

УТВЕРЖДАЮ:

Проректор по научной работе  
СПбГУ



*С.В. Микущев*

» *апрель* 2024 г.

М.П.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет»

Диссертация Корчака Петра Андреевича «Равновесие жидкость-жидкость и распределение биокompонента в водно-солевых системах на основе ионных жидкостей разного строения» выполнена на Кафедре физической химии Института химии СПбГУ Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет».

В период подготовки соискатель Корчак Петр Андреевич обучался в аспирантуре Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет».

В 2019 г. окончил Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет» по специальности 04.04.01 «Химия».

Удостоверение о сдаче кандидатских экзаменов (№ 05/1-13-19) выдано 26 сентября 2022 года. Диплом об окончании аспирантуры при Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет» выдан 13 июля 2023 г.

Научный руководитель (консультант) – Сафонова Евгения Алексеевна, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет», доцент кафедры физической химии

По итогам рассмотрения диссертации принято следующее заключение:

Диссертационная работа Корчака Петра Андреевича на тему «Равновесие жидкость-жидкость и распределение биокompонента в водно-солевых системах на основе ионных жидкостей разного строения», представленная на соискание ученой степени кандидата химических наук, является законченным научно-квалификационным исследованием в области физической химии гетерогенных водно-солевых систем, содержащих ионные жидкости разного строения и модельные биокompоненты. По результатам работы исследованы равновесие жидкость-жидкость и коэффициенты распределения биокompонентов в системах на основе ионной жидкости и неорганической соли разного

химического строения ионной жидкости. В работе продемонстрированы возможности современной молекулярно-термодинамической модели (ePC-SAFT) при описании фазового поведения изученных систем.

Диссертационная работа Корчака Петра Андреевича на тему «Равновесие жидкость-жидкость и распределение биокомпонента в водно-солевых системах на основе ионных жидкостей разного строения» выполнена в рамках проектов Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 16-03-00723а) и Российского научного фонда (грант № 20-13-00038).

**Личное участие автора в получении результатов, изложенных в диссертации.** Личный вклад автора определялся получением и анализом экспериментальных данных о фазовом поведении исследуемых систем, разработкой программного обеспечения и выполнением модельных расчетов. Кроме того, личный вклад автора включает: усовершенствование методик синтеза объектов исследования и количественного анализа равновесных фаз, конструирование установки для проведения изопиестического эксперимента. Совместно с руководителем осуществлялись постановка задач, обобщение результатов и формулировка выводов.

**Отсутствие в диссертации заимствованного материала без ссылки на автора.** Проверка текста диссертации в системе «Антиплагиат» показала 91.92 % оригинальности (без библиографии). Заимствованный материал в диссертации оформлен правильно: даются ссылки на источник заимствования. При обсуждении результатов научных работ, выполненных соискателем ученой степени в соавторстве, приведены ссылки на соответствующие работы.

**Степень достоверности результатов проведенных исследований.** Достоверность результатов подтверждается апробацией экспериментальных методик, надежностью и взаимной согласованностью экспериментальных данных, полученных различными методами, использованием теоретически обоснованной модели, а также соответствием полученных результатов общим положениям термодинамики фазовых равновесий. Экспериментальные результаты получены на сертифицированном оборудовании; проведена метрологическая обработка полученных данных. Научные положения и заключения, сделанные по результатам исследования, обоснованы экспериментально и подтверждены теоретически. Выводы соответствуют цели и задачам исследования. Результаты исследования прошли апробацию на конференциях различного уровня и опубликованы в рецензируемых научных журналах.

**Научная новизна результатов исследования.** Найдены новые системы – водно-солевые двухфазные системы на основе низкомолекулярных и полимеризованных аминокислотных ионных жидкостей – значительно превосходящие системы с галогенидными аналогами по способности экстрагировать модельные биокомпоненты (L-триптофан, ванилин).

Получены новые экспериментальные данные о фазовом поведении и коэффициентах распределения L-триптофана в водно-солевых двухфазных системах, содержащих аминокислотные ионные жидкости на основе катиона 1-алкил-3-метилимидазолия с разной длиной углеводородного радикала и полимеризованные жидкости на основе катиона поли-(диаллилдиметиламмония). Набор систематических экспериментальных данных позволил выявить взаимосвязь между строением ИЖ и способностью водно-солевых систем на основе ИЖ к фазовому разделению и экстракции гидрофобного биокомпонента.

Для водно-солевых двухфазных систем на основе полимеризованных ИЖ впервые получены экспериментальные данные о коэффициентах распределения ванилина, доказано наличие специфических взаимодействий между аминокислотным анионом и растворенным веществом.

Впервые с помощью уравнения состояния ePC-SAFT выполнено моделирование физико-химических свойств водных растворов исследуемых ионных жидкостей,

рассчитаны фазовые равновесия в водно-солевых системах и коэффициенты распределения биокомпонента между жидкими фазами.

**Научная и практическая значимость результатов исследования.** Установлена взаимосвязь между химическим строением ионной жидкости, фазовым поведением и экстрагирующей способностью исследованных водно-солевых систем. Экспериментально подтверждено наличие специфических взаимодействий между аминокислотным анионом и растворенным веществом, что объясняет высокие значения коэффициентов распределения в системах, содержащих аминокислотные ионные жидкости. Результаты исследования расширяют имеющиеся представления о фазовом поведении и механизме экстракции в водно-солевых двухфазных системах на основе ионных жидкостей и определяют возможности описания изученных фазовых равновесий.

Ввиду меньшей токсичности изученных аминокислотных ионных жидкостей и выявленной высокой экстрагирующей способности водно-солевых систем на их основе, такие системы рекомендованы как перспективные для решения задач разделения и очистки биомолекул в рамках концепции «зеленой химии». Данные о фазовом поведении могут быть полезны при разработке способов регенерации применяемых веществ для их повторного использования.

Результаты моделирования будут использованы не только для описания физико-химических свойств растворов, содержащих другие ионные жидкости, но и для прогнозирования поведения неизученных ранее систем.

**Ценность научных работ соискателя.** Полученные результаты вносят существенный вклад в развитие физической химии водно-солевых двухфазных систем, содержащих ионные жидкости. Проведенные систематические исследования позволили обнаружить закономерности, которые расширяют имеющиеся представления о фазовом поведении и механизме экстракции в изученных соискателем системах. Выполненное молекулярно-термодинамическое моделирование открывает новые возможности описания фазовых равновесий в рассматриваемых системах.

Результаты исследований опубликованы в высокорейтинговых журналах по соответствующей специальности.

**Специальность, которой соответствует диссертация.** Содержание и название диссертации соответствует паспорту специальности 1.4.4. Физическая химия по областям исследования:

п. 2. «Экспериментальное определение термодинамических свойств веществ, расчет термодинамических функций простых и сложных систем, в том числе на основе методов статистической термодинамики, изучение термодинамических аспектов фазовых превращений и фазовых переходов.»

п. 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.»

**Полнота изложения материалов диссертации в работах, опубликованных соискателем.** Основное содержание диссертационного исследования изложено в 5 научных статьях, а также в виде тезисов 11 докладов, опубликованных в сборниках трудов конференций различного уровня. Все статьи опубликованы в рецензируемых в Web of Science и Scopus журналах, тематика которых соответствует области наук «Химия». Две статьи опубликована в журнале, имеющем раздел по специальности диссертации.

Диссертация Корчака Петра Андреевича на тему «Равновесие жидкость-жидкость и распределение биокомпонента в водно-солевых системах на основе ионных жидкостей разного строения» представляет собой самостоятельно выполненную автором научно-квалификационную работу, результаты которой обеспечивают решение актуальных экспериментальных (получение новых данных о фазовом поведении многокомпонентных систем), теоретических (моделирование фазового поведения) и прикладных (жидкостная

экстракция) задач. По результатам проведенного исследования установлены основные закономерности влияния химического строения ионной жидкости и неорганической соли на равновесие жидкость-жидкость и коэффициенты распределения биокомпонентов в изучаемых системах. В работе продемонстрированы возможности современной молекулярно-термодинамической модели (ePC-SAFT) при описании фазового поведения изученных жидких систем.

Диссертация «Равновесие жидкость-жидкость и распределение биокомпонента в водно-солевых системах на основе ионных жидкостей разного строения» Корчака Петра Андреевича соответствует, требованиям, установленным пунктами 9–14 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 №842 «О порядке присуждения ученых степеней», и рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Проект заключения принят на заседании экспертной группы, сформированной распоряжением директора Центра экспертиз СПбГУ М.А. Ревазова от 11.04.2024 г. № 1715/1р в составе 3 чел.

Присутствовало на заседании 3 чел., Результаты голосования: «за» - 3 чел., «против» - 0, «воздержалось» – 0 чел. Протокол № 1 от «11» апреля 2024 г.

  
\_\_\_\_\_  
(подпись эксперта (председателя экспертной группы))

Толстой Петр Михайлович  
д.х.н., профессор кафедры физической  
органической химии СПбГУ  
(фамилия, имя, отчество, ученая степень, ученое звание,  
наименование структурного подразделения, должность)

  
\_\_\_\_\_  
(подпись эксперта)

Михельсон Константин Николаевич  
д.х.н., профессор, профессор кафедры  
физической химии СПбГУ  
(фамилия, имя, отчество, ученая степень, ученое звание,  
наименование структурного подразделения, должность)

  
\_\_\_\_\_  
(подпись эксперта)

Приходько Игорь Владимирович  
к.х.н., доцент, доцент кафедры химической  
термодинамики и кинетики СПбГУ  
(фамилия, имя, отчество, ученая степень, ученое звание,  
наименование структурного подразделения, должность)