

UNIVERZITET U NOVOM SADU

TEHNOLOŠKI FAKULTET

N O V I S A D

28. marta 1988.g.

SAVETU TEHNOLOŠKOG FAKULTETA

Odlukom Saveta Tehnološkog fakulteta, određena je Komisija za ocenu urađene doktorske disertacije kandidata **Mr Slobodana M. Lomića**, asistenta Tehnološkog fakulteta u Novom Sadu, pod nazivom "**Tumačenje retencije rastvorka u tačnoj hromatografiji primenom koeficijenata aktiviteta**", u sastavu :

1. Dr Slobodan Petrović, redovni profesor
2. Dr Paula Putanov, redovni profesor
3. Dr Božidar Milić, vanredni profesor

Komisija je pregledala doktorsku disertaciju kandidata **mr Slobodan Lomića** i podnosi Savetu Tehnološkog fakulteta sledeći

I Z V E Š T A J

Doktorska disertacija kandidata **mr Slobodana M. Lomića**, asistenta Tehnološkog fakulteta Univerziteta u Novom Sadu, pod nazivom "**Tumačenje retencije rastvorka u tačnoj hromatografiji primenom koeficijenata aktiviteta**" izložena je na **119 strana** i sadrži **25 tablica, 14 slika i 84 literaturna navoda**. Rad je podeljen u **7 poglavlja: Uvod, Teorijski deo, Eksperimentalni deo, Rezultati i diskusija, Zaključak, Literatuta, Prilog**.

U poglavlju **Uvod** kandidat **mr Slobodan M. Lomić** razmatra opšti retencionni mehanizam koji se javlja u tačnoj hromatografiji i koji je uzrok činjenici da je hromatografija najefikasnija metoda za razdvajanje kompleksnih smeša jedinjenja. Polazi od toga da je u tačnoj hromatografiji sistem sačinjen od tačne pokretne faze, koja perkolira preko čvrste nepokretne faze i da se molekuli rastvoraka koji se nalaze u tačnoj fazi raspodelju-

ju između nepokretne i pokretne faze u jednom ravnotežnom procesu koji se stalno narušava. Od veličine ravnotežne konstante pojedinih rastvoraka zavisi i moć razdvajanja sistema. Dalje, kandidat prikazuje da u zavisnosti od prirode i sastava pokretne i nepokretne faze postoje dva tipa tečne hromatografije - tečno-čvrsta i tečno-tečna, a u zavisnosti od veličine polarности pokretne i nepokretne faze - hromatografija na normalnim i hromatografija na obrnutim fazama. Kandidat ukazuje da je uticaj tečne pokretne faze na retenciju, zbog njene relativne jednostavnosti, dobro proučen u literaturi, dok je uticaj vrlo kompleksne nepokretne faze nedovoljno razjašnjen, najviše zbog toga što je to teško učiniti samo na osnovu retencionih podataka. Zato kandidat stavlja sebi u zadatak da na osnovu eksperimentalnih retencionih podataka i parametara koji definišu pokretnu fazu, a dobijeni su na osnovu podataka koji ne pripadaju hromatografskom sistemu, ispita uticaj nepokretne faze na retenciju u hromatografskim sistemima na normalnim i obrnutim fazama.

U poglavlju **Teorijska razmatranja** kandidat daje iscrpan pregled teorijskih razmatranja koja se odnose na tečno-čvrstu hromatografiju na normalnim fazama i tečnu hromatografiju na obrnutim fazama. U tečno-čvrstoj hromatografiji na normalnim fazama izdvajaju se kao najrealnija dva modela, kompeticioni model, koji se zasniva na pretpostavci da su interakcije rastvorak - pokretna faza zanemarljive i da do retencije rastvoraka dolazi zbog nadmetanja molekula rastvoraka koji se nalaze u pokretnoj fazi sa molekulima pokretne faze koji su adsorbovani na površini nepokretne faze za aktivne centre nepokretne faze, i interakcioni model, koji polazi od pretpostavke da do retencije rastvoraka dolazi prvenstveno usled interakcionih sila rastvorak - pokretna faza. Po prvoj linearna zavisnost postoji između logaritma retencione konstante i logaritma koncentracije polarne komponente u pokretnoj fazi, a po drugoj, između recipročne vrednosti retencione konstante i koncentracije polarne komponente u pokretnoj fazi. U krajnjoj definiciji nijedan od modela ne povezuje retenciju rastvoraka sa prirodom i sasta-

vom nepokretne faze. U ovom poglavlju posebno je razmatrana i relativna retencija rastvorka, tzv. selektivnost, koja je nezamenljiv faktor pri definisanju stepena razdvajanja u tečnoj hromatografiji. U ovom poglavlju je takođe data teorijska osnova potrebna za shvatanje koncepta doprinosa funkcionalnih grupa tzv. UNIFAC modela, pomoću koga se mogu računati koeficijenti aktiviteta rastvorka pri beskonačnom razblaženju u pokretnoj tečnoj fazi hromatografskog sistema.

U poglavlju **Eksperimentalni deo** dat je opis instrumenata i metoda korišćenih u radu za eksperimentalno određivanje retencionih konstanti, kao i način kompjuterskog izračunavanja koeficijenata aktiviteta rastvoraka u pokretnoj fazi.

U poglavlju **Rezultati i diskusija** prikazani su i prodiskutovani rezultati koji su dobijeni upoređivanjem eksperimentalno određenih retencionih veličina i računski dobijenih koeficijenata aktiviteta u pokretnoj fazi. Pokazano je u tečno-čvrstoj hromatografiji na normalnim fazama :

- da retencija rastvorka u nepokretnoj fazi γ_1^s / Φ u zavisnosti od promena koncentracije komponenata Φ u binarnoj pokretnoj fazi, zadovoljava funkciju formalno identičnu Langmuir-ovoj adsorpcionoj izotermi,

- da kada je komponenta binarne pokretne faze iz reda proton-donor rastvarača dolazi do kombinovanog mehanizma retencije, odnosno da do većeg izražaja dolazi mehanizam koji odgovara mehanizmu u tečno-tečnoj (podeonoj) hromatografiji, a manje mehanizam koji se javlja u tečno-čvrstoj (adsorpcionoj) hromatografiji,

- da su kompeticioni i interakcioni model, dva u hromatografskom svetu usvojena modela, ekvivalentni i da se zasnivaju na istom retencionom mehanizmu,

- da iako se retencija rastvorka u nepokretnoj fazi pokorava Langmuir-ovoj funkciji, relativna retencija rastvorka, odnosno selektivnost je nepromenljiva sa promenom koncentracije komponenata u pokretnoj fazi ili sa promenom prirode komponenata, tj. relativna retencija zavisi samo od hemijske strukture rastvoraka koji se upoređuju.

Utvrđeno je da se koeficijenti aktiviteta rastvoraka u pokretnoj fazi, γ_i^m , računati UNIFAC metodom i za slabo polarne i vrlo polarne pokretne faze najbolje pokoravaju kvadratnoj jednačini kada su funkcija promene koncentracije komponenta pokretne faze.

U tačnoj hromatografiji na obrnutim fazama je pokazano:

- da se retencija rastvorka u pokretnoj fazi izvanredno može imitirati računanjem koeficijenata aktiviteta, ako se poseduju korektni UNIFAC parametri,

- da se upoređivanjem izračunatih γ_i^m vrednosti i eksperimentalno određenih retencionih konstanti može odrediti odnos faza, Φ , hromatografskog sistema, koji je neophodan za definisanje retencionog ponašanja rastvorka u nepokretnoj fazi.

Referenti žele posebno da istaknu da se kandidat bavi ovom izuzetno važnom problematikom duži niz godina i da ima objavljene značajne naučne radove u međunarodnim časopisima, kao i saopštenja na međunarodnim simpozijumima. Ovom disertacijom kandidat je pokazao izuzetno poznavanje najnovijih dostignuća u oblasti hromatografije, čime je dokazao sposobnost da samostalno rešava i veoma složene naučne probleme, kao i dobro poznavanje naučnih oblasti u koje zadiré predmet istraživanja ove disertacije.

Rezultati do kojih je **mr Slobodan M. Lomić** došao, predstavljaju nov, originalan i značajan doprinos oblasti analitičke hemije, u čiji okvir spada hromatografija, te stoga referenti predlažu Savetu Tehnološkog fakulteta u Novom Sadu, da rad **mr Slobodana M. Lomića**, asistenta Tehnološkog fakulteta u Novom Sadu, pod nazivom **"Tumačenje retencije rastvorka u tačnoj hromatografiji primenom koeficijenata aktiviteta"** prihvate kao tezu za sticanje akademskog stepena doktora nauka i da kandidata pozove na javnu odbranu.

U Novom Sadu, 28.III 1988.

K O M I T E T A

Dr Slobodan Petrović, red.prof.

Dr Paula Kuleva, red.prof.

Dr Bozidar Milić, van.prof.