0, «воздержалось» – 0, протокол № 2 от 18.03.2021.

Председатель семинара,
академик, д.х.н.



Мясоедов Б.Ф.

Секретарь семинара, к.х.н.



Захарченко Е.А.

Рецензия на диссертационную работу Зайцевой Елены Александровны
«Метод описания селективности жидких неподвижных фаз в аналитической
хроматографии полярных органических соединений и их изомеров»

Работа Е.А. Зайцевой посвящена разработке нового метода классификации неподвижных фаз в газо-жидкостной хроматографии и его применения для повышения селективности анализа органических веществ. Метод базируется на теоретическом подходе, позволяющем не только обосновать способ классификации, но и рассчитывать характеристики селективности неподвижных фаз по их строению без использования эмпирических параметров. Цель и способ ее реализации представляются актуальными и полезными для газовой хроматографии полярных веществ. Предложенная модель достаточно эффективна и имеет фундаментальное обоснование. Доказана ее непротиворечивость и преемственность существующим методам классификации фаз. Рассмотрены интересные примеры априорного расчета характеристик популярных фаз на основе полиэтиленгликолей (ПЭГ) и замещенных силоксанов. Обнаружена и подтверждена экспериментальными данными зависимость селективности ПЭГ от массы полимера. Объяснен тонкий эффект инверсии селективности фаз к геометрическим изомерам жирных кислот. Предсказаны свойства фаз, которые являются наилучшими для анализа транс-жиров в пищевых продуктах.

Ранее были сделаны замечания по отсутствию в названии уточнения по агрегатному состоянию неподвижных фаз, задачам, выводам, заданы вопросы по механизмам удерживания адсорбатов. В новой версии работы большая часть замечаний учтена и прояснены заданные вопросы. Также считаю правильным добавление специальности 02.00.04 физическая химия, так как эта область широко представлена в работе.

Научный уровень и объем представленной работы являются достаточными для представления на соискание степени кандидата химических наук по специальностям 02.00.02 - Аналитическая химия и 02.00.04 – Физическая химия.

Работа может быть рекомендована диссертационному совету по аналитической химии ГЕОХИ РАН к защите.

Профессор кафедры физической химии Химического факультета.
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»
Почтовый адрес: 119991 г. Москва, ГСП-1, Ленинские горы, д. 1, строение 3, Химический факультет
Рабочий телефон: +7 (495) 939-19-26
Электронная почта: silica2012@gmail.com
Доктор химических наук, профессор,

С.Н.Ларин

16.03.2021



**Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Ордена Ленина и Ордена Октябрьской Революции
Институт геохимии и аналитической химии им. В.И.
Вернадского Российской академии наук**

Рецензия на диссертацию

Зайцевой Елены Александровны,

соискателя степени кандидата химических наук
по специальности 02.00.02 – Аналитическая химия,
02.00.04 – Физическая химия

1. Тема диссертации:

«МЕТОД ОПИСАНИЯ СЕЛЕКТИВНОСТИ ЖИДКИХ НЕПОДВИЖНЫХ ФАЗ В АНАЛИТИЧЕСКОЙ ХРОМАТОГРАФИИ ПОЛЯРНЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ И ИХ ИЗОМЕРОВ»

2. Актуальность и новизна темы.

Процессы сорбции широко используются в методах очистки от примесей, разделения и анализа разнообразных химических веществ, в том числе веществ со сходными химическими формулами. Проблема выбора оптимального сорбента для того или иного анализа, для разделения близких ионов, особенно изомеров весьма актуальна. Для оценки сорбентов существует ряд общепринятых эмпирических методов, таких как Роршнайдера-МакРейнольдса, Абрахама и других, включая формальный кластерный анализ. В связи с этим, развитие нового метода, способного теоретически оценивать свойства того или иного сорбента весьма актуально. Особенно важна привязка метода не к эмпирическим коэффициентам, а к реальным химическим свойствам сорбата и адсорбата, таким как гидрофобность – гидрофильность, полярность, наличие заряда или возможности внешних водородных связей.

3. Наиболее существенные выводы и рекомендации.

В результате серьёзного исследования диссертантом выяснены недостатки существующих методов оценки свойств сорбента и показано, что существующие методы оценки сорбентов основанные на произвольно выбранных параметрах, не связаны явным образом с реальными характеристиками сорбата и адсорбата. Таким образом, обоснована необходимость работ в данном направлении. Диссертантом предложен оригинальный метод трёхпараметрической оценки свойств сорбента, учитывающей неполярные, полярные и водородные связи, основанный на теоретических оценках характеристик неподвижных фаз и их средства сорбируемым анализам с учётом их химических формул и соответствующим их свойств.

4. Практическая ценность разработанных вопросов.

Теоретические построения позволили диссертанту найти зависимость характеристик полярности и гидрофильности неподвижных фаз на основе полиэтиленгликоля от массы полимера, предсказанные результаты подтверждена результатами расчета, полученными путем решения обратной

задачи с использованием опубликованных экспериментальных данных. Компьютерная программа STARNMAP, созданная диссертантом, позволяет классифицировать молекулы адсорбатов по классам гидрофильности и рассчитывать характеристики селективности неподвижных фаз из экспериментальных данных по индексам Ковача. Диссертантом предложена карта селективности, позволяющая делать выбор неподвижной фазы, наиболее селективной к целевому аналиту. В качестве примера диссертантом изучена сорбция изомеров метиловых эфиров жирных кислот из газовых сред. Считаю, что работа диссертанта может иметь широкое применение в хроматографическом анализе, в процессах очистки и разделения веществ и возможно в иных ещё неисследованных областях.

5. Правильность расчетов и оформления графических материалов.

Работа хорошо проиллюстрирована, содержит, содержит 28 рисунков и 12 таблиц, в списке цитируемой литературы 143 наименования отечественных и зарубежных авторов. Работа написана чётким языком состоит из введения, литературного обзора, пяти глав собственных исследований и выводов, изложенных на 115 страницах. Выводы автора обоснованы.

6. Наличие недостатков.

В основном, недостатки касаются оформления рисунков. На рисунке 1 нет обозначения осей; рисунок 8 не имеет описания, возможно, его стоит убрать, как несущественный, или провести полное описание значений столбцов и строк, показанных на рисунке.

7. Общий вывод и оценка

Перечисленные недостатки не мешают считать, что диссертационная работа Е.А.Зайцевой «Метод описания селективности жидких неподвижных фаз в аналитической хроматографии полярных органических соединений и их изомеров» является научно-квалификационной работой, соответствующей требованиям Министерства образования и науки РФ, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата химических наук, а её автор Зайцева Елена Александровна заслуживает присвоения ей учёной степени кандидата химических наук по специальностям 02.00.02 – Аналитическая химия, пункт 5 – математическое обеспечение химического анализа, также по специальности 02.00.04 - Физическая химия, пункт 4 - теория растворов, межмолекулярные и межчастичные взаимодействия и пункт 10 - связь реакционной способности реагентов с их строением и условиями осуществления химической реакции.

Рецензент: Прудковский Андрей Гаральдович, Ведущий научный сотрудник лаборатории сорбционных методов ГЕОХИ РАН, доктор физико-математических наук.

Адрес: 119334, Россия, Москва, ул. Косыгина, 19

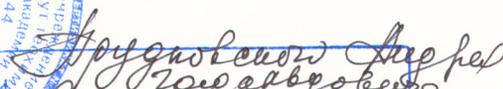
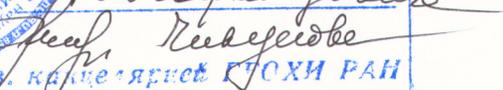
Мейл: prudkovsky@gmail.com

Тел: +7(916)237-68-93

 / Прудковский А.Г.

« 16 » марта 2021 г.





Зав. кафедрой ГЕОХИ РАН