

# Облікова картка дисертації (ОКД)

Шифр спецради: К 61.051.03

Відкрита

Вид дисертації: 04

Державний обліковий номер: 0421U103349

Дата реєстрації: 13-09-2021



## 1. Відомості про здобувача

ПІБ (укр.): Смірнова Оксана Ярославівна

ПІБ (англ.): Smirnova Oksana Yaroslavivna

Аспірантура: так

Шифр спеціальності, за якою відбувся захист: 02.00.02

Дата захисту: 10-09-2021

На здобуття наукового ступеня: Кандидат хімічних наук (к. х. н.)

Спеціальність за освітою: Хімічна технологія біологічно активних сполук

## 2. Відомості про установу, організацію, у вченій раді якої відбувся захист

Назва організації: Державний вищий навчальний заклад "Ужгородський національний університет"

Підпорядкованість: Міністерство освіти і науки України

Код ЄДРПОУ: 02070832

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

Телефон: 380312613396

Телефон: 380312613321

E-mail: office@uzhnu.edu.ua

Інше: www.uzhnu.edu.ua

## 3. Відомості про організацію, де виконувалася (готувалася) дисертація

Назва організації: Національний університет "Львівська політехніка"

Підпорядкованість: Міністерство освіти і науки України

Код ЄДРПОУ: 02071010

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

Телефон: 380322582111

E-mail: coffice@lp.edu.ua

WWW: http://lp.edu.ua

## 4. Відомості про організацію, де працює здобувач

**Назва організації:** Національний університет "Львівська політехніка"

**Підпорядкованість:** Міністерство освіти і науки України

**Код ЄДРПОУ:** 02071010

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

**Телефон:** 380322582111

**E-mail:** coffice@lp.edu.ua

**WWW:** <http://lp.edu.ua>

## 5. Наукові керівники та консультанти

### Наукові керівники

Ятчишин Йосип Йосипович (д. х. н., професор, 05.17.04)

## 6. Офіційні опоненти та рецензенти

### Офіційні опоненти

Мілюкін Михайло Васильович (д. х. н., старший науковий співробітник, 21.06.01)

Студеняк Ярослав Іванович (к. х. н., доц., 02.00.02)

## 7. Підсумки дослідження та кількісні показники

**Підсумки дослідження:** 40 - Нове вирішення актуального наукового завдання

**Кількість публікацій:** 21

**Кількість сторінок:** 302

**Кількість патентів:**

**Кількість додатків:** 4

**Впровадження результатів роботи:**

**Ілюстрації:** 58

**Мова документа:** Українська

**Таблиці:** 44

**Зв'язок з науковими темами:** 0187U0097989

**Схеми:**

**Використані першоджерела:** 183

## 8. Індекс УДК тематичних рубрик НТІ

**Індекс УДК:** 543, 543.544+547.655.6

**Тематичні рубрики:** 31.19

## 9. Тема та реферат дисертації

### Тема (укр.)

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

### Тема (англ.)

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

### Реферат (укр.)

Дисертаційна робота присвячена дослідженню умов розділення та визначення 29 похідних 1,4-нафтохінону методами обернено-фазової вискоєфективної 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 рН для МФ на утримування і встановлено, що при менших, ніж  $pH \approx 5$  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 рН для МФ ( $pH=3,5-7$ ) мають вигляд частини S-подібної кривої, яка характерна в умовах ОФ ВЕРХ для аналітів, що є слабкими кислотами. Випробовано можливості комп'ютерного моделювання з допомогою програми ChromDream для прогнозування утримування похідних 1,4-нафтохінону в умовах ОФ ВЕРХ. Здійснено розрахунок величин  $V$  і  $\Delta G$  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 Снайдер-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.

## Реферат (англ.)

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  $pH \approx 5$  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 characteristic 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  $\Delta G$  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.

---

**Голова спеціалізованої вченої ради:** Барчій Ігор Євгенович (д.х.н., професор, 02.00.01)

**Головуючий на засіданні:** Барчій Ігор Євгенович (д.х.н., професор, 02.00.01)

---

Підпис

М.П.

**Відповідальний за подання документів:** Стерчо І.П. (Тел.: 0312235091)

---

Підпис

**Керівник відділу реєстрації наукової діяльності  
УкрІНТЕІ**



Юрченко Т.А.