



Морозова Ксения Игоревна

ОБРАЗОВАНИЕ

2019 –2023

ЯрГУ им. П.Г. Демидова

Институт фундаментальной и прикладной химии

Химия (медицинская и фармацевтическая химия)

Научный руководитель: Лебедев Антон Сергеевич, к.х.н., доцент

Тема ВКР: «Обнаружение субстандартного сливочного масла методом ИК-спектроскопии с использованием дискриминантного анализа»

В работе предлагается методика оценки подлинности сливочного масла, основанная на методе спектроскопии в ближней инфракрасной области. Результаты работы посвящены проведению подбора условий подготовки образца, реализации анализа ИК- и БИК-спектров, выявлению наиболее информативных спектральных областей. В работе реализована хемометрическая обработка и анализ полученных данных, подробно описывается выбор оптимальной предварительной обработки спектральных данных. Полученная математическая модель дискриминации подвергается кросс- и тест-валидации, приводится оценка чувствительности и селективности модели. В работе также рассчитывается чувствительность самой аналитической методики, что дает дополнительное подтверждение корректности выбранного аналитического подхода. Разработанная методика характеризуется приемлемой селективностью, достаточной чувствительностью и низкой трудоемкостью. В связи с этим разработанную методику в дальнейшем можно использовать в качестве экспрессной при потоковом анализе образцов сливочного масла.

Научная группа кафедры физической органической химии

Лаборатория невалентных взаимодействий

Научный руководитель: Толстой Пётр Михайлович, д.х.н., профессор

Магистерская работа будет посвящена исследованию водородной связи, перехода протона в гомосопряжённых анионах органических кислот методами низкотемпературной ЯМР-спектроскопии с применением квантовых расчетов.