

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА

РХТУ.Р.13 федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева» по диссертации на соискание ученой степени кандидата наук

аттестационное дело № 34/25
решение диссертационного совета
от 5 декабря 2025 года, протокол № 1

О присуждении ученой степени кандидата химических наук Александровой Дарье Алексеевне, представившей диссертационную работу на тему «Спектрометрия ионной подвижности азотсодержащих гетероциклических соединений и аварийно химически опасных веществ» по научной специальности 1.4.2. Аналитическая химия.

Диссертация принята к защите «16» октября 2025 г., протокол № 7, Аттестационной комиссией федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева» (РХТУ им. Д.И. Менделеева).

Состав диссертационного совета РХТУ.Р.13 утвержден в количестве 14 человек приказом ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева от «23» октября 2025 года № 205 ОД.

Соискатель Александрова Дарья Алексеевна, 1996 года рождения, в 2017 году окончила бакалавриат федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», диплом бакалавра серия 107718 номер 0785149.

В 2019 году окончила магистратуру федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», диплом магистра с отличием серия 107718 номер 1137721.

В 2023 году окончила аспирантуру федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», свидетельство об окончании аспирантуры серия 107724 номер 0000001.

Соискатель работает младшим научным сотрудником лаборатории «Технические системы для химической безопасности федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева».

Диссертация выполнена на кафедре экспертизы в допинг- и наркоконтроле федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева».

Научный руководитель – доцент, кандидат химических наук Баберкина Елена Петровна, доцент кафедры экспертизы в допинг- и наркоконтроле федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева».

Официальные оппоненты:

доцент, доктор химических наук Гущин Андрей Андреевич, профессор кафедры «Промышленная экология» федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Ивановский государственный химико-технологический университет»;

доктор физико-математических наук Сысоев Алексей Александрович, профессор кафедры «Молекулярная физика» (№10) института лазерных и плазменных технологий федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего

образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ».

Ведущая организация – Федеральное государственное бюджетное учреждение «Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт».

Основные положения и выводы диссертационного исследования в полной мере изложены в 27 научных работах, опубликованных соискателем, в том числе в 8 публикациях в изданиях, индексируемых в международных базах данных Scopus, Chemical Abstracts, Springer. Общий объем публикаций составляет 76 страниц. В нескольких публикациях диссертант является первым автором с указанием основного вклада в экспериментальную работу. Все публикации выполнены в соавторстве, личный вклад соискателя (от 60 до 90 %) состоит в анализе литературы, получении и анализе экспериментальных данных, обработке результатов, непосредственном участии в написании статей. Получено 1 свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ. Соискателем опубликовано 10 работ в материалах международных конференций. Монографий, депонированных рукописей не имеет. В диссертации отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем работах.

Наиболее значимые работы по теме диссертации:

Публикации в изданиях, индексируемых в международных базах данных:

1. Александрова Д.А. Спектрометрия ионной подвижности имидазола и возможности его определения / Д.А. Александрова, Т.Б. Меламед, Е.П. Баберкина [и др.] // Журнал аналитической химии. – 2021. – Т. 76, № 11. – С. 989-996. – DOI: 10.31857/S0044450221110025. (Scopus, Chemical Abstracts)

2. Александрова Д.А. Спектрометрия ионной подвижности N-метилимидазола и возможности его определения / Д.А. Александрова, Т.Б. Меламед, Е.П. Баберкина [и др.] // Тонкие химические технологии. – 2021. – Т. 16, № 6. – С.512-525. – DOI:10.32362/2410-6593-2021-16-6-512-525. (Scopus, Chemical Abstracts)

3. Александрова Д.А. Анализ спектров ионной подвижности хлорацетофенона, трис(2-хлорэтил)амин и метилмеркаптана / Д.А. Александрова, Т.Б. Меламед, Е.П. Баберкина [и др.] // Тонкие химические технологии. – 2024. – Т. 19, № 5. – С. 462-478. – DOI:10.32362/2410-6593-2024-19-5-462-478. (Scopus, Chemical Abstracts)

4. Александрова Д.А. Обнаружение аварийно химически опасных веществ методом спектрометрии ионной подвижности / Д.А. Александрова, Е.П. Баберкина, Р.В. Якушин [и др.] // Доклады Российской академии наук. Химия, науки о материалах. – 2024. – Т. 517, №1. – С. 39-48. – DOI: 10.31857/S2686953524040052. (Scopus)

5. Kapustin R. Molecular Interactions and Structural Transformations in Water Complexes with Azoles in Solid Films: IR and DFT Study/ R. Kapustin, I. Grinvald, D. Aleksandrova [et al.] // ChemistrySelect. – 2024. – Vol. 9, No. 42. – e202403714. – DOI: 10.1002/slct.202403714. (Scopus)

6. Александрова Д.А. Исследование следовых количеств гетероциклических соединений азота на ионно-дрейфовом детекторе «Кербер» / Д.А. Александрова, Е.П. Баберкина, С.С. Гришин [и др.] // Датчики и системы. – 2023. – № 3(268). – С. 70-74. – DOI: 10.25728/datsys.2023.3.14. (Springer)

7. Курбанова Д.М. Исследование следовых количеств предельных одноатомных спиртов методом спектрометрии ионной подвижности / Д.М. Курбанова, Е.П. Баберкина, Д.А. Александрова [и др.] // Датчики и системы. – 2023. – № 3(268). – С. 64-69. – DOI: 10.25728/datsys.2023.3.13. (Springer)

8. Александрова Д.А. Система измерения концентрации углеводородных газов на основе кондуктометрических датчиков / Д.А. Александрова, Н.В. Матвеев, В.В. Беляков, Л.В. Несмачная // Датчики и системы. – 2023. – № 3(268). – С. 36-40. – DOI: 10.25728/datsys.2023.3.8. (Springer)

Публичные доклады на всероссийский и международных научных мероприятиях:

1. Grishin S.S. The influence of chemical structure of nitrogen-containing heterocyclic compounds on the character of ion mobility spectra / S.S. Grishin, K.I. Negru, E.P. Baberkina, D.A. Aleksandrova [et al.] // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering, Moscow, June 01 – 02, 2017. Vol. 498. – Moscow: Institute of Physics Publishing, 2019. – P. 012036. – DOI: 10.1088/1757-899X/498/1/012036.

2. Александрова Д.А. Исследование спектров ионной подвижности азотсодержащих гетероциклов на ионно-дрейфовом детекторе «Кербер» / Д.А. Александрова, Е.П. Баберкина, С.С. Гришин [и др.] // XXII Всероссийская конференция молодых учёных-химиков (с международным участием) (Нижний Новгород, 23 – 25 апреля 2019 г.): тезисы докладов. Нижний Новгород: Изд-во ННГУ им. Н.И. Лобачевского, 2019. – 577 с. – С. 277.

3. Александрова Д.А. Исследование спектров ионной подвижности ароматических азотсодержащих гетероциклических соединений на ионно-дрейфовом детекторе «Кербер» / Д.А. Александрова, Е.П. Баберкина, Е.А. Дубкина [и др.] // Актуальные аспекты химической технологии биологически-активных веществ: сб. научных трудов. Вып. 190 / под общ. ред. А. Е. Коваленко. М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2020. – 248 с. – С. 34-35.

4. Меламед Т.Б. Исследование процессов ионизации производных имидазола методом спектрометрии ионной подвижности / Т.Б. Меламед, Е.П. Баберкина, Д.А. Александрова [и др.] // Химия и технология биологически активных веществ для 22 медицины и фармации: тезисы докладов I Школы молодых ученых – М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2021. – 116 с. – С. 105.

5. Меламед Т.Б. Спектрометрия ионной подвижности азотсодержащих гетероциклических соединений / Т.Б. Меламед, Д.А. Александрова, Е.П. Баберкина [и др.] // Химия и технология биологически активных веществ для медицины и фармации: Тезисы докладов II Школы молодых ученых, Москва, 05 – 07 апреля 2022 года. – Москва: Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева, 2022. – С. 108.

6. Александрова Д.А. Спектрометрия ионной подвижности АХОВ и определение возможности их детектирования в воздушной среде / Д.А. Александрова, Т.Б. Меламед, Е.П. Баберкина [и др.] // Химия и технология биологически активных веществ для медицины и фармации: Тезисы докладов III Школы молодых ученых, Москва, 15 – 19 мая 2023 года. – Москва: Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, 2023. – С. 107.

7. Александрова Д.А. Исследование хлорсодержащих аварийно химически опасных веществ методом спектрометрии ионной подвижности / Д.А. Александрова, Т.Б. Меламед, Е.П. Баберкина, Р.В. Якушин // Техничко-криминалистическое обеспечение раскрытия и расследования преступлений: Сборник научных трудов Всероссийской научно-практической конференции, проводимой в рамках деловой программы Международной выставки «Интерполитех-2024», Москва, 20 ноября 2024 года. – Москва: Московский университет МВД РФ им. В.Я. Кикотя, 2024. – С. 23-25.

Патенты, свидетельства:

1. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2025617813 Российская Федерация. KerberImporter : заявл. 20.03.2025 : опубл. 28.03.2025 / Д.А. Александрова, Е.П. Баберкина, Д.И. Зыкова, Т.Б. Меламед.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы:

1. **Отзыв официального оппонента**, доктора химических наук, доцента, проректора по науке и инновациям федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Ивановский государственный химико-технологический университет» **Гущина Андрея Андреевича**. Отзыв **положительный**. Имеются замечания:

1) С какой целью была разработана методика регистрации, математической обработки спектров, и определения характеристических значений ионной подвижности при работе ИДД «Кербер-Т» и ГАС «Сегмент», если для этих проборов есть свое программное обеспечение?

Отметим, что требования к программному обеспечению для средств измерений строго регламентируются нормативными документами и направлены на обеспечение единства измерений, защиту программного обеспечения и измерительной информации от изменений, идентификацию программного обеспечения и оценку влияния на метрологические характеристики оборудования.

2) Так как ионизация происходит в среде атмосферного воздуха, то примеси (не основные компоненты), присутствующие в нем, могут влиять на процесс деструкции исследуемых сложных органических соединений конечный результат измерений. Как вариативность состава воздуха учитывается в случае проведения измерений не в лабораторных условиях, когда наблюдается относительно постоянный состав газовой фазы, а в реальных условиях?

3) При исследованиях имидазола и N-метиимидазола в спектрах ионной подвижности наблюдается сигнал в области $2,1 \text{ см}^2/(\text{В}\cdot\text{с})$. Как это скажется на процедуру проведения измерений, в случае если оба соединения будут в анализируемой пробе?

4) Автором работы не указан нижний предел обнаружения для акрилонитрила.

5) В диссертационной работе на стр. 98 указано, что для хлорсодержащих соединений, сигнал в области отрицательной ионизации (ионная подвижность для хлорацетона - $K_0 = 2,699 \text{ см}^2/(\text{В}\cdot\text{с})$) сильно зависит от внешних факторов: температуры, влажности и атмосферного давления. Каким образом это было установлено? И почему приведены рекомендации для всех хлорсодержащих соединений, если исследования проводились лишь с хлорацетоном?

В заключении указано, что диссертационная работа Александровой Дарьи Алексеевны «Спектрометрия ионной подвижности азотсодержащих гетероциклических соединений и аварийно химически опасных веществ» является завершенной научно-квалификационной работой, в которой изложены научно обоснованные решения, имеющие существенное значение в области современной аналитической химии, в частности совершенствования методологических подходов для спектрометрии ионной подвижности, а также расширению базы детектируемых соединений для спектрометров ионной подвижности.

С учетом отмеченной актуальности, научной новизны, теоретической и практической значимости диссертация Александровой Дарьи Алексеевны является выполненной на высоком уровне работой и полностью отвечает требованиям Положения о порядке присуждения ученых степеней в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», утвержденного приказом и.о. ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева от 14.09.2023 г. № 103 ОД, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.2 Аналитическая химия.

2. **Отзыв официального оппонента**, доктора физико-математических наук, профессора кафедры «Молекулярная физика» (№10) института лазерных и плазменных технологий федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ» **Сысоева Алексея Александровича**. Отзыв положительный. Имеются замечания:

1) В тексте диссертации встречаются не устоявшиеся и жаргонные выражения, например, «времяпролетная спектрометрия ионной подвижности» вместо «дрейфовая спектрометрия ионной подвижности», «дизайнерские наркотики» вместо «психоактивные вещества с видоизмененной химической формулой».

2) Терминологически некорректно утверждение об определении характерных значений ионной подвижности исследуемых соединений, в спектрометрии ионной

подвижности мы получаем информацию о значениях подвижности ионов, формируемых исследуемыми соединениями, одно соединение может формировать несколько отличающихся по подвижности ионов (например мономер и димер, могут формироваться мономеры с различными присоединенными заряженными функциональными группами).

3) В предложении «В прибор, разработанный Институтом аналитического приборостроения РАН, была интегрирована сетка, обеспечивающая дополнительную селекцию ионов [72-77]» ссылки не имеют отношения к работам Института аналитического приборостроения РАН.

4) Утверждение, «метод времяпролетной спектрометрии – единственный метод СИП, который обеспечивает прямое измерение поперечного сечения столкновений на основе подвижности иона» не вполне корректно. Улавливающая спектрометрия ионной подвижности, где разделение ионов осуществляется на основе достижения баланса между потоком ионов и противоположно направленной по отношению к потоку осевой компоненте электрического поля, также делает возможным определение транспортного сечения столкновений.

5) Фраза «Второй затвор расположен перед детектором для экранирования от индуктивных эффектов, возникающих вследствие взаимодействия входящего ионного облака с детекторной системой.» (стр. 16 последнее предложение) некорректна, для решения указанной проблемы устанавливается апертурная сетка, о чем совершенно справедливо говорится в следующем абзаце. Второй ионный затвор как правило используют при соединении спектрометра ионной подвижности с медленными сканирующими анализаторами, например, квадрупольным масс-спектрометром.

6) Допустимость указания точности определения приведенной подвижности в третьем знаке после запятой, полученной в результате постановки физического эксперимента (пп.3.4, 3.5, 3.6, 3.7, 3.8), без приведения соответствующей погрешности измерений вызывает сомнения.

7) В тексте диссертации встречаются опечатки в форме отсутствующих пробелов, лишние запятые, например, последний абзац стр. 10, неправильное указание терминов, например, «методов масс-спектрометрии (IMS)» (первая строка стр. 11 – из контекста понятно, что речь идет о спектрометрии ионной подвижности), «отправления» вместо «отравления» (стр. 46 абзац 1). Также встречаются несогласованные предложения, например, второе предложение 1 абзаца на стр.11. Встречаются стилистически некорректные предложения, например, предложение 1 абзаца 3 стр. 14.

Приведенные замечания носят рекомендательный характер и на значимость диссертационной работы в целом влияния не оказывают.

В заключении указано, что диссертация Александровой Дарьи Алексеевны представляет собой комплексное исследование, в котором объединены экспериментальное исследование, термодинамическое обоснование процессов ионизации и разработка методик. Работа раскрывает механизм формирования ионов под действием коронного разряда при атмосферном давлении. Итоговые результаты дают основу для дальнейшей оптимизации процесса детектирования азолов и аварийно химически опасных веществ.

Диссертационная работа Александровой Дарьи Алексеевны «Спектрометрия ионной подвижности азотсодержащих гетероциклических соединений и аварийно химически опасных веществ» соответствует требованиям Положения о порядке присуждения ученых степеней в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», утвержденного приказом и.о. ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева от 14.09.2023 г. № 103 ОД», а автор диссертации, Александрова Дарья Алексеевна, заслуживает присуждения искомой учёной степени кандидата химических наук по научной специальности: 1.4.2 – Аналитическая химия.

3. Отзыв ведущей организации – Федерального государственного бюджетного учреждения «Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт». Отзыв положительный. Имеются замечания:

1) В ходе выполнения работы было проведено изучение спектров ионной подвижности азотсодержащих гетероциклических соединений. Для оценки перспектив и возможностей применения интервала ионной подвижности азотсодержащих гетероциклических соединений для идентификации наркотических веществ с измененной химической формулой, которые являются аналогами известных наркотических веществ, важным представляется расширение номенклатуры исследуемого ряда соединений.

2) Для пробоподготовки азотсодержащих гетероциклических соединений использовали органические растворители: ацетонитрил и диэтиловый эфир. Чем обусловлен выбор именно этих растворителей?

3) В рамках проведенного исследования обсуждение возможных механизмов реакции базировалось на оценке и сравнении расчетных значений энтальпий исследуемых соединений с реактант ионами. В работе приведены расчетные энтальпии для ионов мономеров, димеров и тримеров различного строения. В частности, приведены расчетные значения для тримерных форм имидазола (табл. 8). Как объясняется отсутствие сигнала тримерной формы на спектре ионной подвижности имидазола несмотря на самую низкую энтальпию образования иона?

4) На стр. 47, главы 2 диссертации автор, описывая методику измерений ионной подвижности, пишет, что «в качестве дрейфового газа использовался окружающий воздух», но не приводит его аналитические характеристики о содержании примесей, которые могли бы повлиять на результаты измерений ионной подвижности в выбранном диапазоне концентраций. При обработке результатов измерений применяется программа, которая позволяет учесть фоновые значения сигнала дрейфового газа (стр. 52), но никак не учитывается возможное взаимодействие примесей, содержащихся в воздухе, например, таких как CO_2 , CO , H_2O с анализируемым веществом и влияние этого взаимодействия на динамику образования ионов.

5) Достоверность полученных данных подтверждена проведением экспериментов на всех исследованных образцах аварийно химически опасных соединений с использованием современных спектрометров ионной подвижности ГАС «Сегмент» и ИДД «Кербер-Т». Однако из текста работы и приложенных таблиц не ясно, проводил ли автор работы эксперименты повторно на однотипном оборудовании для проверки воспроизводимости результатов структурных исследований.

В заключении указано, что по актуальности избранной темы, научной новизне, степени обоснованности, достоверности полученных результатов, выводов и рекомендаций, значимости для профильной отрасли промышленности, апробации основных результатов в научных изданиях диссертационное исследование Александровой Дарьи Алексеевны на тему «Спектрометрия ионной подвижности азотсодержащих гетероциклических соединений и аварийно химически опасных веществ» выполнено на высоком уровне, соответствует требованиям Положения о порядке присуждения ученых степеней в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», утвержденного приказом и.о. ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева от 14.09.2023 г. № 103 ОД», а ее автор, Александрова Дарья Алексеевна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.2. Аналитическая химия.

Отзыв составила кандидат химических наук, ученый секретарь Курчатовского комплекса физико-химических технологий Архипова Анна Александровна.

Отзыв рассмотрен и одобрен на заседании Курчатовского комплекса физико-химических технологий НИЦ «Курчатовский институт», протокол от 20.10.2025 № 4 (в обсуждении приняли участие 12 специалистов, в том числе 6 кандидатов и 3 доктора наук).

Отзыв подписан кандидатом химических наук, ученым секретарем Курчатовского комплекса физико-химических технологий Архиповой Анной Александровной, кандидатом химических наук, председателем заседания научно-технического семинара Курчатовского комплекса физико-химических технологий Егоровым Антоном Сергеевичем и доктором технических наук, доцентом, секретарем заседания научно-технического семинара Курчатовского комплекса физико-химических технологий Макаренковым Дмитрием Анатольевичем, заверен заместителем директора-главным Ученым секретарем НИЦ «Курчатовский институт» Алексеевой Ольгой Анатольевной и утвержден директором Центра доктором физико-математических наук, членом-корреспондентом РАН Дьяковой Юлией Алексеевной.

4. Отзыв на автореферат диссертации от кандидата технических наук, ведущего научного сотрудника отделения химико-технологических исследований ФГУП "Научно-исследовательский технологический институт им. А.П. Александрова" **Мацаева Владимира Тимофеевича**. Отзыв положительный. Имеются замечания:

1) Из замечаний можно отметить отсутствие объяснений наличие уширенного пика пиридина на рисунке 3.

2) Несколько сбивает с толку данные для «имидазола массой $m=7 \cdot 10^{-10}$ г», хотя ранее во второй главе «предложено использование насыщенных паров аналита с их последующим разбавлением в газовой фазе атмосферным воздухом до заданных концентраций».

3) Также в тексте автореферата говорится о наличии димеров в 1,2-диметилимидазоле и N-метилимидазоле, но не приводятся их спектры.

5. Отзыв на автореферат диссертации от кандидата химических наук, доцента кафедры аналитической химии химического факультета ФГАОУ ВО «СКФУ» **Червонной Татьяны Артемовны**. Отзыв положительный. Имеются замечания:

1) Любая новая методика количественного анализа должна пройти весьма строгую процедуру валидации для дальнейшего применения в специализированных центрах, лабораториях и т.д. В связи с этим, определены ли в условиях анализа заявленных реальных образцов для разработанных практических применений необходимые метрологические характеристики: повторяемость, воспроизводимость, точность. Весьма уместно применение метода внутреннего стандарта для количественного определения аналитов. Чем обусловлено предпочтение иного способа оценки количественного содержания?

2) Из литературных данных известно, что на воспроизводимость сигналов достаточно сильно влияют различные неконтролируемые параметры работы прибора, в большей степени проявляющиеся при использовании самосборных конструкций. Также реальные объекты характеризуются значительными матричными влияниями на результаты анализа. Как учитывается влияние этих параметров?

3) Рассматривали ли Вы возможность создания гибридной системы, для решения задач, где одной подвижности недостаточно для достоверной идентификации всех компонентов сложной смеси?

6. Отзыв на автореферат диссертации от кандидата химических наук, доцента, доцента кафедры технико-криминалистического обеспечения учебно-научного комплекса судебной экспертизы Московского университета МВД России имени В.Я. Кикотя **Виноградовой Натальи Ивановны**. Отзыв положительный. Имеются замечания:

1) Повторение в соседних предложениях форм одного слова «позволит» в актуальности на стр. 2, снижается художественная оформленность текста. Отсутствует обозначение энтальпии перед значениями, в то время как для остальных величин указаны их символичные обозначения.

7. Отзыв на автореферат диссертации от кандидата химических наук, эксперта I категории экспертно-криминалистического центра Министерства внутренних дел по Республике Татарстан **Фицева Игоря Михайловича**. Отзыв положительный. Имеются замечания:

1) Проводилось ли сравнение полученных аналитических характеристик, а именно динамического диапазона определяемых концентраций и пределов обнаружения детектируемых соединений с такими способами определения как ГХ-МС, ВЭЖХ, ВЭЖХ-МС(МС/МС)? Если да, то в чем преимущество предложенного способа?

2) Каков «диапазон» вероятности ложного детектирования (т.е. надежность определения) в приведенных условия схожих по химическому строению соединений только с использованием коэффициентов ионной подвижности? Чем можно минимизировать риск ложноположительного детектирования?

3) Аттестован ли автором предложенный способ определения азотсодержащих гетероциклических соединений и аварийно химически опасных веществ методом спектрометрии ионной подвижности?

8. Отзыв на автореферат диссертации от доктора химических наук, профессора кафедры Технология электрохимических производств и химия органических веществ федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева» **Курского Юрия Алексеевича**. Отзыв положительный. Имеются замечания:

1) Хорошо было бы уточнить, какие именно сигналы обнаружены для хлорсодержащих соединений в области положительной организации.

2) Было бы полезным отразить в работе причины, при которых разные аварийно химически опасные вещества дают разный порядок величин пределов обнаружения.

9. Отзыв на автореферат диссертации от старшего научного сотрудника **Гладырева Вадима Вячеславовича**, кандидата технических наук, заместителя начальника отдела **Мисюрин Юрия Александровича** федерального государственного унитарного предприятия «Центральный научно-исследовательский институт химии и механики». Отзыв положительный.

В порядке замечания следует отметить, что в рамках рецензируемой работы не проводилось исследование каких-либо производных гетероциклических соединений, помимо базовых представителей классов. Исследование подобных веществ позволило бы значительно расширить экспериментальную и теоретическую базу диссертационного исследования.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается их высокой компетентностью, которая подтверждена значительным количеством публикаций в области спектрометрии ионной подвижности и исследования реакций в газовой фазе и позволяет оценить научную и практическую значимость диссертации.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

получены подробные исследования ионизации коронным разрядом при атмосферном давлении азотсодержащих гетероциклических соединений и аварийно химически опасных веществ;

выполнены расчеты энтальпии реакций как образующихся ионов, так и ионизирующих агентов, проведены сравнения полученных данных с характером спектров ионной подвижности;

охарактеризованы методические подходы к анализу спектров ионной подвижности исследуемых соединений, выявлению характерных для всех веществ величин ионной подвижности;

установлен унифицированный подход к подготовке образцов в зависимости от физико-химических свойств исследуемых соединений и настройке детектирующих систем, предоставленный метод пробоотбора является гибким и адаптируемым под характеристики веществ;

установлена зависимость характеристик спектров ионной подвижности от концентрации веществ в газовой фазе, оценена устойчивость мономеров и димеров при исследовании соединений в разных концентрациях;

показана возможность применения анализа площадей пиков для установления соответствия между наблюдаемым сигналом в спектре ионной подвижности и структурой иона и установлено равновесие мономерно-димерных форм при изменении концентрации;

показан выбор сигналов, ориентированных на использование в базе данных спектрометров ионной подвижности ИДД «Кербер-Т» и ГАС «Сегмент», обеспечивающих расширение номенклатуры детектируемых азотсодержащих гетероциклических соединений и аварийно химически опасных веществ.

Теоретическая и практическая значимость исследования обоснована тем, что:

разработаны методы отбора проб в зависимости от физико-химических свойств исследуемых соединений, которые существенно повышают эффективность обнаружения веществ с помощью портативных спектрометров ионной подвижности, что подтверждено актами практического использования результатов диссертационной работы ООО «Модус» и ФГБОУ ВО РХТУ им. Д.И. Менделеева;

разработаны методы детектирования и анализа спектров ионной подвижности аварийно химически опасных веществ;

получены значения ионной подвижности азотсодержащих гетероциклических соединений и аварийно химически опасных веществ и внесены в базу данных спектрометра ионной подвижности «ИДД КЕРБЕР-Т» (ИДД «Кербер-Т») и газосигнализатора автоматического стационарного «Сегмент» (ГАС «Сегмент»);

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

обоснованность и достоверность полученных результатов работы обеспечивается большим объемом экспериментальных данных, использованием современных методик эксперимента и обработки данных;

обоснованность и достоверность научных положений, выводов и рекомендаций подтверждена их внутренней непротиворечивостью, а также воспроизводимостью результатов экспериментальных исследований, согласованностью спектральных данных с расчётными моделями;

использованы современные физико-химические методы анализа, такие как спектрометрия ионной подвижности, ^1H , ^{13}C ЯМР спектроскопия, ГХ-МС.

Личный вклад автора был определяющим на всех этапах выполнения работы, включая постановку цели и задач, планирование и проведение теоретических и экспериментальных исследований, подготовку рукописей к публикации и текста диссертации, обобщение результатов и формулировку выводов.

Диссертационный совет пришёл к выводу о том, что диссертация Александровой Дарьи Алексеевны представляет собой завершённую научно-квалификационную работу, которая направлена на разработку методологии определения в спектрах ионной подвижности азотсодержащих гетероциклических соединений и аварийно химически опасных веществ, что имеет существенное значение в области современной аналитической химии.

По своему содержанию диссертация отвечает паспорту научной специальности 1.4.2. Аналитическая химия в части пунктов: 2. Методы химического анализа (химические, физико-химические, атомная и молекулярная спектроскопия, хроматография, рентгеновская спектроскопия, масс-спектрометрия, ядерно-физические методы и др.); 3. Аналитические приборы; 4. Методическое обеспечение химического анализа; 5. Математическое обеспечение химического анализа; 6. Метрологическое обеспечение химического анализа.

По актуальности, научной новизне, теоретической и практической значимости диссертация Александровой Дарьи Алексеевны «Спектрометрия ионной подвижности азотсодержащих гетероциклических соединений и аварийно химически опасных веществ» соответствует требованиям, установленным Положением о порядке присуждения ученых степеней в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», утвержденным приказом и.о. ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева от «14» сентября 2023 года № 103 ОД.

На заседании диссертационного совета РХТУ.Р.13 РХТУ им. Д.И. Менделеева «05» декабря 2025 года принято решение о присуждении Александровой Дарье Алексеевне ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.2. Аналитическая химия.

Присутствовали на заседании – 14 (четырнадцать) членов диссертационного совета, в том числе докторов наук по научной специальности, отрасли науки рассматриваемой диссертации – 13 (тринадцать), в том числе в режиме видеоконференции – 1 (один).

При проведении голосования члены диссертационного совета по вопросу присуждения ученой степени проголосовали:

Результаты тайного голосования:

«за» – 13 (тринадцать),

«против» – нет,

«воздержались» – нет

Проголосовал 1 (один) член диссертационного совета, присутствовавший на заседании в режиме видеоконференции:

«за» – 1 (один),

«против» – нет,

«воздержались» – нет.

Итоги голосования:

«за» – 14 (четырнадцать),

«против» – нет,

«воздержались» – нет.

Председатель диссертационного совета

д.х.н., проф. Кузнецов В.В.

Ученый секретарь диссертационного совета

к.х.н., доц. Соловьева И.Н.

Дата «05» декабря 2025 г.