

«Утверждаю»

Проректор по НИР Федерального государственного бюджетного  
образовательного учреждения высшего образования

«Саратовский национальный исследовательский государственный  
университет имени Н.Г.Чернышевского»

д.ф.-м.н., профессор

А.А.Короновский

 марта 2016 г

**Отзыв**

ведущей организации на диссертацию Дроздовой Евгении Викторовны  
«Определение органических легколетучих токсикантов массивом  
пьезосенсоров для оценки безопасности полимерных материалов»,  
представленную на соискание ученой степени кандидата химических наук  
по специальности 02.00.02.-аналитическая химия.

В последние десятилетия весьма перспективным направлением стала разработка мультисенсорных устройств на основе различных сенсоров и методов математической статистики, позволяющих интерпретировать образы откликов как индивидуальных соединений (паров, газов, запахов летучих и растворенных веществ), так и идентифицировать, распознавать и определять качество сложных объектов. Важной проблемой является возможность использовать систем на основе газовых химических сенсоров для определения антропогенных загрязнителей в воздухе жилых помещений, наличие которых связано большим распространением полимерных материалов.

Целью диссертационной работы Дроздовой Е.В. явилась разработка массивов пьезосенсоров для идентификации и количественного определения легколетучих органических соединений в воздухе для оценки безопасности изделий из полимерных материалов, композиций на их основе.

Задача разработки систем типа «электронный нос» на основе пьезосенсоров с различными хемометрическими способами обработки

сигналов обоснована и решается впервые, а тема диссертационной работы Дроздовой Е.В., несомненно, актуальна и важна для решения проблемы идентификации токсикантов, выделяемых из полимерных материалов, листовых композиционных материалов и др.

Автором установлены закономерности влияния сорбционных свойств тонких пленок модификаторов пьезокварцевых резонаторов на аналитические сигналы универсальных и специфических тест-веществ, выделяющимися полимерами. Разработаны способы идентификации вида полимеров, оценки безопасности изделий из ПВХ-пластизоля, листовых композиционных материалов, загрязняющих воздух легколетучими органическими соединениями. Важно отметить применение различных хемометрических методов для прогнозирования органолептических свойств запаха полимеров.

Для проведения исследований в работе использованы различные методы, надежность которых не вызывает сомнений: пьезокварцевое микровзвешивание, газовая хроматография, хромато-масс-спектрометрия, молекулярно-абсорбционные спектроскопия; проводился органолептический анализ образцов. Полученные экспериментальные данные обрабатывались различными хемометрическими методами.

Работа обладает несомненной научной новизной, которая связана с установлением закономерностей влияния сорбционных свойств модификаторов пьезокварцевых резонаторов на аналитические сигналы легколетучих органических соединений, выделяемых различными видами полимерных материалов, с разработкой массивов пьезосенсоров типа «электронный нос» для определения органических токсикантов с использованием хемометрических методов обработки аналитических сигналов. Научная новизна исследования подтверждена 4 патентами Р.Ф.

Практическая значимость исследования подтверждается многочисленными примерами идентификации и количественного определения токсикантов, выделяемых из тонкопленочных, блоковых полимеров и изделий из них, оценки безопасности полимерных материалов (особенно детских игрушек с применением разработанных массивов

пьезосенсоров для газоанализатора «МАГ-8» и «Polymers». Важным практическим результатом является доказательство преимуществ применения пьезосенсоров (экспрессность, простота оборудования). Разработанные методики внедрены в практику различных лабораторий и учебный процесс (акты о внедрении приведены в приложении).

Структура диссертации, в целом, традиционна. Она включает введение, литературный обзор (глава 1), описание объектов и методов исследования (глава 2) три содержательных главы, описывающих основные экспериментальные результаты, выводы, список использованных библиографических источников, приложения.

Литературный обзор содержит подробное описание экологических проблем современного жилища, связанных с широким использованием полимерных и полимерсодержащих материалов, выделяющих значительное количество токсикантов. Дана критическая оценка современных методов определения легколетучих органических соединений в замкнутых помещениях; показана роль «электронных носов» для оценки интегральных показателей.

В главе 2 представлены характеристики объектов исследования: тест-веществ, которые использованы для подбора эффективных модификаторов поверхности сенсоров. В качестве тест-веществ выбраны легколетучие органические соединения различных классов-основных загрязняющих веществ: насыщенные углеводороды, алифатические спирты, ароматические соединения, альдегиды, кетоны, сложные эфиры-всего 15 соединений, а также 2-3х компонентных модельных смесей (всего 41 смесь); модификаторов поверхности пьезокварцевых резонаторов. Всего в работе использовано 16 сорбентов, различающихся по полярности и сорбционной активности по отношению к определенным группам органических веществ. Дана характеристика реальных объектов, исследованных в диссертации (52 объекта-древесные и полимерные материалы 10 образцов детских игрушек из ПВХ-пластизоля).

Основная часть диссертации-собственные экспериментальные данные, полученные автором, их обсуждение (гл. 3-5).

Глава 3 посвящена обоснованию выбора массива пьезосенсоров для оценки безопасности полимерных материалов и воздуха помещений. Поскольку в диссертации исследуется большое количество аналитов, материалов, приведенная на стр. 68 схема эксперимента по разработке новых методик оценки безопасности полимерных и полимерсодержащих материалов, позволяет четко отслеживать отдельные этапы исследований по созданию пьезосенсоров с оптимальными характеристиками. Автором проведен обоснованный подбор сорбционных покрытий пьезосенсоров для детектирования основных загрязняющих веществ, выделяемых различными материалами в воздух жилых и рабочих помещений. Оценены коэффициенты селективности пьезосенсоров с выбранными покрытиями, вклады откликов каждого сенсора в площадь «визуального отпечатка» сигналов, средние площади под кривой сигналов отдельных сенсоров в парах тест-веществ, на основании которых выбран оптимальный состав и число сенсоров в массивах для детектирования токсикантов.

Особо следует отметить предложенный автором кинетический коэффициент, отражающий особенности взаимодействия в системах «сорбат-сорбент», позволяющий оценить надежность идентификации паров ЛОС малых концентраций; квантово-химическое моделирование полуэмпирическим методом для расчета межмолекулярных взаимодействий в системах «аналит-аналит».

Оценены метрологические и эксплуатационные характеристики массива «Polymers» пьезосенсоров при детектировании паров органических соединений; сформирован универсальный массив сенсоров для многоканального анализатора газов «МАГ-8».

В главе 4 рассмотрены способы оценки уровня эмиссии органических соединений из полимерных материалов. На основании установленных особенностей сорбции паров отдельных легколетучих органических соединений автором разработаны новые способы оценки уровня эмиссии ЛОС и безопасности широкого набора полимерсодержащих материалов, готовых изделий, основанные на пьезокварцевом микровзвешивании

массивом пьезосенсоров равновесной газовой фазы над ними с применением многоканального анализатора газов «МАГ-8».

Важным этапом проведения определения ЛОС является правильная пробоподготовка с учетом видов изделий, которые логично автор разделяет на 4 группы. Здесь также следует отметить разработанную в рецензируемой работе методологию анализа отдельных групп полимерных материалов. Схема проведения анализа полимерсодержащих материалов и воздуха закрытых помещений, представленная на стр.140, позволяет четко ориентироваться в большом объеме экспериментального материала по отдельным этапам анализа различных объектов.

Следует отметить подтверждение правильности результатов анализа референтными методами: газовой хроматографией, молекулярно-абсорбционной спектроскопией. Преимуществом применения анализатора газов «МАГ-8» является экспрессность, получение первичной информации о состоянии образца. При этом не требуется сложная пробоподготовка, применение вспомогательных реактивов и дорогостоящих приборов.

Глава 5 посвящена разработке портативного анализатора на основе 4-х пьезосенсоров, выполненного по программе «У.М.Н.И.К.». Приводится конструкторская документация и макет портативного анализатора, алгоритм его эксплуатации и практическое применение разработанного устройства для определения ЛОС в образцах игрушек из ПВХ-пластизоля.

Высокая научная эрудиция автора проявилась как в анализе литературных данных, так и постановке, проведении экспериментов и глубоком анализе их результатов. Достоверность полученных экспериментальных данных, обусловлена надежностью выбранных методов исследования.

Диссертация написана хорошим литературным языком, иллюстрирована большим числом рисунков (50) и таблиц (59); список литературы содержит 226 наименований.

По диссертации имеются некоторые замечания:

1. В интересной по содержанию, как в теоретическом, так и практическом плане работе, и огромного экспериментального материала, широте

использованных объектов, модификаторов, методов исследования и т.д., уровню обсуждения полученных результатов автором очень скромно сформулирована научная новизна и выводы. В тексте диссертации отмечаются установленные закономерности, даже предложена методология, но это не нашло отражения во введении к диссертации.

2. Автором не указываются причины затруднения детектирования паров фенола по выбранным параметрам, в смесях с бензолом, толуолом, ацетоном и стиролом.
3. Автор относит к ацетатам этилацетат, бутилацетат - но это сложные эфиры.
4. Несколько технических замечаний:
  - стр.11 автореферат - прилученным параметрам
  - стр.13 автореферат - идентификация паров ацетона и толуола по параметрам ... высокочувствительно и эффективность...
  - стр. 16 автореферат - результаты тестирования аналитических проб ... представлены в табл. 12, которая отсутствует.

Сделанные замечания не снижают общую положительную оценку рецензируемой работы. Полученные в ней результаты могут найти применение и развитие в научных и учебных центрах, работающих в области сенсорных технологий – в Санкт-Петербургском, Московском, Казанском, государственных университетах, ГЕОХИ РАН, Уральском государственном экономическом университете и др., в экоаналитических лабораториях для идентификации типа полимерных материалов и токсикантов, выделяемых из них.

Содержание диссертации полностью отражено в автореферате и соответствует указанной специальности. Автореферат дает полное представление о вкладе автора, новизне и значимости результатов. Основные результаты работы изложены в 11 публикациях, в том числе 4 статьях в профильных рецензируемых научных журналах ВАК и прошли апробацию на Международных и Всероссийских конференциях, что также подтверждает достоверность полученных автором результатов.

Таким образом, диссертационная работа Евгении Викторовны Дроздовой, направленная на разработку массивов пьезосенсоров для определения органических легколетучих токсикантов и оценки безопасности полимерных материалов по актуальности решаемой проблемы, объему проведенных исследований, уровню их обсуждения и научной значимости соответствует требованиям п.9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. № 842, и может рассматриваться как завершенная научно-квалификационная работа, в которой содержится решение задачи, имеющее существенное значение для развития теории и практики анализа органических соединений и химической сенсорики, а ее автор-Дроздова Е.В.-заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.02 - аналитическая химия.

Отзыв составлен профессором кафедры аналитической химии и химической экологии ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г.Чернышевского», доктором химических наук, профессором Кулапиной Еленой Григорьевной.

Отзыв рассмотрен и одобрен на заседании кафедры аналитической химии и химической экологии Саратовского национального исследовательского государственного университета имени Н.Г.Чернышевского (протокол № 11 от 14.03.2016 г.).

Зав. кафедрой аналитической химии  
и химической экологии ФГБОУ ВО  
«СГУ имени Н.Г.Чернышевского»,  
д. х. н., доцент

Татьяна Юрьевна Русанова

Почтовый адрес: 410012, г.Саратов, ул.Астраханская 83, корпус 1

Телефон: 8(8452)51-64-11

Электронная почта: [tatyanarys@yandex.ru](mailto:tatyanarys@yandex.ru)

