Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0421U103349

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 13-09-2021

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Смірнова Оксана Ярославівна

2. Smirnova Oksana Yaroslavivna

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 02.00.02

Назва наукової спеціальності: Аналітична хімія

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 10-09-2021

Спеціальність за освітою: Хімічна технологія біологічно активних сполук

Місце роботи здобувача: Національний університет "Львівська політехніка"

Код за ЄДРПОУ: 02071010

Місцезнаходження: вул. Степана Бандери, буд. 12, м. Львів, Львівська обл., 79013, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): К 61.051.03

Повне найменування юридичної особи: Державний вищий навчальний заклад "Ужгородський національний університет"

Код за ЄДРПОУ: 02070832

Місцезнаходження: вул. Підгірна, буд. 46, м. Ужгород, Ужгородський р-н., Закарпатська обл., 88000, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

IV. Відомості про підприємство, установу, організацію, в якій було виконано дисертацію

Повне найменування юридичної особи: Національний університет "Львівська політехніка"

Код за ЄДРПОУ: 02071010

Місцезнаходження: вул. Степана Бандери, буд. 12, м. Львів, Львівська обл., 79013, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.19

Тема дисертації:

1. Розділення та визначення похідних 1,4-нафтохінону методами рідинної хроматографії

2. Separation and determination of 1,4-naphthoquinone derivatives by liquid chromatography

Реферат/анотація:

1. Дисертаційна робота присвячена дослідженню умов розділення та визначення 29 похідних 1,4-нафтохінону методами обернено-фазової високоефективної рідинної хроматографії (ОФ ВЕРХ) та нормально-фазової тонкошарової хроматографії (НФ ТШХ). Досліджений вплив кількості органічного компонента у мобільній фазі (МФ) на утримування похідних 1,4-нафтохінону в умовах ОФ ВЕРХ. Найбільш повне розділення для досліджених сполук в ізократичному режимі при використанні простих бінарних МФ «вода-органічний компонент» було досягнуто для МФ з вмістом □ 60 % об. ацетонітрилу (MeCN) та 75 % об. метанолу (MeOH). Для амінокислотних похідних 1,4-нафтохінону досліджено вплив pH для МФ на утримування і встановлено, що при менших, ніж pH ≈ 5 роздвоєння піків зникає, тобто ці аналіти переходять в молекулярну форму, хроматографічні піки для якої мають більші часи утримування в ОФ ВЕРХ. Залежності коефіцієнта ємності амінокислотних похідних від величини pH для МФ (pH=3,5-7) мають вигляд частини S-подібної кривої, яка

характерна в умовах ОФ ВЕРХ для аналітів, що є слабкими кислотами. Випробувано можливості комп'ютерного моделювання з допомогою програми ChromDream для прогнозування утримування похідних 1,4-нафтохінону в умовах ОФ ВЕРХ. Здійснено розрахунок величин V і ΔG для досліджених похідних 1,4-нафтохінону. При калібруванні хроматографічної колонки за референтними речовинами (n=5), що були вибрані з досліджених похідних 1,4-нафтохінону показано, що величини a, b та c (модель Галушко С.В. і співробітників) суттєво залежать як від кількості речовин, так і від того, які речовини були вибрані для їх розрахунку, про що свідчать різні варіанти розрахунків. Кількість задовільних результатів з усіх даних прогнозування (n=5/24) у випадку МФ з MeCN є приблизно в 2 рази меншою, ніж для МФ з MeOH. Узагальнено вплив складу МФ на утримування та розділення похідних 1,4-нафтохінону у НФ ТШХ за моделлю Снайдера-Сочевінського. Зростання ефективності ТШХ за кількістю теоретичних тарілок від N=700-1000 до N=1400-1500, тобто в межах 1,5-2 рази спостерігається при заміні полярного компонента МФ у ряду: ацетонітрил<ацетон<метанол<пропан-2-ол<хлороформ. Розроблені методики кількісного визначення похідних 1,4-нафтохінону з використанням методів ОФ ВЕРХ та НФ ТШХ на основі знайдених оптимальних складів бінарних МФ.

2. The manuscript is devoted to the research of separation and determination of 29 derivatives of 1,4-naphthoquinone reversed phase high-performance liquid chromatography (RP HPLC) and normal phase thin layer chromatography (NP TLC). The effect was investigated for the organic modifier amount in the mobile phase (MP) on the retention of 1,4-naphthoquinone derivatives under conditions of RP HPLC. The most complete separation for the investigated compounds in isocratic mode using simple binary MP «water-organic modifier» was achieved for MP containing 60 % vol. acetonitrile (MeCN) and 75 % vol. methanol (MeOH). For amino acid derivatives of 1,4-naphthoquinone, the effect of pH for MP on retention was investigated and it was found that at values less than pH ≈ 5 the bifurcation of disappears, so these analytes turn into a molecular form, for which chromatographic peaks have longer retention times under HPLC. The dependences of the capacity factor of amino acid derivatives on the pH value of the MP (pH = 3.5-7) have the form of part of the S-shaped curve, which is characteristical in the conditions of RP HPLC for analytes that are weak acids. The possibilities of computer modeling assisted by the ChromDream software for predicting the retention of 1,4-naphthoquinone derivatives in RP HPLC were tested. The values of V and ΔG were calculated for the investigated 1,4-naphthoquinone derivatives. When calibrating the chromatographic column for reference substances (n = 5), which were selected from the investigated derivatives of 1,4-naphthoquinone, it has been shown that the values of a, b and c (model Galushko S.V. and coworkers) significantly depend on both the amount of substances and which substances were selected for their calculation, as evidenced by the different calculation options. The number of satisfactory results from all prediction data (n = 5/24) in the case of MP with MeCN is approximately 2 times less than for MP with MeOH. The generalisation was made for the MP composition effect on the retention and separation of 1,4-naphthoquinone derivatives under NP TLC according to the Snyder□Soczewinsky model. An increase in the TLC efficiency in terms of the number of theoretical plates from N = 700-1000 to N = 1400-1500, that is, within 1.5-2 times, is observed when the polar component of the mobile phase is replaced in the series: acetonitrile <acetone <methanol <propane-2-ol <chloroform. Methods were developed for the quantitative determination of 1,4-naphthoquinone derivatives using RP HPLC and NP TLC based on the found optimal compositions of binary MP.

Державний реєстраційний номер ДіР:

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки:

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:

Підсумки дослідження:

Публікації:

Наукова (науково-технічна) продукція:

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації:

Зв'язок з науковими темами:

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Ятчишин Йосип Йосипович

2. Yatchyshyn Yosyp Yosypovych

Кваліфікація: д. х. н., 05.17.04

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Мілюкін Михайло Васильович

2. Milyukin Mykhailo Vasyliovych

Кваліфікація: д. х. н., 21.06.01

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Студеняк Ярослав Іванович

2. Studenyak Yaroslav Ivanovych

Кваліфікація: к. х. н., 02.00.02

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Рецензенти

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради Барчій Ігор Євгенович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Барчій Ігор Євгенович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності Юрченко Т.А.