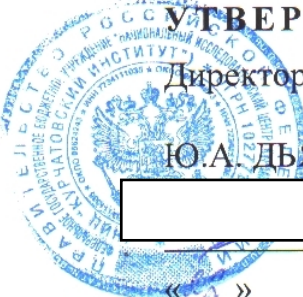


УТВЕРЖДАЮ  
Директор Центра  
Ю.А. ДЬЯКОВА  
  
« 10 » 20 25 г.

## ОТЗЫВ

ведущей организации федерального государственного бюджетного учреждения  
«Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»  
(НИЦ «Курчатовский институт») на диссертацию Александровой Дарьи  
Алексеевны «Спектрометрия ионной подвижности азотсодержащих  
гетероциклических соединений и аварийно химически опасных веществ»,  
представленную на соискание учёной степени кандидата химических наук по  
специальности 1.4.2. Аналитическая химия

В связи с распространением «дизайнерских наркотиков» (психоактивные вещества, разрабатываемые с целью обхода действующего законодательства, синтетические заменители какого-либо натурального вещества, полностью воспроизводящие наркотические свойства последнего либо близкие, но не идентичные по строению), в основе структуры которых присутствует базовый фрагмент ароматического или гетероароматического ряда и характерные функциональные группы, процедура выявления азотсодержащих гетероциклических соединений (азолов) имеет как фундаментальное, так и практическое значение.

Перспективным и широко распространенным направлением является экспресс-детектирование взрывчатых, боевых отравляющих, наркотических и аварийно химически опасных веществ.

Спектрометрия ионной подвижности представляет собой высокочувствительный метод, применяемый для повышения селективности аналитической системы, уточнения результатов анализа сложных образцов, включая обнаружение токсичных, наркотических и взрывчатых веществ и др.

Учитывая распространение применения азолов в медицине, фармакологии, химической промышленности, необходимость выявления новых синтетических каннабиноидов, а также отсутствие в базах данных аналитических приборов информации о подобных соединениях, исследование специфики и аналитических свойств спектров ионной подвижности, разработка

методов детектирования азотсодержащих гетероциклических соединений и аварийно химически опасных веществ является актуальной задачей.

Целью работы являлось установление закономерностей между характером спектров ионной подвижности и строением исследуемых азотсодержащих гетероциклических соединений и аварийно химически опасных веществ для их оперативного обнаружения.

Основные результаты работы заключаются в:

- разработке методических подходов к анализу спектров ионной подвижности исследуемых соединений, выявлении характерных для всех веществ величин ионной подвижности;
- установлении зависимостей характеристик спектров ионной подвижности от концентрации вещества в газовой фазе, оценке устойчивости мономеров и димеров при исследовании соединений в разных концентрациях;
- выполнении расчетов энтальпии реакций как образующихся ионов, так и ионизирующих агентов, проведении сравнения полученных данных с характером спектров ионной подвижности;
- определении методических подходов и условий детектирования, разработке методик пробоотбора в зависимости от физико-химических свойств исследуемых соединений;
- выборе 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.

Научная новизна работы заключается в выявлении интервалов ионной подвижности моноциклических азотсодержащих соединений и ряда аварийно химически опасных веществ, позволяющих оценить наличие в структуре молекул сходных функциональных фрагментов. Для большинства выбранных соединений подобные данные до этой работы отсутствовали.

Автором работы 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.

Практическая значимость результатов работы состоит в разработке методов детектирования и анализа спектров ионной подвижности аварийно химически опасных веществ, использованных 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».



Безусловным положительным результатом работы является внесение полученных характеристических значений ионной подвижности азотсодержащих гетероциклических соединений и аварийно химически опасных веществ 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.

Достоверность полученных результатов обеспечивается применением систематического анализа литературных данных, использованием современного лабораторного оборудования, получением воспроизводимых экспериментальных данных и их критического анализа.

Выводы автора являются достоверными, имеющими существенную новизну, и могут быть применены для непрерывного контроля состава воздуха рабочей зоны на производстве, в местах массового скопления людей (аэропорты, вокзалы, массовые мероприятия). Работа имеет практическое значение в предотвращении террористических актов, досмотровом контроле, анализе воздуха рабочей зоны на производстве и иных угроз жизни и здоровью людей.

Результаты исследований в достаточной степени апробированы в докладах на научных конференциях и в научных журналах.

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, списка сокращений и условных обозначений и списка литературы, включающего 178 наименований. Общий объем работы 171 страница, включая 60 рисунков, 45 таблиц и 32 приложения.

Во введении обоснована актуальность работы, определены цели и задачи исследований, рассмотрены новизна и практическая значимость. Представлен краткий обзор структуры диссертации и личный вклад автора.

Первая глава носит обзорный характер. В ней обобщена информация о современных представлениях, и выполнен обзор экспресс-метода анализа химических соединений — спектрометрии ионной подвижности, основанной на ионизации молекул при атмосферном давлении.

Во второй главе изложены методические основы исследования спектров ионной подвижности. Определены методы регистрации, математической обработки спектров и выделения характеристических значений ионной подвижности соединений в результате проделанной работы. Представлено описание разработанного программного обеспечения для вычитания фоновых сигналов спектра и построения спектров ионной подвижности. Приведены методы пробоподготовки в зависимости от физико-химических свойств соединений.

Третья глава посвящена анализу спектров ионной подвижности азотсодержащих гетероциклических соединений.

В четвертой главе приведены результаты исследований и анализ спектров ионной подвижности аварийно химически опасных веществ: сероуглерода, метилмеркаптана, хлорацетофенона, хлорацетона, трис(2-хлорэтил)амин, бромциана, бромметана, акрилонитрила.

В заключении представлены основные результаты, полученные в работе.

Диссертационная работа хорошо структурирована, обладает внутренним единством и содержит новые научно-экспериментальные результаты, что свидетельствует о значительном вкладе автора в совершенствование методического обеспечения и интерпретации результатов, полученных с помощью спектрометров ионной подвижности.

Тема и содержание диссертации соответствуют п. 2 – 6 паспорта научной специальности 1.4.2 Аналитическая химия.

Автореферат диссертации оформлен в соответствии с установленными требованиями, и полностью отражает содержание диссертации, включает в себя цели и задачи исследования, научной новизны, практической значимости и основные выводы.

Рекомендации по использованию результатов и выводов диссертационной работы. Результаты диссертации Александровой Д.А. могут быть использованы исследователями в области разработки и применения спектрометров ионной подвижности с целью детектирования химических соединений, заводами и компаниями, заинтересованными в решении проблем анализа качественного и количественного состава воздушных смесей, а также следовых количеств химических веществ на исследуемых объектах (ЭКЦ МВД России, подразделения войск РХБЗ Вооружённых сил РФ, Московский метрополитен и др. транспортные объекты).

Материал, представленный в диссертации, вызывает ряд замечаний как по изложению материала, так и непосредственно по содержанию работы.

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  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{H}_2\text{O}$  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.

Отмеченные недостатки, не снижают общей высокой оценки работы, в связи с чем считаем, что диссертационная работа Александровой Д.А. является законченным самостоятельно выполненным научно-квалификационным исследованием, в котором автором решена актуальная научно-техническая задача, имеющая значение для предотвращения террористических актов, досмотрового контроля, анализа воздуха рабочей зоны на производстве и иных угроз жизни и здоровью людей.

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 составили:

Ученый секретарь  
Курчатовского комплекса  
физико-химических технологий,  
кандидат химических наук

Архипова  
Анна Александровна  
тел.: +7 (499) 196-71-00  
e-mail: Arkhipova\_AAl@nrcki.ru

Председатель заседания  
научно-технического семинара  
Курчатовского комплекса  
физико-химических технологий,  
кандидат химических наук

Егоров Антон  
Сергеевич

Секретарь заседания  
научно-технического семинара  
Курчатовского комплекса  
физико-химических технологий,  
доктор технических наук, доцент

Макаренков Дмитрий  
Анатольевич

Подписи А.А. Архиповой, А.С. Егорова, Д.А. Макаренкова заверяю

Заместитель директора –  
главный Ученый секретарь  
НИЦ «Курчатовский институт»

Алексеева Ольга  
Анатольевна

Адрес НИЦ «Курчатовский институт»:  
123182, Москва, пл. Академика Курчатова, д. 1  
e-mail: nrcki@nrcki.ru  
<http://www.nrcki.ru>

