



«УТВЕРЖДАЮ»

И.о. ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева
д.х.н., профессор, Е.В. Румянцев

06

2025 г.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Диссертация на тему: «Спектрометрия ионной подвижности азотсодержащих гетероциклических соединений и аварийно химически опасных веществ» по научной специальности 1.4.2. Аналитическая химия (химические науки) выполнена в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева» на кафедре экспертизы в допинг- и наркоконтроле.

В процессе подготовки диссертации Александрова Дарья Алексеевна, «03» января 1996 года рождения, была очным аспирантом кафедры экспертизы в допинг- и наркоконтроле федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева» с 1 сентября 2019 по 1 сентября 2023 года. С 12.05.2025 г. является младшим научным сотрудником лаборатории «Технические системы для химической безопасности» федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева».

Справка об обучении выдана в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева» в 2023 году.

Научный руководитель – кандидат химических наук по специальности 02.00.03 – Органическая химия, доцент, доцент кафедры экспертизы в допинг- и наркоконтроле федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева» Баберкина Елена Петровна.

По результатам рассмотрения диссертации на тему: «Спектрометрия ионной подвижности азотсодержащих гетероциклических соединений и аварийно химически опасных веществ» принято следующее заключение.

Актуальность темы диссертационной работы обусловлена тем, что результаты научной работы направлены на повышение антитеррорстической защищенности и обеспечение национальной безопасности в сфере контроля за

оборотом запрещенных веществ. Анализ связи «структура – характеристические сигналы функциональных групп» азотсодержащих гетероциклических соединений и аварийно химически опасных веществ методом спектрометрии ионной подвижности позволяет определять не только индивидуальные соединения, но и группы соединений, сходных по структуре.

Научная новизна заключается в следующем:

1. На основе характеристик спектров выявлены интервалы ионной подвижности моноциклических азотсодержащих соединений и ряда аварийно химически опасных веществ, позволяющие оценить наличие в структуре молекул сходных функциональных фрагментов. Для большинства выбранных соединений подобные данные до этой работы отсутствовали.

2. Впервые предложен метод интерпретации сигналов ионной подвижности на основе расчетов площадей пиков и изменения их интенсивности в процессе одного измерения. Это позволило оценить структуру ионов, образующихся в ионном источнике и дрейфовой камере спектрометра ионной подвижности при атмосферном давлении, и отнести их к мономерной и олигомерной формам.

3. Проведено сопоставление результатов анализа экспериментально полученных спектров ионной подвижности исследуемых групп соединений с теоретическими квантово-химическими расчетами энтальпий образования ионов.

Теоретическая и практическая значимость работы. 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».

Полученные характеристические значения ионной подвижности азотсодержащих гетероциклических соединений и аварийно химически опасных веществ внесены в базу данных спектрометра ионной подвижности «ИДД КЕРБЕР-Т» (ИДД «Кербер-Т») и газосигнализатора автоматического стационарного «Сегмент» (ГАС «Сегмент») отечественного производства, которые используются в МВД, ФСБ и ФТС России. Применение данного оборудования способствует импортозамещению сложного аналитического оборудования. Оценены пределы обнаружения и установлены рабочие диапазоны детектирования аварийно химически опасных веществ.

Разработанные методы детектирования и анализа спектров ионной подвижности аварийно химически опасных веществ использованы при проектировании комплекса неразрушающего экспресс-контроля почтовых отправлений «Сегмент-Пост» для выявления вложений потенциально опасных для жизни и здоровья получателя корреспонденции в рамках программы стратегического академического лидерства «Приоритет-2030».

Экспериментальные результаты диссертационной работы используются при проведении лабораторного практикума по учебному курсу «Физико-химические методы анализа биологически активных веществ» для студентов федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева».

Работа характеризуется логичностью построения, аргументированностью основных научных положений и выводов, а также четкостью изложения.

Основные положения диссертации получили полное отражение в 8 статьях в журналах, индексируемых в международных базах данных Scopus, Chemical Abstracts и Springer. Получено 1 свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ.

Результаты диссертации представлены на международных и всероссийских конференциях, в том числе на: XXII Всероссийской конференции молодых ученых-химиков (с международным участием) (г. Нижний Новгород, 2019 г.); научно-практической конференции «Актуальные аспекты химической технологии биологически активных веществ» (г. Москва, 2020 г.); I, II и III Школах молодых ученых «Химия и технология биологически активных веществ для медицины и фармации» (г. Москва, 2021, 2022 и 2023 гг.); XXXVII Fortov International Conference on Equations of State for Matter (Elbrus, 2022); XXII Менделеевском съезде по общей и прикладной химии (Федеральная территория «Сириус», 2024 г.); Всероссийской научно-практической конференции, проводимой в рамках деловой программы Международной выставки «Интерполитех-2024» (г. Москва, 2024 г.).

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 всероссийских и международных научных мероприятиях (конференциях, съездах, симпозиумах, конгрессах):

1. Александрова Д.А. Исследование спектров ионной подвижности азотсодержащих гетероциклов на ионно-дрейфовом детекторе «Кербер» / Д.А. Александрова, Е.П. Баберкина, С.С. Гришин, А.А. Гущина, Д.М. Курбанова, В.В. Трефилова, А.Е. Коваленко, Ю.Р. Шалтаева, В.В. Беляков // 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.

2. Александрова Д.А. Исследование следовых количеств спиртов на ионно-дрейфовом детекторе «Кербер» / Д.М. Курбанова, Е.П. Баберкина, С.С. Гришин, А.А. Гущина, Д.А. Александрова, Ю.Р. Шалтаева, В.В. Беляков // 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. 308.

3. Aleksandrova D.A. 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.

4. Александрова Д.А. Исследование ароматических аминов методом спектрометрии ионной подвижности / **Д.А. Александрова**, А.В. Григорьева, Е.П. Баберкина, А.Е. Коваленко, В.В. Беляков, Ю.Р. Шалтаева // Химия и технология биологически активных веществ для медицины и фармации: тезисы докладов I Школы молодых ученых – М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2021. – 116 с. – С. 91.

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

6. Александрова Д.А. Исследование аммиака в качестве допанта на ИДД «КЕРБЕР» / Р.И. Минаев, Е.П. Баберкина, А.Е. Коваленко, **Д.А. Александрова**, Ю.Р. Шалтаева, В.В. Беляков // Химия и технология биологически активных веществ для медицины и фармации: тезисы докладов I Школы молодых ученых – М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2021. – 116 с. – С. 106.

7. Александрова Д.А. Исследование ионизации метилфурана методом спектрометрии ионной подвижности / Е.С. Осина, Е.П. Баберкина, А.Е. Коваленко, **Д.А. Александрова**, Ю.Р. Шалтаева, В.В. Беляков // Химия и технология биологически активных веществ для медицины и фармации: тезисы докладов I Школы молодых ученых – М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2021. – 116 с. – С. 109.

8. 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, А.Е. Коваленко, Ю.Р. Шалтаева, В.В. Беляков // 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.

9. Александрова Д.А. Исследование следовых количеств углеводородов ароматического ряда на ионно-дрейфовом детекторе «Кербер» / А.А. Гришина, **Д.А. Александрова**, Д.М. Курбанова, Е.П. Баберкина, С.С. Гришин, А.Е. Коваленко, Ю.Р. Шалтаева, В.В. Беляков // 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. 32-33.

10. Александрова Д.А. Исследование спектров ионной подвижности карбонильных соединений на ионно-дрейфовом детекторе «Кербер» / Е.А. Дубкина, **Д. А. Александрова**, Е.П. Баберкина, А.Е. Коваленко // 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. 36-37.

11. Александрова Д.А. Исследование спектров ионной подвижности индола и его производных / Р.И. Минаев, Е.П. Баберкина, А.Е. Коваленко, **Д.А. Александрова**, Ю.Р. Шалтаева, В.В. Беляков // 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. 30-31.

12. Александрова Д.А. 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.

13. Александрова Д.А. Спектрометрия ионной подвижности изомеров толуидина и определение возможности детектирования их из различных сред / Е.С. Осина, Л.А. Лузенина, **Д.А. Александрова** [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. 109.

14. 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.

15. Александрова Д.А. Спектрометрия ионной подвижности ацетофенона и его производных / А.А. Каплин, **Д.А. Александрова**, 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. 108.

16. Александрова Д.А. Спектрометрия ионной подвижности изомеров анизида и определение возможности их детектирования в воздушной среде / Е.С. Осина, Л.А. Лузенина, **Д.А. Александрова** [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. 109.

17. Меламед Т.Б. Спектрометрия ионной подвижности спиртов / Т.Б. Меламед, Д.А. Александрова, Е.П. Баберкина, Р.В. Якушин // XXII Менделеевский съезд по общей и прикладной химии, 7-12 октября, 2024, Федеральная территория «Сириус», Россия. Сборник тезисов докладов в 7 томах. Том 2. – М.: ООО «Буки Веди», 2024. – 528 с. – С. 432.

18. 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 // Техникo-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 Т.Б.

По тематике, методам исследования, предложенным новым научным положениям диссертация соответствует паспорту специальности научных работников 1.4.2. Аналитическая химия в части:

п. 2. Методы химического анализа (химические, физико-химические, атомная и молекулярная спектроскопия, хроматография, рентгеновская спектроскопия, масс-спектрометрия, ядерно-физические методы и др.);

п. 3. Аналитические приборы;

п. 4. Методическое обеспечение химического анализа;

п. 5. Математическое обеспечение химического анализа;

п. 6. Метрологическое обеспечение химического анализа.

Автореферат отражает основное содержание диссертации.

Диссертация Александровой Дарьи Алексеевны является завершенной научно-квалификационной работой, содержащей результаты, полученные на основании исследований, проведенных на высоком научном и техническом уровне с применением современных методов исследования. Научные положения, выводы и рекомендации, сформулированные автором, теоретически обоснованы и не вызывают сомнений. Представленные в работе результаты принадлежат Александровой Дарье Алексеевне; они оригинальны, достоверны и отличаются научной новизной и практической значимостью.

С учетом научной зрелости автора, актуальности, научной новизны и практической значимости работы, а также ее соответствия требованиям Положения о порядке присуждения ученых степеней в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», предъявляемым к подобным работам, диссертация на тему: «Спектрометрия ионной подвижности азотсодержащих гетероциклических соединений и аварийно химически опасных веществ» рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.2. Аналитическая химия.

Диссертация рассмотрена на расширенном заседании кафедры экспертизы в допинг- и наркоконтроле, состоявшемся «9» июня 2025 года, протокол № 9.

В обсуждении приняли участие: и.о. заведующего кафедрой экспертизы в допинг- и наркоконтроле, декан факультета химико-фармацевтических технологий и биомедицинских препаратов, к.т.н., доцент, Якушин Роман Владимирович; доцент кафедры экспертизы в допинг- и наркоконтроле, к.т.н., доцент, Коваленко Алексей Евгеньевич; доцент кафедры экспертизы в допинг- и наркоконтроле, к.х.н., доцент, Баберкина Елена Петровна; старший преподаватель кафедры экспертизы в допинг- и наркоконтроле, к.х.н., доцент, Завьялова Анна Александровна, доцент кафедры химии и технологии биомедицинских препаратов, старший научный сотрудник научно-образовательной лаборатории систем доставки лекарственных веществ, к.х.н., доцент, Ермоленко Юлия Валерьевна; доцент кафедры экспертизы в допинг- и наркоконтроле, д. фармацевт.н., доцент, Абизов Евгений Анатольевич.

Принимало участие в голосовании - 7 человек. Результаты голосования: «За» - 7 человек, «Против» - 0 человек, «Воздержались» - 0 человек, протокол № 9 от «9» июня 2025 г.

И.о. заведующего кафедрой
экспертизы в допинг- и наркоконтроле
к.т.н., доцент

Р.В. Якушин

Секретарь заседания
д. фармацевт. н., доцент

Е.А. Абизов