



«УТВЕРЖДАЮ»

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

09

2015 г.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Диссертация на тему: «Новые возможности метода масс-спектрометрии отрицательных ионов с резонансным захватом электронов для структурно-аналитических исследований органических соединений» 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 аналитической химии.

В процессе подготовки диссертации Терентьев Андрей Геннадьевич, «22» декабря 1978 года рождения, был заведующим лаборатории, доцентом кафедры аналитической химии федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева».

В 2010 году Терентьев Андрей Геннадьевич защитил диссертацию на соискание ученой степени кандидата химических наук на тему: «Специальная тема» по научной специальности 20.02.23 – «Поражающее действие специальных видов оружия, средства и способы защиты» в диссертационном совете, созданном на базе Военной академии радиационной, химической и биологической защиты и инженерных войск имени С.К.Тимошенко.

По результатам рассмотрения диссертации на тему: «Новые возможности метода масс-спектрометрии отрицательных ионов с резонансным захватом электронов для структурно-аналитических исследований органических соединений» принято следующее заключение.

Актуальность темы диссертационной работы обусловлена тем, что, несмотря на большие возможности современной масс-спектрометрии, базирующиеся на комплексном применении нескольких ее модификаций и широком разнообразии современного парка масс-спектрометрических приборов, ряд важных аналитических задач весьма трудно поддается решению в рамках этого инструментального метода, который во многих случаях является единственно применимым. Отсюда становится ясной необходимость существенного расширения аналитических возможностей масс-

спектрометрического метода, что можно осуществить путем более эффективного применения уже известных разновидностей масс-спектрометрии и связанной с этим разработкой новых или усовершенствованием существующих приборов.

Одной из таких разновидностей, широко известных в научных кругах физиков и химиков-аналитиков, но редко применяемых для решения практических задач, является метод масс-спектрометрии отрицательных ионов резонансного захвата электронов.

Научная новизна заключается в следующем:

1. Разработан способ регистрации двумерных масс-спектров ОИ, полученных резонансным присоединением электронов, на квадрупольных масс-спектрометрах, охватывающий все резонансные области исследуемых веществ, для получения новой аналитической информации о структуре соединений при проведении анализа сложных многокомпонентных смесей.

2. Представлено описание процессов фрагментации молекулярных отрицательных ионов, полученных на квадрупольном масс-спектрометре при резонансном захвате электронов низких энергий, следующих классов соединений: фосфатов, фосфонатов, пирофосфатов, тиодигликолей, хлорфенолов, нитротолуолов, нитроэфиров и отдельных соединений других классов (более 100 веществ). Установлены характерные ионы и оптимальная энергия захватываемых электронов для получения качественных и информативных масс-спектров.

3. Разработан алгоритм прогнозирования МС ОИ некоторых классов фосфорсодержащих органических соединений и показана его высокая эффективность: при сравнении экспериментального масс-спектра ОИ с базой данных рассчитанных масс-спектров по алгоритмам сравнения Identity и Similarity показатели прямого и обратного поиска находятся в пределах от 750 до 990 единиц, что доказывает работоспособность созданного алгоритма и высокую аутентичность созданной базы данных МС ОИ.

4. Сочетанием методов МС ЭИ ПИ и МС ОИ РЗЭ разработан способ идентификации: V-газов (наиболее токсичного класса боевых отравляющих веществ, относящихся к полулетучим органическим соединениям), реализованный на одном приборе – хроматомасс-спектрометрическом комплексе.

5. На основе комплементарного применения методов МС ОИ РЗЭ и МС ЭИ ПИ решена задача определения числа углеродных атомов в каждой О-алкильной цепи в молекулах полиэфиров фосфорных кислот: $(XP(O)(OR)(OR'))$, $P(O)(OR)(OR')(OR'')$, где $X = Cl, R, R', R''$ – алкильные радикалы, а также в молекулах тетраалкилпирофосфатов – проблема, не имеющая к настоящему

моменту общего решения даже при совместном использовании нескольких спектральных методов (ИК, ЯМР, МС ЭИ ПИ).

Теоретическая значимость работы состоит в том, что полученные в работе данные об образовании и фрагментации отрицательных ионов при резонансном захвате электронов могут быть полезны для развития теоретических представлений в области термохимии ионов в газовой фазе, химической физики, физической химии, квантовой химии, химической кинетики. На основе всестороннего анализа теоретических положений образования масс-спектров отрицательных ионов, полученных экспериментальных данных обоснована целесообразность использования данного метода в аналитических лабораториях для идентификации органических соединений. Показано, что совместное использование методов МС ЭИ ПИ и МС ОИ РЗЭ значительно повышает эффективность и достоверность идентификации.

Практическая значимость работы заключается:

1. Разработан и реализован на серийном масс-спектрометре способ резонансного захвата электронов веществ, позволяющий проводить эффективную генерацию отрицательных ионов в режиме МС ОИ РЗЭ с охватом всех резонансных областей электронного захвата исследуемого соединения. На основе этого способа разработано устройство питания катода масс-спектрометра переменным током для периодической вариации энергии эмитируемых электронов, которое дает возможность записи масс-спектров ОИ за короткое время одновременно во всех резонансных областях и получения таким образом максимальной аналитической информации. Использование устройства может быть положено в основу общей методики обнаружения и серийного анализа органических соединений.

2. Показано, что аналитическая информация, получаемая методом МС ОИ РЗЭ, кардинально отличается от данных, полученных другими аналитическими масс-спектральными методами, и при комплексном их использовании расширяет возможности и повышает надежность идентификации.

Экспериментально подтверждены возможности/преимущества метода МС ОИ РЗЭ, которые заключаются:

- в получении дополнительной аналитической информации о структуре соединений, включая наличие функциональных групп, атомов галогенов, а также их расположения в структуре соединения;

- в возможности различения изомеров органических соединений;

- в регистрации и установлении пика молекулярных (депротонированных молекулярных) ионов, различных классов органических соединений и отдельных веществ, например: О-алкилалкилфторфосфонатов, О-алкил-S-2-

(N,N-диалкиламино)этилалкилтиофосфонатов, хлорацетофенона, дибензоксазипина и др.;

– в повышенной, по сравнению с «классической» масс-спектрометрией электронной ионизации с регистрацией положительных ионов, чувствительности к электроноакцепторным соединениям.

3. Создана база данных экспериментальных масс-спектров отрицательных ионов (БД МС ОИ) органических веществ, содержащая более 100 записей.

4. С помощью разработанного с участием автора алгоритма прогнозирования МС ОИ соединений из четырех классов (гомологов зарина, V-газов, а также хлорфосфатов) создана база данных масс-спектров ОИ без предварительного синтеза этих веществ.

5. Разработан способ идентификации органических соединений при совместном применении данных газовой хроматографии, МС ЭИ ПИ и МС ОИ РЗЭ.

6. Создан способ идентификации V-газов, позволяющий устанавливать в молекулах данных соединений количество атомов углерода О-алкильного радикала и алкильного радикала, связанного с атомом фосфора. Ранее это было возможно с применением метода масс-спектрометрии с химической ионизацией, но не для всей гомологической группы V-газов.

7. Разработан способ определения числа углеродных атомов в каждой О-алкильной цепи в молекулах полиэфиров фосфорных кислот: $(XP(O)(OR)(OR'))$, $P(O)(OR)(OR')(OR'')$, где $X = Cl$; R , R' , R'' – алкильные радикалы; а также в молекулах тетраалкилпирофосфатов.

8. На основании проведенных исследований разработано, создано и апробировано устройство по сохранению работоспособности источника электронов (катода) масс-спектрометра, позволяющее значительно продлить ресурс катода при работе в режиме генерации и регистрации отрицательных ионов, полученных при малых энергиях захватываемых электронов.

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

Основные положения диссертации получили полное отражение в 19 статьях в рецензируемых изданиях, из них 14 статей в журналах, индексируемых в международных базах данных Scopus, Chemical Abstracts, GeoRef, Springer. Получены 5 патентов РФ (в том числе 2 патента на полезную модель), 3 свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ, 2 свидетельства о государственной регистрации баз данных.

Результаты диссертации представлены на международных и всероссийских конференциях, в том числе на: XXI и XXII Менделеевских

съездах по общей и прикладной химии (2019 и 2024 гг.; места проведения: г. Санкт-Петербург; Федеральная территория «Сириус», Россия); VI Съезде аналитиков России (г. Москва, 2022 г.); съездах Всероссийского масс-спектрометрического общества (г. Москва, 2015, 2017, 2019 гг.); XXIII Всероссийской конференции «Структура и динамика молекулярных систем» (г. Москва – Йошкар-Ола – Уфа – Казань, 2016 г.); Всероссийской конференции с международным участием «Электронные, спиновые и квантовые процессы в молекулярных и кристаллических системах» (г. Уфа, 2024 г.); 23rd Seminar on New Trends in Research of Energetic Materials (Czech Republic, Pardubice, April 1–3, 2020); XIV Международной дистанционной научно-практической конференции «Современные проблемы гуманитарных и естественных наук» (г. Москва, 2013 г.) и других.

Публикации в изданиях, индексируемых в международных базах данных:

1. Khatymov R. V. Discrimination of stereoisomers of 2-chlorovinylchloroarsine and bis(2-chlorovinyl)chloroarsine from the data of negative ion mass spectrometry and quantum-chemical simulation / R.V. Khatymov, M.V. Ivanova, A.G. Terentyev, I.V. Rybal'chenko // Russian Journal of General Chemistry. – 2015. – Vol. 85, No.11. – P. 2596-2604. (**Scopus**)
2. Terentyev A.G. Determination of the Structural Features of O-Alkyl-S-2-(N,N Dialkylamino)ethyl Alkylthiophosphonates from Their Electron Ionization Mass Spectra / A.G. Terentyev, Y.I. Morozik, A.V. Dudkin [et al.] // Journal of Analytical Chemistry. – 2016. – Vol. 71, No.13. – P. 1266-1274. (**Scopus**)
3. Terentyev A.G. Interpretation and simulation of negative ion mass spectra of some phosphorus organoelement compounds / A.G. Terentyev, A.V. Dudkin, I.V. Rybal'chenko [et al.] // Journal of Analytical Chemistry. – 2017. – Vol. 72, No.13. – P. 1322-1330. (**Scopus**)
4. Terent'ev A.G. Identification and Determination of the Molecular Structure of Phosphate Esters by the Joint Application of Positive Ion and Negative Ion Electron Ionization Mass Spectrometry / A.G. Terent'ev, Y.I. Morozik, M.V. Ivanova, A.V. Dudkin // Journal of Analytical Chemistry. – 2020. – Vol. 75, No.2. – P. 208-218. (**Scopus**)
5. Terent'ev A.G. Mass Spectra Electron Ionization of Tetraalkyl Pyrophosphates in the Mode of Registration of Positive Ions and Negative Ions of Resonance Electron Capture. Group Identification and Determination of the Number of Carbon Atoms in Alkyl Radicals of These Compounds / A.G. Terentyev, Y.I. Morozik, A.V. Dudkin // Russian Journal of General Chemistry. – 2020. – Vol. 90, No. 5. – P. 845-851. (**Scopus**)
6. Terentyev A.G. Comparison of sensitivity for methods of positive and negative ion mass spectrometry, exemplified by nitrotoluenes / A.G. Terentyev, R.V.

Khatymov // Russian Chemical Bulletin. – 2020. – Vol. 69, No.5. – P. 899-908. **(Scopus)**

7. Khatymov R.V. Resonant electron capture negative ion mass spectrometry: the state of the art and the potential for solving analytical problems / R.V. Khatymov, A.G. Terentyev // Russian Chemical Bulletin. – 2021. – Vol. 70, No.4. – P. 605-646. **(Scopus)**

8. Khatymov R.V. Resonant electron captures by polycyclic aromatic hydrocarbon molecules: effects of aza-substitution / R.V. Khatymov, M.V. Muftakhov, A.G. Terentyev [et al.] // Journal of Chemical Physics. – 2024. – Vol. 160, No.12. – DOI 10.1063/5.0195316. **(Scopus)**

9. Терентьев А.Г. Формирование масс-спектров положительных и отрицательных ионов изомеров тринитротолуола в условиях газовой хромато-масс-спектрометрии / А.Г. Терентьев, А.В. Дудкин, Р.В. Хатымов [и др.] // Журнал общей химии. – 2025. – Т. 95, № 1-2. – С. 27-43. **(Chemical Abstracts)**

10. Khatymov R. V. Chromatography-mass spectrometry of trinitrotoluene isomers in the negative ionization mode under resonance electron capture / R.V. Khatymov, A.G. Terentyev, A.V. Dudkin [et al.] // Journal of Analytical Chemistry. – 2025. – Vol. 80, No.6. – P. 1089-1101. **(Scopus)**

11. Terent'ev A.G. Determination of the Structure of Alkyl Radicals in a Series of Highly Toxic Organophosphorus Compounds Using Mass Spectrometry Databases and Library Search / A. V. Dudkin, Yu. I. Morozik, I. V. Rybal'chenko, A. G. Terentyev // Journal of Analytical Chemistry. – 2018. – Vol. 73. – P. 1275-1281. **(Springer)**

12. Хатымов Р.В. Сродство молекул к электрону и активационный барьер на пути автоотщепления электрона из газофазных молекулярных отрицательных ионов / Р.В. Хатымов, М.В. Муфхатов, П.В. Щукин, Л.З. Хатымова, А.Г. Терентьев, Г.Ф. Рудаков, Р.Ф. Туктаров // ЖЭТФ. – 2025. – Т. 168, вып.3(9). – С. 296-303. **(GeoRef)**

13. Терентьев А.Г. Получение аналитической информации о соединении для проведения структурно-группового анализа по масс-спектрам отрицательных ионов / А.Г. Терентьев, А.В. Дудкин, Ю.И. Морозик // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. – 2019. – Т. 85, №8. – С. 8-15. **(GeoRef)**

14. Терентьев А.Г. Устройство управления разверткой низких энергий ионизирующих электронов для формирования совокупного масс-спектра отрицательных ионов с использованием квадрупольного масс-спектрометра / А.Г. Терентьев, Р.В. Хатымов, А.В. Мальцев // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. – 2020. – Т. 86, №4. – С. 12-20. **(GeoRef)**

Публикации в рецензируемых изданиях:

1. Терентьев А.Г. Определение молекулярной массы некоторых фосфорсодержащих органических веществ по масс-спектрам отрицательных ионов / А.Г. Терентьев, Р.В. Хатымов // Башкирский химический журнал. – 2020. – Т. 27, № 2. – С. 4-11.
2. Хатымов Р. В. Масс-спектры положительных и отрицательных ионов и стабильность некоторых нитронасыщенных ароматических соединений / Р.В. Хатымов, А.В. Дудкин, А.Г. Терентьев, Л.З. Хатымова, М.Д. Крыкин, А.В. Дьячков // Масс-спектрометрия. – 2025. – Т. 22, №1. – С. 43-54.

Публикации в прочих изданиях:

1. Терентьев А.Г. Сравнение результатов регистрации отрицательных ионов, полученных на различных масс-спектрометрах / М.В. Иванова, Р.В. Хатымов, Терентьев А.Г. // Физика молекул и кристаллов: Сборник статей. – Уфа: ИП Галлиулин Д.А., 2014. ISBN 978-5-905269-42-4. – С.108-115.
2. Терентьев А.Г. Определение характеристик молекулярного строения триалкилфосфатов путем совместного применения масс-спектров электронной ионизации с регистрацией положительных ионов и отрицательных ионов резонансного захвата электронов / Ю.И. Морозик, А.А. Цветков, А.Р. Валиев, А.Г. Терентьев // Вестник войск РХБ защиты. – 2021. – Т. 5, №4. – С.303-312.
3. Терентьев А.Г. Применение масс-спектрометрии отрицательных ионов в аналитических целях на ГХ-МС комплексе / А.Г. Терентьев, Р.В. Хатымов, М.В. Иванова // Известия Уфимского научного центра РАН. – 2014. – № 3. – С. 86-90.

Патенты:

1. Патент на полезную модель № 158407 U1 Российская Федерация, МПК H01J 49/00. Устройство для сохранения катода масс-спектрометра при работе с малыми энергиями ионизации : № 2015106407/07 : заявл. 25.02.2015 : опубл. 27.12.2015 / А.Г. Терентьев, М.В. Иванова, Р.В. Хатымов, А.В. Дудкин ; заявитель Федеральное государственное казённое военное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Военная академия радиационной, химической и биологической защиты имени Маршала Советского Союза С.К. Тимошенко» Министерства обороны Российской Федерации.
2. Патент № 2599900 C2 Российская Федерация, МПК G01N 30/72. Способ идентификации органических соединений методом хромато-масс-спектрометрии : № 2015104248/28 : заявл. 09.02.2015 : опубл. 20.10.2016 / А.Г. Терентьев, М.В. Иванова, Р.В. Хатымов [и др.] ; заявитель Федеральное государственное казённое военное образовательное учреждение высшего

образования «Военная академия радиационной, химической и биологической защиты имени Маршала Советского Союза С.К. Тимошенко» Министерства обороны Российской Федерации.

3. Патент № 2616595 С Российская Федерация, МПК H01J 49/00, G01N 30/72. Масс-спектрометрическая идентификация соединений ряда V-газов : № 2015118563 : заявл. 18.05.2015 : опубл. 18.04.2017 / А.Г. Терентьев, М.В. Иванова, Ю.И. Морозик [и др.] ; заявитель Федеральное государственное казённое военное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Военная академия радиационной, химической и биологической защиты имени Маршала Советского Союза С.К. Тимошенко» Министерства обороны РФ.

4. Патент на полезную модель № 188483 U1 Российская Федерация, МПК H01J 49/30. Устройство питания катода масс-спектрометра переменным током для периодической вариации энергии эмитируемых электронов при регистрации масс-спектров отрицательных ионов : № 2018115124 : заявл. 23.04.2018 : опубл. 16.04.2019 / А.Г. Терентьев, А.А. Брусенин, Р.В. Хатымов, Р.Ф. Туктаров ; заявитель Федеральное государственное бюджетное учреждение «27 Научный центр» Министерства обороны Российской Федерации.

5. Патент № 2664713 C1 Российская Федерация, МПК H01J 49/08 G01N 30/72. Способ ионизации вещества электронами при работе на масс-спектрометре : № 201711389 : заявл. 04.04.2017 : опубл. 22.08.2018 / А.Г. Терентьев, Р.В. Хатымов, А.Ю. Домрачев [и др.] ; заявитель Закрытое акционерное общество Специальное конструкторское бюро «Хроматэк».

Свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ:

1. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2016661049 Российская Федерация. Прогнозирование масс-спектров отрицательных ионов соединений: алкилди-хлорфосфатов, диалкилхлорфосфатов, V-газов, О-алкилалкилфторфосфонатов (PRONEGMS1.0) : № 2016612245 : заявл. 17.03.2016 : опубл. 28.09.2016 / А.Г. Терентьев, И.В. Рыбальченко, А.В. Дудкин, Л.А. Тихомиров ; заявитель федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Костромской государственный университет».

2. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2017615526 Российская Федерация. Программный модуль экспертной системы «Компьютерное моделирование фрагментации отрицательных ионов химических соединений» (GENFRAG 1.0) : № 2016663303 : заявл. 06.12.2016 : опубл. 17.05.2017 / А.В. Дудкин, Ю.И. Морозик, А.Г. Терентьев [и др.] ; заявитель федеральное государственное бюджетное образовательное

учреждение высшего образования «Костромской государственный университет» (КГУ).

3. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2017615115 Российская Федерация. Программный модуль экспертной системы «Генератор структурных изомеров химических соединений» (GENTOX 1.0) : № 2016663313 : заявл. 06.12.2016 : опубл. 03.05.2017 / А.В. Дудкин, Ю.И. Морозик, А.Г. Терентьев [и др.] ; заявитель федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Костромской государственный университет» (КГУ).

Свидетельства о государственной регистрации баз данных:

1. Свидетельство о государственной регистрации базы данных № 2015621486 Российская Федерация. База данных масс-спектров отрицательных ионов токсичных химикатов (varhbz) : № 2015621003 : заявл. 27.07.2015 : опубл. 24.09.2015 / А.Г. Терентьев, А.В. Дудкин, Ю.И. Морозик [и др.] ; заявитель федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Костромской государственный технологический университет».

2. Свидетельство о государственной регистрации базы данных № 2016621328 Российская Федерация. База данных спрогнозированных масс-спектров отрицательных ионов соединений групп: алкилдиалхлорфосфатов, диалкилхлорфосфатов, V-газов, О-алкилалкилфторфосфонатов «LibNegMS1.0» : № 2016620260 : заявл. 17.03.2016 : опубл. 28.09.2016 / А.Г. Терентьев, А.В. Дудкин, Ю.И. Морозик [и др.] ; заявитель федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Костромской государственный университет».

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

1. Хатымов Р.В. Резонансный захват электронов спиропиранами / Р.В. Хатымов, М.В. Муфтахов, А.Г. Терентьев [и др.] // Электронные, спиновые и квантовые процессы в молекулярных и кристаллических системах: сборник тезисов докладов и сообщений на Всероссийской конференции с международным участием, г. Уфа, 21-24 мая 2024 года. – Уфа: Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы, 2024. – С. 23.

2. Дудкин А.В. Прогнозирование фрагментации отрицательных ионов методами машинного обучения / А.В. Дудкин, А.Г. Терентьев, Ю.И. Морозик [и др.] // Структура и динамика молекулярных систем: сб. тезисов докладов и сообщений XXIII Всероссийской конференции, г. Москва – Йошкар-Ола – Уфа – Казань, 4-8 июля 2016 года. – Москва: ИФХЭ РАН, 2016. – С. 42.

3. Терентьев А.Г. Масс-спектрометрия отрицательных ионов для решения аналитических задач. Возможности и ограничения / А.Г. Терентьев, М.А.

Легков, Р.В. Хатымов [и др.] // Структура и динамика молекулярных систем: сб. тезисов докладов и сообщений XXIII Всероссийской конференции, г. Москва – Йошкар-Ола – Уфа – Казань, 4-8 июля 2016 года. – Москва: ИФХЭ РАН, 2016. – С. 129.

4. Терентьев А.Г. Спектроскопия – один из элементов защиты от химического оружия / А.Г. Терентьев // Физика молекул и кристаллов: Сб. статей II Всероссийской конференции «Нелинейные и резонансные явления в конденсированных средах», г. Уфа, 27-30 октября 2014 года. – Уфа: ИП Галиуллин Д.А., 2014. – С. 43.

5. Терентьев А.Г. Применение масс-спектрометрии отрицательных ионов в аналитических целях на ГХ-МС комплексе / А.Г. Терентьев, Р.В. Хатымов, М.В. Иванова // Структура и динамика молекулярных систем: сб. тезисов докладов и сообщений XXI Всероссийской конференции, г. Москва – Йошкар-Ола – Уфа – Казань, 22-27 июня 2014 года. – Уфа: ИФМК УНЦ РАН, 2014. – С. 169.

6. Терентьев А.Г. Определение молекулярной массы некоторых фосфорорганических отравляющих веществ по масс-спектрам отрицательно заряженных ионов / А.Г. Терентьев, А.В. Дьячков, М.В. Иванова // Структура и динамика молекулярных систем: сб. тезисов докладов и сообщений XXII Всероссийской конференции, г. Москва – Йошкар-Ола – Уфа – Казань, 22-27 июня 2015 года. – Казань: КНИТУ, 2015. – С. 103.

7. Терентьев А.Г. Возможности масс-спектрометрии отрицательных ионов резонансного захвата для решения аналитических задач / А.Г. Терентьев, Р.В. Хатымов, И.В. Рыбальченко // Масс-спектрометрия и ее прикладные проблемы: сб. материалов VII съезда ВМСО и VI Всероссийская конференция с международным участием, г. Москва (пос. Московский), 12-17 октября 2015 года. – г. Москва: ВМСО, 2015. – С. 90.

8. Терентьев А.Г. Определение молекулярной массы эфиров метилфосфоновой кислоты по масс-спектрам отрицательных ионов / А.Г. Терентьев, Д.В. Орешкин, И.В. Рыбальченко // Кластер конференций по органической химии: тезисы докладов «ОргХим-2016», г. Санкт-Петербург (пос. Репино), 27 июня – 1 июля 2016 года. – СПб.: Изд-во ВВМ, 2016. – С. 170.

9. Терентьев А.Г. Чувствительность метода масс-спектрометрии отрицательных ионов при идентификации токсичных веществ / А.Г. Терентьев, М.А. Легков, Р.В. Хатымов // Структура и динамика молекулярных систем: сб. тезисов докладов и сообщений XXIV Всероссийской конференции, г. Москва – Йошкар-Ола – Уфа – Казань, 26-30 июня 2017 года. – Йошкар-Ола: ПГТУ, 2017. – С. 118.

10. Терентьев А.Г. Подход к обоснованию выбора применяемого масс-спектрометрического метода при анализе токсичных соединений / А.Г.

Терентьев, М.А. Легков, Р.В. Хатымов [и др.] // Масс-спектрометрия и ее прикладные проблемы: сб. материалов VIII съезда ВМСО и VII Всероссийская конференция с международным участием, г. Москва, 9-13 октября 2017 года. – г. Москва: ВМСО, 2017. – С. 56.

11. Терентьев А.Г. Дериватизация маркеров физиологически активных веществ как способ повышения чувствительности метода масс-спектрометрии отрицательных ионов / А.Г. Терентьев, А.В. Дьячков, М.В. Иванова // Структура и динамика молекулярных систем: сб. тезисов докладов и сообщений XXV Всероссийской конференции, г. Йошкар-Ола – Москва – Уфа – Казань, 25-29 июня 2018 года. – Йошкар-Ола: ПГТУ, 2018. – С. 168.

12. Терентьев А.Г. Чувствительность метода масс-спектрометрии отрицательных ионов резонансного захвата электронов на примере ряда нитротолуолов / А.Г. Терентьев, Р.В. Хатымов // XXI Менделеевский съезд по общей и прикладной химии: тезисы докладов. В 6-ти томах, Санкт-Петербург, 9-13 сентября 2019 года. Том 4. – Санкт-Петербург: [б.и.], 2019. – С. 215.

13. Терентьев А.Г. Новые возможности газохроматографического масс-спектрометра с квадрупольным анализатором при работе с устройством для ионизации электронами различных энергий / А.Г. Терентьев, Р.В. Хатымов // III Всероссийская конференция по аналитической спектроскопии с международным участием: материалы конференции, г. Краснодар, 29 сентября-5 октября 2019 года. – г. Краснодар, 2019. – С. 62.

14. Терентьев А.Г. Аналитические возможности метода масс-спектрометрии отрицательных ионов резонансного захвата электронов / А.Г. Терентьев, Р.В. Хатымов, Ю.И. Морозик // Масс-спектрометрия и ее прикладные проблемы: сб. материалов IX съезда ВМСО и VIII Всероссийская конференция с международным участием, г. Москва, 14-18 октября 2019 года. – г. Москва: ВМСО, 2019. – С. 97.

15. Terentyev A.G. Identification of a series of nitrotoluene by the method of mass spectrometry of negative ions of resonant electron capture / A.G. Terentyev, R.V. Khatymov // Proceedings of the 23rd Seminar on New Trends in Research of Energetic Materials, Czech Republic, Pardubice, April 1–3, 2020. University of Pardubice Czech Republic, Pardubice. University of Pardubice, 2020. – Pp. 705-710.

16. Терентьев А.Г. Масс-фрагментация положительных и отрицательных ионов изомеров ди- и тринитротолуолов, меченых изотопом N^{15} / А.Г. Терентьев, Н.В. Юдин, Р.В. Хатымов [и др.] // IV Съезд аналитиков России: тезисы докладов, г. Москва, 26-30 сентября 2022 г. – М.: ОНТИ ГЕОХИ РАН, 2022 г. – С.181.

17. Терентьев А.Г. О расширении возможностей оборудования ГХ/МС в базовой комплектации переключением в режим генерации отрицательных ионов резонансным захватом электронов / А.Г. Терентьев, Р.В. Хатымов // IV

Съезд аналитиков России: тезисы докладов, г. Москва, 26-30 сентября 2022 г. – М.: ОНТИ ГЕОХИ РАН, 2022 г. – С.183.

18. Терентьев А.Г. Структурно-аналитические исследования с помощью масс-спектрометрии отрицательных ионов резонансного захвата электронов / А.Г. Терентьев, Р.В. Хатымов, А.В. Дьячков [и др.] // 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. – ISBN 978-5-00202-666-1 [т. 2]. – С. 354.

19. Терентьев А.Г. Структура отрицательных ионов спиропиранов при резонансном захвате электронов / Р.В. Хатымов, М.В. Муфтахов, В.С. Митянов [и др.] // 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. – ISBN 978-5-00202-666-1 [т. 2]. – С. 496.

20. Терентьев А.Г. Масс-спектрометрическая характеристика 6,7-дибром-3,3-дихлорспиро(2-тиабицикло[2.2.1]гепта-5,1-циклопропана) / А.Г. Терентьев, Е.Ю. Лапко, А.В. Дьячков [и др.] // Сборник тезисов докладов XIV Международной дистанционной научно-практической конференции «Современные проблемы гуманитарных и естественных наук». – Москва, 2013. – С. 4.

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. 10. Анализ органических веществ и материалов.

Автореферат отражает основное содержание диссертации.

Диссертация Терентьева Андрея Геннадьевича 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 Терентьеву Андрею Геннадьевичу; 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: «Новые возможности метода масс-спектрометрии отрицательных ионов с резонансным захватом электронов для структурно-аналитических исследований органических соединений» рекомендуется к защите на соискание ученой степени доктора химических наук по специальности 1.4.2 Аналитическая химия.

Диссертация рассмотрена на расширенном заседании кафедры аналитической химии факультета естественных наук РХТУ им. Д.И. Менделеева, состоявшемся «11» сентября 2025 года, протокол №2.

В обсуждении приняли участие: профессор кафедры аналитической химии, д.х.н., профессор Кузнецов Владимир Витальевич; профессор кафедры общей и неорганической химии, д.х.н., профессор Кузнецов Виталий Владимирович; профессор кафедры аналитической химии химического факультета МГУ им. М.В. Ломоносова, д.х.н. Родин Игорь Александрович; профессор кафедры органической химии СПбГУ, д.х.н., профессор Зенкевич Игорь Георгиевич; старший научный сотрудник Института физики молекул и кристаллов – обособленного структурного подразделения УФИЦ РАН, д.ф.-м.н. Лукин Владимир Гаврилович.

Принимало участие в голосовании 16 человек. Результаты голосования: «За» - 16 человек, «Против» - 0 человек, «Воздержались» - 0 человек, протокол № 2 от «11» сентября 2025 г.

Председатель заседания:
заведующий кафедрой аналитической химии
к.х.н., доцент

С.В. Стаханова

Секретарь заседания

Е.Г. Шалимова