

«УТВЕРЖДАЮ»

Протокол ректора РХТУ им. Д. И. Менделеева,
к.б.н., доц. Д.А. Сахаров



« 04 » _____ 20 23 г.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Диссертация на тему: «Электропроводность некоторых ионных жидкостей в диметилформамиде и диметилсульфоксиде» по научной специальности 1.4.4 Физическая химия выполнена в РХТУ имени Д.И. Менделеева на кафедре общей и неорганической химии.

В процессе подготовки диссертации с 01.09.2019 г и по настоящее время Карпуничкина Ирина Алексеевна, «02» июня 1995 года рождения, является аспирантом РХТУ им. Д.И. Менделеева.

Справка об обучении выдана РХТУ им. Д.И. Менделеева в 2023 году.

Научный руководитель д.х.н. по научным специальностям 02.00.01 Неорганическая химия и 02.00.04 Физическая химия, проф. РХТУ им. Д.И. Менделеева кафедры общей и неорганической химии Щербаков Владимир Васильевич.

По результатам рассмотрения диссертации на тему: «Электропроводность некоторых ионных жидкостей в диметилформамиде и диметилсульфоксиде» принято следующее заключение.

Актуальность темы диссертационной работы обусловлена тем, что ионные жидкости (ИЖ) являются конкурентоспособными материалами для «Зеленой химии», в частности для экологически чистой электроники. Ионные жидкости ИЖ способны растворять как полярные, так и неполярные вещества, обладают низкой летучестью и практически исключают

1
12/23

возможность возгорания, а также могут быть многократно использованы после очистки. В сравнении со многими растворителями, используемыми на производстве, ИЖ обладают меньшей токсичностью. Можно назвать ИЖ «дизайнерскими» растворителями, поскольку подбором различных комбинаций катиона и аниона получают соединения с требуемыми свойствами. Затрудняет практическое использование ИЖ их высокая вязкость. По этой причине большой интерес представляют их смеси с полярными растворителями. Несмотря на большое количество исследований физико-химических свойств ИЖ, мало изучены свойства их растворов в индивидуальных и смешанных растворителях. Это замедляет и затрудняет возможность их практическое применение.

Научная новизна заключается в следующем:

Впервые в интервале температур 20 – 85°C и в широком интервале концентраций определена удельная ЭП растворов 1-бутил-3-метилимидазолий бис {(трифторметил) сульфонил} имида (ИЖ-1), 1-бутил-3-метилпиридиний бис {(трифторметил) сульфонил} имида (ИЖ-2), тригексилтетрадецил-фосфоний хлорида (ИЖ-3) и тригексилтетрадецил-фосфоний бромида (ИЖ-4) в ДМФА и ДМСО. Установлены закономерности изменения ЭП исследованных растворов в зависимости от концентрации и температуры. Определены термодинамические характеристики ассоциации ИЖ в ДМФА и ДМСО. Рассчитано расстояние между частицами в исследуемых растворах и установлена структура ионных пар в концентрированных растворах ИЖ. Установлена связь между величиной ЭП растворов ИЖ и диэлектрическими характеристиками растворителей.

Практическая ценность работы состоит в том, что полученные в данной работе численные величины удельной ЭП дают возможность проводить термодинамические расчеты процессов, протекающих в неводных растворителях, используя их в качестве справочного материала. Установленные в работе закономерности изменения удельной ЭП в

зависимости от концентрации и температуры позволяют без проведения измерений оценивать величины удельной ЭП диметилформамидных и диметилсульфоксидных растворов ионных жидкостей.

Работа характеризуется логичностью построения, аргументированностью основных научных положений и выводов, а также четкостью изложения.

Основные положения диссертации получили полное отражение в 27 публикациях, три из которых индексируются в системах Scopus и WOS, а 12 представляют собой тезисы докладов на международных и всероссийских конференциях.

Результаты диссертации представлены на международных и всероссийских конференциях, в том числе на IX Международной конференции Российского химического общества имени Д. И. Менделеева (г. Москва, 2018 г.), XXIII Международной научно-практической конференции «Инновационные технологии» (г. Тула, 2019 г.), IX, X, XI, XII и XIII Всероссийской (с международным участием) научной конференции «Современные методы в теоретической и экспериментальной электрохимии» (г. Плес, Ивановская обл., 2017 – 2022 г.г.), XXVIII Международной Чугаевской конференции по координационной химии (г. Туапсе, 2021 г.), XXXIII, XXXIV, XXXV и XXXVI Международном конгрессе молодых ученых по химии и химической технологии (г. Москва, 2019 – 2022 г.г.), XIV Международной научной конференции «Проблемы сольватации и комплексообразования в растворах» (г. Иваново, 2021 г.).

Наиболее значимые публикации по теме диссертации:

1. Shcherbakov Vladimir V., Artemkina Yuliya M., Akimova Irina A., Artemkina Irina M. Dielectric Characteristics, Electrical Conductivity and Solvation of Ions in Electrolyte Solutions. // Materials. Vol.14(19), 5617 2021 (DOI:10.3390/ma14195617; Q2).

2. Artemkina Yu.M., Shcherbakov V.V., Akimova I.A. The Temperature Dependence of the Electrical Conductivity Activation Energy of the of Aqueous Electrolyte Solutions. //Key Engineering Materials. 2021. Vol. 1031. P. 228-233 (ISSN: 1662-9752 doi:10.4028/www.scientific.net/MSF.1031.228; Q3).

3. Karpunichkina I.A. (Akimova I.A.), Artemkina Yu.M., Pleshkova N.V., Shcherbakov V.V. Electrical conductivity and association of 1-butyl-3-methylpyridinium bis{(trifluoromethyl)sulfonyl}amide in some polar solvents. Herald of the Bauman Moscow State Technical University, Series Natural Sciences, 2023, no. 3 (108), pp. 145–163. DOI: <https://doi.org/10.18698/1812-3368-2023-3-145-163>.

4. Артемкина Ю.М., Акимова И.А., Щербаков В.В. Возможности применения кондуктометрического метода для оценки солености сточных вод и состава регенерированных растворов электролитов. // Современные проблемы экологии. Доклады XXIII Международной научно-практической конференции. 15 октября 2019 года. -Тула. «Инновационные технологии». 2019. С. 41 – 44.

5. Машина А.Н., Щербаков В.В., Артемкина Ю.М., Акимова И.А. Электропроводность и ассоциация 1-октил-3-метилимидазолий трифлата в диметилформамиде. //Химическая технология и биотехнология новых материалов и продуктов. IX Международная конференция Российского химического общества имени Д. И. Менделеева: тезисы докладов. – М. : РХО им. Д. И. Менделеева : РХТУ им. Д. И. Менделеева, 31.10.2018. С. 37 – 39.

6. Артемкина Ю.М., Акимова И.А., Щербаков В.В. Возможности применения кондуктометрического метода для оценки солености сточных вод и состава регенерированных растворов электролитов. // Современные проблемы экологии. Доклады XXIII Международной научно-практической конференции. 15 октября 2019 года. -Тула. «Инновационные технологии». 2019. С. 41 – 44.

7. Щербаков В.В., Дуров В.А., Артемкина Ю.М., Акимова И.А. Электропроводность и расстояние между ионами в водных растворах// Современныe методы в теоретической и экспериментальной электрохимии». XI Всероссийская (с междунар. участием) научная конференция Тез. Докл. 7.09–11.09 2020 г. Плес, Ивановская обл. С. 134.

8. Артемкина Ю.М., Акимова И.А., Щербаков В.В. Сольватация ионов в растворах и расстояние между ионами в полярных растворителях. Тезисы докладов. КЛАСТЕР КОНФЕРЕНЦИЙ 2021: XIV Международная научная конференция «Проблемы сольватации и комплексообразования в растворах» XI Международная научная конференция "Кинетика и механизм кристаллизации. Кристаллизация и материалы нового поколения" VI Международная научная конференция по химии и химической технологии XIII Всероссийская школа-конференция молодых ученых «Теоретическая и экспериментальная химия жидкофазных систем» (Крестовские чтения). 20-24 сентября 2021 г. Иваново. С. 112.

9. Щербаков В.В., Артемкина Ю.М., Акимова И.А., Артемкина И.М. Комплексообразование в водных растворах неэлектролитов и расстояние между молекулами в растворе. XXVIII Международная Чугаевская конференция по координационной химии. Сборник тезисов. 3-8 октября 2021 г. Туапсе. С. 470.

10. Акимова И.А., Артемкина Ю.М., Стаханова С.В., Щербаков В.В. Зависимость энергии активации электропроводности растворов тетрафторобората N,N-диметилпирролидия в ацетонитриле от температуры. «Современные методы в теоретической и экспериментальной электрохимии», XII Международная научная конференция, г. Плес, Ивановская обл., 13-17 сентября 2021 г. Тезисы докладов. Иваново: Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, 2021. С. 80.

11. Артемкина Ю.М., Акимова И.А., Артемкина И.М., Щербаков В.В. О природе максимума концентрационной зависимости удельной

электропроводности растворов электролитов в полярных растворителях. «Современные методы в теоретической и экспериментальной электрохимии», XII Международная научная конференция, г. Плес, Ивановская обл., 13-17 сентября 2021 г. Тезисы докладов. Иваново: Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, 2021. С. 126.

12. Карпуничкина И.А., Артемкина Ю.М., Щербаков В.В. Влияние температуры на электропроводность разбавленных растворов тригексилтетрадецилфосфоний бромида в диметилформамиде. «Современные методы в теоретической и экспериментальной электрохимии», XIII Международная научная конференция, г. Плес, Ивановская обл., 05-09 сентября 2022 г. Тезисы докладов. Иваново: Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, 2022. С. 77.

По тематике, методам исследования, предложенным новым научным положениям диссертация соответствует паспорту научной специальности научных работников 1.4.4. Физическая химия в части:

4. Теория растворов, межмолекулярные и межчастичные взаимодействия. Компьютерное моделирование строения, свойств и спектральных характеристик молекул и их комплексов в простых и непростых жидкостях, а также ранних стадий процессов растворения и зародышеобразования.

Автореферат отражает основное содержание диссертации.

Диссертация Карпуничкиной Ирины Алексеевны является завершенной научно-квалификационной работой, содержащей результаты, полученные на основании исследований, проведенных на высоком научном и техническом уровне с применением современных методов исследования. Научные положения, выводы и рекомендации, сформулированные автором, теоретически обоснованы и не вызывают сомнений. Представленные в работе результаты принадлежат Карпуничкиной Ирине Алексеевне; они оригинальны, достоверны и отличаются научной новизной и практической значимостью.

С учетом научной зрелости автора, актуальности, научной новизны и практической значимости работы, а также ее соответствия требованиям Положения о порядке присуждения ученых степеней в федеральном государственном бюджетном учреждении высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», предъявляемым к подобным работам, диссертация на тему: «Электропроводность некоторых ионных жидкостей в диметилформамиде и диметилсульфоксиде» рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Диссертация рассмотрена на заседании комиссии по итоговой аттестации по научной специальности 1.4.4. Физическая химия, состоявшемся «21» июня 2023 года, протокол № 1. В обсуждении приняли участие: зав. кафедрой физической химии, доц. Райтман О.А., зав. кафедрой ОНХ, декан ФЕН, доц. Свириденкова Н.В., доц. Гребенник А.В., доц. Мерещкий А.М., доц. Попова Н.Г., проф. Бушуев Н.Н., доц. Артемкина И.М.

Приняли участие в голосовании 7 членов комиссии. Результаты голосования: «За» - 7, «Против» - нет, «Воздержались» - нет, протокол № 1 от «21» июня 2023 г.

Председатель комиссии по
итоговой аттестации

О.А. Райтман

Секретарь заседания

И.М. Артемкина

ПРОТОКОЛ

заседания комиссии по итоговой аттестации

РХТУ им. Д.И. Менделеева

от «21» июня 2023г. № 1

Присутствовали: зав. кафедры физической химии, доц. Райтман О.А., зав. кафедры ОНХ, декан ФЕН, доц. Свириденкова Н.В., доц. Гребенник А.В., доц. Мерещкий А.М., доц. Попова Н.Г., проф. Бушуев Н.Н., доц. Артемкина И.М.

Всего присутствовало: 7 человек.

ПОВЕСТКА ДНЯ

Предварительное рассмотрение диссертационной работы Карпуничкиной Ирина Алексеевны, аспиранта кафедры общей и неорганической химии РХТУ им. Д.И. Менделеева на тему: «Электропроводность некоторых ионных жидкостей в диметилформамиде и диметилсульфоксиде».

Работа выполнена на кафедре общей и неорганической химии РХТУ им. Д.И. Менделеева.

Тема диссертационной работы Карпуничкиной Ирины Алексеевны и научный руководитель доктор химических наук, профессор Щербаков Владимир Васильевич утверждены на заседании Ученого совета РХТУ им. Д.И. Менделеева от 25.11.2020 г. (протокол № 4). Тема диссертации переутверждена на заседании Ученого совета факультета естественных наук от 08.06.2023 (протокол №11).

СЛУШАЛИ:

Сообщение Карпуничкиной Ирины Алексеевны, изложившей основное содержание своей диссертационной работы.

Карпуничкиной Ирине Алексеевне были заданы следующие вопросы:

Проф. Бушуев Н.Н.: Тема диссертационной работы «Ионные жидкости». Ионные жидкости должны проводить электрический ток. ДМСО

и ДМФА – это тоже электролиты? К какому классу соединений они относятся? Они полярны?

Проф. Бушуев Н.Н.: При какой температуре наблюдается кристаллизация ваших ионных жидкостей? Вы пробовали их заморозить?

Проф. Бушуев Н.Н.: При взаимодействии ионных жидкостей могут образовываться ассоциаты. Диаметры частиц есть в ваших таблицах. Как вычисляли межмолекулярное расстояние?

Проф. Бушуев Н.Н.: Подобные исследования проводились ранее? Такое было в иностранной литературе?

Проф. Бушуев Н.Н.: Какая основа у молекул ионных жидкостей? Они сферические?

Проф. Бушуев Н.Н.: С чем связаны перегибы на рисунке 9? Совпадают ли эти перегибы с состоянием лигандов растворителя?

Доц. Мерещкий А.М.: Что вы вкладывали в понятие «разбавленные растворы»?

Доц. Гребенник А.В.: Вы изучили физические свойства чистых ионных жидкостей?

Доц. Гребенник А.В.: В таблице 4 энтропия ассоциации должна быть отрицательная, а она у Вас положительная, а отрицательная только в ИЖ-2. Можете это объяснить?

Доц. Гребенник А.В.: Почему не привели на рисунке 4 второй график из автореферата?

Доц. Гребенник А.В.: Почему Вы выбрали последние опубликованные данные по диэлектрической проницаемости, а не цифры из справочника Я.Ю. Ахадова 1999г.?

Зав. каф. Райтман О.А.: Покажите структурные формулы. Рассчитывали подвижность для двух первых молекул?

Зав. каф. Райтман О.А.: Почему выбрали ИЖ-1/2 и ИЖ-3/4 из разных классов?

Зав. каф. Райтман О.А.: Чем обусловлено падение для ИЖ-2 константы ассоциации в ДМФА? Как Вы думаете?

Зав. каф. Райтман О.А.: В ДМСО наблюдается такая же тенденция с константами ассоциации?

Зав. каф. Райтман О.А.: У Вас на слайде была вязкость жидкостей. К чему она относится?

Доц. Гребенник А.В. сделал замечание по отсутствию уравнения Ли Уитона в тексте диссертации и рекомендовал представить диссертационную работу Карпуничкиной И.А. к защите.

Доц. Мерецкий А.М. отметил, что Карпуничкина И.А. прекрасно разбирается во всех разделах своей работы и рекомендовал работу к защите.

Зав. каф. Райтман О.А. указал на большой массив данных и обширность работы. Научная новизна и актуальность не вызывает сомнений. Рекомендовал работу к защите.

Слово предоставляется руководителю работы проф. Щербакову В.В.. В своем выступлении проф. Щербаков В.В. положительно охарактеризовал работу Карпуничкиной И.А. по подготовке диссертационной работы и предложил рекомендовать ее к защите.

В обсуждении приняли участие: зав. кафедры физической химии, доц. Райтман О.А., зав. кафедры ОНХ, декан ФЕН, доц. Свириденкова Н.В., доц. Гребенник А.В., доц. Мерецкий А.М., доц. Попова Н.Г., проф. Бушуев Н.Н., доц. Артемкина И.М.

ПОСТАНОВИЛИ:

Заслушав и обсудив диссертационную работу Карпуничкиной Ирины Алексеевны, принять следующее заключение.

Председатель комиссии по
итоговой аттестации



О.А. Райтман

Секретарь заседания



И.М. Артемкина