

**ОТЗЫВ официального оппонента**  
**на диссертацию на соискание ученой степени**  
**кандидата химических наук**  
**Детенчук Елены Андреевны**  
**на тему: «Трансформация органических веществ в окружающей среде**  
**и при воздействии хлорирующих агентов»**  
**по специальностям 1.5.15. Экология (химические науки) и**  
**1.4.3. Органическая химия**

Диссертационная работа Детенчук Елены Андреевны посвящена изучению состава продуктов, образующихся из органических соединений различного строения при их взаимодействии с реагентами для обеззараживания воды, с помощью современных физико-химических методов анализа.

**Актуальность темы** исследований предопределяется выбранным направлением работы: питьевая вода является одним из наиболее ценных и используемых в жизни человека ресурсов. Качество питьевой воды предопределяет состояние здоровья ее потребителей и играет одну из ключевых ролей в продолжительности жизни человека. Поэтому изучение факторов влияющих на появление в питьевой воде опасных соединений крайне важно для разработки процедур ее дополнительной очистки. При этом потребление питьевой воды приводит и к формированию сточных вод. Таким образом тема работы имеет важное значение и для изучения воздействия хозяйственной деятельности человека на окружающую среду.

**Научная новизна** работы очевидна и не вызывает сомнений: автором проведены масштабное изучение процессов превращения применяемых в быту соединений в условиях хлорирования воды, что позволило идентифицировать ранее не описанные продукты такой трансформации. Показано, что в результате взаимодействия некоторых из изученных в работе соединений с хлорирующими агентами могут образовываться токсичные соединения, опасные для здоровья человека.

**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, большая часть из которых является высокорейтинговыми и входит в первый квартиль международных наукометрических баз данных Web of Science и Scopus, а также докладами на международных и всероссийских научных конференциях.

**Значимость результатов диссертационной работы для науки и практики.** Полученные результаты вносят существенный вклад в изучение направлений химических взаимодействий между органическими веществами различного строения и галогенирующими агентами. С практической точки зрения собранный массив данных имеет огромное значение для контроля качества питьевой воды и безопасности стоков, 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 Детенчук Е.А. имеет традиционную структуру и состоит из введения, обзора литературы, экспериментальной части, обсуждения полученных результатов, выводов и списка цитируемой литературы, содержащего 290 наименований. Работа изложена на 147 страницах машинописного текста, включает 57 рисунков, 4 схемы и 19 таблиц.

Литературный обзор, предшествующий изложению экспериментальных методов и обсуждению собственных результатов, обстоятельно рассматривает образование различных побочных продуктов дезинфекции воды. 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 главе. Первые три ее раздела посвящены широко используемому для защиты кожи от ультрафиолетового излучения соединению - авобензону. Автором проведена впечатляющая работа по идентификации и установлению строения различных продуктов трансформации этого соединения в условиях его хлорирования и бромирования в водном растворе. Крайне интересны результаты, полученные при добавлении в реакционную среду солей железа и меди. Эти эксперименты позволяют моделировать реальные условия превращений авобензона в ходе водоподготовки или в морской воде. В результате было продемонстрировано, что присутствие катионов металлов может оказывать значительное влияние на состав продуктов трансформации резко увеличивая выход опасных для здоровья человека соединений. Так же показано, что хотя полноценные исследования в области токсикологического эффекта значительной части обнаруженных соединений не проводилось, есть основания предполагать их негативное влияние на живые организмы.

Важно отметить, что результаты модельных экспериментов, проведенных автором, нашли свое подтверждение при проведенном ею исследовании воды и пресной, и морской воды из бассейнов. Интересно, что исходного авобензона

обнаружить не удалось, что указывает на его полное превращение в продукты трансформации и подчеркивает значение проведенной работы.

Четвертый и пятый раздел работы посвящены результатам изучения превращений других широко используемых в уходовых средствах для кожи соединений - ресвератрола и лимонена. Показано, что превращение этих соединений так же может приводить к образованию потенциально токсичных соединений.

Последние три раздела главы 3 диссертации описывают результаты, полученные при изучении возможности замены одного галогена другим в ароматических соединениях в условиях водного хлорирования. Установлено, что такое замещение может приводить к образованию бромсодержащих соединений, обладающих повышенной токсичностью.

В целом работа представляет собой завершенное оригинальное научное исследование, тематика которого и полученные результаты соответствуют заявленным специальностям 1.5.15 – «Экология» (химические науки) и 1.4.3 - Органическая химия. Основное содержание диссертации опубликовано в шести статьях, а также апробировано на международных и 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 присутствуют неточности. Например, при описании условий изучения состава продуктов водного бромирования авобензона и продуктов хлорирования D-лимонена, которое проводили с помощью масс-спектрометра Pegasus GC-HRT, не указан метод ионизации, в описании хроматографических условий фигурирует GC-печь (печь хроматографа) и т.д.

2. Безусловно ценные результаты идентификации продуктов трансформации органических соединений в условиях галогенирования в водной среде по данным масс-спектрометрии с ионизацией электронами могли бы быть дополнены определением их газохроматографических характеристик - индексами удерживания. Эти

параметры оказали бы значительную помощь при идентификации этих анализов другими исследователями, однако автор предпочла оперировать временами удерживания. Более того, в Табл.3 при их указании допущена ошибка в размерности, в результате у некоторых соединений времена удерживания составляют более 17 часов.

3. Приписание положений заместителей при изучении продуктов трансформации авобензона вызывает определенные сомнения. Например, соединение 18b 2-хлор-4-метоксифенол было идентифицировано с помощью масс-спектральной базы данных NIST. Однако масс-спектр его изомера 3-хлор-4-метоксифенола, образование которого так же вполне возможно, в базе данных отсутствует. Поэтому сделать однозначный вывод о строении этого соединения нельзя. Гораздо более надежный подход автор использовала в следующих разделах, где для возможных изомерных структур точное положение заместителей не приведены.

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 диссертация «Трансформация органических веществ в окружающей среде и при воздействии хлорирующих агентов» Детенчук Елены Андреевны является законченной научно-квалификационной работой, а по объему теоретических и экспериментальных исследований, их актуальности, научной новизне и практической значимости отвечает требованиям, установленным Московским государственным университетом имени М.В.Ломоносова к работам подобного рода. Содержание диссертации соответствует паспортам специальностей 1.5.15. Экология (химические науки) и 1.4.3. Органическая химия, а также критериям, определенным пп. 2.1-2.5 Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова, и оформлена согласно требованиям Положения о совете по защите диссертаций на

соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова. Автор же диссертационного исследования, *Детенчук Елена Андреевна*, несомненно заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальностям 1.5.15. Экология (химические науки) и 1.4.3. Органическая химия.

Кандидат химических наук,  
ведущий научный сотрудник лаборатории №15 «Спектральных исследований» отдела физико-химических исследований Федерального государственного бюджетного учреждения науки Ордена Трудового Красного Знамени Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской академии наук (ИНХС РАН)

Борисов Роман Сергеевич

15 октября 2023 года

Контактные данные:

Рабочий тел.: +7 495 954-22-69, рабочий e-mail: borisov@isp.ac.ru.

Специальность, по которой официальным оппонентом защищена диссертация:  
02.00.03 – Органическая химия

Адрес места работы:

119991, Москва, ГСП-1, г. Москва, Ленинский проспект, д. 29; Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Ордена Трудового Красного Знамени Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской академии наук (ИНХС РАН), Отдел физико-химических исследований  
+7 495 954-22-69, e-mail: borisov@isp.ac.ru

Подпись сотрудника ИНХС РАН Р.С. Борисова удостоверяю:

Ученый секретарь ИНХС РАН

д.х.н., доцент

15 октября 2023 года

Костина Ю.В.