

Заключение

комиссии диссертационного совета Д 002.109.01 при ГЕОХИ РАН

*о возможности принятия к защите диссертационной работы Вирюса Эдуарда Даниэлевича на тему «**Развитие жидкостной хроматомасс-спектрометрии сверхвысокого разрешения как метода скрининга физиологически активных веществ в сложных по составу смесях**», представленной на соискание ученой степени доктора химических наук по специальности 02.00.02 – аналитическая химия*

Диссертационная работа Вирюса Эдуарда Даниэлевича посвящена развитию метода жидкостной хроматомасс-спектрометрии сверхвысокого разрешения на базе орбитальной ионной ловушки для обнаружения широкого круга физиологически активных веществ (ФАВ) в биологических жидкостях. В рамках работы развивается новое направление ретроспективного скрининга следовых количеств ФАВ в сложных по составу матрицах, основанное на снижении влияния матричных эффектов за счет селективной ионизации искомым анализом для реализации аналитических возможностей орбитальной ионной ловушки. **Актуальность и важность решенных задач не вызывает сомнений.**

Автором разработана методология хроматомасс-спектрометрического скрининга экзогенных ФАВ в биологических жидкостях, включающая оценку матричных эффектов, их снижение, обнаружение ФАВ и выбор подтверждающего метода анализа. Предложены методические подходы, обеспечивающие селективную ионизацию ФАВ с переносом протона в газовой фазе и подавление ионизации мешающих компонентов матрицы в газовой фазе, что значительно уменьшает влияние таких компонентов на результаты детектирования следовых количеств анализом с использованием точно измеренной массы характеристичных ионов. На этой основе автором разработаны способы обнаружения следов стероидов, бензотиодиазинов, N-алкил- β -гидрокси-арилоксипропиламинов, катехоламинов, фенилалкиламинов, (β -гидроксифенилэтил) аминов, производных бензамида (более 100 соединений) методом жидкостной хроматомасс-спектрометрии высокого разрешения с орбитальной ионной ловушкой. Диссертационная работа вносит значительный вклад в развитие метода жидкостной хроматомасс-спектрометрии.

Практическая значимость отражена в разработанных способах достоверного обнаружения физиологически активных веществ в биологических жидкостях на следовом уровне. Разработанные решения в области селективной ионизации искомым соединений по отношению к мешающим компонентам образца могут найти применение и в сочетании с другими масс-анализаторами для решения широкого круга аналитических задач.

Тема и содержание работы соответствуют профилю Совета по специальности 02.00.02 – аналитическая химия, конкретно следующим областям исследований, предусмотренных паспортом этой специальности:

- п.2 «Методы химического анализа»,
- п.4 «Методическое обеспечение химического анализа»,
- п.10. «Анализ органических веществ и материалов»,
- п. 16. «Клинический анализ».

Соискателем опубликована 21 статья в российских и зарубежных рецензируемых журналах и три патента. 12 статей опубликованы в журналах из перечня научных изданий, входящих в Международные реферативные базы данных, 9 статей – в журналах, входящих в список ВАК. Таким образом, **требования к количеству публикаций выполнены; материал диссертации адекватно отражен в опубликованных работах.**

Список цитируемой литературы включает 224 источника. Литературные ссылки необходимы для обзора состояния исследований по тематике диссертационной работы, грамотной постановки задачи, а также обоснованного обсуждения полученных результатов. Автореферат диссертации и публикации в полной мере отражают содержание диссертационной работы и раскрывают её основные положения.

Требования к публикации основных научных результатов, предусмотренные п.11 - 13, а также требования п. 10 и 14 Положения, выполнены полностью. Текст диссертации, предоставленный в диссертационный совет, идентичен тексту диссертации, размещенному на официальном сайте ГЕОХИ РАН.

По своей актуальности, уровню поставленных и решенных задач, объёму и качеству экспериментальных данных, новизне и значимости полученных научных результатов работа *«Развитие жидкостной хроматомасс-спектрометрии сверхвысокого разрешения как метода скрининга физиологически активных веществ в сложных по составу смесях»* полностью соответствует требованиям, предъявляемым к докторским диссертациям, установленным в п. 9 "Положения о порядке присуждения ученых степеней", утвержденного постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. № № 842 (в ред. от 01.10.2018, с изм. от 26.05.2020), и является научно-квалификационной работой, в которой на основании выполненных автором исследований получены экспериментальные и теоретические результаты, совокупность которых можно квалифицировать как научное достижение в области аналитической химии, в том числе в области новой научной дисциплины – метаболомики, имеющее важное социально-экономическое значение.

Диссертационная работа *«Развитие жидкостной хроматомасс-спектрометрии сверхвысокого разрешения как метода скрининга физиологически активных веществ в сложных по составу смесях»* может быть **принята к защите** в совете на соискание ученой степени доктора химических наук по специальности 02.00.02 – аналитическая химия.

Комиссия рекомендует утвердить в качестве оппонентов:

Бродского Ефима Соломоновича, д.х.н., старшего научного сотрудника, заведующего лабораторией аналитической экотоксикологии Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института проблем экологии и эволюции им. А.Н. Северцова РАН (ИПЭЭ РАН)

Заикина Владимира Георгиевича, профессора, д.х.н., главного научного сотрудника лаборатории спектральных исследований Федерального государственного бюджетного учреждения науки Ордена Трудового Красного Знамени Института нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН (ИНХС РАН).

Родина Игоря Александровича, д.х.н., в.н.с, заместитель декана по научно-инновационной работе химического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова (МГУ).

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской академии наук (ИФХЭ РАН);

Выбор оппонентов обоснован тем, что они являются известными специалистами в области аналитической химии, и в том числе, в области хроматомасс-спектрометрии органических соединений. Все оппоненты являются авторами большого числа публикаций, соответствующих тематике диссертационной работы и опубликованных в ведущих российских и международных изданиях.

Выбор ведущей организации обоснован тем, что в ней работают высококвалифицированные специалисты в области масс-спектрометрии органических соединений, соответствующей тематике диссертационной работы; регулярно выходят публикации в ведущих журналах.

Председатель комиссии:

Г.н.с., зав. лабораторией инструментальных методов
и органических реагентов, д.х.н.

А.А. Гречников

Члены комиссии:

Г.н.с., зав. лабораторией геохимии углерода
ГЕОХИ РАН, д.т. н.

В.С. Севастьянов

Г.н.с., зав. лабораторией сорбционных методов
ГЕОХИ РАН, д.х.н.

Р.Х. Хамизов

