

## ОТЗЫВ

**официального оппонента** профессора, директора Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт физической химии и электрохимии имени А.Н. Фрумкина» Российской Академии наук **д.х.н. Буряка А.К.** на диссертацию Мазура Дмитрия Михайловича «Установление структуры органических соединений в индивидуальном виде и смесях современными методами масс-спектрометрии», представленную на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальностям 02.00.03 – органическая химия и 02.00.02 – аналитическая химия.

**Актуальность работы.** Диссертация Мазура Дмитрия Михайловича посвящена решению актуальной проблемы – установлению структуры органических веществ исключительно методами масс-спектрометрии. Особенностью работы стала разработка масс-спектрометрического подхода по изучению структуры молекул в многокомпонентных смесях, в данном случае в объектах окружающей среды.

Современные исследования в области органической и аналитической химии требуют быстрых, надежных и чувствительных методов идентификации органических соединений. Принимая во внимание возрастающую роль масс-спектрометрии как аналитического метода во многих отраслях науки, работа Дмитрия Михайловича несомненно актуальна и отвечает на современные вызовы. Предложенный Мазуром Д.М. подход по анализу смесей неизвестного состава представляет интерес не только в рамках исследованных объектов окружающей среды, но также и в связи с возможностью его распространения на другие области, как, например, метаболомные исследования, изучения структуры низкомолекулярных природных соединений и идентификация технологических примесей.

Диссертационная работа состоит из 2 частей: изучение структуры синтетических изомеров и анализ многокомпонентных смесей. Каждая из частей обладает внутренним единством и содержит оригинальные научные результаты, изложенные в 10 опубликованных статьях. Материал диссертации полностью соответствуют изложенным в публикациях данным, что подтверждает достоверность и новизну полученных результатов. Стоит отметить, что все материалы изложены в рецензируемых научных изданиях, индексируемых в зарубежных и отечественных базах данных.

Диссертация изложена на 149 страницах и включает в себя введение, литературный обзор, экспериментальную часть, обсуждение полученных результатов, выводы и список литературы, состоящий из 136 ссылок. Литературный обзор подробно описывает наиболее распространенные подходы и протоколы при целевом и нецелевом анализе

многокомпонентных смесей в объектах окружающей среды. Особенно тщательно автор рассматривает примеры установления структуры органических веществ, используя закономерности фрагментации как при классической электронной ионизации (ЭИ), так и в условиях тандемной масс-спектрометрии.

В работе рассмотрены два важных аспекта: фундаментальный и прикладной. К фундаментальным аспектам можно отнести изучение фрагментации органических соединений под действием ЭИ и ионизации электрораспылением (ИЭР) с дальнейшей диссоциацией, индуцированной соударением (ДИС). Построение схем фрагментации для новых соединений в значительной степени углубляет понимание физико-химических процессов, происходящих при анализе, а также расширяет знания о корреляции между процессами фрагментации и структурой молекулы. Из практических аспектов автор выделяет разносторонний подход при изучении объекта – использование методов ГХ/МС, ГХ/МСВР, ГХ/МС с мягкой ионизацией, МС-ИЦР ПФ. Совокупность всех методов позволяет более точно идентифицировать состав и структуру веществ, и более того, расширить количество идентифицируемых соединений. Также стоит упомянуть о разработанной экспрессной методике пробоподготовки воды при анализе летучих и полунлетучих приоритетных экотоксикантов из списка Агентства по охране окружающей среды США (US EPA). Мазуру Д.М. удалось в значительной степени упростить методику EPA 8270 и 8260, сделав её быстрой и подходящей для полевых условий. Уменьшив количество образца и органического растворителя, автору удалось сохранить не только извлекаемость веществ при экстракции, но и предел определения, что немаловажно при количественном расчете содержания.

Дмитрий Михайлович в совершенстве овладел практическими навыками масс-спектрометрического анализа, что было показано в экспериментальной части на ряде использованных методов масс-спектрометрии. Кроме того, отличное владение материалом по классической фрагментации органических соединений под действием ЭИ, позволило автору скорректировать результаты идентификации с помощью библиотек масс-спектров и установить структуры отсутствующих в библиотеке веществ.

**Научная новизна.** На основе полученных данных Мазур Д.М. разработал масс-спектрометрический метод дифференциации 3 различных по природе пар изомеров, а также показал в ряде случаев уместность использования масс-спектрометрии для моделирования реакций в растворе. Он также доказал необходимость разностороннего масс-спектрометрического подхода при анализе многокомпонентных смесей на примере воды и снега. Разработанный подход позволил наиболее полным образом описать состав и структуру органических веществ в атмосфере Москвы, чего раньше никто не делал.

**Экспериментальная часть** работы выполнена на высоком уровне и не вызывает сомнений в достоверности полученных результатов. Все эксперименты были выполнены на современном оборудовании, что позволило в полной мере использовать все доступные на сегодняшний день инструментальные достижения.

**Практическая значимость работы** состоит в разработке новой разносторонней методологии анализа неизвестного объекта с извлечением максимальной информации о составе и структуре органических веществ в смеси. Установленный список приоритетных органических экотоксикантов и проведенное картирование значительно расширили понимание о возможных экологических рисках и угрозах в таком густонаселенном городе, как Москва.

Материал защищаемой работы полностью отражен в автореферате и опубликованных статьях. Особое внимание заслуживает количество и качество представленных статей, которые в силу особенности работы, преимущественно опубликованы в журналах по экологии и аналитической химии (Analyst, Environ. Chem. Lett., Sci. Tot. Environ., Environ. Poll., Rapid Comm. Mass Spec., J. Pharm. Biomed. Anal.).

Однако хотелось бы отметить и некоторые недочеты:

1. Для получения стабильных молекулярных ионов автор использовал в качестве мягкого метода ионизации – ионизацию в тлеющем разряде. Однако, такой выбор не совсем очевиден, поскольку традиционный подход предусматривает использование химической ионизации или понижении энергии ионизирующих электронов.
2. Одним из недостатков работы для полноты картины является отсутствие данных по анализу объектов методом жидкостной хроматографии – масс-спектрометрии. Эти результаты могли бы значительно дополнить данные, полученные методом МС-ИЦР ПФ, и подтвердить предполагаемые структуры.
3. В формальной части автореферата при описании структуры диссертации отсутствует упоминание о разделе «Обсуждение результатов»
4. На стр. 15, рис. 11 в автореферате приведен чёрно-белый рисунок, а в легенде упоминается выделение характеристических пиков красным, голубым и зелёным цветами, что вводит читателя в заблуждение.
5. Опечатки в автореферате. Должно быть: стр. 16, «силиконовых», стр. 18, «электрораспылением», стр. 20, подпись к рис. 20, «ДМ»

Необходимо отметить, что замечания носят лишь частный характер и нисколько не умаляют общих достоинств данной работы.

Диссертационная работа Мазура Д.М. является законченным научным исследованием, отличающееся высоким уровнем научной новизны и практической значимости, а также выполненная на современном экспериментальном уровне. Достоверность результатов не вызывает сомнения. Автореферат полностью отражает содержание диссертации. Результаты исследования изложены в 10 научных статьях в рецензируемых журналах, индексируемых в международных системах Web of Science и Scopus.

Актуальность темы, новизна полученных результатов, практическая значимость и объем выполненных исследований соответствует требованиям и отвечает критериям, установленным в п. 2 «Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова», утвержденного Ректором Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова 27 октября 2016 г., а Мазур Дмитрий Михайлович заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальностям 02.00.03 – органическая химия и 02.00.02 – аналитическая химия.

Официальный оппонент:

доктор химических наук

по специальности 02.00.04 – физическая химия

профессор

Наименование организации:

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт физической химии и электрохимии имени А.Н. Фрумкина» Российской Академии наук

Должность:

Директор Института

Адрес: 119071, Москва, Ленинский пр-т, д.31, корп.4

Телефон: 8 (495) 9520065, E-mail: akburyak@mail.ru

