

## УТВЕРЖДАЮ

Проректор по научной работе  
ФГБОУ ВО «Уфимский университет  
науки и технологий»  
д.ф.-м.н. профессор

С.А. Мустафина  
«10» \_\_\_\_\_ 2023 г.



## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения  
высшего образования  
«Уфимский университет науки и технологий»

Диссертация «Особенности электрохимического поведения сенсорных систем на основе графитового, угольно-пастового и полианилинового электродов в условиях их непрерывного функционирования» выполнена на кафедре физической химии и химической экологии Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский университет науки и технологий».

В период подготовки диссертации соискатель Максютова Эльза Ильдусовна обучалась в аспирантуре по очной форме обучения по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки, направленность Физическая химия и работала по совместительству в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Башкирский государственный университет» в должности инженера научно-исследовательского сектора.

В 2017 г. окончила Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Башкирский государственный университет» по направлению подготовки 04.04.01 Химия с присвоением квалификации «Магистр». В 2021 г. окончила аспирантуру по очной форме обучения Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Башкирский государственный университет» по направлению подготовки 04.06.01

Химические науки с присвоением квалификации «Исследователь. Преподаватель-исследователь». Диплом об окончании аспирантуры выдан Федеральным государственным бюджетным образовательным учреждением высшего образования «Башкирский государственный университет» в 2021 г.

Справка об обучении со сведениями о сданных кандидатских экзаменах выдана Федеральным государственным бюджетным образовательным учреждением высшего образования «Уфимский университет науки и технологий» в 2023 г.

Научный руководитель – Сидельников Артем Викторович, доктор химических наук, доцент, профессор кафедры зеленой химии и ресурсосберегающих технологий Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский университет науки и технологий».

По итогам обсуждения диссертации принято следующее заключение:

Диссертация Максютовой Эльзы Ильдусовны на тему «Особенности электрохимического поведения сенсорных систем на основе графитового, угольно-пастового и полианилинового электродов в условиях их непрерывного функционирования», представленная на соискание ученой степени кандидата химических наук по научной специальности 1.4.4. Физическая химия, является самостоятельным законченным исследованием, связанным с изучением физико-химических свойств электрохимических систем в условиях вольтамперометрии следов органических соединений, содержащих химические связи с разной полярностью и электрохимической активностью. Данная работа имеет теоретическое и практическое значение для развития научных знаний и подходов к физико-химическим исследованиям реакций и процессов с применением хемометрии и вольтамперометрии больших данных об объектах, химические микрокомпоненты в которых проявляют свою активность при малых концентрациях, сопоставимых в пересчете на электрохимические сигналы с фоновыми сигналами и их дисперсией.

Диссертационная работа направлена на решение следующих задач:

1. Изучение влияния природы, модификаций электродов/сенсоров на физико-химические свойства электрохимических систем.

2. Изучение влияния природы анализируемого соединения на величину предела обнаружения.

3. Количественное описание фрактальной структуры электроактивных центров поверхности электродов/сенсоров при протекании электрического тока в условиях многократного функционирования сенсорных систем.

4. Определение активационных параметров гетерогенных окислительно-восстановительных реакций в электрохимических системах с использованием модифицированного метода - проекции на латентные структуры.

**Актуальность** представленной работы связана с проблемой исследования активности следов химических компонентов в реакциях и процессах, в которых прецизионный контроль их содержания во времени затруднен в силу малой интенсивности откликов сенсоров на их присутствие в условиях электрохимических измерений, зашумленных дисперсией фона различной природы и сигналами высокой интенсивности «мешающих» макрокомпонентов матрицы растворов.

В таких условиях, а именно на уровне или ниже предела обнаружения, для извлечения полезного электрохимического сигнала и усиления его интенсивности решениями являются непрерывное функционирование электрохимической системы, совершенствование способов обработки сигналов отклика, использованию новых способов онлайн модифицирования сенсорных слоев и сочетание этих подходов в рамках распознавания образов и регрессионного анализа с машинным обучением. В условиях многократного функционирования сенсоров неизбежный дрейф токов и потенциалов во времени приводит к непредсказуемому поведению электрохимической системы и ухудшает показатели точности определения физико-химических параметров, функционально связанных с природой и концентрацией исследуемых компонентов.

Особый интерес представляют случаи с образцами, содержащими компоненты органической природы, не обладающие электрохимической активностью или, если и присутствуют, то в следовых количествах. Например, для определения ультрамикроколичеств элементов в инверсионной вольтамперометрии сначала проводится накопление электроактивного вещества на поверхности электрода. Однако экспериментальные данные по

интенсивностям следов веществ часто «зашумлены», и извлечь полезную химическую информацию с использованием классических приемов обработки сигналов затруднительно (отсутствуют или искажены пики окисления/восстановления компонентов). Решение этой проблемы актуально при исследовании реакций и процессов с участием неэлектроактивных веществ: органических технических жидкостей, пищевых масел, лекарственных средств, сточных и природных вод и т.п. Расширение перечня таких объектов исследования и методов вольтамперометрического анализа их химических компонентов актуально в экологическом мониторинге жилища, природных объектов, комплексном геоэкологическом мониторинге окружающей среды, мониторинге коррозионных процессов, контроле качества препаратов в медицине и сырья/продуктов питания в пищевой промышленности и др.

Одним из способов решения проблемы количественной оценки «шума» и его классификации в рамках концепции «Бигдата» является многократное проведение электрохимических измерений с применением мультисенсорных систем электродов перекрестной чувствительности. Преимущество такого подхода состоит в накоплении/усилении малоинтенсивных сигналов в широком диапазоне потенциалов. Временная протяженность измерения отклика в этом формате регистрации данных позволяет проводить его дискретно с той точностью, которую обеспечивает аппаратура (импедансометры и потенциостаты/гальваностаты позволяют регистрировать нано-, пико- токи).

В практику физико-химических исследований в последние десятилетия активно вовлекаются передовые методы обработки массива данных временных рядов с применением машинного обучения: фрактальный анализ, искусственные нейронные сети, теория перколяции и др. С целью количественного описания скрытых закономерностей в массиве физико-химических параметров, обусловленных комплексным влиянием сигналов одновременного высокой и низкой интенсивности, наибольшую теоретическую и практическую значимость получили фрактальные подходы, так как они позволяют, в отличие от искусственных нейронных сетей, в явном виде получить фрактальные характеристики исследуемого процесса. В частности, в работе применен фрактальный подход в рамках перколяционной модели протекания токов в сенсорных системах. Важнейшими характеристическими параметрами электрохимической активности выступают количество перколяционных каналов и фрактальная размерность границы раздела фаз электрод/раствор.

**Научная новизна** исследования заключается в том, что:

– впервые обнаружена и количественно описана временная структура вольтамперометрического поведения мультисенсорных систем на основе твердых плоских, трубчатых и угольно-пастовых электродов в рамках фрактального подхода;

– впервые определены и количественно описаны фрактальные физико-химические характеристики электрохимических систем, установлена их взаимосвязь с природой электродов, объемной концентрацией химических компонентов и качественным составом исследуемых жидкостей;

– выявлены термодинамические факторы перекрестной чувствительности пленочных электродов на основе индикаторной реакции электрополимеризации анилина и его аналогов в присутствии БАВ.

**Научная и практическая значимость работы:**

– предложен подход к определению физико-химических характеристик электрохимических реакций и процессов с использованием вольтамперных временных рядов неэлектроактивных веществ и следовых количеств деполяризаторов;

– изучена фрактальная природа электрохимических процессов, обусловленная образованием перколяционных каналов – активных центров, участвующих в переносе заряженных частиц;

– усовершенствованы подходы к распознаванию неэлектроактивных веществ с использованием вольтамперометрических мультисенсорных систем;

– разработана методика вольтамперометрического распознавания неэлектроактивных компонентов на примере связующего УПЭ;

– на основе физико-химических характеристик электродных процессов представлена методика для вольтамперометрического определения следовых количеств электроактивных компонентов на примере триптофана на платиновом и графитовом электродах;

– предложены методика вольтамперометрического распознавания витаминов группы В и подход к термодинамическому анализу на основе индикаторной реакции электрополимеризации анилина и его аналогов в присутствии БАВ.

**Степень достоверности и апробация результатов**

Достоверность результатов исследования подтверждается многочисленными экспериментальными данными, полученными с использованием современных физико-химических методов анализа.

Основные результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на всероссийских и международных конференциях таких, как Третий съезд аналитиков России (Москва, 2017), республиканская научно-практическая конференция «История, настоящее и будущее химической промышленности республики Башкортостан» (Стерлитамак, 2017), The Eleventh Winter Symposium on Chemometrics «Modern Methods of Data Analysis» (Санкт-Петербург, 2018), XXI Всероссийская конференция молодых учёных-химиков (с международным участием) (Нижний Новгород, 2018), I Міжнародна (IX Українська) наукова конференція студентів, аспірантів і молодих учених «Хімічні проблеми сьогодення» (Винница, 2018), III Всероссийская молодежная конференция «Достижения молодых ученых: химические науки» (Уфа, 2018), XIII Всероссийская научная интернет-конференция «Интеграция науки и высшего образования в области био- и органической химии и биотехнологии» (Уфа, 2019), V Международная заочная научно-практическая конференция аспирантов, магистрантов и студентов «Современные технологии: актуальные вопросы, достижения и тенденции развития» (Стерлитамак–Актобе, 2019), The Twelfth Winter Symposium on Chemometrics «Modern Methods of Data Analysis» (Саратов, 2020), XXII Всероссийская конференция молодых учёных-химиков (с международным участием) (Нижний Новгород, 2020), V Всероссийская (заочная) молодежная конференция «Достижения молодых ученых: химические науки» (Уфа, 2020), XIII Международная научно-практическая конференция молодых ученых «Актуальные проблемы науки и техники – 2020» (Уфа, 2020), XIV Международная научно-практическая конференция молодых ученых «Актуальные проблемы науки и техники – 2021» (Уфа, 2021).

#### **Личный вклад автора.**

Автор участвовал во всех стадиях научно-исследовательского процесса: от постановки задачи до проведения экспериментальных работ, обработки данных и их интерпретации, подготовки публикаций. Все выводы основаны на данных, полученных автором.

По теме диссертации опубликовано 22 научные работы, из которых 10 научных статей, из них 3 в рецензируемых научных журналах, рекомендованных перечнем ВАК РФ при Министерстве науки и высшего образования Российской

Федерации, 7 включены в базу данных Web of Science, 12 тезисов докладов на всероссийских и международных конференциях.

1. МГК-анализ вольтамперных временных рядов энантиомеров триптофана в условиях непрерывного функционирования сенсора / А.В. Сидельников, Р.Р. Нигматуллин, В.Н. Майстренко, Г.К. Будников, Э.И. Максютова, А.А. Тихонова // Бутлеровские сообщения. – 2017. – Т. 51, № 9. – С. 94-102.

2. Импедансометрическое определение катионных поверхностно-активных веществ методом титрования / А.В. Сидельников, Д.И. Дубровский, Ф.Х. Кудашева, Э.И. Максютова, А.А. Тихонова // Вестник Башкирского университета. – 2017. – Т. 22, № 2. – С. 373-378.

3. Характеризация вольтамперных временных рядов твердых электродов с использованием метода главных компонент / А.В. Сидельников, Р.Р. Нигматуллин, Г.К. Будников, Э.И. Максютова, В.Б. Богуславский // Вестник Башкирского университета. – 2017. – Т. 22, № 4. – С. 1006-1016.

4. Temporal multi-sensor system for voltammetric recognition of L- and D-tryptophan enantiomers based on generalized principal component analysis / R.R. Nigmatullin, H.C. Budnikov, A.A. Khamzin, A.V. Sidelnikov, E.I. Maksyutova, // New Journal of Chemistry. – 2018. – V. 42, № 1. – P. 465-475.

5. Description of Complex Fluids Electrochemical Data in the Frame of Percolation Model / R.R. Nigmatullin, A.V. Sidelnikov, H.C. Budnikov, E.I. Maksyutova // Electroanalysis. – 2018. – V. 30, № 9. – P. 2053-2065.

6. Detection of additives with the help of discrete geometrical invariants / R.R. Nigmatullin, A.S. Vorobev, H.C. Budnikov, A.V. Sidelnikov, E.I. Maksyutova, // Applied Sciences. – 2019. – V. 9, № 5. – P. 926.

7. The usage of unremovable artefacts for the quantitative "reading" of nanonoises in voltammetry / R.R. Nigmatullin, A.S. Vorobev, H.C. Budnikov, A.V. Sidelnikov, A.D. Badikova, E.I. Maksyutova // New Journal of Chemistry. – 2019. – V. 43, № 16. – P. 6168-6178.

8. Classification of raw sugar by PCA of voltammetric signals from tube electrodes / E.I. Maksyutova, A.V. Sidelnikov, A.G. Mustafin, E.V. Govorov // New Journal of Chemistry. – 2021. – V. 45, № 30. – P. 13512-13518.

9. Differentiation of different sorts of sugars by the CAPoNeF method / R.R. Nigmatullin, A.V. Sidelnikov, E.I. Maksyutova [et al.] // *Electroanalysis*. – 2021. – V. 33, № 12. – P. 2508-2515.

10. A quantitative description of the voltammetric time series of unclosed electric circuits for detection of differences between different potentiostats/galvanostats / R.R. Nigmatullin, V.S. Alexandrov, A.V. Sidelnikov, H.C. Budnikov, E.I. Maksyutova, A.S. Kvyatkovskaya // *New Journal of Chemistry*. – 2022. – V. 46. – P. 12148-12157.

Диссертация Максютовой Эльзы Ильдусовны «Особенности электрохимического поведения сенсорных систем на основе графитового, угольно-пастового и полианилинового электродов в условиях их непрерывного функционирования» соответствует паспорту научной специальности 1.4.4. Физическая химия (химические науки), а именно пункту 3 – «Определение термодинамических характеристик процессов на поверхности, установление закономерностей адсорбции на границе раздела фаз и формирования активных центров на таких поверхностях», пункту 6 – «Химические превращения, потоки массы, энергии и энтропии пространственных и временных структур в неравновесных системах», пункту 10 – «Создание и разработка методов компьютерного моделирования строения и механизмов превращений химических соединений на основе представлений квантовой механики, различных топологических и статистических методов, включая методы машинного обучения, методов молекулярной механики и молекулярной динамики, а также подходов типа структура-свойства».

Диссертационная работа соответствует требованиям п. п. 9-11, 13, 14 Постановления Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. № 842 «О порядке присуждения ученых степеней». В диссертации соискатель ссылается на собственные опубликованные работы, а также на работы других ученых, материалы без ссылки или источника заимствования отсутствуют.

Диссертация Максютовой Эльзы Ильдусовны «Особенности электрохимического поведения сенсорных систем на основе графитового, угольно-пастового и полианилинового электродов в условиях их непрерывного функционирования» рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата химических наук по научной специальности 1.4.4. Физическая химия.



Заключение принято на заседании кафедры физической химии и химической экологии химического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский университет науки и технологий».

Присутствовало на заседании 16 чел., из них докторов наук 6 чел.

Результаты голосования: «за» – 16 чел., «против» – 0 чел., «воздержалось» – 0 чел.

Протокол № 9 от «10» апреля 2023 г.

Заведующий кафедрой  
физической химии и химической экологии  
ФГБОУ ВО «Уфимский университет  
науки и технологий»  
д.х.н., профессор

Мустафин  
Ахат Газизьянович

Подпись Мустафина А.Г. заверяю:  
Ученый секретарь Ученого совета университета



Ефименко Н.В.