

## **ЗАКЛЮЧЕНИЕ**

**Диссертационного совета по группе специальностей 6D060600, 8D05301 -  
Химия, 6D73900, 8D07101 - Нефтехимия, 6D072000, 8D07104 -  
Химическая технология неорганических веществ и 6D072100, 8D07105 -  
Химическая технология органических веществ при КазНУ имени аль-  
Фараби по диссертации Капар Анель Амангельдыкызы на тему:  
«Modeling the processes of solid-phase microextraction of organic compounds  
from environmental objects», представленной на соискание степени  
доктора философии (PhD) по специальности «8D05301 – Химия»  
(протокол 19 от 12 февраля 2025 г.).**

1. По результатам защиты и тайного голосования диссертационный совет принял решение направить на доработку диссертационную работу Капар Анель Амангельдыкызы на тему: «Modeling the processes of solid-phase microextraction of organic compounds from environmental objects» для исправления следующих замечаний:

1) Необходимо привести в диссертации более детальные описания теоретических сведений по использованию COMSOL. Приведите в диссертации несколько примеров из литературы, где он использовался для моделирования процессов, аналогичных рассматриваемой системе. Для каждой симуляции в COMSOL необходимо чётко описать допущения модели, начальные и граничные условия.

2) Необходимо учесть в диссертации вопросы к Главе 2. Моделирование в газовой фазе, которые возникли во время защиты диссертации:

а. Каковы допущения модели? Каковы начальные и граничные условия модели?

б. В представленных моделях – процесс сорбции в волокнах не описан. Если этот процесс рассматривается, необходимо привести используемые уравнения и параметры (здесь имеется в виду уравнение 55, описывающее процесс сорбции для водного образца). Тот же процесс был рассмотрен для образцов почвы, почему же он не учитывается при моделировании в газовой фазе?

3) Необходимо учесть в диссертации вопросы к Главе 3. Моделирование для водных образцов, которые возникли во время защиты диссертации:

а. Каковы допущения модели? Каковы начальные и граничные условия модели?

б. Следующий раздел вызывает затруднения в понимании. Пожалуйста, объясните его:

### 3.3.4 Optimization of incubation time

The developed model for HSSPME was corrected by removing other geometry parts except water and headspace. 'Transport of Diluted Species' was used for headspace instead of the 'Transport of Diluted Species in Porous Media'; the corrected model contained two 'Transport of Diluted Species' physics. Initial analyte concentration in headspace was set to zero.

с. Неясно, как были связаны масса-перенос и турбулентное течение.

symmetry (in 2D-axisymmetric geometry). SPME was modeled using 'Transport of Diluted Species' physics (time-dependent study) with convection velocities taken from the results obtained using 'Turbulent Flow, k-ε' physics (stationary study).]

4) Необходимо учесть в диссертации вопросы к главе 4. Моделирование для образцов почвы, которые возникли во время защиты диссертации:

Масса-перенос на границе раздела между почвой и воздухом недостаточно четко определён. В приведённом ниже уравнении параметр  $K_{sh}$  является ключевым.

$$Flux_1 = 1000 \frac{m}{s} (c_s - c_h K_{sh}); Flux_2 = 1000 \frac{m}{s} (c_h K_{sh} - c_s)$$

= 8300. Modeling was conducted using seven different dimensionless soil-headspace constants ( $K_{sh}$ ): 1, 10, 100, 1000, 10,000, 100,000 and 1000,000.

Каков физически обоснованный диапазон значений  $K_{sh}$ ? В литературе должны быть данные по этому параметру.

5) Во время защиты соискатель не смогла предоставить экспериментальные доказательства выносимого на защиту положение 2 "Increasing the coating-air distribution constant from 1000 to 10000 at constant temperature and diffusion coefficient in PDMS coating equal to  $10^{-11} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$  results in 43% increase of equilibration time". Необходимо либо указать в диссертации соответствующие экспериментальные данные, либо уточнить формулировку положения, сделав её более конкретной.

6) Во время защиты кандидат не смог в полной мере объяснить, почему экспериментальные результаты приведены без стандартных отклонений. В диссертации необходимо добавить соответствующее пояснение.



2. Доработанная диссертационная работа представляется в диссертационный совет в трехмесячный срок, который допускается продлевать не более чем на 3 (три месяца). Решение о продлении срока доработки принимается диссертационным советом на основании заявления докторанта. В случае, если доработанная диссертационная работа не представляется в установленные сроки, то докторант проходит повторную защиту.

Председатель диссертационного совета,  
кандидат химических наук, доцент

А.К. Галеева

Ученый секретарь диссертационного совета,  
кандидат химических наук, профессор

Б.М. Уралбеков

РАСТАЙМЫН  
өл-Фараби атындағы ҚазҰУ Ғылыми кадрларды  
даярлау және аттестаттау басқармасының басшысы

ЗАВЕРЯЮ

Начальник управления подготовки и аттестации  
научных кадров КазНУ им. аль-Фараби

«18» 20 2018 г.



## CONCLUSION

of the Dissertation Council for the group of specialties 6D060600, 8D05301 – Chemistry, 6D073900, 8D07101 – Petrochemistry, 6D072000, 8D07104 – Chemical Technology of Inorganic Substances, and 6D072100, 8D07105 – Chemical Technology of Organic Substances at Al-Farabi Kazakh National University on the dissertation of Kapar Anel Amangeldykyzy titled *"Modeling the Processes of Solid-Phase Microextraction of Organic Compounds from Environmental Objects"*, submitted for the degree of Doctor of Philosophy (PhD) in the specialty 8D05301 – Chemistry (Protocol No. 19 dated February 12, 2025).

1. Based on the results of the defense and secret voting, the Dissertation Council decided to send Kapar Anel Amangeldykyzy's dissertation titled *"Modeling the Processes of Solid-Phase Microextraction of Organic Compounds from Environmental Objects"* for revision to address the following comments:

1) Provide more complete background on the basic theory, structure, and use of COMSOL. Provide a few examples from the literature where it has been used to simulate processes similar to the system presented. For each COMSOL simulation, assumptions of the model, initial conditions, and boundary conditions need to be clearly described.

2) It is necessary to address in the dissertation the questions related to Chapter 2 Chapter 2, modeling the air sample, which arose during the dissertation defense.

a. What are the assumptions of the model? What are the initial and boundary conditions of the model?

b. Sorption in the coating was not described in the model development at all. If this process is considered, equations and parameters used must be described. (here referred to as equation 55, the sorption process considered for the water sample. The same process was considered for soil samples, why this sorption process is not considered for air samples).

3) It is necessary to address in the dissertation the questions related to Chapter 3, modeling the water sample, which arose during the dissertation defense.

a. What are the assumptions of the model? What are the initial and boundary conditions of the model?

b. The following section is very confusing. Please explain.

### **3.3.4 Optimization of incubation time**

The developed model for HSSPME was corrected by removing other geometry parts except water and headspace. 'Transport of Diluted Species' was used for headspace instead of the 'Transport of Diluted Species in Porous Media'; the corrected model contained two 'Transport of Diluted Species' physics. Initial analyte concentration in headspace was set to zero.

c. How mass transport and turbulent flow were coupled is not clear.



symmetry (in 2D-axisymmetric geometry). SPME was modeled using 'Transport of Diluted Species' physics (time-dependent study) with convection velocities taken from the results obtained using 'Turbulent Flow, k-ε' physics (stationary study).]

4) It is necessary to address in the dissertation the questions related to Chapter 4. Modeling soil samples, which arose during the dissertation defense.

The mass transport between soil and air interfaces is not clearly defined. In the equation below,  $K_{sh}$  is a key parameter.

$$Flux_1 = 1000 \frac{m}{s} (c_s - c_h K_{sh}); Flux_2 = 1000 \frac{m}{s} (c_h K_{sh} - c_s)$$

= 8300. Modeling was conducted using seven different dimensionless soil-headspace constants ( $K_{sh}$ ): 1, 10, 100, 1000, 10,000, 100,000 and 1000,000.

What is a physically meaningful range of  $K_{sh}$ ? Work of literature should have data for that.

5) During the defense, the candidate was unable to provide experimental evidence for Proposition 2: *"Increasing the coating-air distribution constant from 1000 to 10000 at constant temperature and diffusion coefficient in PDMS coating equal to  $10^{-11} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$  results in 43% increase of equilibration time"*. It is necessary either to include the relevant experimental data in the dissertation or to refine the wording of the proposition to make it more specific.

6) During the defense, the candidate can't fully explain why the experimental results were presented without standard deviations. The dissertation should include an appropriate explanation.

2. The revised dissertation must be submitted to the Dissertation Council within three months, with the possibility of an extension for no more than an additional three months. The decision to extend the deadline is made by the Dissertation Council based on a request from the doctoral candidate. If the revised dissertation is not submitted within the established timeframe, the doctoral candidate must undergo a repeated defense.

Chairman of the Dissertation Council,  
Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor

A.K. Galeeva

Scientific Secretary of the Dissertation Council,  
Candidate of Chemical Sciences, Professor

B.M. Uralbekov

Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті  
дәріс және аттестаттар басқармасының басшысы  
ЗАБЕРЯЮ  
Начальник управления подготовки и аттестации  
научных кадров КазНУ им. а.Фараби  
Бел. Фиганов  
«18» 02 2025

