

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Терентьева Андрея Геннадьевича
«Новые возможности метода масс-спектрометрии отрицательных ионов с
резонансным захватом электронов для структурно-аналитических
исследований органических соединений», представленной на соискание
ученой степени доктора химических наук по специальности 1.4.2.

Аналитическая химия

Диссертация Терентьева Андрея Геннадьевича посвящена развитию метода масс-спектрометрии отрицательных ионов с резонансным захватом электронов (МС ОИ РЗЭ), направленному на решение актуальной проблемы определения ультрамалых количеств широкого спектра суперэкоотоксикантов с использованием широкодоступного аналитического оборудования. Особо следует отметить, что до выполнения данной работы метод МС ОИ РЗЭ в нашей стране применялся главным образом с использованием сложных магнитно-секторных приборов и практически не был адаптирован к серийным и доступным ГХ/МС комплексам, что создавало разрыв между фундаментальными возможностями метода и реальными потребностями аналитических лабораторий. Предложенное автором развитие метода на базе доступных и распространённых квадрупольных систем с обеспечением межприборной воспроизводимости и возможностью массового анализа выводит тему исследования на уровень практико-ориентированной задачи государственного значения.

Не вызывает никакого сомнения научная новизна работы. В работе разработан способ регистрации двумерных масс-спектров отрицательно заряженных ионов, полученных в условиях резонансного захвата электронов на серийных квадрупольных масс-спектрометрах с охватом всех резонансных областей, что позволяет получать принципиально новую аналитическую информацию о структуре органических соединений в сложных по составу смесях. Впервые на таком классе приборов детально изучены особенности

образования и фрагментации отрицательно заряженных молекулярных ионов более чем 100 соединений различных классов (фосфаты, фосфонаты, нитроэфиры, хлорфенолы и др.) с установлением характеристичных ионов и оптимальных энергий захватываемых электронов.

Существенным элементом новизны является разработка алгоритма прогнозирования масс-спектров отрицательно заряженных ионов для ряда фосфорсодержащих соединений и создание базы данных рассчитанных спектров с последующей верификацией, показавшей высокие показатели сходимости (750–990 ед. по алгоритмам Identity и Similarity). Новым является также решение ранее не имевшей общего подхода задачи определения числа атомов углерода в О-алкильных радикалах полиэфиров фосфорных кислот и тетраалкилпирофосфатов на основе комплементарного применения масс-спектрометрии с электронной ионизацией в режиме регистрации положительно заряженных ионов (МС ЭИ ПИ) и МС ОИ РЗЭ.

Отдельно следует выделить разработанный совместно с приборостроителями узел питания катода (устройство для работы с электронами низких энергий, УРЭНЭ), позволяющий реализовать режим динамического сканирования энергии электронов (0–10 эВ) и формировать интегральные масс-спектры отрицательно заряженных ионов (ОИ) во всех резонансных областях за малое время. Показано, что использование данного устройства позволяет, как существенно повысить чувствительность и информативность МС ОИ РЗЭ, так и обеспечить сохранность катода при работе на низких энергиях

Практическая значимость работы бесспорна и подтверждается комплексом реализованных решений: созданием экспериментальной базы данных МС ОИ (более 100 записей), базы спрогнозированных спектров для 230 соединений (включая гомологи зарина, V-газов, О-алкилалкилфторфосфонаты, алкил- и диалкилхлорфосфаты), а также разработкой программного обеспечения для прогнозирования спектров (PRONEGMS 1.0) и специализированных устройств для ионизации

электронами низких энергий. Показана высокая чувствительность метода МС ОИ РЗЭ при идентификации нитроароматических соединений: для тринитротолуола предел идентификации составил 5 нг, тогда как для классического МС ЭИ ПИ – 0,05 мкг, при сохранении высоких показателей библиотечного поиска.

Разработаны конкретные практические подходы применения МС ОИ РЗЭ: различение стерео- и структурных изомеров (на примере люизитов и нитротолуолов), надёжное определение молекулярной массы при отсутствии пика молекулярного иона в условиях ЭИ ПИ, выявление и количественная оценка электроноакцепторных фрагментов (NO₂, CF₃ и др.), установление длины и набора О-алкильных радикалов в эфирах фосфорных кислот, а также идентификация V-газов с определением числа атомов углерода в ключевых радикалах. Показана хорошая межприборная воспроизводимость МС ОИ РЗЭ на разных ГХ/МС комплексах, что создаёт основу для широкого внедрения предложенных подходов в рутинную практику аналитических лабораторий.

Личный вклад автора отчётливо прослеживается на всех этапах работы – от постановки цели, планирования и проведения экспериментов, разработки алгоритмов и программ до внедрения технических решений и формирования баз данных, что подтверждается авторством патентов, свидетельств и публикаций в авторитетных рецензируемых изданиях. Автореферат полностью передает содержание работы. Таким образом, диссертационная работа Терентьева Андрея Геннадьевича представляется актуальным, научно новаторским и практически значимым исследованием, отличающимся оригинальностью подходов и результатов и вносящим весомый вклад в развитие аналитической масс-спектрометрии и прикладной аналитической химии в целом.

Подводя итог вышеизложенного, считаю, что диссертационная работа на тему «Новые возможности метода масс-спектрометрии отрицательных ионов с резонансным захватом электронов для структурно-аналитических исследований органических соединений» 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», а её автор, Терентьев Андрей Геннадьевич, заслуживает присуждения ученой степени доктора химических наук по специальности 1.4.2. Аналитическая химия.

Доктор химических наук,
Начальник лаборатории биохимии

Э.Д. Вирюс
«24» февраля 2026 г.

Федеральное государственное бюджетное учреждение "Федеральный научный центр физической культуры и спорта" (ФГБУ ФНЦ ВНИИФК)
Тел.: 8 (499) 265-4432 e-mail: info@vniifk.ru

105005, г. Москва, Елизаветинский пер., д. 10, стр.1

Подпись Эдуарда Даниэлевича Вирюса удостоверяю

Начальник отдела кадров и делопроизводства
управления правового и документационного обеспечения



Е.С. Леонтьева