

ОТЗЫВ официального оппонента
на диссертацию на соискание ученой степени
кандидата химических наук
ВАРСЕГОВА ИЛЬИ СЕРГЕВИЧА

на тему: «Определение азотсодержащих поверхностно-активных веществ и
продуктов их трансформации в воде плавательного бассейна хромато-масс-
спектрометрическими методами»

по специальности 1.4.2. – Аналитическая химия

Диссертационная работа Варсегова Ильи Сергеевича посвящена решению важной научно-практической задачи – разработке аналитических подходов для детектирования и установления строения продуктов трансформации азот-содержащих поверхностно-активных веществ, образующихся в процессе дезинфекции воды плавательных бассейнов, с применением комплекса методов хромато-масс-спектрометрии.

Актуальность темы не вызывает сомнений. Широкое использование галогенсодержащих реагентов для дезинфекции воды рекреационных объектов, с одной стороны, и постоянное присутствие в этой воде биоцидов, компонентов моющих средств и продуктов личной гигиены, с другой, закономерно приводит к образованию многочисленных побочных продуктов дезинфекции, многие из которых обладают повышенной токсичностью. Разработка эффективных методов для их обнаружения и идентификации на следовых уровнях в сложной матрице является важной проблемой современной аналитической химии. Комбинированное использование ВЭЖХ-МСВР и ГХ-МСВР, предложенное автором, представляется перспективным подходом, позволяющим решать подобные задачи.

Научная новизна работы очевидна. Автором впервые предложена комплексная аналитическая схема, сочетающая целевой и нецелевой скрининг для изучения трансформации таких соединений, как бензалкония хлорид и кокамидопропил бетаин, в условиях водного хлорирования и бромирования.

Впервые проведено масштабное исследование, позволившее обнаружить, идентифицировать и предложить механизмы образования обширного спектра ранее не описанных промежуточных и конечных побочных продуктов дезинфекции, включая хлорированные, бромированные, кислородсодержащие и смешанные производные. Помимо модельных экспериментов изучен состав реальных объектов.

Степень обоснованности, достоверности и новизны научных положений, выводов, рекомендаций и заключений. Достоверность полученных результатов подтверждается применением комплекса современных масс-спектрометрических методов, получением воспроизводимых экспериментальных данных, не противоречащих современным научным представлениям и закономерностям. Полученный массив данных квалифицированно обработан, на основе его анализа сделаны оригинальные выводы, полностью соответствующие результатам экспериментов. Обоснованность научных положений, выводов и рекомендаций, сделанных в работе, подтверждается публикациями соискателя в рецензируемых научных журналах, часть из которых является высокорейтинговыми и входит в первый квартиль международных наукометрических баз данных Web of Science и Scopus, а также докладами на всероссийских научных конференциях.

Значимость результатов диссертационной работы для науки и практики. Проведенное исследование вносит существенный вклад в развитие аналитической химии, в частности, в области хромато-масс-спектрометрического скрининга и идентификации неизвестных загрязнителей в объектах окружающей среды. С практической точки зрения собранный массив данных имеет огромное значение для контроля качества воды, соблюдением норм безопасности для воды используемой в бассейнах и иных искусственных водоемах с системами водоподготовки. Полученные масс-спектры ионизации электронами продуктов трансформации широко применяемых соединений в условиях обеззараживания воды

галогенированием могут быть использованы для их дальнейшей идентификации.

Общая характеристика диссертационной работы. Диссертационная работа Варсегова И.С. имеет традиционную структуру и включает введение, литературный обзор, экспериментальную часть, обсуждение результатов, выводы и список литературы. Работа изложена на 129 страницах, содержит 36 рисунков и 12 таблиц. Список литературы включает 142 источника.

Литературный обзор, предшествующий изложению экспериментальных методов и обсуждению собственных результатов, обстоятельно рассматривает методы дезинфекции воды, а также существующие методы обнаружения и идентификации побочных продуктов дезинфекции. Обзор прекрасно систематизирован, написан хорошим научным языком, тщательно выверен и практически не содержит опечаток. Он не оставляет сомнений в оригинальности подходов, использованных диссертантом в работе, и в правомочности постановки решаемой диссертантом научной задачи.

Вторая глава работы посвящена описанию условий и процедур пробоподготовки, проведения экспериментов, режимов работы оборудования и использованных в работе реагентов и расходных материалов. Подробность приведенных сведений позволяет оценить масштаб проделанной работы и использовать данные описания для воспроизведения полученных результатов и разработанных методик.

Основные результаты и их обсуждение изложены автором в третьей, четвертой и пятой главах. Третья глава посвящена трансформации бензалкония хлорида. Автор проводит комплексный анализ, включающий как разработку метода идентификации и количественного определения исходных гомологов в реальной воде бассейна, так и применение методов целевого и нецелевого скрининга с использованием ВЭЖХ-МСВР для идентификации продуктов трансформации. В результате был обнаружен и идентифицирован широкий спектр новых продуктов превращений бензалконий хлорида, включая галогенированные, кислородсодержащие и смешанные производные.

В модельных экспериментах детально изучена кинетика процессов и убедительно показано ключевое влияние pH и УФ-излучения на состав и скорость образования побочных продуктов. Дополнение исследования анализом летучих продуктов глубокой деградации методом ГХ-МСВР позволило получить полную картину превращений изучаемого соединения.

Глава 4 освещает исследование трансформации кокамидопропил бетаина. В связи с ожидаемо низкими концентрациями самого соединения и продуктов его превращений в реальной воде применена стратегия, основанная на детальном изучении модельных систем. Нецелевой скрининг выявил исключительно широкий круг хлорсодержащих продуктов, вплоть до пентахлорированных производных. Автор предлагает обоснованные механизмы их образования, включающие радикальные реакции и электрофильное присоединение. Изучение кинетики демонстрирует быстрое расходование прекурсора и последующую деградацию первичных продуктов. Целевой поиск подтвердил присутствие большинства идентифицированных соединений в реальных образцах воды бассейна в следовых количествах.

В пятой главе описывается разработка и валидация высокочувствительной методики определения кокамидопропилбетаина. Автор предлагает подход, основанный на твердофазной экстракции с последующим анализом экстрактов методом ВЭЖХ-МСВР. В ходе работы были оптимизированы ключевые параметры пробоподготовки, что позволило добиться высоких параметров аналитической методики. Разработанный способ анализа успешно апробирован на реальных образцах, подтвердив свою практическую пригодность для мониторинга целевого соединения в сложных матрицах.

В целом работа представляет собой завершенное оригинальное научное исследование, тематика которого и полученные результаты соответствуют заявленной специальности 1.4.2. – Аналитическая химия. Основное содержание диссертации опубликовано в четырех статьях, а также

апробировано на всероссийских конференциях. Автореферат полностью отражает содержание диссертации.

Несмотря на общее благоприятное впечатление от работы, к ней есть следующие вопросы и замечания:

1. В экспериментальной части работы отсутствует какое-либо упоминание об условиях получения данных с помощью ХИ. Какой газ использовался в сочетании с этим методом, предпринимались ли попытки использовать наиболее мягкий вариант ХИ с изобутаном?
2. В работе встречается многочисленное упоминание «электронного удара»-устаревшего названия метода электронной ионизации или ионизации электронами. Надо отметить, что в некоторых местах используется и правильный термин.
3. С чем связана большая погрешность определения точной массы бутильного карбкатиона-52 ppm (Рис.26).
4. На том же рисунке в ацильном ионе заряд локализован на атоме углерода, что крайне маловероятно. Так же сомнительно выглядит строение иона с m/z 95, где заряд локализован на атоме углерода при кратной связи.
5. К сожалению, в обсуждении результатов присутствует заметное количество опечаток и ошибок. Например, фразу «...их обнаружение доказывает хлорирование алкильной цепи с любым разрывом связи С-С в некоторых этап» понять достаточно сложно. Или каким образом были получены «Продукты глубокой деструкции кокамидопропилбетаина методом ГХ-МС»

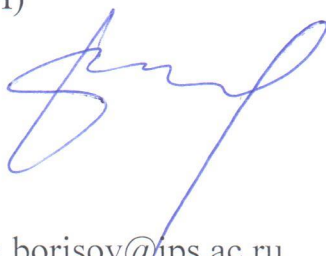
Следует отметить, что высказанные замечания не затрагивают сути проведенного исследования и не противоречат сделанным в работе выводам и выносимым на защиту положениям.

Таким образом, можно заключить, что по объему теоретических и экспериментальных исследований, их актуальности, научной новизне и практической значимости диссертация отвечает требованиям, установленным

пунктами 9-11, 13, 14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 № 842 (в действующей редакции) к работам подобного рода. Содержание диссертации соответствует паспорту специальности, а ее автор Варсегов Илья Сергеевич, несомненно заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.2. – Аналитическая химия.

Кандидат химических наук,
ведущий научный сотрудник лаборатории спектральных и
хроматографических исследований Федерального государственного
бюджетного учреждения науки Ордена Трудового Красного Знамени
Института нефтехимического синтеза им. А.В.Топчиева Российской
академии наук (ИНХС РАН)

Борисов Роман Сергеевич



08 декабря 2025 года

Контактные данные:

тел.: 7(916)5969013, e-mail: borisov@ips.ac.ru

Специальность, по которой официальным оппонентом
защищена диссертация:

02.00.03 - Органическая химия

Адрес места работы: 119991, ГСП-1, Москва, Ленинский проспект, 29, ИНХС
РАН, лаборатория спектральных и хроматографических исследований

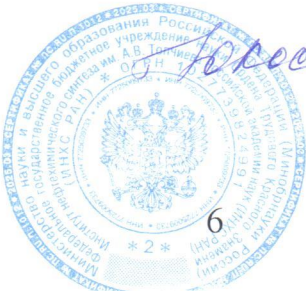
Тел.: +7(495)954-2269; e-mail: borisov@ips.ac.ru

Подпись сотрудника ИНХС РАН Р.С. Борисова удостоверяю:

Ученый секретарь ИНХС РАН

д.х.н., доцент

08 декабря 2025 года



Костина Ю.В.