

ОТЗЫВ

официального оппонента кандидата химических наук, доцента Павловой Ларисы Викторовны на диссертационную работу *Као Ньят Линь* «Определение карбоновых кислот в производственных растворах модифицированными пьезоэлектрическими сенсорами», представленную на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.02 – аналитическая химия.

Оценка актуальности темы диссертационного исследования.

В настоящее время активно развивается направление использование пьезоэлектрических сенсоров для селективного экспрессного анализа на портативных устройствах. Достоинствами данного подхода является простота, надежность, возможность анализа проб непосредственно на месте отбора. В этом плане диссертационная работа Као Ньят Линь является актуальным исследованием, посвященным разработке способа определения карбоновых кислот в производственных растворах модифицированными пьезоэлектрическими сенсорами. Разработка прикладных методов анализа примесных концентраций карбоновых кислот является важной составляющей получения качественной продукции в различных областях химической пищевой промышленности, косметологии, фармации. Актуальность работы подтверждается еще и тем, что разработанный способ был успешно применен производственных условиях, что подтверждает акт ООО «НПЦ «Этанол» об использовании результатов диссертационного исследования Као Ньят Линь в разработке новой технологии ректификационной очистке этанола.

Степень обоснованности научных положений, выводов и практических рекомендаций, сформулированных в диссертации.

Диссертационная работа Као Ньят Линь изложена на 128 страницах печатного текста и состоит из введения, 1 главы - обзора литературы, 2 главы - объекты и методы исследования, 3 главы - квантово-химическое моделирование молекулярно-импринтированных полимеров и исследование их свойств, 4 главы – определение карбоновых кислот в жидкостях пьезоэлектрическими сенсорами, выводов, списка сокращений и условных обозначений, списка цитированной литературы, включающего 181 наименование, приложения. Она написана четким и ясным языком, удачно структурирована и содержит все необходимые для понимания материала рисунки, таблицы, схемы.

Во введении соискателем показана актуальность темы исследований,

сформулирована цель работы, обозначены научная новизна и практическая значимость. В диссертации представлен полноценный обзор по имеющимся на настоящий момент исследованиям молекулярно-импринтированных полимеров, способам их получения и применения. Уделено особое внимание способам квантово-химического моделирования химических структур молекулярно-импринтированных полимеров. В библиографическом списке приведено достаточно большое количество современных первоисточников, причем не только отечественных, но и зарубежных, а также ссылки на программное обеспечение, используемое для получения результатов диссертационной работы.

Описание оборудования, эксперимента, формулы, по которым проводились вычисления в работе приводятся во 2 главе. Научные положения, выводы и практические рекомендации, сформулированные в конце 3 и 4 главы, а также выводы диссертации, теоретически и метрологически обоснованы, подтверждаются масштабностью проведенных автором исследований. В работе представлена первичная аналитическая информация.

Перспективы практического применения квантово-химического моделирования для выбора условий получения молекулярно-импринтированных полимеров на основе полиимида с отпечатками карбоновых кислот доказаны большим объемом эмпирических исследований. Кроме того, разработанные в ходе исследования пьезоэлектрические молекулярно-импринтированные сенсоры с отпечатками карбоновых кислот апробированы при анализе кубовых жидкостей разгонной и ректификационной колонн при производстве этилового спирта.

Достоверность и новизна научных положений, выводов и практических рекомендаций.

В научном отношении диссертационное исследование Као Ньят Линь отличается новизной и оригинальностью решения поставленной задачи. Достоверность экспериментальных результатов подтверждается выполнением работы с использованием современного инструментария: ГХ-МС, ИК-спектроскопии. Полученные экспериментальные данные согласуются с данными, полученными расчетным методом.

Новизна полученных результатов заключается в том, что методами квантовой химии определены оптимальные соотношения реагентов для получения молекулярно-импринтированных полимеров на основе полиимидов, с уксусной, пропионовой, масляной, олеиновой и пальмитиновой кислот в качестве темплатов. Установлена селективность

полученных молекулярно-импринтированных полимеров к целевым и родственным кислотам, а также определены оптимальные условия сорбции целевых молекул кислот на молекулярно-импринтированные полимеры.

К основным достижениям диссертации Као Ньят Линь можно отнести разработку способа количественного определения одноосновных карбоновых кислот в технологических растворах этилового спирта с помощью пьезоэлектрических сенсоров на основе молекулярно-импринтированных полимеров.

Практическая значимость результатов исследования подтверждается предложенным методологическим подходом для выбора условий получения молекулярно-импринтированных полимеров на основе полиимида с отпечатками карбоновых кислот с помощью квантово-химического моделирования, а также апробированием разработанных пьезоэлектрических сенсоров на основе молекулярно-импринтированных полимеров с отпечатками карбоновых кислот для анализа производственных растворов: бражного дистиллята, эпората, кубовых жидкостей разгонной и ректификационной колонн, что доказывает возможность применения данного способа анализа уксусной, пропионовой, масляной, олеиновой и пальмитиновой кислот в брагоректификационной установке.

Оценка содержания диссертации, ее завершенность, подтверждение публикаций автора.

Содержание диссертации соответствует паспорту заявленной специальности, это завершенный научный труд, выполненный на высоком уровне, имеющий большое практическое значение, оформленный в соответствии с требованиями, предъявляемыми к кандидатской диссертации. Автор диссертационной работы справился с поставленными задачами. Полученные автором результаты не вызывают сомнения и отражены в виде 4 публикаций в журналах, рекомендованных ВАК (всего по теме исследования опубликовано 9 научных работ), представлены на 5 профильных конференциях.

Автореферат и публикации в полной мере отражают основное содержание диссертации.

Замечания по диссертации и автореферату.

Принципиальных недостатков в представленной работе нет. Вместе с тем по диссертации и автореферату можно сделать несколько замечаний:

1. Целью работы представляется разработка способа определения карбоновых кислот модифицированными пьезоэлектрическими сенсорами в

производственных растворах, при этом в работе рассматриваются лишь растворы с различных этапов производства этилового спирта, другие матрицы, составы не рассматриваются.

2. Соответственно, и в заключении к 4 главе не обоснованно используется слишком общая формулировка «На основе молекулярно-импринтированных полимеров были разработаны пьезоэлектрические сенсоры для определения в жидких средах карбоновых кислот...».

3. В работе присутствует несоответствие в определении значения $\Delta f_{\text{МИП}}$. В одном случае определяется как «сигнал пьезосенсора с покрытием с молекулярными отпечатками, кГц», в другом – как «разностная частота колебаний сенсора на основе МИП» уже без указания единиц измерения.

4. В таблицах, где приводятся значения импринтинг фактора и коэффициента селективности, полученные из экспериментальных значений, не указан доверительный интервал. Показания частотомера всегда были одинаковые?

5. В работе не отражено изучение восстановления разработанных пьезосенсоров после анализа карбоновых кислот, что необходимо для полноценного использования представленного способа анализа на практике.

6. В литературном обзоре указано, что извлечение вещества-темплата из матрицы занимает продолжительное время, в исследовании же этот момент не отражен. Как проверяли полноту извлечения, сколько времени это занимает и т.д.

7. Способ анализа с использованием пьезоэлектрических сенсоров, разрабатываемый в представленном исследовании, позиционируется как экспресс-исследование, однако, в работе подробно описана последовательность действий и время, затраченное на их выполнение только для изучения процессов сорбции в объеме растворителя, а для анализа с применением пьезоэлектрических сенсоров, покрытых молекулярно-импринтированными полимерами, не приводятся временные затраты для этапов выполнения анализа, не описана последовательность операций при проведении рутинного анализа.

Заключение о соответствии диссертации требованиям Положения о порядке присуждения ученых степеней.

Указанные замечания не влияют на общую высокую оценку работы. В целом, диссертационная работа представляет собой законченное решение поставленной задачи, имеет научную и практическую ценность, новизну. На основании выполненных автором исследований получены новые научно обоснованные решения в области разработки модифицированных

