

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА РХТУ.Р.15  
федерального государственного бюджетного образовательного учреждения  
высшего образования «Российский химико-технологический университет  
имени Д.И. Менделеева» по диссертации на соискание ученой степени доктора наук

аттестационное дело № 47/25  
решение диссертационного совета  
от «18» марта 2026 года, № 1

О присуждении ученой степени доктора химических наук Терентьеву Андрею Геннадьевичу, представившему диссертационную работу 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.

Диссертация принята к защите «18» декабря 2025 г., протокол № 11, 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 утвержден в количестве 11 человек приказом ректора РХТУ им. Д.И. Менделеева №2486 СТ от «24» декабря 2025 г. (с изменениями, внесенными приказом от «02» марта 2026 г. № 428 СТ).

Соискатель, Терентьев Андрей Геннадьевич, 1978 года рождения, в 2001 году окончил Военный университет радиационной, химической и биологической защиты, филиал г. Кострома (диплом БВС 0863209 от 15 июня 2001 года); в 2007 году окончил Военную академию радиационной, химической и биологической защиты имени Маршала Советского Союза С.К. Тимошенко МО РФ (диплом ВСА 0176891 от 15 июня 2007 года).

В 2010 году окончил адъюнктуру Военной академии войск РХБ защиты и инженерных войск им. Маршала Советского Союза С.К. Тимошенко, диплом ППК 212014 от 26 августа 2010 года.

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» защитил 30 ноября 2010 года в диссертационном совете, созданном на базе Военной академии радиационной, химической и биологической защиты и инженерных войск имени С.К. Тимошенко, диплом кандидата наук ДКН № 130996 от 25 марта 2011 г.

Соискатель работает доцентом на кафедре аналитической химии, заведующим целевой поисковой лаборатории «Перспективные высокоэнергетические материалы» в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева».

Диссертация выполнена на кафедре аналитической химии РХТУ им. Д.И. Менделеева.  
Официальные оппоненты:

доктор химических наук, чл.-корр. РАН Буряк Алексей Константинович, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской академии наук, директор института;

доктор химических наук, профессор, Савчук Сергей Александрович, Ассоциация специалистов по химико-токсикологическому и судебно-химическому анализу, заместитель председателя;

доктор химических наук, профессор, Зенкевич Игорь Георгиевич, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет», Институт химии, профессор.

Ведущая организация – Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «МИРЭА-Российский технологический университет».

Основные положения и выводы диссертационного исследования в полной мере изложены в 18 научных работах, опубликованных соискателем, в том числе в 14 публикациях в изданиях, индексируемых в международных базах данных, и в 2 публикациях в рецензируемых изданиях. 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. Все работы опубликованы в соавторстве. Личный вклад автора составляет более 50 %, заключается в непосредственном участии в планировании работ, проведении экспериментов, анализе и обсуждении полученных результатов, непосредственном участии в написании статей. Данные об опубликованных работах, представленные в диссертации, достоверны.

Наиболее значимые научные результаты по теме диссертации:

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.
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.
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.
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.
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.
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.
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.
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.
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.

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.

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.

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.

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.

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.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы:

1. **Отзыв официального оппонента**, доктора химических наук, член-корреспондента РАН Буряка Алексея Константиновича, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской академии наук, директор института. Отзыв положительный. Имеются замечания:

– В работе представлено широкое разнообразие исследуемых веществ: от токсичных веществ до взрывчатых и др. Чем обоснован такой выбор?

– Известно, что при понижении энергии ионизирующих электронов в положительных ионах чувствительность ухудшается. Можно ли провести такую аналогию с методом МС ОИ РЗЭ?

– На мой взгляд, в литературном обзоре мало уделено внимания теории метода масс-спектрометрии отрицательных ионов резонансного захвата электронов, механизмам образования таких ионов, особенностям их образования.

– Из текста диссертации непонятно возможно ли образование и регистрация двухзарядных отрицательных ионов?

– Хотелось бы увидеть в работе сравнение возможностей и характеристик метода МС ОИ РЗЭ и метода химической ионизации с отрицательными ионами?

– Непонятен выбор диапазона энергий от 0 до 10 эВ в устройстве для работы электронами низких энергий (гл. 5.1), при том, что исследования, проведенные в главе 3, осуществлялись в диапазоне от 0 до 15 эВ?

– В какой степени выводы о фрагментации могут быть переложены на другие вещества одного и того же класса?

– В тексте диссертации и автореферата имеют место незначительные опечатки и неудачные выражения.

В заключении указано, что диссертационная работа А.Г. Терентьева «Новые

возможности метода масс-спектрометрии отрицательных ионов с резонансным захватом электронов для структурно-аналитических исследований органических соединений» является законченным квалификационным научным исследованием. Отмеченные замечания имеют незначительный характер и не оказывают влияния на значимость и научно-практическую важность полученных результатов. Диссертационная работа «Новые возможности метода масс-спектрометрии отрицательных ионов с резонансным захватом электронов для структурно-аналитических исследований органических соединений» **соответствует** критериям, установленным Положением 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 соискатель Терентьев Андрей Геннадьевич, без всякого сомнения, заслуживает присуждения учёной степени доктора химических наук по специальности 1.4.2. «Аналитическая химия».

2. **Отзыв официального оппонента**, доктора химических наук, профессора, Савчука Сергея Александровича, Ассоциация специалистов по химико-токсикологическому и судебно-химическому анализу, заместитель председателя. Отзыв положительный. Имеются замечания:

– По итогам работы показано, что совместным использованием данных масс-спектрометрии положительных ионов и масс-спектрометрии отрицательных ионов резонансного захвата электронов, возможно эффективное установление пика молекулярного иона, очень важного при идентификации соединений. По какой причине ни в целях, ни в задачах работы слово «идентификация» не встречается?

– По какой причине ранее метод масс-спектрометрии отрицательных ионов резонансного захвата электронов (МС ОИ РЗЭ) не применялся для исследований на квадрупольных масс-спектрометрах?

– В чем принципиальное отличие двумерных масс-спектров, полученных МС ОИ РЗЭ (п.1 научной новизны) от масс-спектров отрицательных ионов, получаемых исследователями в г. Уфа?

– Возможно ли внедрение разработанного автором алгоритма прогнозирования масс-спектров отрицательных ионов (п. 3 научной новизны) в существующие программы обработки и интерпретирования масс-спектров, например AMDIS? Имеется ли возможность сравнения их эффективности?

– Автором не дается объяснение особенностям работы методом МС ОИ РЗЭ и его ограничениям, выявленным при выполнении работы, только констатация фактов, даже без высказывания предположений таких особенностей.

– В работе проводится сравнение спрогнозированных масс-спектров отрицательных ионов с реально полученными на квадрупольных приборах. При этом автор ссылается на качественную характеристику таких сравнений – показатели сходства по прямому и обратному поиску, не давая пояснений, что это за показатели.

– В п. 5 научной новизны применяется слово «комплементарный». Объясните смысловую нагрузку применяемого слова: это комплексный, комбинированный или какое-то другое толкование?

– Известно, что применение метода химической ионизации достаточно сложный процесс, имеющий ряд недостатков, например загрязнение ионного тракта, ионного объема, вследствие чего ухудшается чувствительность прибора. Рассматриваемый в диссертационной работе метод МС ОИ РЗЭ по ионообразованию похож на масс-

спектрометрию химической ионизации с регистрацией отрицательных ионов, однако сравнения между данными методами по различным характеристикам не проведено.

В заключении указано, что диссертационная работа А.Г. Терентьева «Новые возможности метода масс-спектрометрии отрицательных ионов с резонансным захватом электронов для структурно-аналитических исследований органических соединений» является законченным квалификационным научным исследованием. Отмеченные замечания носят частный характер и не влияют на значимость и научно-практическую важность полученных результатов. Диссертационная работа «Новые возможности метода масс-спектрометрии отрицательных ионов с резонансным захватом электронов для структурно-аналитических исследований органических соединений» **соответствует** критериям, 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 14.09.2023 г. № 103 ОД, а соискатель, Терентьев Андрей Геннадьевич, без всякого сомнения, заслуживает присуждения учёной степени доктора химических наук по специальности 1.4.2. «Аналитическая химия».

3. **Отзыв официального оппонента**, доктора химических наук, профессора, Зенкевич Игоря Георгиевич, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет», Институт химии, профессор. Отзыв положительный. Имеются замечания:

– В схемах фрагментации неоднократно указано, что при захвате электрона (например, частицей ABC) образуется анион ( $ABC^-$ , см., например, схему на Рис.1, стр.23). Такая небрежность часто встречается в литературе, но не может быть оправдана. На самом же деле в результате захвата электрона образуется анион-радикал  $ABC^{\bullet-}$ . Следует, правда, заметить, что в некоторых схемах автор использует корректную символику.

– В некоторых местах текста диссертации отчетливо проявляется путаница в терминах «чувствительность» и «предел детектирования». Это относится даже к самому заголовку раздела 4.2: «Чувствительность метода МС ОИ РЗЭ. Определение пределов идентификации на примере тринитротолуола», равно как и к его содержанию, а также к выводам по главе. Например, на стр. 93 присутствует фраза «В настоящее время масс-спектрометрические приборы достигают чувствительности  $10^{-17} - 10^{-19}$  г и даже ниже». Очевидно, что здесь речь идет не о чувствительности, а именно о пределе детектирования, потому что чувствительность – это отношение интенсивности аналитического сигнала к количеству аналита. Столь же нелогично утверждение в разделе 5.4 (стр. 130): «чувствительность определяется отношением "сигнал-шум"», потому что отношение "сигнал-шум" определяет предел детектирования.

– Указанные предел идентификации (это, фактически, новый термин) тринитротолуола в предлагаемом варианте МС ОИ РЗЭ составляет 5 нг. Если это количество аналита в пробе (должно быть конкретизировано), то это очень невысокая величина, что автору следовало бы отметить самому. Кроме того, масс-спектрометр – потоковый детектор, а для них пределы детектирования (LOD) конкретнее указывать в единицах массы в единицу времени, например, нг/с. Этому условию, правда, в литературе следуют не всегда.

– Автор не обсуждает в работе использованные для идентификации хроматографической информации (индексы удерживания) в дополнение к масс-спектрам (это не критическое замечание, а особенность работы). Тем не менее, когда речь идет об алкилдихлорфосфатах и диалкилхлорфосфатах можно заметить, что вопросы их хромато-масс-спектрометрической

идентификации рассмотрены в публикации 2019 г. (doi: 10.1134/S1061934819140120). Здесь же можно отметить, что индексы удерживания *цис*- и *транс*-изомеров  $\alpha$ -люизита известны, так что их идентификация не вызывает особых проблем.

– в Табл. 13 (стр. 173) встречаются погрешности в указании молекулярных масс хлорсодержащих соединений, которые иногда вычислены с использованием величины средней атомной массы хлора  $\sim 35.5$  Да, что в масс-спектрометрии не практикуется. В результате, например, для этилдихлорфосфата получается  $M = 162$  (по легкому изотопу хлора с  $A = 35$ ). Если так рассуждать, что для диэтилхлорфосфата пришлось бы указать  $M = 172.5$ , но в таблице означено  $M = 173$ .

Из менее существенных моментов можно отметить следующее:

– О терминологии. В работе неоднократно упоминается «одностадийный масс-спектрометр». Поскольку здесь речь идет о приборе с одним масс-анализатором, то, наверно, так и стоило бы его называть. В крайнем случае – одноступенчатым.

– В задачах работы указано «Подтвердить возможность получения отрицательных ионов РЗЭ на квадрупольном масс-спектрометре...». Если точнее, то здесь две задачи: образование ионов в источнике ионов и возможность их разделить с применением квадрупольного масс-анализатора.

– В тексте много раз (в том числе в заключении) встречается словосочетание «электроноакцепторные соединения», что не совсем корректно. Принято говорить о присутствии электроноакцепторных функциональных групп в составе молекул, либо о соединениях с высоким сродством к электрону.

– Встречается использование выражения типа «регистрация ионов с различными относительными интенсивностями» (стр. 48). Конечно же, во всех аналогичных случаях должно быть «пики ионов». Например, на стр. 54 во фразе «Данные ионы являются наиболее интенсивными в масс-спектре».

– В подписи к Рис. 28 указано «масс-спектры отрицательных ионов...», хотя спектр на этом рисунке всего один.

– На стр. 114 Рис. 47 должен иметь номер 48.

– На стр. 138 упомянуты «*цис*- и *транс*-изомеры»  $\alpha$ -люизита, но их следует называть либо просто *цис*- и *транс*-изомерами, либо  $\pi$ -диастереомерами.

– На Рис. 75 приведен масс-спектр ЭИ О-этил,О-бутил, О,О-дипропилпирофосфата, а на Рис. 76 – Масс-спектр ОИ РЗЭ условно неизвестного О,О-дибутил, О,О-дипропилпирофосфата. Так как в молекулах пирофосфатов атомы кислорода локализованы при разных атомах фосфора, то заместители при двух из них для предотвращения структурной неопределенности следует указывать штрихами.

– На стр. 40 упомянут материал катодов (иридий или вольфрам). А почему не рений?

В заключении указано, что на основании рассмотрения диссертации и автореферата можно обоснованно утверждать, что диссертационная работа А.Г. Терентьева по своей актуальности, научной новизне и практической значимости 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. Соискатель – Андрей Геннадьевич Терентьев – заслуживает присуждения ученой степени доктора химических наук по специальности 1.4.2 – Аналитическая химия.

4. **Отзыв ведущей организации** – Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «МИРЭА-Российский технологический университет». Отзыв положительный. Имеются вопросы и замечания:

– Регистрация молекулярных ионов является важным моментом при идентификации органических соединений. Известно, что при понижении энергии ионизирующих электронов можно добиться существенного увеличения интенсивности пика молекулярного иона. Можно ли считать метод МС ОЭ РЗЭ аналогом предлагаемого вышеуказанного способа?

– Чем автор может объяснить выявленные особенности при работе методом МС ОИ РЗЭ, указанные на странице 177 диссертации?

– В п. 4 практической значимости диссертационной работы указано, что создана база данных масс-спектром четырех классов (гомологов зарина, V-газов, хлорфосфатов) Непонятно проводилась ли верификация полученных масс-спектров в каких-либо организациях?

– В работе рассматривается нижний предел обнаружения методом МС ОИ РЗЭ на примере нитротолуолов. Было бы желательно в работе расширить список веществ по определению нижнего предела обнаружения и сравнению его с методом масс-спектрометрии положительных ионов электронной ионизации.

– В диссертационной работе упоминается ссылка на базы данных масс-спектров NIST-2014 (источник 190). При этом существуют более новые базы данных. Чем обосновано использование NIST-2014?

– При том, что язык изложения материала в целом грамотный и ясный, в тексте диссертации имеются отдельные грамматические и стилистические ошибки. В некоторых случаях используется английское обозначение осей на графиках.

В заключении указано, что диссертационная работа представляет собой завершённую научно-квалификационную работу на актуальную тему. Замечания не затрагивают положений и выводов диссертации. Объем и качество представленных результатов свидетельствуют о глубоком понимании сложных физико-химических процессов и подтверждают высокую научную квалификацию диссертанта. Диссертационная работа на тему «Новые возможности метода масс-спектрометрии отрицательных ионов с резонансным захватом электронов для структурно-аналитических исследований органических соединений» является завершённой научно-квалификационной работой, выполненной на высоком уровне, в которой изложены новые научно-обоснованные решения по внедрению метода МС ОИ РЗЭ в практику работы аналитических лабораторий, так как применение метода МС ОИ РЗЭ, использование разработанных способов идентификации, основанных на использовании данных двух методов: МС ПИ ЭИ и МС ОИ РЗЭ существенно повышает достоверность проводимых исследований, уменьшает количество применяемых аналитических приборов, имеющие важное значение для развития исследований в области физико-химических методов анализа, и, соответственно, развития отечественной аналитической химии в Российской Федерации и соответствует всем 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, Терентьев Андрей Геннадьевич, заслуживает присуждения ученой степени доктора химических наук по специальности 1.4.2 «Аналитическая химия».

Доклад по диссертационной работе Терентьева Андрея Геннадьевича на тему: «Новые возможности метода масс-спектрометрии отрицательных ионов с резонансным захватом электронов для структурно-аналитических исследований органических соединений» был

заслушан, обсуждён и одобрен на заседании кафедры аналитической химии имени И.П. Алимарина (протокол №7 от 12 февраля 2026 года).

5. **Отзыв на автореферат диссертации** доктора химических наук Вирусса Эдуарда Даниэлевича, начальника лаборатории биохимии ФГБУ «Федеральный научный центр физической культуры и спорта». Отзыв положительный. Замечаний нет.

6. **Отзыв на автореферат диссертации** доктора физико-математических наук Лукина Владимира Гавриловича, старшего научного сотрудника лаборатории физики атомных столкновений Института физики молекул и кристаллов – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук (ИФМК УФИЦ РАН). Отзыв положительный. Имеются замечания:

– При создании устройства для работы с электронами низких энергий был выбран диапазон от 0 до 10 эВ с шагом квантования электронов по энергии 0.1 эВ. Чем обоснован такой выбор диапазона, если ранее исследования проводились в диапазоне от 0 до 15 эВ?

– В автореферате приводится алгоритм прогнозирования масс-спектром отрицательных ионов/, полученных простым разрывом 1-2 связей. Возможно ли такое же успешное прогнозирование с более сложными направлениями фрагментации, например, при перегруппировочных процессах?

7. **Отзыв на автореферат диссертации** доктора химических наук, профессора Васильевой Веры Ивановны, профессора кафедры аналитической химии ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет». Отзыв положительный. Имеются замечания:

– Какие, по мнению автора, необходимы действия для создания баз данных масс-спектров отрицательных ионов новых классов органических веществ?

– На рисунке 2 (стр. 16) недостаточно четко продемонстрированы различия результатов сравнения показателей сходства по прямому и обратному поиску, несмотря на использование цветной картинки.

8. **Отзыв на автореферат диссертации** доктора химических наук, Шкирской Светланы Алексеевны, профессора кафедры физической химии ФГБОУ ВО «Кубанский государственный университет». Отзыв положительный. Имеются замечания:

– Не совсем удачным в автореферате является сквозная нумерация расчетных уравнений (1-7, 9, 10) и структурных молекулярных формул (7, 8).

– Возможно ли методом масс-спектрометрии отрицательных ионов резонансного захвата электронов различать изомеры алкильных радикалов, например: пропил/изопропил, бутил/третбутил и т.д.?

9. **Отзыв на автореферат диссертации** доктора химических наук, профессора Пеньковой Анастасии Владимировны, профессора кафедры аналитической химии Института химии ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный университет». Отзыв положительный. Имеются замечания:

– Возможно ли получить на устройстве для ионизации электронами низких энергий хроматографический пик привычного вида, не поделенный на подпики?

– Возможна ли одновременная работа квадрупольного масс-спектрометра в режиме положительных и отрицательных ионов в течение одного анализа?

10. **Отзыв на автореферат диссертации** доктора химических наук, профессора Кузнецова Владимира Витальевича, профессора кафедры аналитической химии ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева». Отзыв положительный. Имеются замечания:

– На стр. 23 сказано, что наибольшая вклад в «узнаваемость» масс-спектра

О-изопротилдихлорфосфата получена при энергии ионизирующих электронов 10 эВ. Правильно ли, что это резонансная энергия захвата электронов данного вещества?

– Наличие положительного молекулярного иона или отрицательного молекулярного (отрицательного депротонированного) иона в работе выполняется в 90% случаев. Чем объяснить отсутствие выполнения такого правила в оставшихся 10%?

11. **Отзыв на автореферат диссертации** доктора физико-математических наук, Бурякова Игоря Александровича, главного научного сотрудника Научно-исследовательского технологического института им. А.П. Александра. Отзыв положительный. Имеются замечания:

– отсутствуют расшифровки аббревиатур МС ЭИ ПИ, ЭИ ПИ, присутствуют описки – ПИ ЭИ и МС ПИ ЭИ;

– выносимые на защиту научные положения сформулированы скорее в виде научных результатов;

– вместо термина «авторские свидетельства» желательно использовать термин «свидетельства о государственной регистрации ...» (термин «авторское свидетельство» использовали ранее в СССР, с настоящее время – это документ об авторстве селекционного достижения);

– часть надписей на рисунках плохо читается.

Выбор официальных оппонентов обоснован их высокой компетентностью, которая подтверждена значительным количеством публикаций в области идентификации органических соединений в сложных пробах методами хромато-масс-спектрометрии, большой практической работой, что в совокупности позволяет им оценить научную и практическую значимость диссертации.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

**введено** понятие двумерного масс-спектра отрицательных ионов, полученного в широком диапазоне энергий ионизирующих электронов;

**разработана** теоретико-экспериментальная основа адаптации метода МС ОИ РЗЭ для идентификации органических веществ, позволяющая повысить достоверность результатов, при уменьшении финансовых затрат на аналитическое оборудование и его эксплуатацию;

**предложены** способы идентификации органических веществ с использованием метода МС ОИ РЗЭ;

**доказана** целесообразность внедрения метода МС ОИ РЗЭ в практику работы аналитических лабораторий.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

**доказана** резонансная природа образуемых и регистрируемых в квадрупольном масс-спектрометре отрицательных ионов, расширяющая возможности использования масс-спектрометров квадрупольного типа для идентификации органических веществ;

**установлены** особенности работы методом МС ОИ РЗЭ на квадрупольном масс-спектрометре;

**установлены** направления фрагментации молекулярных отрицательных ионов различных классов органических веществ;

**проведено** сравнение полученных экспериментальных масс-спектров отрицательных ионов с результатами квантово-химических расчетов, показавшее высокую степень адекватности.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

**разработаны:** а) способ регистрации двумерных отрицательных ионов РЗЭ на квадрупольном масс-спектрометре, содержащий все резонансные области исследуемых веществ; б) способ идентификации: V-газов; в) 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;

**определен** предел идентификации 2,4,6-тринитротолуола методом МС ОИ РЗЭ;

**создан** а) алгоритм прогнозирования МС ОИ РЗЭ групп соединений: О-алкилалкилфторфосфонатов, О,О'-диалкилхлорфосфатов, О-алкилдихлорфосфатов, О-алкил-S-2-(N,N-диалкиламино)этилалкилтиофосфонатов; б) устройство ионизации электронами низких энергий; в) база данных МС ОИ РЗЭ изученных органических веществ;

**представлены** возможности метода МС ОИ РЗЭ и его преимущества перед методом масс-спектрометрии электронной ионизации положительных ионов, 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.

#### **Оценка достоверности результатов исследования выявила:**

- результаты получены на современном сертифицированном оборудовании ГХ/МС, имеют хорошую воспроизводимость и межприборную сходимость
- статистическая обработка полученных результатов проводилась с использованием известных программных пакетов, полученные теоретические результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными и не противоречат исследованиям, выполненным ранее.

Автором спланированы и сформулированы основные направления теоретических и экспериментальных исследований в соответствии с целью работы, разработаны основные теоретические концепции и модели исследования процессов. Спланированы и проведены лично им или под его руководством все лабораторные эксперименты. Обработка и анализ результатов экспериментов выполнены лично автором, либо под его непосредственным руководством. При участии автора осуществлены квантово-химические расчеты характеристик некоторых соединений, представленных в работе. Проведено обобщение полученных результатов, определены новые научные положения, установлены их прикладные аспекты, организована практическая реализация и внедрение технических разработок в серийно производимый хромато-масс-спектрометрический комплекс. Под руководством автора и при его личном участии подготовлены материалы публикаций по выполненной работе, а также для получения авторских свидетельств, патентов на полезные

модели, свидетельства о регистрации баз данных.

Диссертационный совет пришел к выводу о том, что диссертация представляет собой завершенную научно-квалификационную работу, в которой теоретически обоснован, развит и практически осуществлен метод масс-спектрометрии отрицательных ионов резонансного захвата электронов для решения задач по идентификации органических веществ и внедрения метода в практику работы аналитических лабораторий.

По своему содержанию диссертация отвечает паспорту специальности 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.

По актуальности, новизне, практической значимости диссертация 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.15 18 марта 2026 года принято решение о присуждении Терентьеву Андрею Геннадьевичу ученой степени доктора химических наук по специальности 1.4.2 Аналитическая химия.

Присутствовало на заседании 11 членов совета, в том числе докторов наук по научной специальности, отрасли науки рассматриваемой диссертации 10 (десять).

**Итоги голосования:**

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

«За» – 11

«против» – 0

«воздержались» – 0.

Председатель  
диссертационного совета

Ученый секретарь  
диссертационного совета

«18» марта 2026 г.



д.х.н., профессор Кузнецов В.В.

к.х.н., доцент Ермоленко Ю.В.

