



ОРИГИНАЛЬНЫЕ СТАТЬИ

Научная статья

УДК 5543.544

doi: 10.17308/sorpchrom.2022.22/10570

Идентификация компонентов озонированной пиролизной жидкости с использованием газовой хромато-масс-спектрометрии, ионной жидкости в качестве неподвижной фазы и машинного обучения

Анастасия Юрьевна Шолохова¹✉, Светлана Александровна Боровикова¹,
Дмитрий Дмитриевич Матюшин¹, Алексей Константинович Буряк¹

¹Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия, shonastya@yandex.ru ✉

Аннотация. Одним из подходов к переработке пластиковых отходов является пиролиз. В зависимости от условий процесса пиролиз обычно приводит к образованию летучей жидкой фракции (пиролизная жидкость) и нелетучего твердого или смолистого осадка. Пиролиз с последующей переработкой жидкой фракции является предметом многочисленных исследований и используется на практике. Одним из возможных направлений исследований в области дальнейшей переработки пиролизной жидкости является озонирование (окисление озono-воздушной смесью). После озонирования пиролизной жидкости полученная смесь содержит как смесь углеводов, так и кислородсодержащие соединения.

Целью данной работы является идентификация компонентов смеси, образовавшейся в результате озонирования жидкой фракции, полученной посредством пиролиза пластика, методами газовой хромато-масс-спектрометрии и машинного обучения. Для этой цели впервые использована неподвижная фаза на основе ионной жидкости. Для отсеивания ложных кандидатов при поиске по масс-спектральной базе данных впервые апробирована ранее предложенная модель для предсказания индексов удерживания на различных неподвижных фазах. Объектом исследования являлся образец, полученный озонированием пиролизной жидкости в течение длительного времени. Анализ образца проводили методом газовой хромато-масс-спектрометрии на приборе Shimadzu GCMS-TQ8040 (Shimadzu). Для анализа исследуемого образца использовали колонку на основе пиридиниевой ионной жидкости, обозначаемой Bis4MPyC6 (30 м, 0.22 мм×0.2 мкм). Для предсказания индексов удерживания использовали ранее опубликованный универсальный метод машинного обучения, который в качестве входных переменных использует индексы удерживания, предсказанные с помощью предварительно обученных нейронных сетей для стандартных полярных и неполярных фаз. Показано, что поиск масс-спектров по базе данных NIST дает некорректную идентификацию практически для всех соединений в исследуемой смеси. Предсказание индекса удерживания позволяет определить состав смеси.

Таким образом, в работе идентифицированы продукты пиролиза пластика с последующим озонированием посредством газовой хромато-масс-спектрометрии и машинного обучения. Установлено, что неподвижная фаза, на основе ионной жидкости Bis4MPyC6 позволяет удовлетворительно разделять как полярные, так и неполярные соединения, содержащиеся в анализируемой смеси.

Ключевые слова: газовая хроматография, ионные жидкости на основе пиридина, глубокое обучение, нецелевой анализ, пиролиз.

Благодарности: Авторы выражают благодарность зав. аналитической лаборатории ИК СО РАН им. Г.К. Борескова к.х.н. Шашкову М.В. за предоставленную хроматографическую колонку с неподвижной фазой на основе Bis4MPyC6. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 22-13-00266), предоставленного Институту физической химии и электрохимии имени А.Н. Фрумкина Российской академии наук

Для цитирования: Шолохова А.Ю., Боровикова С.А., Матюшин Д.Д., Буряк А.К. Идентификация компонентов озонированной пиролизной жидкости с использованием газовой хромато-масс-спектрометрии, ионной жидкости в качестве неподвижной фазы и машинного обучения // *Сорбционные и хроматографические процессы*. 2022. Т. 22, № 4. С. 413-420. <https://doi.org/10.17308/sorpchrom.2022.22/10570>



Original article

Identification of the components of an ozonated pyrolysis liquid through the use of gas chromatography-mass spectrometry, ion liquid as a stationary phase, and machine learning

Anastasiya Yu. Sholokhova¹✉, Svetlana A. Borovikova¹,
Dmitry D. Matyushin¹, Alexey K. Buryak¹

¹Institute of Physical chemistry and electrochemistry, Moscow, Russian Federation, shonastya@yandex.ru✉

Abstract Pyrolysis is one of the methods for recycling plastic. Depending on the conditions of the process, pyrolysis usually results in the formation of a volatile liquid fraction (pyrolysis liquid) and a non-volatile solid or resinous precipitate. Pyrolysis followed by the processing of the liquid fraction is a widely used and is a thoroughly studied technique. Ozonation (oxidation with an ozone-air mixture) can be the focus of further research in the processing of pyrolysis liquids. After the ozonation of a pyrolysis liquid, the obtained mixture contains both hydrocarbon and oxygen-containing compounds.

The purpose of our study was to identify the components of the mixture formed as a result of ozonation of the liquid fraction obtained by the pyrolysis of plastic using gas chromatography-mass spectrometry and machine learning methods. In order to do this, we used a stationary phase based on an ionic liquid. To exclude false candidates when searching the mass-spectral database, we used a new model for the prediction of retention indices on various stationary phases. In our study we used a sample obtained by the ozone treatment of a pyrolysis liquid for a long period of time. The analysis of the sample was performed by means of gas chromatography-mass spectrometry using a Shimadzu GCMS-TQ8040 (Shimadzu) instrument. To analyse the sample, we used a column based on pyridine ionic liquid Bis4MPyC6 (30 m, 0.22 mm×0.2 μm). To predict the retention indices, we used a universal machine learning method which uses retention indices predicted by preliminary trained neural networks for standard polar and nonpolar phases as the input variables. The search for the mass spectra in the NIST database resulted in the incorrect identification of practically all the compounds in the studied mixture. Prediction of the retention index allowed us to determine the composition of the mixture.

Thus, we managed to identify the products of plastic pyrolysis followed by ozone treatment by means of gas chromatography-mass spectrometry and machine learning. The study demonstrated that a stationary phase based on the ionic liquid Bis4MPyC6 can be used to separate both polar and nonpolar compounds contained in the studied mixture.

Keywords: gas chromatography, pyridine based ionic liquids, deep learning, nontargeted analysis, pyrolysis.

Acknowledgments: The authors express their gratitude to M.V. Shashkov, PhD in Chemistry, Head of the Analytical Laboratory of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, for the chromatographic column with a stationary phase based on Bis4MPyC6

The work was supported by the grant of the Russian Science Foundation (project No 22-13-00266) to the Frumkin Institute of Physical Chemistry and Electrochemistry of the Russian Academy of Sciences.

For citation: Sholokhova A.Yu., Borovikova S.A., Matyushin D.D., Buryak A.K Identification of the components of an ozonated pyrolysis liquid through the use of gas chromatography-mass spectrometry, ion liquid as a stationary phase, and machine learning. *Sorbtionnye i khromatograficheskie protsessy*. 2022. 22(4): 413-420. (In Russ.). <https://doi.org/10.17308/sorpchrom.2022.22/10570>

Введение

За всё время с момента начала массового производства пластмасс в мире произведено около 6.3 миллиардов тонн пластиковых отходов, из которых 79% не были переработаны и находятся на свалках и в окружающей среде [1]. Одним из подходов к переработке пластиковых отходов является пиролиз. Пиролиз – это

разложение органических материалов под действием температуры в отсутствие кислорода. В зависимости от условий процесса пиролиз обычно приводит к образованию летучей жидкой фракции (пиролизная жидкость или пиролизное масло) и нелетучего твердого или смолистого осадка. Полученные продукты могут быть переработаны в химикаты или

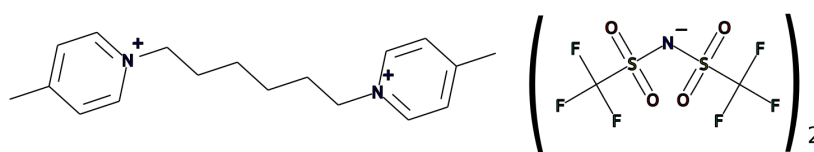


Рис. 1. Структура ионной жидкости, обозначаемой как Bis4MPyC6
Fig. 1. Structure of the Bis4MPyC6 ionic liquid

топливо [2]. Пиролиз с последующей переработкой жидкой фракции является предметом многочисленных исследований и используется на практике [3, 4]. Пиролизная жидкость представляет собой сложную смесь углеводородов [5]. Одним из возможных направлений исследований в области дальнейшей переработки пиролизной жидкости является озонирование (окисление озono-воздушной смесью). После озонирования пиролизной жидкости полученная смесь содержит в себе как различные углеводороды, так и кислородсодержащие соединения.

Одним из основных методов исследования пиролизной жидкости является метод газовой хромато-масс-спектрометрии (ГХ-МС). Для определения кислородсодержащих соединений зачастую используют полярные неподвижные фазы (НФ), однако, НФ на основе полиэтиленгликоля имеют ограниченную термостабильность [6] и не могут быть использованы при температурах выше $\sim 250^\circ\text{C}$. Основным преимуществом НФ на основе ионных жидкостей (ИЖ) является их высокая термостабильность в сочетании с высокой полярностью [7, 8]. НФ на основе ИЖ эффективны для разделения как полярных, так и неполярных соединений [9]. Они обеспечивают хорошее разделение при анализе различных объектов: смесей жирных кислот, нефтепродуктов, объектов растительного происхождения и пестицидов [10]. В связи с этим для разделения озонированных продуктов пиролиза пластика была использована НФ на основе ИЖ, обозначаемой как Bis4MPyC6 [11]. Структура этой ИЖ, катион которой содержит алкильную цепочку из 6 атомов углерода, первый и шестой из которых соединены с атомами

азота 4-метилпиридиний ионов, показана на рисунке 1. Исследование НФ на основе пиридиниевых ИЖ представляет интерес с точки зрения создания колонок с более высокой селективностью [11].

При нецелевом анализе с помощью ГХ-МС идентификация молекул осуществляется на основе их масс-спектров. При этом обычно выполняется поиск масс-спектров по базам данных, например, по базе данных NIST. К сожалению, даже если база данных содержит искомое соединение, поиск масс-спектров часто приводит к ошибочному результату. Для отсека ложных кандидатов можно использовать сравнение наблюдаемых индексов удерживания с предсказанными с помощью машинного обучения [12]. Предсказание газохроматографических индексов является важной задачей, поскольку соединений, для которых доступна информация об индексах удерживания, намного меньше по сравнению с теми, для которых известны спектры. В последнее время для предсказания газохроматографических индексов удерживания [13, 14] используются методы глубокого обучения. Для достаточно точного предсказания индексов удерживания необходимы большие обучающие наборы данных, поэтому в основном все модели разработаны для наиболее распространенных неполярных НФ, таких как полидиметилсилоксан. Недавно разработанный универсальный метод машинного обучения [15, 16] в качестве входных переменных использует индексы удерживания, предсказанные с помощью предварительно обученных нейронных сетей для стандартных полярных и неполярных НФ, а также молеку-

лярные дескрипторы. Этот метод способен предсказывать индексы удерживания с точностью, аналогичной методам глубокого обучения, однако для обучения достаточно информации лишь сравнительно небольшого набора данных (100-200 молекул). Метод может быть применен к нестандартным НФ, для которых большие наборы данных недоступны.

Целью данной работы является идентификация компонентов смеси, полученной путём озонирования жидкой фракции продуктов пиролиза пластика, методом ГХ-МС с применением машинного обучения. Для этой цели впервые использована НФ на основе ИЖ. Для отсеивания ложных кандидатов при поиске по масс-спектральной базе данных впервые апробирована ранее предложенная модель [15, 16] для предсказания индексов удерживания на различных НФ.

Экспериментальная часть

Объектом исследования являлся образец, полученный путем длительного пропускания озono-воздушной смеси через пиролизную жидкость. Способ пиролиза пластика и получения пиролизной жидкости описан в нашей предыдущей работе [17]. Образец был получен в ходе исследований по озонированию и был использован в качестве модельного образца сложной смеси в данной работе.

Анализ образца проводили методом ГХ-МС на приборе Shimadzu GCMS-TQ8040 (Shimadzu). Для анализа исследуемого образца использовали колонку на основе ИЖ Bis4MPyC6 (30 м, 0.22 мм×0.2 мкм), предоставленную авторами [11].

0.04 г образца растворяли в 1 см³ ацетонитрила с последующей обработкой ультразвуком и отделением нерастворимого остатка. Для определения индексов удерживания добавляли стандартную смесь н-алканов в исследуемый образец (C₇-C₄₀).

ГХ-МС анализ проводили при следующих условиях: температура инжектора –

250 °С, источника ионов – 200 °С; газ-носитель – гелий, скорость потока – 0.6 см³/мин; деление потока – 1:50. Режим программирования температуры: от 50 до 240 °С со скоростью 8 °С/мин, а затем 240 °С в течение 15 мин. Масс-спектрометр работал в режиме электронной ионизации при 70 эВ, скорость сканирования – 1666 ед/с, диапазон сканирования масс – 44-500 m/z.

Предсказание индексов удерживания с использованием глубокого обучения. Строковые представления рассматриваемых молекул (строки SMILES [18]) были получены с сайта PubChem [19]. Затем, используя ранее опубликованный набор данных по индексам удерживания разнообразных органических молекул (123 соединения разных классов) на НФ Bis4MPyC6 [20], была обучена модель машинного обучения для предсказания индексов удерживания на данной НФ. При этом использовались метод и программное обеспечение [16], подробно описанные в нашей предыдущей работе [15].

Обсуждение результатов

Анализируемая смесь содержит множество высококипящих кислородсодержащих соединений. Для разделения озонированных продуктов пиролиза использовали НФ на основе ИЖ, обладающую термостабильностью и способностью эффективно разделять такие соединения. Хроматограмма смеси (без добавления н-алканов) представлена на рисунке 2.

Установлено, что смесь содержит альдегиды, карбоновые кислоты и алканы. Полный набор стандартных образцов (для каждого соединения) отсутствовал. Предварительная идентификация осуществлялась поиском по базе данных NIST 17. Однако поиск в базе данных масс-спектров не давал правильных результатов для большинства соединений в смеси: первые результаты поиска были одинаковыми для многих пиков, поскольку правильную длину углеродной

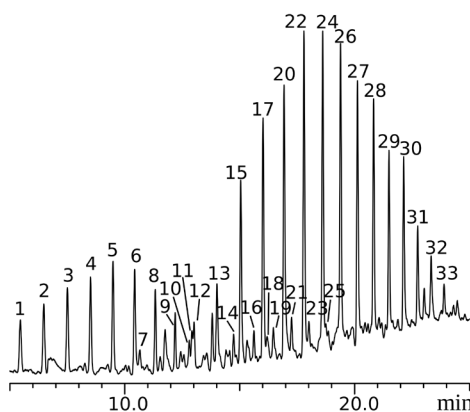


Рис. 2. Хроматограмма пиролизной жидкости после озонирования; хроматографическая колонка на основе ионной жидкости Bis4MPyC6 без добавления смеси n-алканов.

Нумерация пиков дана в соответствии с таблицей 1

Fig. 2. Chromatogram of the pyrolysis liquid after ozone treatment; chromatographic column based on the Bis4MPyC6 ionic liquid without n-alkanes). The peaks are numbered according to Table 1.

цепи трудно определить только с помощью масс-спектрометрии. Для других пиков поиск в библиотеке дает соединения, которые вряд ли содержатся в смеси. В качестве дополнительного критерия для отсеечения ложных кандидатов использовали индекс удерживания. Так как справочные данные об индексах удерживания анализируемых веществ для данной НФ отсутствуют, использовали предсказание индексов удерживания. В таблице 1 представлены идентифицированные компоненты исследуемой смеси, а также экспериментальные и предсказанные индексы удерживания.

Сравнение экспериментальных и предсказанных индексов удерживания позволяет идентифицировать каждый из пиков на хроматограмме с высокой степенью уверенности. Отметим, что соединения, содержащиеся в исследуемой смеси, в обучающей выборке отсутствовали, поэтому данные об эффективности такого подхода можно считать надежными.

На примере неизвестного соединения, которое элюируется при времени удерживания 18.61 мин. (пик 24), покажем, как осуществлялась идентификация соединений с использованием предсказанных индексов удерживания. Поиск в базе

Таблица 1. Соединения, идентифицированные в озонированной пиролизной жидкости методом газовой хромато-масс-спектрометрии с использованием неподвижной фазы на основе ионной жидкости Bis4MPyC6. $I_{набл.}$ – наблюдаемый индекс удерживания, $I_{предск.}$ – предсказанный индекс удерживания, t – наблюдаемое время удерживания

Table 1. Compounds identified in the ozonated pyrolysis liquid by means of gas chromatography-mass spectrometry using a stationary phase based on the Bis4MPyC6 ionic liquid. $I_{observed}$ – observed retention index, $I_{predicted}$ – predicted retention index, t – duration of retention

N	t , мин	Название соединения	$I_{набл.}$	$I_{предск.}$	Первый кандидат из базы данных NIST 17
1	2	3	4	5	6
1	5.45	Пентадекан	1500		
2	6.48	Гексадекан	1600		
3	7.50	Гептадекан	1700		



1	2	3	4	5	6
4	8.51	Октадекан	1800		
5	9.49	Нонадекан	1900		
6	10.43	Эйкозан	2000		
7	10.66	Тридеканаль	2026	2078	Ундеканаль
8	11.33	Геникозан	2100		
9	12.19	Докозан	2200		
10	12.81	Тетрадеканаль	2275	2205	Октадеканаль
11	12.92	Пентановая кислота	2288	2244	Гептановая кислота
12	13.00	Трикозан	2300		
13	14.01	Гексановая кислота	2425	2375	Октановая кислота
14	14.73	Гептадеканаль	2521	2566	Пентадеканаль
15	15.04	Гептановая кислота	2563	2507	Нонановая кислота
16	15.62	Октадеканаль	2643	2681	Гексадеканаль
17	16.02	Октановая кислота	2699	2648	н-Декановая кислота
18	16.19	2-Октадеканон	2724	2712	2-Гексадеканон
19	16.46	Нонадеканаль	2764	2791	Эйкозаналь
20	16.93	Нонановая кислота	2833	2789	Ундекановая кислота
21	17.26	Эйкозаналь	2882	2893	Тетракозаналь
22	17.80	Декановая кислота	2965	2929	Додекановая кислота
23	18.01	Геникозаналь	2998	2990	Оксиран, гептадецил
24	18.61	Ундекановая кислота	3093	3066	Тридекановая кислота
25	18.75	Докозаналь	3115	3092	Эйкозаналь
26	19.39	Додекановая кислота	3220	3186	Тетрадекановая кислота
27	20.12	Тридекановая кислота	3343	3302	Пентадекановая кислота
28	20.83	Тетрадекановая кислота	3463	3419	Эйкозановая кислота
29	21.49	Пентадекановая кислота	3581	3538	Гептадекановая кислота
30	22.13	Гексадекановая кислота	3696	3649	Октадекановая кислота
31	22.74	Гептадекановая кислота	3810	3753	Эйкозановая кислота
32	23.33	Октадекановая кислота	3921	3842	Эйкозановая кислота
33	23.89	Нонадекановая кислота	4032	3921	Октадекановая кислота

данных дает для этого соединения тридекановую кислоту. Экспериментальный индекс удерживания рассматриваемого неизвестного соединения равен 3093, предсказанный индекс удерживания тридекановой кислоты (первый кандидат из базы данных) равен 3302. Это указывает

на некорректную идентификацию соединения по базе данных. Такое же поведение наблюдается практически для всех соединений в исследуемой смеси. Предсказание индекса удерживания позволяет определить состав смеси.



Заключение

В работе идентифицированы продукты пиролиза пластика с последующим озонированием посредством газовой хромато-масс-спектрометрии и машинного обучения. Установлено, что неподвижная фаза, на основе ионной жидкости Bis4MPyC6 позволяет удовлетворительно разделять как полярные, так и неполярные соединения, содержащиеся в анализируемой смеси. Использован ранее

разработанный метод для предсказания индексов удерживания на различных неподвижных фазах. Данный метод позволил сопоставить структуру каждому из пиков на хроматограмме.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет известных финансовых конфликтов интересов или личных отношений, которые могли бы повлиять на работу, представленную в этой статье.

Список литературы / References

1. Geyer R., Jambeck J.R., Law K.L. Production, use, and fate of all plastics ever made. *Sci. Adv.*, 2017; 3(7): e1700782. <https://doi.org/10.1126/sciadv.1700782>
2. Qureshi M.S., Oasmaa A., Pihkola H., Deviatkin I., Tenhunen A., Mannila J., Minkinen H., Pohjakallio M., Laine-Ylijoki J. Pyrolysis of plastic waste: Opportunities and challenges. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*. 2020; 152: 104804. <https://doi.org/10.1016/j.jaap.2020.104804>
3. Lombardi L., Carnevale E.A. Evaluation of the environmental sustainability of different waste-to-energy plant configurations. *Waste Management*. 2018; 73: 232-246. <https://doi.org/10.1016/j.wasman.2017.07.006>
4. Anuar Sharuddin S.D., Abnisa F., Wan Daud W.M.A., Aroua M.K. A review on pyrolysis of plastic wastes. *Energy Conversion and Management*. 2016; 115: 308-326. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2016.02.037>
5. Gala A., Guerrero M., Guirao B., Domine M.E., Serra J.M. Characterization and Distillation of Pyrolysis Liquids Coming from Polyolefins Segregated of MSW for Their Use as Automotive Diesel Fuel. *Energy Fuels*. 2020; 34(5): 5969-5982. <https://doi.org/10.1021/acs.energyfuels.0c00403>
6. Rahman Md.M., Abd El-Aty A.M., Choi J.-H., Shin H.-C., Shin S.C., Shim J.-H. Basic Overview on Gas Chromatography Columns, Analytical Separation Science /

- ed. Pino V., Anderson J.L., Berthod A., Stalcup A.M., Weinheim, Germany: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2015, pp. 823-834. <https://doi.org/10.1002/9783527678129.assep024>
7. Poole C.F., Poole S.K. Ionic liquid stationary phases for gas chromatography: Gas Chromatography. *J. Sep. Science*. 2011; 34(8): 888-900. <https://doi.org/10.1002/jssc.201000724>
8. Yao C., Anderson J.L. Retention characteristics of organic compounds on molten salt and ionic liquid-based gas chromatography stationary phases. *Journal of Chromatography A*. 2009; 1216(10): 1658-1712. <https://doi.org/10.1016/j.chroma.2008.12.001>
9. Liu J., Jiang G., Liu J., Jönsson J.Å. Application of ionic liquids in analytical chemistry. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*. 2005. 24(1): 20-27. <https://doi.org/10.1016/j.trac.2004.09.005>
10. Vidal L., Riekkola M.-L., Canals A., Ionic liquid-modified materials for solid-phase extraction and separation: A review. *Analytica Chimica Acta*. 2012; 715: 19-41. <https://doi.org/10.1016/j.aca.2011.11.050>
11. Shashkov M.V., Sidelnikov V.N., Zaikin P.A. Selectivity of stationary phases based on pyridinium ionic liquids for capillary gas chromatography. *Russ. J. Phys. Chem.* 2014; 88(4): 717-721. <https://doi.org/10.1134/S0036024414040268>
12. Matyushin D.D., Sholokhova A.Yu., Karnaeva A.E., Buryak A.K. Various as-

pects of retention index usage for GC-MS library search: A statistical investigation using a diverse data set. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*. 2020; 202: 104042. <https://doi.org/10.1016/j.chemolab.2020.104042>

13. Matyushin D.D., Sholokhova A.Yu., Buryak A.K. A deep convolutional neural network for the estimation of gas chromatographic retention indices. *Journal of Chromatography A*. 2019; 1607: 460395. <https://doi.org/10.1016/j.chroma.2019.460395>

14. Qu C., Schneider B.I., Kearsley A.J., Keyrouz W., Allison T.C. Predicting Kováts Retention Indices Using Graph Neural Networks. *Journal of Chromatography A*. 2021; 1646: 462100. <https://doi.org/10.1016/j.chroma.2021.462100>

15. Matyushin D.D., Sholokhova A.Yu., Buryak A.K. Deep Learning Based Prediction of Gas Chromatographic Retention Indices for a Wide Variety of Polar and Mid-Polar Liquid Stationary Phases. *IJMS*. 2021; 22(17): 9194. <https://doi.org/10.3390/ijms22179194>

16. Matyushin D. Source code of software and parameters of pre-trained models. Available at: <https://doi.org/10.6084/M9.FIGSHARE.16885009>

M9.FIGSHARE.14602317 (accessed 03 Juny 2022).

17. Sholokhova A.Yu., Patrushev Y.V., Sidelnikov V.N., Buryak A.K. Analysis of light components in pyrolysis products by comprehensive two-dimensional gas chromatography with PLOT columns. *Talanta*. 2020; 209: 120448. <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2019.120448>

18. Weininger D., SMILES, a chemical language and information system. 1. Introduction to methodology and encoding rules. *J. Chem. Inf. Model.* 1988; 28(1): 31-36. <https://doi.org/10.1021/ci00057a005>

19. Kim S., Thiessen P.A., Bolton E.E., Chen J., Fu G., Gindulyte A., Han L., He J., He S., Shoemaker B.A., Wang J., Yu B., Zhang J., Bryant S.H. PubChem Substance and Compound databases. *Nucleic Acids Res.* 2016; 44(D1): D1202-D1213. <https://doi.org/10.1093/nar/gkv951>

20. Matyushin D. Pyridinium-based ionic liquids as gas chromatographic stationary phases: a data set for quantitative structure-retention relationships. Available at: <https://doi.org/10.6084/M9.FIGSHARE.16885009> (accessed 03 Juny 2022).

Информация об авторах / Information about the authors

А.Ю. Шолохова – с.н.с. лаборатории физико-химических основ хроматографии и хромато-масс-спектрометрии, Институт физической химии и электрохимии имени А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия

С.А. Боровикова – н.с. лаборатории физико-химических основ хроматографии и хромато-масс-спектрометрии, Институт физической химии и электрохимии имени А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия

Д.Д. Матюшин – н.с. лаборатории физико-химических основ хроматографии и хромато-масс-спектрометрии, Институт физической химии и электрохимии имени А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия

А.К. Буряк – заведующий лабораторией физико-химических основ хроматографии и хромато-масс-спектрометрии, проф., д.х.н., Институт физической химии и электрохимии имени А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия

A.Yu. Sholokhova – researcher, laboratory of physicochemical principles of chromatography and chromatography – mass spectrometry; Institute of Physical chemistry and electrochemistry, Moscow, Russian Federation, e-mail: shonastya@yandex.ru

S.A. Borovikova – researcher, laboratory of physicochemical principles of chromatography and chromatography – mass spectrometry; Institute of Physical chemistry and electrochemistry, Moscow, Russian Federation, e-mail: borovikova7@mail.ru

D.D. Matyushin – researcher, laboratory of physicochemical principles of chromatography and chromatography – mass spectrometry; Institute of Physical chemistry and electrochemistry, Moscow, Russian Federation, e-mail: dm.matiushin@mail.ru

A.K. Buryak – prof., grand PhD (chemistry), laboratory of physicochemical principles of chromatography and chromatography – mass spectrometry; Institute of Physical chemistry and electrochemistry, Moscow, Russian Federation, e-mail: akburyak@mail.ru

Статья поступила в редакцию 07.06.2022; одобрена после рецензирования 28.06.2022; принята к публикации 04.07.2022.

The article was submitted 07.06.2022; approved after reviewing 28.06.2022; accepted for publication 04.07.2022.