

Rada Doskonałości Naukowej 00-901 Warszawa, pl. Defilad 1 Dział Kancelaryjny WPEŁNIŁO (RPW)	
27.07.2023	
Znak sprawy: DRKN.26.400.185.2023	
Podp.	Zal.
	Za N

Uniwersytet Łódzki
ul. Prezydenta Gabriela Narutow
90-136 Łódź



(nazwa i dane adresowe podmiotu habi
wybranego do przeprowadzenia postępc
za pośrednictwem:

Rady Doskonałości Naukowej

pl. Defilad 1
00-901 Warszawa

(Pałac Kultury i Nauki, p. XXIV, pok. 101)



Zdzisław Kinart

(imię i nazwisko wnioskodawcy)

Uniwersytet Łódzki Wydział Chemii Katedra Chemii
Fizycznej

(miejsce pracy/jednostka naukowa)

Wniosek

z dnia 27.07.2023

o przeprowadzenie postępowania w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie **nauk ścisłych i przyrodniczych** w dyscyplinie¹ **nauki Chemiczne**. Określenie osiągnięcia naukowego będącego podstawą ubiegania się o nadanie stopnia doktora habilitowanego pt.:

Wykorzystanie badań konduktometrycznych w analizie oddziaływań międzymolekularnych typu jon-jon, jon-cyklodekstryna i jon-rozpuszczalnik w szerokim przedziale temperatur.

Wnioskuje – na podstawie art. 221 ust. 10 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz. U. z 2021 r. poz. 478 zm.) – aby komisja habilitacyjna podejmowała uchwałę w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego w głosowaniu **tajnym/jawnym***²

Zostałem poinformowany, że:

Administratorem w odniesieniu do danych osobowych pozyskanych w ramach postępowania w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego jest Przewodniczący Rady Doskonałości Naukowej z siedzibą w Warszawie (pl. Defilad 1, XXIV piętro, 00-901 Warszawa).

Kontakt za pośrednictwem e-mail: kancelaria@rdn.gov.pl, tel. 22 656 60 98 lub w siedzibie organu. Dane osobowe będą przetwarzane w oparciu o przesłankę wskazaną w art. 6 ust. 1 lit. c) Rozporządzenia UE 2016/679 z dnia z dnia 27 kwietnia 2016 r. w związku z art. 220 - 221 oraz art.

232 – 240 ustawy z dnia 20 lipca 2018 roku - Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce, w celu przeprowadzenie postępowania o nadanie stopnia doktora habilitowanego oraz realizacji praw i obowiązków oraz środków odwoławczych przewidzianych w tym postępowaniu.

Szczegółowa informacja na temat przetwarzania danych osobowych w postępowaniu dostępna jest na stronie www.rdn.gov.pl/klauzula-informacyjna-rodz.html

(podpis wnioskodawcy)

Załączniki:

1. Dane wnioskodawcy
2. Kopia dyplomu doktora
3. Autoreferat osiągnięcie naukowe
4. Wykaz osiągnięć naukowych
5. Oświadczenia współautorów publikacji
6. Kopie publikacji stanowiących osiągnięcie naukowe
7. Potwierdzenie innych osiągnięć

Autoreferat

Wykorzystanie badań konduktometrycznych w analizie oddziaływań międzymolekularnych typu jon-jon, jon-cyklodekstryna i jon-rozpuszczalnik w szerokim przedziale temperatur.

dr Zdzisław Kinart

Załącznik 3

Do wniosku o przeprowadzenie postępowania habilitacyjnego

Łódź, 2023

Spis treści

1. Imię i nazwisko	3
2. Posiadane dyplomy, stopnie naukowe.	3
3. Informacje o dotychczasowym zatrudnieniu w jednostkach naukowych	3
4. Omówienie osiągnięć, o których mowa w art. 219 ust. 1 pkt. 2 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz. U. z 2021 r. poz. 478 z późn. zm.)	4
4.1 Tytuł osiągnięcia naukowego.....	4
4.2 Wykaz publikacji naukowych stanowiących podstawę osiągnięcia naukowego.....	4
4.3 Omówienie celu naukowego w/w prac i osiągniętych wyników wraz z omówieniem.....	8
4.3.1 Wprowadzenie.....	8
4.3.2 Cele badawcze	
4.3.2a. Wnioski i analiza wyników badań przedstawionych w pracach [H1-H11].....	11
4.3.2b. Badania konduktometryczne jako kryterium oceny wpływu składu mieszanego rozpuszczalnika na efekty solwatacyjno – asocjacyjne badanych jonów.....	12
4.3.2c. Analiza wpływu budowy anionów alifatycznych kwasów mono i dikarboksylowych na wartości ich przewodnictw granicznych oraz efekty solwatacyjne.....	16
4.3.2d. Analiza wpływu zmian temperatury i własności fizykochemicznych rozpuszczalnika na efekty solwatacyjno-asocjacyjne z punktu widzenia pomiarów konduktometrycznych.....	25
4.3.2e. Zaproponowanie nowych równań pozwalających na obliczenie wartości przewodnictwa teoretycznego i stałych tworzenia kompleksów inkluzyjnych w oparciu o badania konduktometryczne cyklodekstryn z różnego typu anionami organicznymi.....	28
4.3.3. Najważniejsze osiągnięcia.....	33
5. Informacja o wykazywaniu się istotną aktywnością naukową albo artystyczną realizowaną w więcej niż jednej uczelni, instytucji naukowej lub instytucji kultury, w szczególności zagranicznej	35
6. Informacja o osiągnięciach dydaktycznych, organizacyjnych oraz popularyzujących naukę lub sztukę	35
6.1 Osiągnięcia dydaktyczne i popularyzujące naukę.....	35
6.2 Informacja o osiągnięciach organizacyjnych.....	37
Spis literatury	39

1. Imię i nazwisko

Zdzisław Dariusz Kinart

2. Posiadane dyplomy, stopnie naukowe.

2011 **dyplom doktora nauk chemicznych**

Uniwersytet Łódzki, Wydział Chemiczny,

Praca doktorska pt. "Konduktometryczne i wolumetryczne badania roztworów kwasów karboksylowych i ich soli sodowych"

Promotor: dr hab. Adam Bald prof. UŁ

2004 **dyplom magistra chemii**

Uniwersytet Łódzki, Wydział Chemii i Fizyki

Praca magisterska pt. "Przewodnictwo elektryczne soli sodowych wybranych kwasów mono i dikarboksylowych w wodzie w temperaturze 298.15K".

Promotor: dr hab. Adam Bald prof. UŁ

3. Informacje o dotychczasowym zatrudnieniu w jednostkach naukowych.

26.09.2011 do dnia dzisiejszego -

Adiunkt Uniwersytet Łódzki, Wydział Chemiczny, Katedra Chemii Fizycznej Roztworów

01.09.2009-25.09.2011 - Asystent naukowo - dydaktyczny

Uniwersytet Łódzki, Wydział Chemiczny, Zakład Fizykochemii Roztworów

4. Omówienie osiągnięć, o których mowa w art. 219 ust. 1 pkt. 2 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz. U. z 2021 r. poz. 478 z późn. zm.).

4.1 Tytuł osiągnięcia naukowego

Podstawą osiągnięcia naukowego pt. „Wykorzystanie badań konduktometrycznych w analizie oddziaływań międzymolekularnych typu jon-jon, jon-cyklodekstryna i jon-rozpuszczalnik w szerokim przedziale temperatur” jest cykl monotematycznych 11-stu artykułów naukowych [H1-H11] opublikowanych w latach 2013–2023 w recenzowanych czasopismach z Listy Filadelfijskiej o łącznym IF = 53.989 (średni IF = 4.908) oraz punktami MNiSW = 1130 na rok 2021:

4.2 Wykaz publikacji naukowych stanowiących podstawę osiągnięcia naukowego:

[H1] Bald A.*, **Kinart Z.**

Conductance studies of NaCl, KCl, NaBr, KBr, NaI, Bu₄NI, and NaBPh₄ in water + 2-propoxyethanol mixtures at 298.15 K (2015) *Ionics*, 21 (10), pp. 2781-2787.

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na stworzeniu koncepcji pracy, napisaniu manuskryptu. Opracowałem metodykę badań. Wykonałem pomiary konduktometryczne dla badanych związków. Wykonałem analizę i interpretację otrzymanych wyników. Jako współautor przygotowałem odpowiedzi na recenzje a także byłem odpowiedzialny za kontakt z wydawnictwem.

IF₂₀₂₁=2.961
MNiSW=70p

[H2] Bald A.*, **Kinart Z.**, Wypych-Stasiewicz A., Tomáš R.

Conductance studies of NaCl, KCl, NaBr, KBr, Bu₄NBr, and NaBPh₄ in water + 2-methoxyethanol mixtures at 298.15 K (2013) *Journal of Molecular Liquids*, 182, pp. 14-24.

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na stworzeniu koncepcji pracy, napisaniu manuskryptu. Opracowałem metodykę badań. Wykonałem pomiary konduktometryczne dla badanych związków. Wykonałem analizę i interpretację wyników otrzymanych wyników. Jako współautor przygotowałem odpowiedzi na recenzje a także byłem odpowiedzialny za kontakt z wydawnictwem.

IF₂₀₂₁=6.633
MNiSW=100p

[H3] **Kinart Z.***, Tomaš R.

Conductivity properties of selected aliphatic monocarboxylic acid anions in water at 298.15 K (2020) International Journal of Electrochemical Science, 15, pp. 10007-10027.

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na stworzeniu koncepcji pracy, napisaniu manuskryptu. Opracowałem metodykę badań. Wykonałem pomiary konduktometryczne dla badanych anionów kwasów karboksylowych, Wykonałem analizę i interpretację wyników otrzymanych wyników. Jako autor korespondencyjny przygotowałem odpowiedzi na recenzje a także byłem odpowiedzialny za kontakt z wydawnictwem

IF₂₀₂₀=1.541
MNiSW=70p

[H4] **Kinart Z.***

Conductometric studies of dissociation constants of selected monocarboxylic acids a wide range of temperatures (2019) Journal of Molecular Liquids, 292, art. no. 111405.

Praca monoautorska

IF₂₀₂₁=6.633
MNiSW=100p

[H5] **Kinart Z.***

Conductance studies of sodium salts of selected dicarboxylic acids in water at temperatures of 283.15 K to 313.15 K (2021) Journal of Molecular Liquids 337, 116262.

Praca monoautorska

IF₂₀₂₁=6.633
MNiSW=100p

[H6] **Kinart Z.***, Tomaš R.

Conductometric study of potassium chloride in ethylene glycol + water mixtures at different temperatures (2020) International Journal of Electrochemical Science, 15 (1), pp. 5560-5570.

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na współudziale w: tworzeniu koncepcji pracy, napisaniu większości manuskryptu, wykonaniu obliczeń konduktometrycznych dotyczących parametrów badanych układów, opracowaniu metodyki badań oraz analizie i interpretacji wyników.

IF₂₀₂₀=1.541
MNiSW=70p

[H7] Vraneš M.*, **Kinart Z.**, Borović T.T., Papović S., Tomaš R.

The physicochemical properties of selected imidazolium chloride ionic liquids in tetraethylene glycol: Experimental and computational approach (2023) Journal of Molecular Liquids, 372, art. no. 120763.

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na współudziale w: tworzeniu koncepcji pracy, napisaniu części manuskryptu i interpretacji wyników dotyczącej części konduktometrycznej, wykonaniu obliczeń konduktometrycznych dotyczących parametrów badanych układów, opracowaniu metodyki badań oraz analizie i interpretacji wyników.

IF₂₀₂₁=6.633
MNiSW=100p

[H8] Tomaš R., **Kinart Z.**, Tot A., Papović S., Teodora Borović T., Vraneš M*.

Volumetric properties, conductivity and computation analysis of selected imidazolium chloride ionic liquids in ethylene glycol (2022) Journal of Molecular Liquids, 345, art. no. 118178.

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na współudziale w: tworzeniu koncepcji pracy, napisaniu części manuskryptu i interpretacji wyników dotyczącej części konduktometrycznej, wykonaniu obliczeń konduktometrycznych dotyczących

parametrów badanych układów, opracowaniu metodyki badań oraz analizy i interpretacji wyników

IF₂₀₂₁=6.633
MNiSW=100p

[H9] **Kinart Z.***, Tomaš R.

Studies of the Formation of Inclusion Complexes Derivatives of Cinnamon Acid with α -Cyclodextrin in a Wide Range of Temperatures Using Conductometric Methods (2022) *Molecules*, 27 (14), art. no. 4420.

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na współudziale w: tworzeniu koncepcji pracy, napisaniu całości manuskryptu i interpretacji wyników dotyczącej pomiarów konduktometrycznych, wykonaniu obliczeń konduktometrycznych dotyczących parametrów badanych układów, opracowaniu metodyki badań, oraz analizy i interpretacji wyników. Jako autor korespondencyjny przygotowałem odpowiedzi na recenzje a także byłem odpowiedzialny za kontakt z wydawnictwem.

IF₂₀₂₁=4.927
MNiSW=140p

[H10] **Kinart Z.***

Stability of the Inclusion Complexes of Dodecanoic Acid with α -Cyclodextrin, β -Cyclodextrin and 2-HP- β -Cyclodextrin (2023) *Molecules*, 28 (7), art. no. 3113.

Praca monoautorska

IF₂₀₂₁=4.927
MNiSW=140p

[H11] **Kinart Z.***

Conductometric Studies of Formation the Inclusion Complexes of Phenolic Acids with β -Cyclodextrin and 2-HP- β -Cyclodextrin in Aqueous Solutions (2023) *Molecules*, 28 (1), art. no. 292.

Praca monoautorska

IF₂₀₂₁=4.927
MNiSW=140p

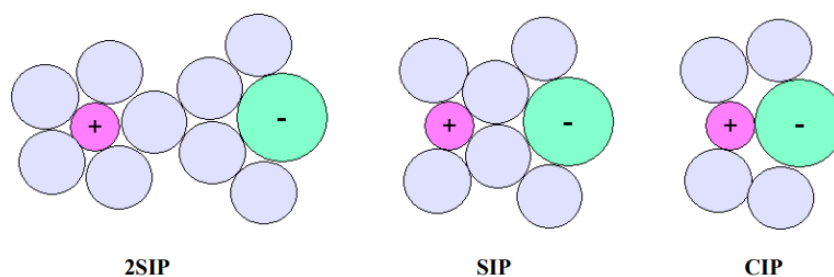
4.3 Omówienie celu naukowego w/w prac i osiągniętych wyników wraz z omówieniem.

4.3.1 Wprowadzenie.

Konduktometria należy do klasycznych metod elektroanalitycznych polegających na pomiarze przewodnictwa elektrycznego roztworów elektrolitów. Przepływ prądu w roztworze spowodowany jest ruchem jonów wywołanym różnicą potencjałów przyłożoną do elektrod. Prędkość poruszania się jonów, a co zatem idzie wartość przewodnictwa zależy od takich czynników jak: rodzaj i stężenie elektrolitu, temperatura, ładunek i rozmiar jonów oraz własności fizykochemicznych i strukturalnych rozpuszczalnika. W pomiarach przewodnictwa elektrolitów stosowany jest prąd zmienny o częstotliwości rzędu 1000 Hz aby uniknąć wydzielania się produktów elektrolizy na elektrodach. Zachodzący proces elektrolizy prowadzi do konsekwencji do zmiany stężenia roztworu oraz polaryzacji elektrod co zakłócałoby pomiar. Zastosowanie do badań metody konduktometrycznej pozwala na uzyskanie informacji na temat zachowania się jonów w roztworze z punktu widzenia oddziaływań typu jon-jon i jon-rozpuszczalnik. Należy podkreślić, że przewodnictwo roztworów elektrolitów rośnie wraz ze wzrostem temperatury, natomiast w przypadku stężenia zależy od rozcieńczenia roztworów. Wraz ze wzrostem stężenia elektrolitu przewodnictwo początkowo rośnie, a następnie maleje co jest związane z niecałkowitą dysocjacją elektrolitów oraz spadkiem ruchliwości jonów spowodowaną wzrostem sił oddziaływania między nimi i tworzeniem asocjacji. W roztworach rozcieńczonych przewodnictwo rośnie praktycznie liniowo, na skutek zwiększania ilości jonów, przypadających na jednostkę objętości roztworu.

Dzięki zastosowaniu pomiarów konduktometrycznych możliwe jest przeanalizowanie asocjacji jonowej, definiowanej jako łączenie się w sposób odwracalny jonów w większe agregaty takie jak pary czy trójki jonowe. Pary jonowe nie uczestniczą w procesie przenoszenia ładunku w roztworze (ze względu na sumaryczny ładunek obojętny) przez co obniżają maksymalną gęstość prądu w elektrolicie. Para jonowa tworzy się, kiedy odległość między jonami jest większa niż „odległość najbliższego dostępu” zwana też odległością maksymalnego zbliżenia jonów, natomiast mniejsza niż pewna graniczna odległość R . „Odległość najbliższego dostępu” (a) definiowana jest jako najmniejsza możliwa odległość pomiędzy jonami w parze jonowej wynikająca z silnych sił odpychania ich powłok elektronowych. Odległość ta nie może być mniejsza niż suma promieni krystalograficznych jonów tworzących parę.

Pary jonowe mogą się tworzyć na trzy różne sposoby: 2SIP (double solvent-shared ion pair), SIP (solvent-shared ion pair) i CIP (contact ion pair). Pierwszy z nich polega na powstawaniu pary jonowej oddzielonej podwójną warstwą rozpuszczalnika. Kolejną możliwą parą jonową jest SIP, w której pomiędzy jonami znajduje się jedna warstwa rozpuszczalnika. Natomiast CIP jest modelem, gdzie pomiędzy jonami nie ma cząsteczek rozpuszczalnika, a są one w bezpośrednim kontakcie.



Rys. 1. Rodzaje par jonowych.

Występowanie różnych par jonowych jednocześnie jest rzadko spotykane w roztworach elektrolitów, jednak jest to możliwe. Oprócz par jonowych w stężonych roztworach elektrolitów mogą pojawiać się tzw. trójki jonowe. Są to agregaty zbudowane z dwóch jonów o tym samym ładunku i jednego jonu o ładunku przeciwnym (np. $A^+B^-A^+$ lub $B^-A^+B^-$). Tak więc, są to asocjaty obdarzone ładunkiem i uczestniczą w transporcie ładunku elektrycznego w roztworze. W związku z tym muszą mieć one wpływ na mierzone wartości przewodnictwa, a co za tym idzie na wartości funkcji opisujących asocjację jonową.

Analizie powyżej opisywanych efektów asocjacyjno-solvatacyjnych oraz wprowadzenie do literatury światowej nowych równania pozwalających na bardzo dokładną ocenę uzyskanych wartości przewodnictwa i stałych asocjacji poświęcone są moje badania konduktometryczne.

4.3.2 Cele badawcze

Jak już wspomniałem powyżej, głównym celem prowadzonych przeze mnie badań było i jest wykorzystanie pomiarów konduktometrycznych do analizy oddziaływań typu jon – jon i jon = rozpuszczalnik. Starłem się w ścisły sposób powiązać własności dysocjacyjno-asocjacyjne różnego typu elektrolitów z budową strukturalną stosowanych rozpuszczalników, ich własnościami fizykochemicznymi oraz wpływem temperatury na omawiane efekty. Należy podkreślić, że w literaturze światowej brak było do tej pory równań matematycznych

Autoreferat

pozwalających na pełną i dogłębną analizę wpływu wszystkich omawianych czynników na stopień asocjacji jonowej. Dlatego też opracowałem i zaprezentowałem w opublikowanych pracach równania pozwalające na nowe spojrzenie na proces asocjacji jonowej z punktu widzenia badań konduktometrycznych. Równania te jak i sposób ich wykorzystania w analizie i interpretacji uzyskanych przeze mnie wyników spotkały się z dużym zainteresowaniem i bardzo pozytywną oceną innych badaczy prowadzących tego typu pomiary.

Dobór badanych elektrolitów, w prezentowanych pracach [H1 - H5], był podyktowany chęcią powiązania budowy anionów kwasów karboksylowych z efektami solwatacyjno-asocjacyjnymi w wybranych rozpuszczalnikach. W pracach tych przeanalizowałem wszystkie możliwe zmiany tych efektów związane ze zmianami długości łańcucha alifatycznego, wprowadzenia do niego w różnych pozycjach takich podstawników jak brom czy jod, jak również wprowadzania wiązania nienasyconego do struktury badanego anionu. Moje zainteresowanie tą grupą elektrolitów jest związane z faktem ich szerokiego zastosowania w kosmetyce, dermatologii i różnego typu reakcjach syntezy organicznej,

Drugą grupę elektrolitów, prezentowanych w pracach [H6 – H8], stanowią ciecze jonowe pochodne imidazolu (ILs). Prezentowane przeze mnie w tych pracach badania konduktometryczne wybranych ILs w różnych rozpuszczalnikach (głównie glikolach) miały głównie charakter poznawczy. Głównym celem tych prac były badania procesów solwatacyjno-asocjacyjnych w badanych roztworach na drodze analizy przebiegów zmian wyznaczonych wartości granicznego przewodnictwa molowego (Λ_o), granicznego molowego przewodnictwa jonowego (λ_o), stałych asocjacji (K_A) jak również funkcji termodynamicznych opisujących omawiane efekty.

Ze względu na szerokie zastosowanie ILs, między innymi w medycynie czy też wysokoenergetycznych bateriach w przemyśle, znajomość tych parametrów z praktycznego punktu widzenia jest niezbędna.

Prezentowane w moim autoreferacie badania konduktometryczne w wodnych roztworach α -, β - i $2H\beta$ -cyklodekstryn z solami sodowymi kwasów fenolowych i wyższych alifatycznych kwasów karboksylowych [H9–H11] pokazują, że konduktometria przy zastosowaniu opracowanego przeze mnie nowatorskiego (po raz pierwszy prezentowanego w literaturze światowej) równania matematycznego pozwalającego na wyznaczenie wartości stałych tworzenia kompleksów inkluzyjnych i teoretycznego przewodnictwa molowego takich kompleksów, może konkurować z punktu widzenia jej dokładności z innymi metodami

badawczymi. Uzyskane w tych pracach wyniki wskazują, że jesteśmy w stanie używając konduktometrii prześledzić wpływ struktury badanego anionu na proces kompleksowania oraz opisać jak wielkość samej cyklodekstryny wpływa na szybkość kompleksowania badanego związku. Zastosowana metoda doświadczalna i obliczeniowa daje również możliwości prześledzenia pełnej termodynamiki badanego procesu.

4.3.2a. Wnioski i analiza wyników badań przedstawionych w pracach [H1-H11].

Badania zjawisk asocjacyjno-solvatacyjnych rozpocząłem od przeanalizowania, w oparciu o badania konduktometryczne, procesów zachodzących w roztworach prostych soli nieorganicznych w alkoksyalcoholach (prace [H1-H2]).

Dla każdego badanego układu zakres mierzonych stężeń dobierałem indywidualnie. Pomiary prowadziłem w bardzo rozcieńczonych roztworach od około $3 \cdot 10^{-5} \text{ mol} \cdot \text{dm}^{-3}$ do maksymalnego granicznego stężenia (c_{max}), które zależy od wartości względnej przenikalności elektrycznej rozpuszczalnika. Stężenie to zostało podane przez Fuossa [1] i wynosi $c_{\text{max}} = 3.2 \cdot 10^{-7} \cdot \epsilon r^3 \text{ mol} \cdot \text{dm}^{-3}$. Przewodnictwa molowe (Λ) obliczone zostały z eksperymentalnych przewodnictw właściwych (κ) i stężeń molowych roztworów (c) z równania $\Lambda = 1000 \cdot \kappa / c$. Do analizy danych przewodnictwa służy wiele różnych równań, na przykład: równanie Pittsa [2], Fernandez-Printa i Prue (PFPP) [3], Fuossa-Hsia/Fernandez-Prini (FHFP) [4], Fuossa [5, 6], chemiczny model niskich stężeń (lcCM) oparty na równaniu Fuossa-Justice'a [7]. Można też używać równania Lee-Wheatona [8] i Quinta-Viallarda [9], które stosuje się często dla elektrolitów o różnym typie symetrii. Wartości granicznych przewodnictw molowych (Λ_o) uzyskane przy użyciu różnych równań są praktycznie takie same, jednak zdecydowanie większe różnice istnieją pomiędzy wartościami stałych asocjacji (K_A). Dlatego wszystkie uzyskane przeze mnie dane analizowane były w ramach tzw. chemicznego modelu niskich stężeń, szeroko stosowanego ostatnio zarówno w wodnych jak i niewodnych roztworach:

$$\Lambda = \alpha \left[\Lambda_o - S(\alpha c)^{1/2} + E(\alpha c) \ln(\alpha c) + J(\alpha c) + J_{3/2}(\alpha c)^{3/2} \right] \quad (1)$$

$$K_A = \frac{1 - \alpha}{\alpha^2 c y_{\pm}^2} \quad (2)$$

$$\ln y_{\pm} = - \frac{A \alpha^{1/2} c^{1/2}}{1 + B R \alpha^{1/2} c^{1/2}} \quad (3)$$

W równaniach tych:

- Λ_o to graniczne przewodnictwo molowe

- α to stopień dysocjacji elektrolitu
- K_A to stała asocjacji
- y_{\pm} to współczynnik aktywności w skali molowej;
- A i B są współczynnikami równania Debye'a–Hückel'a.

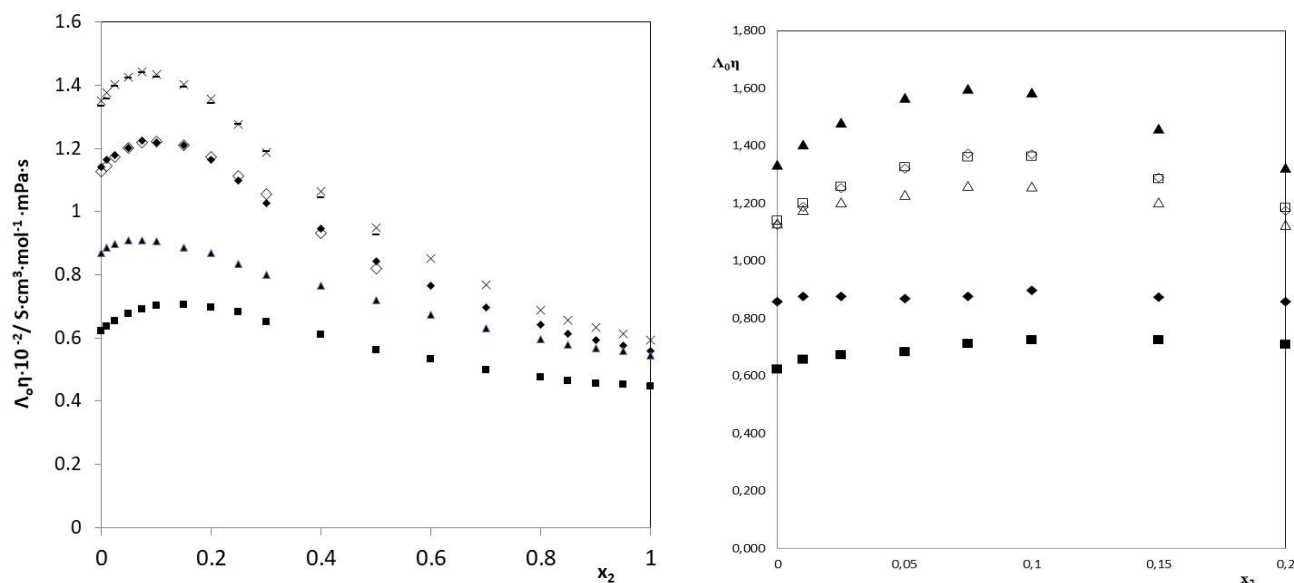
Analityczne formy parametrów S , E , J_1 , i J_2 zostały podane przez Barthel'a i współpracowników [7]. Parametry S i E zależą od gęstości, lepkości i względnej przenikalności elektrycznej rozpuszczalnika. Współczynniki J_1 i J_2 są funkcjami parametru odległości R opisującego odległość między jonami, przy której jony przeciwnego znaku mogą przemieszczać się jako swobodnie poruszające się cząstki w roztworze. Wartości Λ_o , K_A i R zostały obliczone przy użyciu dobrze znanej nieliniowej metody iteracyjnej najmniejszych kwadratów zaproponowanej przez Fuossa [6]. Wartość początkowa Λ_o została przyjęta z ekstrapolacji danych Debye'a-Hückel'a-Onsagera. Obliczenia wykonywano poszukując trzech powyżej wspomnianych parametrów, które minimalizowały odchylenie standardowe (σ) między obliczonymi i doświadczalnymi wartościami przewodnictwa dla sekwencji wartości R . Prezentowana w tych pracy metodyka badań i obliczeń była pewnego rodzaju wzorcem dla prowadzonych przeze mnie analiz wyników badań konduktometrycznych z punktu widzenia analizy efektów asocjacyjnych w roztworach różnych elektrolitów w prostych i mieszanych rozpuszczalnikach przedstawionych w pracach [H3-H11].

4.3.2b. Badania konduktometryczne jako kryterium oceny wpływu składu mieszanego rozpuszczalnika na efekty solwatacyjno – asocjacyjne badanych jonów.

Przedstawione w pracach [H1] i [H2] wyniki pomiarów konduktometrycznych roztworów chlorku sodu (NaCl), chlorku potasu (KCl), bromku sodu (NaBr), jodku sodu (NaI), jodku tetrabutylamoniumowego (Bu_4NI), i tetrafenyloboranu sodu (NaBPh_4) w mieszaninach woda – 2-metoksyetanol i woda 2-propoksyetanol (w temperaturze 298.15 K) pokazują jak wzrost zawartości rozpuszczalnika organicznego w mieszaninie wpływa znacząco na wartości takich wielkości jak graniczne przewodnictwo molowe (Λ_o), graniczne jonowe przewodnictwo molowe (λ_o^{\pm}), iloczyn Waldena ($\Lambda_o \cdot \eta$), parametr zbliżenia jonów (R) czy też stałą asocjacji (K_A).

W pracach tych wykorzystując założenie Fuossa-Hirsha wyznaczono wartości granicznych jonowych przewodnictw molowych (λ_o^{\pm}) i wartości iloczynu Waldena ($\lambda_o^{\pm} \cdot \eta$) dla udziałów

jonowych. Przebieg zmian wartości $\lambda_o^{\pm}\eta$ w funkcji składu mieszanego rozpuszczalnika woda – alkoxyalkohol (x_2) analizowano w oparciu o model Kaya.



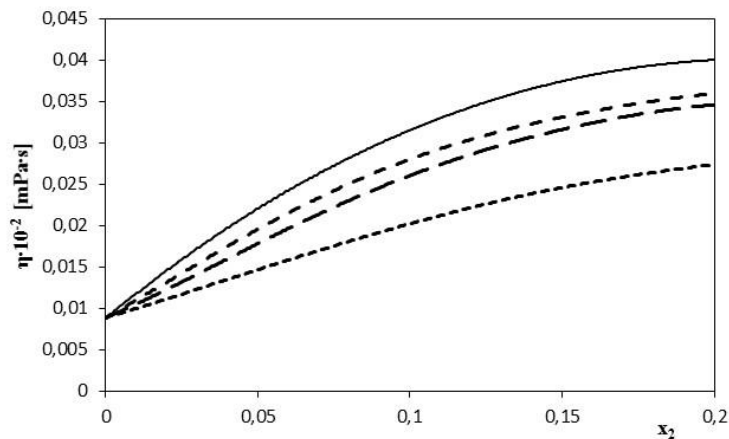
Wykresy 1 i 2. Przebieg zmian iloczyn Waldena ($\lambda_o^{\pm}\eta$), dla NaBr, NaI, KCl, NaBPh₄ i NBu₄I w funkcji ułamka molowego (x_2) w mieszaninach woda (1) + 2-metoksyetanol (x_2) i woda(1) + propoksyetanolu (2) w temperaturze 298.15K: \diamond -NaCl, \square -NaBr, Δ -NaI, \blacktriangle -KCl, \blacksquare -NaBPh₄, \blacklozenge - NBu₄I.

Prezentowane na powyższych wykresach wyniki moich badań, jak również dane literaturowe zawarte w pracach [H1] i [H2] wskazują, że niewielkie dodatki 2-metoksyetanolu jak i 2-propoksyetanolu do wody nie powodują radykalnych zmian w składzie warstw hydratacyjnych jonów. Dlatego też należy założyć, że lepkość w bezpośrednim otoczeniu jonów (tzw. mikrolepkość) nie zmienia się lub wzrasta znacznie wolniej niż lepkość makroskopowa. Należy jednak zauważyć, że dalszy wzrost zawartości alkoxyalkoholu w badanych mieszaninach prowadzi do dużych zmian w składzie otoczek solwatacyjnych badanych jonów w wyniku czego ich rozmiary zbliżają się do wielkości dużych jonów typu BPh_4^- i Bu_4N^+ .

Różnice wartości iloczynu Waldena ($\lambda_o^{\pm}\eta$) dla kationów Na⁺, K⁺, Cl⁻ i Br⁻ oraz dużych jonów BPh_4^- i Bu_4N^+ są w 2-metoksyetanolu zdecydowanie mniejsze niż w wodzie. Może to wskazywać na fakt, że efektywne rozmiary małych jonów w 2-metoksyetanolu są porównywalne z rozmiarami dużych jonów organicznych. Dotyczy to głównie kationów, a w szczególności kationu Na⁺. Wartości parametru maksymalnego zbliżenia R uzyskane dla soli złożonych z małych jonów zdają się potwierdzać te wnioski. Powyższe obserwacje mogą sugerować, że 2-metoksyetanol ma dużą zdolność solwatowania małych jonów, zwłaszcza kationów. Prawdopodobnie w przypadku kationów istotną rolę odgrywa obecność dwóch

Autoreferat

atomów tlenu w cząsteczce alkoksytanolu (eterowy atom tlenu i atom tlenu grupy hydroksylowej). Należy zauważyć również, że wartości stałej asocjacji K_A badanych elektrolitów rosną w regionie bogatym w 2-metoksytanol i 2-propoksytanol, w którym cząsteczki wody są zastępowane przez 2-metoksytanol. Może to wynikać z faktu, że wartości względnej przenikalności elektrycznej mieszanego rozpuszczalnika zmniejszają się wraz ze wzrostem zawartości składnika organicznego. Taki trend tych zmian dotyczy wszystkich analizowanych przez mnie modeli asocjacji jonowej. Wraz ze wzrostem zawartości składnika organicznego rosną również wartości parametru R . Taki charakter zmian wartości R zaobserwowałem we wszystkich badanych mieszaninach woda - rozpuszczalnik organiczny (prace [H1-H2]). Najprawdopodobniej jest to spowodowane wbudowywaniem cząsteczek rozpuszczalnika organicznego między jony tworzące parę jonową. Obserwowany spadek wartości granicznego przewodnictwa molowego (λ_o) wraz ze wzrostem zawartości alkoksyalcoholu może wynikać z faktu, że wraz ze wzrostem zawartości alkoksyalcoholu wzrasta lepkość mieszanin.



Wykres 3. Przebieg zmian lepkości ($\eta \cdot 10^{-2}$) w funkcji ułamka molowego (x_2) w mieszaninach woda (1) + alkoxyetanol (2) w temperaturze 298.15K dla mieszanin zawierających: ---- metoksytanol, — — — etoksytanol, - - - propoksytanol, ——— butoksytanol

Jak widać na Wykresie 3 najmniejszy wzrost lepkości obserwujemy dla mieszaniny woda + metoksytanol i wzrasta on kolejno dla mieszanin: woda + etoksytanol, woda + propoksytanol i woda + butoksytanol. Taki sam charakter zmian obserwujemy dla jonowych udziałów iloczynu Waldena ($\lambda_o^{\pm} \cdot \eta$) przedstawionych na Wykresach 1 i 2. Wartości $\lambda_o^{\pm} \cdot \eta$ stopniowo maleją po przekroczeniu zawartości około 0.10 ułamka molowego alkoxyetanoli. Należy przypuszczać, że przy większych dodatkach alkoxyetanoli do wody selektywna hydratacja jonów zaczyna zanikać. Cząsteczki wody w powłokach hydratacyjnych są zastępowane cząsteczkami alkoxyetanolu. Powoduje to wzrost efektywnego promienia

Autoreferat

jonów. W wyniku tego efektu można zaobserwować spadek jonowych iloczynów Waldena. Ten tok rozumowania i interpretacja prezentowanych wyników potwierdzają również wyniki uzyskane dla mieszanin woda – metoksyetanol [H1].

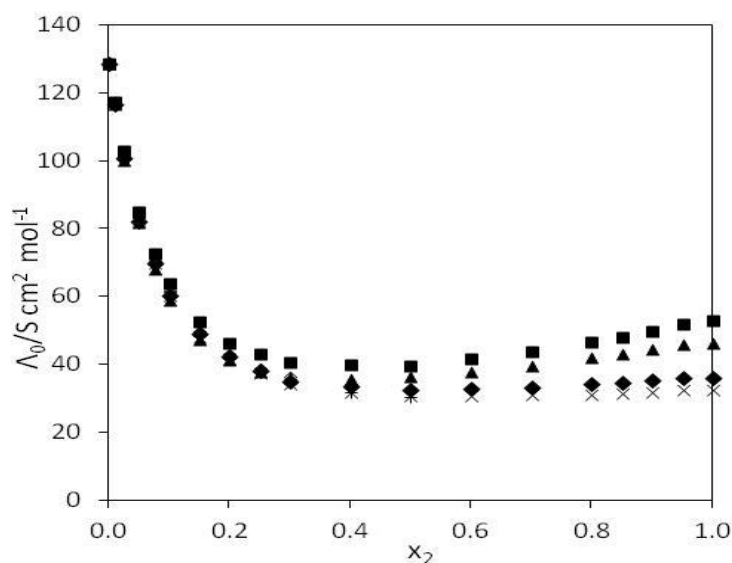
Prezentowane przeze mnie wyniki, zawarte w omawianych pracach, wskazują, że znacznie mniejsze wartości granicznego przewodnictwa molowego elektrolitów typu NaBPh_4 i Bu_4NI wynikają z dużego rozmiaru jonów BPh_4^- i Bu_4N^+ .

Rozmiary tak dużych jonów organicznych praktycznie nie zmieniają się w całym zakresie składu mieszanego rozpuszczalnika woda-alkoksyalkohol.

Omawiane wyniki badań wykorzystałem do uzyskania tzw. „krzywej uniwersalnej”, zaproponowanej przez Apelblata [10]:

$$\frac{\Lambda_j^0(x, T)}{\Lambda_i^0(x, T)} = \frac{\Lambda_j^0(0, T)}{\Lambda_i^0(0, T)} \quad (5)$$

Jak wynika z Wykres 4, koncepcja „krzywej uniwersalnej” jest dobrze potwierdzona dla zakresu składu bogatego w wodę, tj. $0 < x_2 < 0.2$.



Wykres 4. Przebieg zmian granicznego przewodnictwa molowego (Λ_0) dla \blacklozenge - NaBr, \blacksquare - NaBPh₄, \blacktriangle - Bu₄NBr, \times - KBr, \diamond - NaCl, $+$ - KCl. w funkcji ułamka molowego 2-metoksyetanolu (x_2) w temperaturze 298.15 K w mieszaninach woda – 2-metoksyetanol (2) („krzywe uniwersalne” – NaBr jest elektrolitem wzorcowym):

W tym miejscu należy jednak zauważyć, że NBu₄Br (a szczególnie NaBPh₄) znacznie gorzej dopasowują się do „krzywej uniwersalnej” niż inne elektrolity. Być może związane to jest ze specyfiką procesu solwatacji dużych jonów takich jak NBu₄⁺ i BPh₄⁻.

Jak widać z przedstawionych wyników konduktometria jest doskonałym narzędziem pozwalającym na ocenę efektów solwatacyjno-asocjacyjnych w mieszanych wodno-organicznych rozpuszczalnikach z punktu widzenia wpływu budowy i własności fizykochemicznych składnika organicznego tych mieszanin.

4.3.2c. Analiza wpływu budowy anionów alifatycznych kwasów mono- i dikarboksylowych na wartości ich przewodnictw granicznych oraz efekty solwatacyjne.

W moich pracach, z punktu widzenia badań konduktometrycznych, wiele uwagi poświęciłem analizie wpływu budowy stosowanych elektrolitów organicznych na wielkość efektów solwatacyjno-asocjacyjnych w ich roztworach w różnych rozpuszczalnikach.

Jest to szczególnie widoczne w pracach [H3-H5], w których te zagadnienia analizowałem w wodnych roztworach alifatycznych kwasów monokarboksylowych ($C_nH_{2n+1}COOH$ dla $n = 0 - 5$ i dikarboksylowych $HOOC-(CH_2)_n-COOH$ dla $n = 0 - 7$) w zakresie temperatur od 283.15K do 313.15K z punktu widzenia wpływ zmiany długości łańcucha alifatycznego badanych kwasów karboksylowych, pojawienia się w tym łańcuchu podstawników takich jak brom i jod, czy też zmiany charakteru nasycenia tych kwasów z uwzględnieniem położenia wiązania podwójnego na uzyskane wyniki badań konduktometrycznych.

Dla wszystkich badanych kwasów karboksylowych, w omawianym zakresie temperatur, wyznaczyłem wartości granicznego przewodnictwa molowego (Λ_o) oraz wartości stałych dysocjacji (K_d) i asocjacji (K_A). W tym miejscu chciałbym podkreślić, że w celu zminimalizowania błędów w wyznaczonych wartościach przewodnictw granicznych (dla tak słabych elektrolitów jak badane kwasy) zastosowałem matematyczne procedury obliczeniowe bardzo dokładnie opisane w przedstawionych we wniosku habilitacyjnym pracach [H3-H5] jak i w danych literaturowych w nich prezentowanych (ze szczególnym uwzględnieniem wniosków płynących z pracy [11]).

W poniższej Tabeli zestawiałem uzyskane przeze mnie na drodze pomiarów konduktometrycznych (praca [H4]) wartości K_A jak i dane literaturowe tej wielkości, w różnych temperaturach, dla wszystkich badanych kwasów karboksylowych.

T [K] / n	0	1	2	3	4	5
	K_A [dm ³ /mol]					
283.15	5650±0.140	58.309±0.13	76.545±0.08	65.970±0.08	68.123±0.09	69.685±0.10
	57.94[13]	57.870 [17]	75.415 [20]			
	6802[12]					
288.15	5618±0.08	58.072±0.12	76323±0.15	66.049±0.12	68.826±0.08	70.598±0.09
	5714[13]	57.306[17]	74.850 [20]			
	6756[12]					
293.15	5618±0.10	58.207±0.09	76.675±0.09	67.045±0.09	69678±0.08	71658±0.09
	5662[13]	57.077[17]	74.738 [20]			
	6802[12]					
298.15	5679±0.09	59.137±0.07	77.107±0.09	68.049±0.11	70926±0.10	72.980±0.12
	5649[14]	57.100[14]	78.534[14]	66.666[19]	62.111[22]	72.463[15]
	5649[13]	59.046[18]	75.187[21]	65.789[22]	64.102[23]	
	6849[12]	58.651[19]	74.850[20]	67.965[23]	69.935[15]	
	5479[14]	57.110[17]	74.78[16]	71.428[18]		
	5448[15]	56.990[13]		65.876[14]		
				65.490[24]		
303.15	5711±0.09	60.168±0.11	77.932±0.10	69965±0.08	72.040±0.12	74.279±0.11
	5669[14]	58.430[14]	78.534[14]	68860[13]		
	5688[13]	57.438[17]	75.415[20]	67540[16]		
	6944[12]	57.290[16]	75.330[16]			
	5485[16]					
308.15	5780±0.11	61.387±0.09	79.269±0.11	71.825±0.10	73.526±0.11	75.526±0.13
	5727[13]	58.004[17]	76.336 [20]			
	7142[12]					
313.15	5882±0.11	63.086±0.08	80.316±0.13	73.724±0.14	75.041±0.08	76.878±0.09
	5834[13]	58.823[17]	77.882 [20]			
	6944[12]					

Należy jednak zauważyć, że cytowane dane literaturowe K_A otrzymano na drodze innych technik badawczych niż konduktometria (głównie technik potencjometrycznych). Stąd też mogą wynikać różnice w prezentowanych wartościach. Widać też wyraźny rozrzut

Autoreferat

omawianych wielkości uzyskanych przez różnych autorów. Skłania to do wniosku, że precyzyjne wyznaczenie tych wartości nie jest łatwym zadaniem.

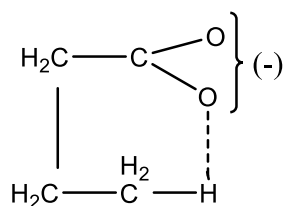
Bardzo ciekawe wnioski płyną z analizy zmian stałej dysocjacji (która jak wiadomo jest odwrotnością stałej asocjacji) badanych kwasów w funkcji zmian temperatury, które są prezentowane w pracy [H4]. Z przedstawionych danych literaturowych wynika, że przebiegi zmian funkcji $K_d = f(T)$ charakteryzują się wyraźnymi ekstremami. Dla kwasu mrówkowego pojawiają się one w temperaturze 298.15 K i stopniowo ze wzrostem rozmiarów kwasów przesuwają się w stronę nieco niższych temperatur.

W przypadku wartości K_d wyznaczonych w tej pracy ekstrema takie również występują tylko przy nieco niższych temperaturach. Ze wzrostem długości łańcucha węglowego kwasu położenie tych ekstremów też wyraźnie przesuwa się w stronę niższych temperatur. Dla kwasu walerianowego i kapronowego w badanym zakresie temperatur maksima te są niewidocznie, chociaż typ krzywizny zależności $K_d = f(T)$ sugeruje, że mogą się one pojawić w temperaturach nieco niższych.

W pracy [H4] przedstawiłem również analizę przebieg zmian stałej dysocjacji badanych kwasów w funkcji ilości atomów węgla w ich grupach alkilowych.

Jak widać wartość K_d dla kwasu mrówkowego jest znacznie wyższa niż dla pozostałych kwasów. Jest to zresztą fakt powszechnie znany. Okazuje się jednak, że dopiero kiedy nie uwzględniono wartości dla kwasu mrówkowego, uwidoczniły się różnice między wartościami K_d dla pozostałych pięciu kwasów.

Obserwujemy tutaj wyraźnie anomalne zachowanie się kwasu propanowego, dla którego stała dysocjacji jest mniejsza niż dla kwasu masłowego. Te anomalia obserwowali również inni badacze [19, 25-27]. Część z nich uważa jednak, że nietypowo wysoką stałą dysocjacji posiada raczej kwas masłowy. Bennett i Mosses [19] interpretują to zjawisko poprzez założenie, że w obrębie cząsteczki kwasu masłowego występuje efekt związany z nieprężeniami w obrębie łańcucha alifatycznego (przestrzenne zagięcie łańcucha alkilowego), co bezpośrednio wiąże się ze zmniejszeniem jego efektu indukcyjnego na grupę karboksylową. Według nich ta zmiana energetyki pola w obrębie cząsteczki tego kwasu powoduje wzrost wartości jego stałej dysocjacji w porównaniu z kwasem propionowym. Nieco inną interpretację „nadzwyczajnego” wzrostu mocy kwasu masłowego przedstawił Evans i współpracownicy [19]. Według nich efekt ten można wytłumaczyć tworzeniem się w wodnych roztworach tego kwasu anionu o strukturze:



Równomierne rozmieszczenie ładunku ujemnego na obu atomach tlenu grupy karboksylowej powoduje znacznie słabsze wiązanie jonów wodorowych H^+ , a co za tym idzie wzrost mocy kwasu. Autorzy ci uważają, że podobny efekt występuje w przypadku kwasu *o*-metylobenzoowego, natomiast nie obserwujemy go w żadnym innym alifatycznym kwasie monokarboksylowym

Harned i Sutherland [27] sugerują również inne anomalne zachowanie kwasu masłowego w porównaniu z pozostałymi rozpuszczalnymi w wodzie alifatycznymi kwasami monokarboksylowymi. Według ich badań jego stała dysocjacji osiąga wartości maksymalne przy około $8^{\circ}C$, natomiast w przypadku kwasu octowego i propionowego (i wyższych od butanowego) to maksimum występuje pomiędzy 20° i $25^{\circ}C$. Uważają oni, że jest to ewidentny dowód na niespójność własności (z punktu widzenia mocy kwasu) kwasu masłowego z pozostałymi rozpuszczalnymi w wodzie alifatycznymi kwasami monokarboksylowymi. Trudno się jednak zgodzić do końca z takim stanowiskiem wielu badaczy. Prowadzi ono bowiem do wniosku, że każdy następny wyższy kwas posiada własności anomalne tylko dlatego, że jego stała dysocjacji jest większa od stałej dysocjacji kwasu propionowego. Nieco dziwne wydaje się również założenie o oddziaływaniach wodoru peryferyjnej grupy $-CH_3$ z atomem tlenu grupy karboksylowej. Również fakt, że maksimum wartości stałej dysocjacji kwasu masłowego pojawia się przy $8^{\circ}C$ nie wydają się czymś dziwnym.

Przedstawione przeze mnie w omawianej pracy dane wskazują na fakt, widocznej tendencji do przesuwania się położenia maksimum stałej dysocjacji badanych kwasów w stronę niższych temperatur w miarę wzrostu długości łańcucha węglowego kwasu (jedynie wartość stałej dysocjacji kwasu propionowego odbiega od tej reguły).

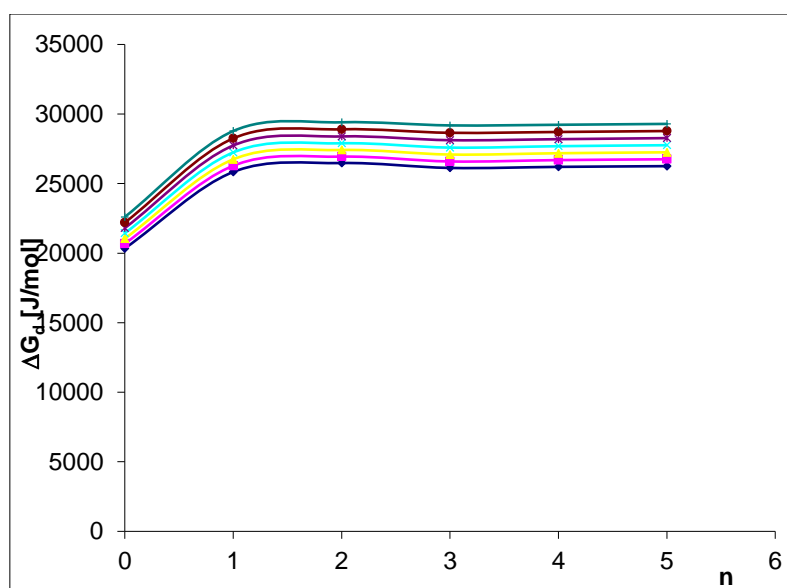
Wyznaczone wartości stałych K_d pozwoliły na obliczenie wartości swobodnej entalpii (ΔG_d), entropii (ΔS_d) i entalpii (ΔH_d) dysocjacji we wszystkich temperaturach pomiarowych, z następujących zależności:

$$\Delta G_d = - R \cdot T \cdot \ln K_d \quad (6)$$

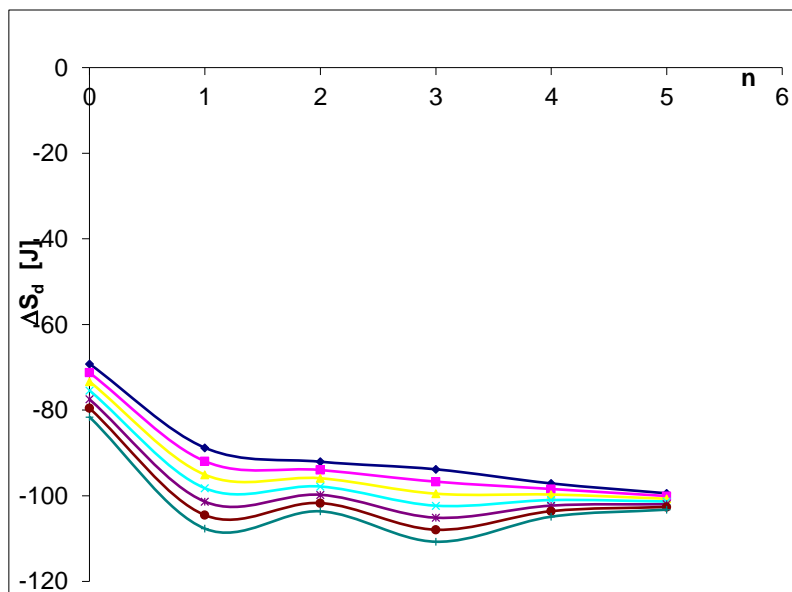
$$\Delta S_d = - \left(\frac{\partial G_d}{\partial T} \right)_p \quad (7)$$

$$\Delta H_d = \Delta G_d + T \cdot \Delta S_d \quad (8)$$

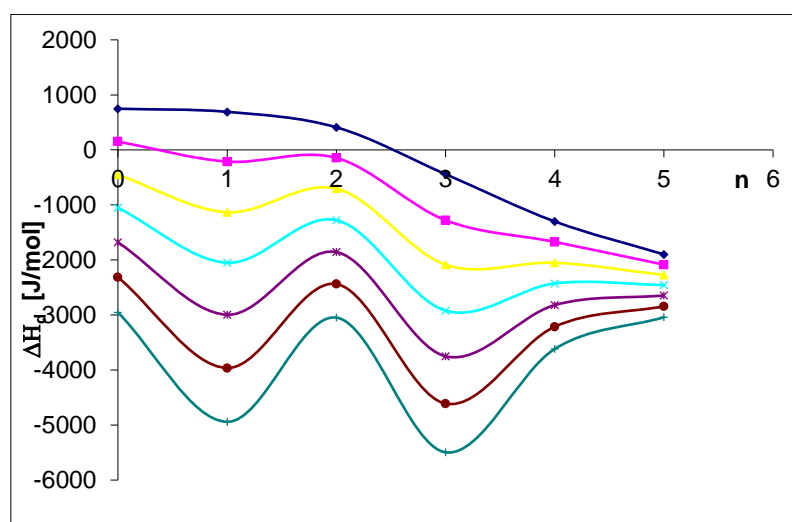
Przebiegi zmian wartości omawianych funkcji termodynamicznych w funkcji ilości atomów węgla w łańcuchu alifatycznym badanych kwasów przedstawiają poniższe wykresy.



Wykres 5. Przebiegi zmian swobodnej entalpii ΔG_d , w funkcji zmian długości łańcucha alifatycznego analizowanych kwasów w pełnym zakresie badanych temperatur. ♦ 283.15 K; ■ 288.15 K; ▲ 293.15 K; x 298.15 K; x 303.15 K; ● 308.15 K; x 313.15 K.



Wykres 6. Przebiegi zmian entropii ΔS_d w funkcji zmian długości łańcucha alifatycznego analizowanych kwasów w pełnym zakresie badanych temperatur. \blacklozenge 283.15K; \blacksquare 288.15 K; \blacktriangle 293.15 K; \times 298.15 K; \times 303.15 K; \bullet 308.15 K; \times 313.15 K.



Wykres 7. Przebiegi zmian entalpii ΔH_d w funkcji zmian długości łańcucha alifatycznego analizowanych kwasów w pełnym zakresie badanych temperatur. \blacklozenge 283.15K; \blacksquare 288.15 K; \blacktriangle 293.15 K; \times 298.15 K; \times 303.15 K; \bullet 308.15 K; \times 313.15 K.

Przedstawione powyżej przebiegi zmian analizowanych funkcji termodynamicznych potwierdzają, omawianą wcześniej, odmienną dysocjacyjną kwasu propionowego w porównaniu z innymi badanymi alifatycznymi kwasami monokarboksylowymi. Szczególnie jest to widoczne na przebiegach zmian entropii i entalpii dysocjacji.

Należy jednak podkreślić, że na podstawie analizy przebiegów zmian przedstawionych na powyższych wykresach funkcji nie można raczej zgodzić się z poglądami niektórych autorów

Autoreferat

wskazującymi również na anomalny charakter dysocjacji kwasu masłowego. Fakt, że entalpie i entropie dysocjacji są dla tego kwasu niższe niż dla kwasu propionowego nie może być podstawą do stwierdzenia anomalnego charakteru jego dysocjacji. Równie dobrze można by przyjąć pogląd o nietypowym charakterze dysocjacji kwasu octowego. Analiza zmian zależności $\Delta H_d = f(n)$ i $\Delta S_d = f(n)$ w funkcji zmian temperatury sugeruje raczej, że ze wzrostem temperatury uwidacznia się coraz silniej anomalny charakter dysocjacji kwasu propionowego.

Większość alifatycznych kwasów karboksylowych ma stałe dysocjacji kwasowej (K_A) rzędu $10^{-4} - 10^{-5}$, co wskazuje, że są one stosunkowo słabymi kwasami w roztworach wodnych. Prezentowana w pracy [H4] analiza poszczególnych czynników, które mogą mieć wpływ na zmianę wartości stałych dysocjacji alifatycznych kwasów monokarboksylowych wskazuje, że należy brać pod uwagę głównie czynniki strukturalne (budowę przestrzenną kwasów i ich wielkość). Ten wniosek potwierdziły badania konduktometryczne wodnych roztworów kwasów monokarboksylowych, w których do łańcucha wprowadzono takie podstawniki jak brom i jod jak również badania nienasyconych alifatycznych kwasów karboksylowych. Wprowadzenie do struktury badanych kwasów $-Br$ lub $-I$ w znaczący sposób zwiększa rozmiar anionu karboksylanowego powodując zmniejszenie jego ruchliwości. Z drugiej strony pojawienie się w strukturze badanych kwasów wiązania podwójnego usztywnia ich strukturę i ma znaczący wpływ na ruchliwość i efekty solwatacyjne badanych anionów. Obszerna analiza tych zagadnień znajduje się w prezentowanych przeze mnie pracach [H3 – H5]. Z prac tych wynika jedna bardzo ciekawa konkluzja. Wskazuje on na fakt, że dominującym czynnikiem mający wpływ na wartości uzyskanych wyników badań konduktometrycznych ma długość łańcucha alifatycznego badanych anionów.

W celu pełniejszej analizy omawianych efektów w pracy [H5] podjąłem również identyczne badania dla soli sodowych kwasów dikarboksylowych $[HOOC-(CH_2)_n-COOH]$; gdzie $n = 0 - 7$. Uzyskane wyniki badań konduktometrycznych zostały przeanalizowane za pomocą równań wynikających z modelu chemicznego niskiego stężenia (lcCM) Wartości przewodnictw granicznych (Λ_0) dla wszystkich badanych soli sodowych kwasów dikarboksylowych w szerokim zakresie temperatur uzyskano stosując dobrze znaną procedurę podaną przez Fuossa [6-7]. Obliczenia wykonano przy założeniu, że $R = q$ (q - odległość Bjerruma).

Uzyskane wyniki pozwoliły na wyznaczenie wartości przewodnictwa granicznego $\Lambda_0(I/2Na_2A)$ dla badanych elektrolitów. Ponieważ sole typu Na_2A są typem elektrolitu niesymetrycznego użyto, na etapie wstępnych analiz wyników pomiarowych, równanie Quinta-Viallarda [8] i

Autoreferat

równanie Lee-Wheatona [9]. Okazało się jednak, że wartości przewodnictw granicznych otrzymywane przy użyciu każdego z tych równań były praktycznie takie same jak uzyskane z równania Fuossa-Justice'a (w granicach spodziewanego błędu wynikającego z eksperymentu). Wykorzystując wyznaczone wartości przewodnictw granicznych $\Lambda_0(1/2Na_2A)$ obliczyłem wartości molowych przewodnictw granicznych dla anionów dikarboksyłanowych ($\lambda_{(A^{2-})}^0$) w oparciu o równanie:

$$\lambda_{(A^{2-})}^0 = \Lambda_0(1/2Na_2A) - \lambda^0(Na^+) \quad (8)$$

wykorzystując wartości $\lambda^0(Na^+)$ podane w literaturze [15].

Uzyskane wyniki $\lambda_{(A^{2-})}^0$ dla badanych anionów w zakresie badanych temperatur 283.15 K – 313.15 K zestawilem w poniższej Tabeli

$\lambda_{(A^{2-})}^0$								
$S \cdot cm^2 \cdot mol^{-1}$								
T/K	n = 0	n = 1	n = 2	n = 3	n = 4	n = 5	n = 6	n = 7
283.15	51.01	39.95	36.96	34.74	32.84	31.20	29.79	28.58
288.15	58.70	46.41	43.10	40.66	38.57	36.77	35.22	33.89
293.15	66.38	52.84	49.22	46.56	44.29	42.33	40.64	39.19
298.15	74.90	60.2	56.25	53.39	50.92	48.8	46.98	45.41
303.15	82.65	66.70	62.43	59.35	56.69	54.41	52.45	50.76
308.15	91.50	74.07	69.49	66.19	63.35	60.91	58.81	57.00
313.15	98.99	80.66	75.76	72.24	69.21	66.61	64.37	62.45

Jak wynika z analizy wyników przedstawionych w pracy [H5] charakter zmian funkcji $\lambda_{A^{2-}}^0 = f(n)$ jest niemal monotoniczny. Jedynie w przypadku anionu szczawianowego obserwujemy nieco gorsze dopasowanie wartości $\lambda_{(A^{2-})}^0$ do omawianej zależności. Jest to najprawdopodobniej spowodowane budową omawianego anionu. W anionie szczawianowym obserwujemy bardzo silne oddziaływanie na siebie grup karboksylowych (które nie są rozdzielone węglami łańcucha alifatycznego), a co za tym idzie obserwujemy odmienny rozkład ładunku w omawianym jonie w porównaniu z anionami wyższych kwasów dikarboksylowych. Podobny monotoniczny (niemal liniowy) charakter zmian obserwujemy analizując przebiegi zmian funkcji $\lambda_{(A^{2-})}^0 = f(T)$ dla badanych anionów.

Autoreferat

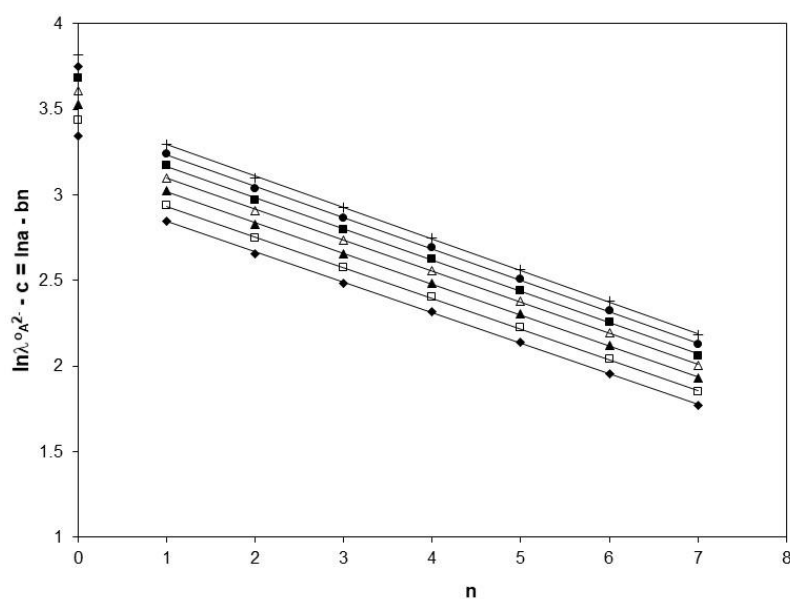
Analiza omawianych wyników doprowadziła mnie do wniosku, że zależność zmian granicznego przewodnictwa jonowego dla badanych anionów w funkcji ilości atomów węgla w łańcuchu alifatycznym można opisać odpowiednią formułą matematyczną. Oczywiście w obliczeniach zostały pominięte dane dla jonu szczawianowego, ponieważ on takich atomów węgla nie posiada. Biorąc pod uwagę fakt, że omawiana zależność ma charakter eksponentialny zaproponowałem następującą jej postać matematyczną:

$$\lambda_{A^{2-}} = a e^{-bn} + c \quad (9)$$

Po przekształceniu tego równania można otrzymać jego postać zawierającą trzy parametry empiryczne (a , b , c).

$$\ln(\lambda_{A^{2-}} - c) = a - bn \quad (10)$$

Jednocześnie należy zaznaczyć, że jeżeli formuła (9) jest zasadna to zależność (10) powinna mieć liniowy charakter. Zostało to przeze mnie potwierdzone, co ilustruje poniższy Wykres.:



Wykres 8. Przebieg zmian funkcji $\ln(\lambda_{A^{2-}}^0 - C) = \ln a - bn$, (\blacklozenge) 283.15 K, (\blacksquare) 288.15 K, (\blacktriangle) 293.15 K, (\triangle) 298.15 K, (\square) 303.15 K, (\bullet) 308.15 K i ($+$) 313.15 K

Analiza wieloparametrowa doprowadziła do wyznaczenia wartości współczynników a , b i c . Wartości tych parametrów zamieszczono w Tabeli przedstawionej poniżej:

T/K	a	b	c
283.15	20.493	0.178	22.728
288.15	22.486	0.179	27.538
293.15	24.466	0.180	32.317
298.15	26.289	0.181	37.599
303.15	28.409	0.182	42.918
308.15	30.395	0.183	48.630
313.15	32.354	0.184	53.609

Wysokie wartości współczynnika korelacji oraz niewielka wartość sumy kwadratów odchyłek $[\sum(\lambda_{calc}-\lambda_{exp})^2]$ wskazują na poprawność zaproponowanego opisu zależności granicznych przewodnictw molowych anionów karboksylowych od ilości grup $-\text{CH}_2-$ w tych anionach. Pełne omówienie znaczenia wartości współczynników a , b i c znajduje się w pracy [H5].

Warto podkreślić, że zaproponowane przeze mnie równania (9) i (10) są pierwszymi równaniami przedstawionymi w literaturze światowej, które wiążą ilościowo przewodnictwo badanych anionów kwasów z ich wielkością bez względu na ich budowę.

4.3.2d. Analiza wpływu zmian temperatury i własności fizykochemicznych rozpuszczalnika na efekty solwatacyjno-asocjacyjne z punktu widzenia pomiarów konduktometrycznych.

Omawiane efekty były szczegółowo analizowane przeze mnie w pracach [H6-H8]. W pracy [H6] badano przewodnictwo KCl w mieszaninach woda – glikol etylenowy (EG) zawierających 0.1, 0.2 0.3 i 0.4 ułamka molowego EG w szerokim przedziale temperatur. Eksperymentalne wartości przewodnictwa pozwoliły na wyznaczenie takich wielkości jak: graniczne przewodnictwo molowe (Λ_o), stała asocjacji (K_A), wartości iloczynu Waldena ($\Lambda_o \cdot \eta$) oraz wartości funkcji termodynamicznych (swobodną entalpię, entropię i entalpię) opisujących proces asocjacji jonowej w badanych roztworach. Uzyskane wyniki wskazują na spadek wartości granicznego przewodnictwa molowego, wzrost stałej asocjacji i wzrost spontaniczności w procesie tworzenia par jonowych w mieszaninach EG - woda wraz

Autoreferat

ze wzrostem zawartości EG i obniżeniem temperatury. Spowodowane jest to najprawdopodobniej wzrostem lepkości i spadkiem wartości przenikalności elektrycznej mieszanego rozpuszczalnika wraz ze wzrostem zawartości EG. Potwierdza to charakter zmian wyznaczonych wartości funkcji termodynamicznych asocjacji.

Praca ta stanowiła pewnego rodzaju wstęp do badań przedstawionych w pracach [H7 i H8].

Przeprowadzono w nich badania konduktometryczne wybranych cieczy jonowych pochodnych imidazolu (ILs) [chlorku 1-metyloimidazolu ([C0mim][Cl]), chlorku 1,3-dimetyloimidazolu ([C1mim][Cl]), chlorku 1-etylo-3-metyloimidazolu ([C2mim][Cl]), chlorku 1-butylo-3-metyloimidazolu ([C4mim][Cl]) i chlorku 1-heksylo-3-metyloimidazolu ([C6mim][Cl])] w glikolu etylenowym i tetraetyleno glikolu w szerokim przedziale temperatur. W oparciu o te wyniki doświadczalne wyznaczono (stosując te same metody obliczeniowe jak w pracy [H6]) wartości granicznego przewodnictwa molowego, granicznego jonowego przewodnictwa molowego, iloczyn Waldena, stałą asocjacji jak również wartości funkcji termodynamicznych asocjacji.

Analiza zmian wyznaczonych wartości przewodnictwa molowego w funkcji stężenia ILs wskazuje na ich liniowy charakter (co jest zgodne z wynikami badań przedstawionymi przez Fuossa [5, 6]). Taki charakter zmian omawianej funkcji wskazuje na to, że za asocjację jonową w badanych roztworach odpowiadają głównie elektrostatyczne oddziaływania między jonowe (w literaturze takie zachowanie określa się jako „idealne”) Należy również zauważyć, że graniczne przewodnictwa molowe badanych cieczy jonowych w TEG [H8] są około trzykrotnie mniejsze niż w EG [H7]. Nie ulega wątpliwości, że tak duża różnica omawianej wielkości w obu rozpuszczalnika wynika z dużych różnic ich lepkości i przenikalności elektrycznej.

Dodatkowych informacji o oddziaływaniach typu jon-rozpuszczalnik w badanych roztworach dostarcza również analiza zmian wartości iloczynu Waldena ($\Lambda_o \cdot \eta$). Jak wynika z danych zawartych w pracach [H7] i [H8] zmiany tej wielkości w obrębie tego samego rozpuszczalnika są niewielkie. Można zatem przyjąć, że ruchliwość jonów przy nieskończonym rozcieńczeniu zależy głównie od makroskopowej lepkości rozpuszczalnika, a solwatacja jonów w badanych układach ma niewielki wpływ na obserwowane zmiany wyników badań konduktometrycznych. Potwierdza to również analiza różnic wartości iloczynu Waldena w obu badanych glikolach. Wartości $\Lambda_o \cdot \eta$ są znacznie niższe w EG w porównaniu z tymi samymi wartościami w TEG. Proste modele termodynamiczne zakładają, że wartości $\Lambda_o \cdot \eta$ są odwrotnie proporcjonalne do efektywnej wielkości jonów zgodnie z równaniem $\Lambda_o \cdot \eta = const / r_s$. Można zatem przyjąć, że efektywna wielkość jonów w EG jest znacznie większa niż w TEG. Możliwe, że jest to (jak już

Autoreferat

wspomniałem wcześniej) spowodowane słabszą solwatacją jonów badanych cieczy jonowych w TEG. Potwierdza to szczegółowa analiza procesów solwatacyjnych oparta na analizie przewodnictwa jonowego i promienia Stokesa badanych jonów w EG i TEG przedstawiona w pracach [H7] i [H8].

Bardzo ciekawe wnioski, z punktu widzenia badanych efektów solwatacyjno-asocjacyjnych, dostarczają przebiegi zmian wartości stałej asocjacji (K_A) w badanych rozpuszczalnikach. Analizując wartości stałej asocjacji badanych ILs w TEG można zauważyć, że wartości te spełniają następującą zależność:

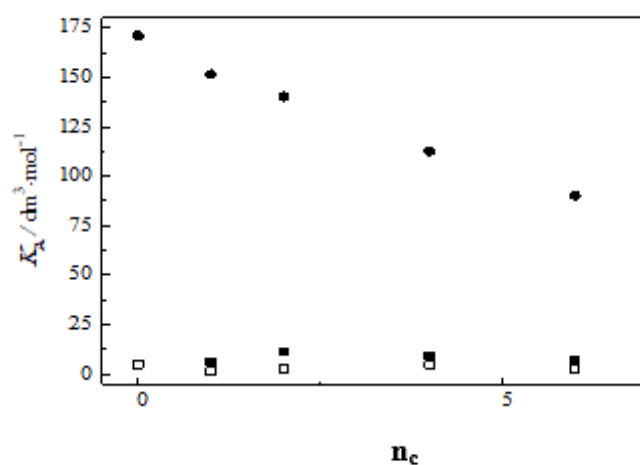
$$K_A(\text{C0mimCl}) > K_A(\text{C1mimCl}) > K_A(\text{C2mimCl}) > K_A(\text{C4mimCl}) > K_A(\text{C6mimCl})$$

Tak więc wartości K_A rosną wraz ze spadkiem masy molowej badanych cieczy jonowych. Okazuje się jednak, że w EG charakter tej zależności ma inną postać:

$$K_A(\text{C0mimCl}) < K_A(\text{C1mimCl}) < K_A(\text{C6mimCl}) < K_A(\text{C4mimCl}) < K_A(\text{C2mimCl})$$

Przedstawione powyżej różnice w charakterze zmian wartości K_A wynikają najprawdopodobniej z różnic w budowie przestrzennej badanych rozpuszczalników, ich odmiennej strukturze wewnętrznej i znacznych różnicach w wartościach ich lepkości.

W pracy [H8] przeprowadziłem również analizę porównawczą zmian wartości K_A w funkcji ilości atomów C w kationie badanych ILs w EG i TEG z literaturowymi doniesieniami odnośnie przebiegu zmian omawianej zależności uzyskanymi w wodzie [31] (ilustruje to poniższy Wykres 9).



Wykres 9. Przebieg zmian stałych asocjacji (K_A) w funkcji długości łańcucha alkilowego, (n_c) w $T = 298.15 \text{ K}$ w (\blacksquare) EG [30], (\square) wodzie [31] i w (\bullet) TEG.

Jak widać, wartości K_A dla wszystkich ILs w EG i TEG są wyższe niż w wodzie, a dodatkowo wzrost wartości K_A w TEG jest znacznie większy niż w EG (praca [H7]). Obserwowane różnice wartości K_A w EG, TEG i wodzie można wytłumaczyć małymi wartościami przenikalności elektrycznej i dużą lepkością obu glikoli. Z drugiej strony obserwowany wzrost wartości K_A w TEG w stosunku do wartości tej stałej w EG jest najprawdopodobniej spowodowany znacznie większą lepkością TEG niż EG. Nie ulega wątpliwości, że wzrost lepkości musi mieć wpływ na efekty solwatacyjne, a tym samym na obserwowane wartości stałej asocjacji badanych ILs w badanych rozpuszczalnikach.

Należy zauważyć, że graniczne przewodnictwa molowe badanych ILs zmieniają się w odwrotnej kolejności niż wartości K_A . Są one większe w EG niż w TEG w tej samej danej temperaturze. Jest to związane ze znacznie niższą lepkością EG niż TEG. Potwierdza to znaczenie wpływu wartości lepkości na solwatację i asocjację w tych rozpuszczalnikach.

Uzyskane w pracach [H7] i [H8] wartości funkcji termodynamicznych opisujących proces asocjacji jonowej (przede wszystkim wartości swobodnej entalpii Gibbsa i entalpii) w roztworach ILs w EG i TEG wskazują, że jest on samorzutny i endotermiczny. Zmiany entropii wskazują równocześnie na fakt, że czynnik entropowy (a więc struktura badanego rozpuszczalnika, która jest ściśle związana z jego przenikalnością elektryczną i lepkością) ma kolosalny wpływ na tworzenie par jonowych w badanych roztworach ILs.

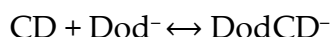
4.3.2e. Zaproponowanie nowych równań pozwalających na obliczenie wartości przewodnictwa teoretycznego i stałych tworzenia kompleksów inkluzyjnych w oparciu o badania konduktometryczne cyklodekstryn z różnego typu anionami organicznymi.

Wydawać by się mogło, śledząc przedstawione przeze mnie badania opisane w pracach [H1 – H8] jak i zawarte w nich dane literaturowe, że pomiary konduktometryczne to jedyne źródło informacji o wartościach, granicznych molowych przewodnictw jonowych, stałych asocjacji czy też funkcji termodynamicznych opisujących procesy asocjacyjno-solvatacyjne w badanych roztworach elektrolitów. Okazuje się jednak, że nie.

W pracach [H9, H10, H11] zaproponowałem wykorzystanie badań konduktometrycznych (z zastosowaniem opracowanego przeze mnie równania matematycznego) do wyznaczania wartości stałych tworzenia kompleksów inkluzyjnych w roztworach cyklodekstryn z różnego typu elektrolitami. Omawiane równanie jest nowatorskim rozwiązaniem (nikt w literaturze światowej takiego równania nie zaprezentował) umożliwiającym wyznaczenie wartości stałej

Autoreferat

kompleksowania, jak również wartości teoretycznego przewodnictwa powstających kompleksów w szerokim przedziale temperatur. Poprawność obliczeń prowadzonych przy wykorzystaniu tego równania przetestowałem badając wodne roztwory soli sodowych wybranych kwasów fenolowych i soli sodowej kwasu dodekanowego z α – cyklodekstryną, β – cyklodekstryną i 2 HP – β –cyklodekstryną w szerokim przedziale temperatur (prace [H9-11]) W badanych roztworach obserwujemy powstawanie kompleksów inkluzyjnych o stechiometrii 1:1 pomiędzy cyklodekstryną (CD) a anionem badanych kwasów (Dod^-):



Stała tworzenia tych kompleksów ma postać:

$$K_f = \frac{[DodCD^-]}{[Dod^-][CD]} \quad (11)$$

Uzyskane wyniki pomiarów konduktometrycznych pozwalają na wyznaczenie wartości tych stałych. Przewodnictwo molowe soli sodowej wybranego kwasu fenolowego można wyrazić przewodnictwem molowym soli kwasu z nieskompleksowanym anionem (Λ_{NaDod}) oraz soli alkalicznej kwasu, w której anion tworzy kompleks inkluzyjny z cyklodekstryną ($\Lambda_{CDNaDod}$) Przewodnictwo molowe roztworu przedstawia następująca zależność:

$$\Lambda = \frac{1000 \cdot \kappa}{C_{NaDod}} \quad (12)$$

gdzie:

κ – przewodnictwo właściwe w jednostce [$S \cdot m^{-1}$]

C_{NaDod} – stężenie molowe soli sodowych kwasu fenolowego

Przewodnictwo molowe badanego kwasu, obliczone z równania (14), można wyrazić przewodnictwem molowym badanej soli sodowej tego kwasu z nieskompleksowanym anionem (Λ_{NaDod}) oraz soli sodowej kwasu, w której anion kwasu tworzy kompleks inkluzyjny z cyklodekstryną ($\Lambda_{CDNaDod}$).

Przewodnictwo molowe badanego roztworu opisuje następująca zależność:

$$\Lambda_{obs} = \alpha \cdot \Lambda_{NaDod} + (1 - \alpha) \cdot \Lambda_{CDNaDod} \quad (13)$$

Autoreferat

gdzie:

$$\alpha = \frac{[\text{Dod}^-]}{[\text{Na}^+]} \quad (14)$$

$$1 - \alpha = \frac{[\text{DodCD}^-]}{[\text{Na}^+]} \quad (15)$$

$$C_{\text{DodNa}} = [\text{Na}^+] = [\text{Dod}^-] + [\text{DodCD}^-] \quad (16)$$

$$C_{\text{CD}} = [\text{CD}] + [\text{DodCD}^-] \quad (17)$$

Stałą tworzenia jonów kompleksowych (DodCD^-) wyraża równanie:

$$K_f = \frac{[\text{DodCD}^-]}{[\text{Dod}^-] \cdot [\text{CD}]} \quad (18)$$

Biorąc pod uwagę równania (21), (22) i (23) otrzymujemy:

$$K_f \cdot [\text{CD}]^2 + [K_f \cdot (C_{\text{DodNa}} - C_{\text{CD}}) + 1] \cdot [\text{CD}] - C_{\text{CD}} = 0 \quad (19)$$

Łącząc równania (13), (14), (15) i (19), otrzymujemy równanie, które zawiera wszystkie wielkości z doświadczenia i dwie wielkości do wyboru (K_f i Λ_{NaDodCD}): Biorąc to pod uwagę, równanie na przewodnictwo molowe roztworu przed dodaniem cyklodekstryny przyjmuje postać:

$$\Lambda = \left[K_f \cdot (C_{\text{DodNa}} - C_{\text{CD}}) - 1 + \sqrt{K_f^2 \cdot (C_{\text{CD}} - C_{\text{DodNa}})^2 + 2K_f \cdot (C_{\text{DodNa}} + C_{\text{CD}}) + 1} \right] \cdot \left[\frac{\Lambda_{\text{NaDod}} - \Lambda_{\text{CDNaDod}}}{2K_f \cdot C_{\text{DodNa}}} \right] + \Lambda_{\text{NaDodCD}} \quad (20)$$

Wartości K_f i przewodnictwa Λ_{NaDodCD} dobiera się minimalizując sumę:

$$\sum_{i=1}^n (\Lambda_{\text{exp}} - \Lambda_{\text{calc}})^2 \quad (21)$$

gdzie:

n – ilość rozwiązań testowych

Λ_{exp} – eksperymentalne przewodnictwo molowe obliczone z równania (17)

Λ_{calc} – przewodność molowa obliczona z równania (25)

Autoreferat

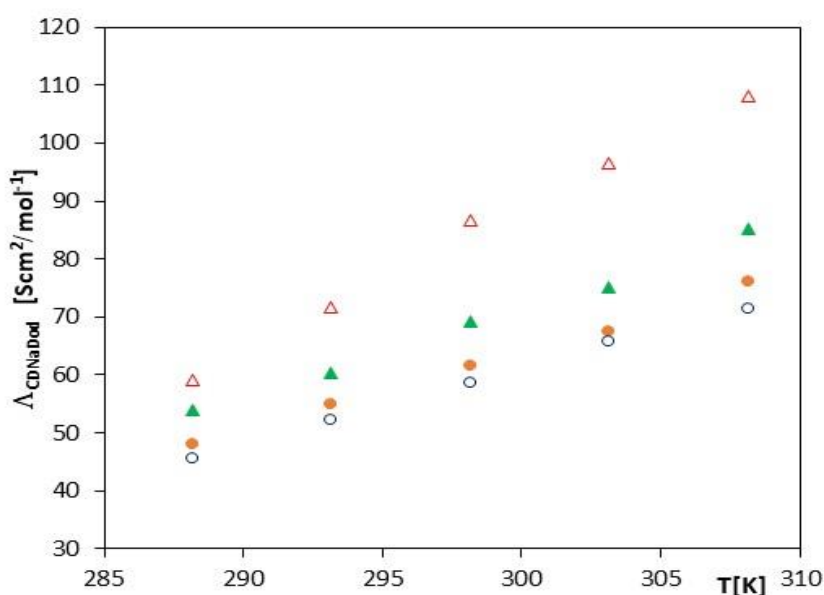
Z przeglądu danych literaturowych [32,33] wynika, że wartości Λ_{NaDod} i $\Lambda_{NaDodCD}$ mogą się zmieniać, a ich wartości można opisać następującymi równaniami:

$$\Lambda_{NaDod} = \Lambda_{oNaDod} - S \cdot c_{NaDod}^{1/2} + E \cdot c_{NaDod} \cdot \ln c_{NaDod} + J_1 \cdot c_S + J_2 \cdot c_{NaDod}^{3/2} \quad (22)$$

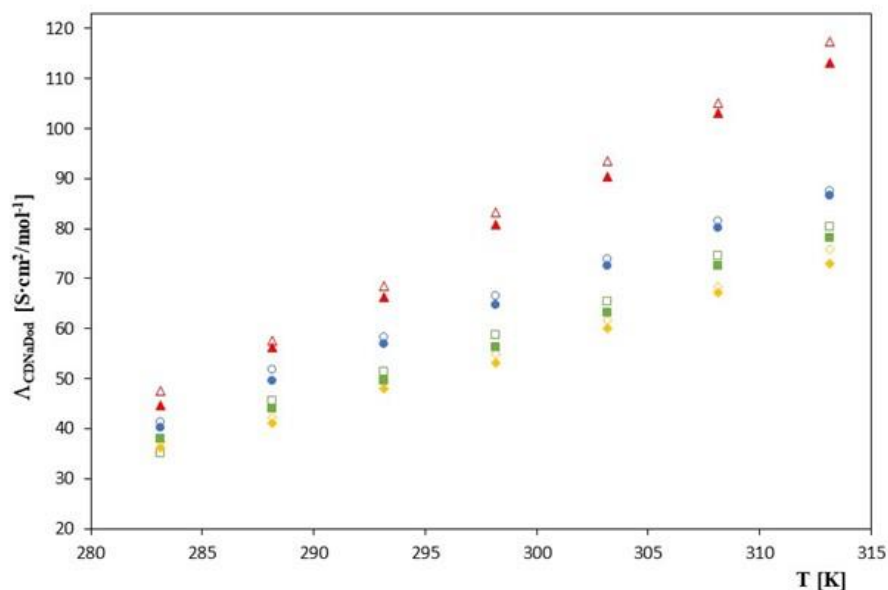
$$\Lambda_{NaDodCD} = \Lambda_{oCDNaDod} - S \cdot c_{NaDod}^{1/2} + E \cdot c_{NaDod} \cdot \ln c_{NaDod} + J_1 \cdot c_S + J_2 \cdot c_{NaDod}^{3/2} \quad (23)$$

Wartości parametrów S , E , J_1 i J_2 odnoszą się do efektów relaksacyjnych i elektroforetycznych. Należy jednak pamiętać, że wartości J_1 i J_2 zależą od tzw. parametru maksymalnego zbliżenia jonu.

W pracy [H10] omawiającej badania z α -cyklodekstryną i pracy [H11] omawiającej pomiary z β -cyklodekstryną i 2 HP - β -cyklodekstryną wartości przewodnictw teoretycznych w funkcji temperatury rosną, co jest faktem oczywistym zgodnie z teorią przewodnictwa. Trzeba jednak zwrócić uwagę, że wartości te są znacznie mniejsze od wartości przewodnictw badanych elektrolitów, kiedy anion nie jest skompleksowany. Fakt ten można tłumaczyć większym rozmiarem anionu skompleksowanego. Na poniższych Wykresach 10 i 11 widać jak dokładnie układają się wartości przewodnictw teoretycznych w funkcji zmian temperatury. Z Wykresów tych wynika również fakt, że wartości przewodnictwa rosną wraz ze wzrostem masy molowej badanego kwasu, a charakter tych zmian jest typowo monotoniczny.



Wykres 10. Przebieg zmian przewodnictwa teoretycznego ($\Lambda_{CDNaDod}$ [$S \cdot cm^2/mol^{-1}$]) w funkcji zmian temperatury (T [K]) dla α -cyklodekstryny ze wszystkimi badanymi solami kwasu: Δ - *trans*-cynamonowego; \blacktriangle - *trans*-p-kumarowego; \bullet - *trans*-kawowego; \circ - *trans*-felurowym.



Wykres 11. Wykres przebiegu zmian przewodnictwa teoretycznego ($\Lambda_{CDNaDod}$ [$S \cdot cm^2 / mol^{-1}$]) w funkcji zmian temperatury (T [K]) dla β -cyklodekstryny z omawianymi solami.: Δ - kwasu *trans*-cynamonowego; \circ - kwasu *trans*-p-kumarowego; \square - kwasu *trans*-kawowego; \diamond - kwasu *trans*-felurowego i 2-HP- β -cyklodextrin z omawianymi solami.: \blacktriangle - kwasu *trans*-cynamonowego; \bullet - kwasu *trans*-p-kumarowego; \blacksquare - kwasu *trans*-kawowego; \blacklozenge - kwasu *trans*-felurowego.

Taki sam charakter zmian obserwujemy analizując uzyskane i przedstawione w pracach [H10-H11] przebiegi zmian wartości stałych tworzenia kompleksów inkluzyjnych (K_f) z punktu widzenia budowy cyklodekstryny, masy molowej badanego elektrolitu jak i zmian temperatury. Wymienione czynniki mają i muszą mieć wpływ na uzyskane wartości przewodnictw jak i wartości stałych tworzenia kompleksów inkluzyjnych ze względu na ich wpływ na tzw. dopasowanie kompleksowanego jonu w luce cyklodekstryny.

Dzięki zastosowaniu pomiarów konduktometrycznych z wykorzystaniem opracowanego przeze mnie równania można było również wyznaczyć wartości funkcji termodynamicznych (ΔG^o – swobodna entalpia, ΔS^o – entropia oraz ΔH^o – entalpia) opisujących proces tworzenia kompleksów inkluzyjnych omawianych cyklodekstrynach z badanymi anionami w wodzie. Dokładne wnioski płynące z przebiegów ich zmian przedstawiłem w pracach [H9-11].

Podsumowując ten rozdział mogę stwierdzić, że zastosowane przeze mnie badania konduktometryczne z zastosowaniem opisaną metodą obliczeniową do wyznaczenia wartości przewodnictw molowych i stałych tworzenia kompleksów inkluzyjnych cyklodekstryn z omawianymi anionami są pierwszymi w literaturze badaniami tego typu. Pokazują one

Autoreferat

również, że mogą być zastosowane do badań cyklicznych anionów kwasów jak i długich łańcuchowych anionów kwasów tłuszczowych.

Być może zaproponowana przeze mnie metoda badań i obliczeń stałych tworzenia kompleksów inkluzyjnych może być bardzo ciekawą alternatywą do innych opisanych w literaturze metod badawczych tej wielkości.

4.3.6 Najważniejsze osiągnięcia

Mój dorobek naukowy istotnie poszerza zakres wiedzy dotyczącej oddziaływań asocjacyjno solwatacyjnych w różnych rozpuszczalnikach. Znaczna część badanych przeze mnie zagadnień została przedstawiona w literaturze po raz pierwszy. Za pomocą stosowanych metod badawczych szczegółowo scharakteryzowałem oddziaływania wybranych elektrolitów w wodzie jak i w rozpuszczalnikach organicznych. W moich pracach opisałem również wpływ wielu czynników na wartości stałej asocjacji oraz zaproponowałem nowatorskie równania pozwalających na określenie wpływu budowy badanych elektrolitów organicznych na jej wartości.

Zaproponowałem po raz pierwszy zastosowanie metody konduktometrycznej (jako alternatywy dla metod NMR i kalorymetrii) do oceny wartości stałych tworzenia kompleksów inkluzyjnych cyklodekstryn z różnego typu anionami organicznymi. Zaowocowało to również wprowadzeniem do literatury światowej (nigdy wcześniej nie stosowanych) równań pozwalające na wyznaczanie wartości tych stałych i wyliczania wartości przewodnictwa teoretycznego. Zaproponowana przeze mnie metoda badawcza jest nie tylko metodą bardzo dokładną, ale daje również olbrzymie możliwości do pełnego opisu termodynamiki badanych procesów tworzenia kompleksów inkluzyjnych.

Moje prace stanowią również krok naprzód w kierunku stosowania konduktometrii jako metody o bardzo wysokiej dokładności i szerokiej gamie zastosowań.

Do moich najważniejszych osiągnięć naukowych ww. cyklu publikacji zaliczam:

1. Przeanalizowane właściwości soli nieorganicznych w różnych rozpuszczalnikach z punktu widzenia wpływu budowy ich jonów (anionów i kationów) na wielkość efektów solwatacyjno asocjacyjne zachodzących w ich roztworach [H1-H2].
2. Opisanie procesu transportu jonów w badanych układach zawierających alkoksyalcohol. W tym celu obliczono wartości iloczynu Waldena ($\lambda_o^{\pm} \cdot \eta$) [H1, H2] oraz wartości

granicznych przewodnictw jonowych (λ_o^{\pm}) dla BPh_4^- , Bu_4N^+ , Na^+ , Br^- , I^- , BF_4^- w badanych alkoxyalkoholach w różnych temperaturach.

3. Przeprowadzenie pełnej analizy wpływu budowy anionów wybranych alifatycznych kwasów mono- i dikarboksylowych na wartości ich przewodnictw granicznych oraz efekty solwatacyjno-asocjacyjne zachodzące w ich roztworach. Wyznaczenie wartości przewodnictwa molowego rozcieńczonych roztworów anionów kwasów karboksylowych podstawionych różnymi podstawnikami (Br i I) oraz nienasyconych kwasów karboksylowych w wodnych roztworach w szerokim zakresie temperatur. [H3-H5].
4. Opracowanie nowych równań (równanie 9 i 10 str. 24 Autoreferatu) umożliwiających wyznaczenie wartości parametrów a , b i c dla tych soli oraz wykazanie, że wartości tych parametrów ulegają zmianie wraz ze zmianą temperatury prace [H3-H5].
5. Przeprowadzenie oceny wpływu zmian temperatury i własności fizykochemicznych rozpuszczalnika na efekty solwatacyjno-asocjacyjne z punktu widzenia pomiarów konduktometrycznych cieczy jonowych pochodnych imidazolu w różnych rozpuszczalnikach prace [H6-H8].
6. Przeanalizowanie wpływu struktury i własności rozpuszczalnika, budowy przestrzennej cieczy jonowej i temperatury na graniczne przewodnictwo molowe cieczy jonowych w badanych rozpuszczalnikach. W prezentowanych pracach przedyskutowałem również wpływ własności rozpuszczalnika, oddziaływań jon- rozpuszczalnik i temperatury na wielkość asocjacji w badanych roztworach cieczy jonowych [H7 i H8].
7. Przeprowadzenie przeze mnie badań (opisane w punkcie 6) [H6-H8] rzucających nowe światło na specyfikę i mechanizm oddziaływań międzymolekularnych w roztworach badanych cieczy jonowych. Badania te wykazały również, że w rozcieńczonych roztworach badane ciecze jonowe zachowują się jak klasyczne elektrolity z organicznym kationem.
8. W pracach [H9-H11] zaprezentowałem moją nową metodę obliczeniową pozwalającą na ocenę stabilności kompleksów inkluzyjnych tworzonych przez α - β - i $2H\beta$ -cyklodekstrynę z cyklicznymi jak i alifatycznymi kwasami karboksylowymi w wodzie w szerokim przedziale temperatur. Należy podkreślić, że metoda ta opiera się wyłącznie na wynikach badań konduktometrycznych.
9. Zaprezentowane w literaturze [H9-H11] po raz pierwszy wartości stałych kompleksowania i teoretycznych przewodnictw molowych badanych kompleksów inkluzyjnych wyznaczonych na podstawie badań konduktometrycznych.

10. Wykonanie pełnej analizy termodynamicznej (swobodnej energii Gibbsa, entalpii i entropii) w szerokim przedziale temperatury z uwzględnieniem wpływu budowy badanej cyklodekstryny oraz inkludowanego anionu karboksylanowego na mechanizm analizowanego procesu kompleksowania prace [H9-H11].

5 Informacja o wykazywaniu się istotną aktywnością naukową albo artystyczną realizowaną w więcej niż jednej uczelni, instytucji naukowej lub instytucji kultury, w szczególności zagranicznej.

Po uzyskaniu stopnia naukowego doktora nawiązałem współpracę naukową z Profesorem Renato Tomaszem z Uniwersytetu w Splicie, Chorwacji. W ramach tej współpracy odbyłem trzy półtora miesięczne staże naukowe oraz trzykrotnie wyjeżdżałem do Splitu w ramach programu ERASMUS+ dla pracowników naukowych.

Podczas tych pobytów intensywnie pracowałem w laboratoriach Uniwersyteckich które umożliwiły mi dalszy rozwój naukowy dzięki możliwości pracy na nowoczesnym sprzęcie laboratoryjnym. Podczas odbytych starzy naukowych miałem możliwość konsultacji naukowych z wieloma naukowcami i wyciąganie cennych wskazówek podczas odbytych spotkań naukowych.

Dzięki tej współpracy powstał szereg artykułów **H2, H6, H7, H8 i H9, P8 i P15** które są między innymi przedmiotem przedstawionej przeze mnie rozprawy habilitacyjnej. Współpracowałem również z Aleksandrem Totem z Królewskiego Instytutu Technologicznego w Sztokholmie (KTH Royal Institute of Technology) i dzięki tej współpracy opublikowałem artykuł **H8**.

Nawiązałem również współpracę z grupą badawczą z Uniwersytetu z Nowego Sadu w Słowenii, której kierownikiem jest Profesor Milan Vraneš. Dzięki niej opublikowałem wspólnie z Profesorem Vranešem trzy artykuły **H7, H8 i P15**. W czasie pandemii wielokrotnie odbywałem spotkania online z grupą badawczą z Nowego Sadu.

6 Informacja o osiągnięciach dydaktycznych, organizacyjnych oraz popularyzujących naukę lub sztukę

6.1 Osiągnięcia dydaktyczne i popularyzujące naukę

1. Do moich osiągnięć dydaktycznych mogę zaliczyć prowadzenie zajęć laboratoryjnych oraz audytoryjnych dla studentów Wydziału Chemicznego Uniwersytetu Łódzkiego z zakresu

Autoreferat

chemii ogólnej, chemii nieorganicznej, chemii fizycznej jak i również chemii kosmetycznej
Dotychczas prowadziłem następujące kursy dydaktyczne:

- Chemia ogólna (wykłady, ćwiczenia obliczeniowe i laboratoryjne)
- Podstawy chemii (ćwiczenia obliczeniowe)
- Chemia nieorganiczna (laboratorium)
- Chemia ogólna (ćwiczenia obliczeniowe)
- Seminaria dyplomowe

Jestem autorem nowego (wprowadzonego na kierunku Chemia Kosmetyczna) przedmiotu „Fizykochemia form kosmetycznych”. W ramach tego przedmiotu prowadzony jest wykład i ćwiczenia laboratoryjne.

2. Byłem promotorem 3 prac magisterskich oraz 12 prac dyplomowych na studiach I stopnia.

3. Pełnię funkcję koordynatora następujących przedmiotów:

- Podstawy Chemii Ogólnej–(kurs obowiązkowy dla studentów studiów stacjonarnych oraz niestacjonarnych)
- Obliczenia chemiczne (dla I stopnia studiów)
- Fizykochemia form Kosmetycznych (dla I stopnia studiów)
- Chemia Ogólna i Warsztaty Elektrochemiczne (dla studiów niestacjonarnych I stopnia).

4. Przygotowałem skrypt do zajęć laboratoryjnych z zakresu chemii ogólnej i fizykochemii form kosmetycznych pt: „Ćwiczenia laboratoryjne w chemii ogólnej”

5. W 2018 roku byłem opiekunem Grantu Studenckiego realizowanego przez moją magistrantkę Panią Agatę Sajdy.

6. W latach 2020/2021 byłem jednym z wykonawców grantu dydaktycznego pt: "Modelowe kształcenie przyszłych nauczycieli przedmiotów matematyczno-przyrodniczych w Uniwersytecie Łódzkim", który był realizowany na Wydziale Chemii w ramach programu operacyjnego „Wiedza-Edukacja-Rozwój”, na podstawie umowy nr POWR.03.01.00-00-KN53/18-00.

7. Aktywnie uczestniczyłem w projekcie” Zdolny uczeń świetny student”, który był realizowany przez Uniwersytet Łódzki dla uczniów szkół licealnych w latach 2021/22 i 2022/23. W trakcie jego trwania uczniowie zapoznawali się z praktycznymi aspektami badań naukowych prowadzonymi na Wydziale Chemii UŁ. Po zakończeniu projektu prezentowali wyniki swojej działalności w formie referatów na uroczystej ceremonii zakończeniowej. W programie tym pełniłem funkcję opiekuna 4 uczniów z łódzkich szkół licealnych

8. W ramach współpracy Uniwersytetu Łódzkiego z łódzkimi szkołami średnimi prowadziłem warsztaty - zajęcia pozalekcyjne:

- w latach 2013-2014: wykłady, zajęcia laboratoryjne z jakościowej chemii nieorganicznej oraz ćwiczenia rachunkowe z chemii ogólnej i nieorganicznej dla uczniów LO Nr XIII w Łodzi
- w latach 2014-2015: prowadziłem warsztaty z wybranych zagadnień z chemii fizycznej i chemii kosmetycznej dla uczniów LO Nr XIII w Łodzi.

6.2 Informacja o osiągnięciach organizacyjnych

1. Jestem egzaminatorem maturalnym powołanym przez Centralną Komisję Egzaminacyjną.
2. Byłem członkiem Komisji Rekrutacyjnych na studia na Wydziale Chemii Uniwersytetu Łódzkiego 2019, 2022 i 2023 roku
3. Jestem członkiem Rady Wydziału Chemicznego Uniwersytetu Łódzkiego (kadencja 2021-2024), jako elekcyjny przedstawiciel grupy adiunktów.
4. Odbyłem szereg szkoleń w celu podniesienia swoich kwalifikacji zawodowych:
 - **„Nie bójmy się technologii - wybrane narzędzia do tworzenia materiałów multimedialnych wspierających przekaz dydaktyczny” - rok 2020 (stacjonarny kurs);**
 - „Pomiar dydaktyczny zadania zamknięte – warsztaty” - rok 2020 (kurs stacjonarny);
 - „Innowacyjne metody pracy ze studentem z wykorzystaniem IT” – rok 2020 (kurs stacjonarny);
 - „Kurs języka angielskiego *“English for academic purposes”* organizowany w ramach Programu Welcome to Poland (BUILD UP) – rok 2020 (kurs stacjonarny);
 - „MS Excel w pracy dydaktyka” zorganizowane przez Komisję ds. Doskonalenia Dydaktyki - rok 2020 (kurs stacjonarny);
 - „Kształcenie kompetencji społecznych. Rola komunikacji interpersonalnej w budowaniu zespołu. - rok 2020 (kurs stacjonarny);
 - „Kształcenie kompetencji organizacyjnych i administracyjnych. Aspekty prawne.” – rok 2020 (kurs stacjonarny);
 - „Kształcenie kompetencji organizacyjnych. Organizacja pracy i zarządzanie czasem.” – rok 2020 (kurs stacjonarny);
 - „Moodle podstawowe narzędzia.” - rok 2020 (kurs stacjonarny) .
 - „Profesjonalne bazy danych – Zarządzanie informacją .” - rok 2020 (kurs stacjonarny);

Autoreferat

- „Techniki perswazji i wywierania wpływu – Protokół bezpieczeństwa pracy w zespole.” - rok 2021 (kurs stacjonarny);
- „Metody nauczania online dla nauczycieli akademickich” – rok 2021 (kurs stacjonarny);
- „Zarządzanie wielokulturowością” realizowany w ramach projektu „Budowanie kompetencji kadry akademickiej i administracyjnej oraz zdolności instytucjonalnej w zakresie umiędzynarodowienia Uniwersytetu Łódzkiego - rok 2021;

5. Byłem członkiem Komitetów Organizacyjnych dwóch konferencji naukowych PTCHEM 2009 w Łodzi oraz EMPOC w 2019r.

6. W 2020 r przyznano mi nagrodę organizacyjną II-ego stopnia J.M. Rektora Uniwersytetu Łódzkiego.

7. Zostałem odznaczony w 2021r Brązowym Medalem Prezydenta RP za długoletnią służbę.

Inne:

1. W 2012 przyznano mi nagrodę II-ego stopnia J.M. Rektora Uniwersytetu Łódzkiego za cykl publikacji naukowych pt. ”Badania własności roztworów elektrolitów w rozpuszczalnikach różnego typu”

2. W 2016r przyznano mi nagrodę I-ego stopnia J.M. Rektora Uniwersytetu Łódzkiego za cykl publikacji naukowych pt. „Badania własności roztworów elektrolitów i rozpuszczalników mieszanych różnego typu”.

3. Zostałem wyróżniony nagrodą II-ego stopnia Dziekana Wydziału Chemii za najlepszą publikację naukową w 2021r.

4. Zostałem wyróżniony nagrodą za zajęcie III miejsca za najlepszy poster na 4Th EuCheMS Chemistry Congress 2012r w Czechach.

Spis Literaturny.

- [1] R.M. Fuoss, Conductance-concentration function for associated symmetrical electrolytes, *J. Phys. Chem.* 79 (1975) 525-540.
- [2] E. Pitts, An Extension of the Theory of the Conductivity and Viscosity of Electrolyte Solutions, *Proc. Roy. Soc. London*, 217A (1953) 43-70.
- [3] R. Fernandez-Prini, J.E. Prue, *Z. Phys. Chem. Leipzig*, A comparison of conductance equations for unassociated electrolytes, 227 (1965) 373-379.
- [4] R. Fernandez-Prini, Conductance of electrolyte solutions. A modified expression for its concentration dependence, *Trans. Faraday Soc.* 65 (1969),3311-3313.
- [5] R.M. Fuoss, Paired ions: Dipolar pairs as subset of diffusion pairs, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 75 (1978) 16-20.
- [6] R.M. Fuoss, Conductance-concentration function for the paired ion model, *J. Phys. Chem.*, 82 (1978) 2427-2440.
- [7] M.G. Barthel, H. Krienke, W. Kunz, *Physical chemistry of electrolyte solutions: modern aspects*, Springer, New York, 1998.
- [8] W.H. Lee, R.J. Wheaton, Conductance of symmetrical, unsymmetrical and mixed 28 electrolytes. Part 1.- Relaxation terms, *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2*, 74 (1978) 743-766.
- [9] J. Quint, A. Viallard, Electrical conductance of electrolyte mixtures of any type, *J. Solution Chem.* 7 (1978) 533-548.
- [10] A. Apelblat, *Journal of Molecular Liquids* 156 (2010) 39.
- [11] Z. Kinart, Conductance studies of sodium salts of some aliphatic carboxylic acids in water at different temperatures, *J. Mol. Liq.* 248 (2017) 1059–1064.
- [12] M. Bončina, A. Apelblat, J. Bartel, M. Bešter-Rogač, Dilute aqueous solutions with Formate ions: a Conductometric study, *J. Chem. Eng. Data* 55 (2010) 1951–1957.
- [13] H.S. Harned, R.W. Ehlers, The dissociation constant of acetic acid from 0 to 35° centigrade, *J. Amer. Chem. Soc.* 54 (1932) 1350–1357.
- [14] M. Salomon, Association of carboxylic acids in aqueous solutions from conductivity data, *J. Solut. Chem.* 15 (1986) 237–241.
- [15] J.F.J. Dippy, Chemical constitution and the dissociation constants of monocarboxylic acids. Part X. saturated aliphatic acids, *J. Chem. Soc. (Resumed)* (1938) 1222–1227.
- [16] R.A. Robinson, R.H. Stokes, *Electrolyte Solutions*, Butterworths, London, 1955.
- [17] H.S. Harned, R.W. Ehlers, The dissociation constant of acetic acid from 0 to 35° centigrade, *J. Amer. Chem. Soc.* 54 (1932) 1350–1357.
- [18] B.H. Wilsdon, N.V. Sidgwick, The rate of hydration of acid anhydrides: acetic, propionic, butyric, and benzoic, *J. Chem. Soc. Trans.* 103 (1913) 1959–1973.
- [19] G.M. Bennett, A.N. Mosses, The influence of the Sulphur atom on the reactivity of adjacent atoms or groups. Part IV. Direct polar effects, *J. Chem. Soc. (Resumed)* (1930) 2364–2369.
- [20] S. Harned, R.W. Ehlers, The thermodynamics of aqueous hydrochloric acid solutions from electromotive force measurements, *J. Amer. Chem. Soc.* 55 (1933) 2379–2193.
- [21] J.F.J. Dippy, D.P. Evans, J.J. Gordon, R.H. Lewis, H.B. Watson, Studies of the ortho-effect. Part I. the influence of substituents in the ortho-position upon the chemical characters of carboxylic acids and their derivatives, *J. Chem. Soc. (Resumed)* (1937) 1421–1425.
- [22] A. Apelblat, Dissociation constants and limiting conductances of organic acids in water, *J. Mol. Liq.* 95 (2002) 99–145
- [23] E. Bauer, Über die Dissociationskonstanten schwacher Säuren, *Z. physical. Chem.* 56 (1906) 215–222.

Spis treści

- [24] B. Saxton, L.S. Darken, The ionization constants of weak acids at 25° from conductance measurements. A method of extrapolating the data, *J. Amer. Chem. Soc.* 62 (1940) 846–852.
- [25] W.L. German, G.H. Jeffery, A.I. Vogel, The dissociation constants of organic acids. Part XIII. The primary and secondary constants of some cyclic 1:1-dicarboxylic acids, *J. Chem. Soc.* (1935) 1624–1630.
- [26] J.F.J. Dippy, D.P. Evans, J.J. Gordon, R.H. Lewis, H.B. Watson, Studies of the ortho-effect. Part I. the influence of substituents in the ortho-position upon the chemical characters of carboxylic acids and their derivatives, *J. Chem. Soc. (Resumed)* (1937) 1421–1425
- [27] H.S. Harned, R.O. Sutherland, The ionization constant of n-butyric acid from 0 to 60°, *J. Am. Chem. Soc.* 56 (1934) 2039–2041.
- [29] A. Apelblat, J. Barthel, Conductance studies of aqueous succinic acid, *Z. Naturforsch* 47a (1992) 493–498.
- [30] R. Tomaš, Z. Kinart, A. Tot, S. Papović, T.T. Borović, M. Vraneš, Volumetric properties, conductivity and computation analyses of selected imidazolium chloride ionic liquids in ethylene glycol, *J. Mol. Liq.* 345 (2022).
- [31] M. Bešter-Rogac, M.V. Fedotova, S.E. Kruchinin, M. Klähn, Mobility and association of ions in aqueous solutions: the case of imidazolium based ionic liquids, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 18 (2016) 28594–28605.
- [32] Salomon, M.; Hefter, G.T. Mobilities of cation-macrocyclic ligand complexes. *Pure and App. Chem.* 65 (1993) 1533–1540.
- [33] Salomon. M. Conductometric Study of Cationic and Anionic Complexes in Propylene Carbonate. *J. Solution Chem.* 19 (1990) 1255-1236.



.....
(Podpis wnioskodawcy)

Wykaz osiągnięć naukowych stanowiących znaczny wkład w rozwój określonej dyscypliny

**Wykorzystanie badań konduktometrycznych w analizie
oddziaływań międzymolekularnych typu jon-jon,
jon-cyklodekstryna i jon-rozpuszczalnik w szerokim przedziale
temperatur.**

dr Zdzisław Kinart

Załącznik 4
Do wniosku o przeprowadzenie
postępowania habilitacyjnego

Łódź 2023

Spis treści

I	WYKAZ OSIĄGNIĘĆ NAUKOWYCH ALBO ARTYSTYCZNYCH, O KTÓRYCH MOWA w ART. 219 UST. 1. PKT 2 USTAWY	4
1	Cykl powiązanych tematycznie artykułów naukowych, zgodnie z art. 219 ust. 1. pkt 2b ustawy	4
II	WYKAZ AKTYWNOŚCI NAUKOWEJ ALBO ARTYSTYCZNEJ	7
1	Wykaz opublikowanych monografii naukowych (z zaznaczeniem pozycji niewymienionych w pkt I.1).....	7
2	Wykaz opublikowanych rozdziałów w monografiach naukowych	7
3	Wykaz członkostwa w redakcjach naukowych monografii.....	7
4	Wykaz opublikowanych artykułów w czasopismach naukowych (z zaznaczeniem pozycji niewymienionych w pkt I.2).....	7
4.1	Wykaz opublikowanych artykułów w czasopismach naukowych, wydanych po uzyskaniu stopnia naukowego doktora.....	7
4.2	Wykaz opublikowanych artykułów w czasopismach naukowych, wydanych przed uzyskaniem stopnia naukowego doktora	10
5	Wykaz osiągnięć projektowych, konstrukcyjnych, technologicznych (z zaznaczeniem pozycji niewymienionych w pkt I.3).....	11
6	Wykaz publicznych realizacji dzieł artystycznych (z zaznaczeniem pozycji niewymienionych w pkt I.3).....	11
7	Wykaz wystąpień na krajowych lub międzynarodowych konferencjach naukowych lub artystycznych, z wyszczególnieniem przedstawionych wykładów na zaproszenie i wykładów plenarnych	11
8	Wykaz udziału w komitetach organizacyjnych i naukowych konferencji krajowych lub międzynarodowych, z podaniem pełnionej funkcji	17
9	Wykaz uczestnictwa w pracach zespołów badawczych realizujących projekty finansowane w drodze konkursów krajowych lub zagranicznych, z podziałem na projekty zrealizowane i będące w toku realizacji, oraz z uwzględnieniem informacji o pełnionej funkcji w ramach prac zespołów.....	17
10.	Wyk z członkostwa w międzynarodowych lub krajowych organizacjach i towarzystwach naukowych wraz z informacją o pełnionych funkcjach.....	19
11.	Wykaz staży w instytucjach naukowych lub artystycznych, w tym zagranicznych, z podaniem miejsca, terminu, czasu trwania stażu i jego charakteru.....	19
12.	Wykaz członkostwa w komitetach redakcyjnych i radach naukowych czasopism wraz z informacją o pełnionych funkcjach (np. redaktora naczelnego, przewodniczącego rady naukowej, itp.).....	19
13.	Wykaz recenzowanych prac naukowych lub artystycznych, w szczególności publikowanych w czasopismach międzynarodowych.....	19
14.	Wykaz uczestnictwa w programach europejskich lub innych programach międzynarodowych.....	20
15.	Wykaz udziału w zespołach badawczych, realizujących projekty inne niż określone w pkt. II.9.....	20

III.	WSPÓŁPRACA Z OTOCZENIEM SPOŁECZNYM I GOSPODARCZYM	21
1	Wykaz dorobku technologicznego.....	21
2	Współpraca z sektorem gospodarczym.	21
3	Wykaz uzyskanych praw własności przemysłowej, w tym uzyskanych patentów krajowych lub międzynarodowych.	21
4	Wykaz wdrożonych technologii.....	21
5	Wykaz wykonanych ekspertyz lub innych opracowań wykonanych na zamówienie instytucji publicznych lub przedsiębiorców.....	21
6	Wykaz udziału w zespołach eksperckich lub konkursowych.	21
7	Wykaz projektów artystycznych realizowanych ze środowiskami pozaartystycznymi.	21
IV.	DANE NAUKOMETRYCZNE	22
1	Impact Factor (w dziedzinach i dyscyplinach, w których parametr ten jest powszechnie używany jako wskaźnik naukometryczny).....	26
2	Liczba cytowań publikacji wnioskodawcy, bez autocytowań**.....	26
3	Informacja o posiadanym indeksie Hirscha:	26
4	Informacja o liczbie punktów MNiSW*.....	26

I WYKAZ OSIĄGNIĘĆ NAUKOWYCH ALBO ARTYSTYCZNYCH, O KTÓRYCH MOWA w ART. 219 UST. 1. PKT 2 USTAWY**1 Cykl powiązanych tematycznie artykułów naukowych, zgodnie z art. 219 ust. 1. pkt 2b ustawy**

Podstawą wnioskowania o nadanie stopnia doktora habilitowanego jest cykl powiązanych tematycznie artykułów naukowych, zatytułowany:

„Wykorzystanie badań konduktometrycznych w analizie oddziaływań międzymolekularnych typu jon-jon, jon cyklodekstryna i jon-rozpuszczalnik w szerokim przedziale temperatur”

[H1] Bald A.*, **Kinart Z.**

Conductance studies of NaCl, KCl, NaBr, KBr, NaI, Bu₄NI, and NaBPh₄ in water + 2-propoxyethanol mixtures at 298.15 K (2015) Ionics, 21 (10), pp. 2781-2787.

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na stworzeniu koncepcji pracy, napisaniu manuskryptu. Opracowałem metodykę badań. Wykonałem pomiary konduktometryczne dla badanych związków, Wykonałem analizę i interpretację otrzymanych wyników. Jako współautor przygotowałem odpowiedzi na recenzje, a także byłem odpowiedzialny za kontakt z wydawnictwem.

IF₂₀₂₁=2.961 MNiSW=70p

[H2] Bald A.*, **Kinart Z.**, Wypych-Stasiewicz A., Tomáš R.

Conductance studies of NaCl, KCl, NaBr, KBr, Bu₄NBr, and NaBPh₄ in water + 2-methoxyethanol mixtures at 298.15 K (2013) Journal of Molecular Liquids, 182, pp. 14-24.

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na stworzeniu koncepcji pracy, napisaniu manuskryptu. Opracowałem metodykę badań. Wykonałem pomiary konduktometryczne dla badanych związków, Wykonałem analizę i interpretację otrzymanych wyników. Jako współautor przygotowałem odpowiedzi na recenzje, a także byłem odpowiedzialny za kontakt z wydawnictwem.

IF₂₀₂₁=6.633 MNiSW=100p

[H3] **Kinart Z.***, Tomáš R.

Conductivity properties of selected aliphatic monocarboxylic acid anions in water at 298.15 K (2020) International Journal of Electrochemical Science, 15, pp. 10007-10027.

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na stworzeniu koncepcji pracy, napisaniu manuskryptu. Opracowałem metodykę badań. Wykonałem pomiary konduktometryczne

dla badanych anionów kwasów karboksylowych, Wykonałem analizę i interpretację otrzymanych wyników. Jako autor korespondencyjny przygotowałem odpowiedzi na recenzje a także byłem odpowiedzialny za kontakt z wydawnictwem

IF₂₀₂₀=1.541 MNiSW=70p

[H4] **Kinart Z.***

Conductometric studies of dissociation constants of selected monocarboxylic acids a wide range of temperatures (2019) Journal of Molecular Liquids, 292, art. no. 111405,

Praca monoautorska

IF₂₀₂₁=6.633 MNiSW=100p

[H5] **Kinart Z.***

Conductance studies of sodium salts of selected dicarboxylic acids in water at temperatures of 283.15 K to 313.15 K (2021)) Journal of Molecular Liquids 337, 116262

Praca monoautorska

IF₂₀₂₁=6.633 MNiSW=100p

[H6] **Kinart Z.***, Tomáš R.

Conductometric study of potassium chloride in ethylene glycol + water mixtures at different temperatures (2020) International Journal of Electrochemical Science, 15 (1), pp. 5560-5570

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na współudziale w: tworzeniu koncepcji pracy, napisaniu większości manuskryptu, wykonaniu pomiarów i obliczeń konduktometrycznych, opracowaniu metodyki badań oraz analizie i interpretacji wyników.

IF₂₀₂₀=1.541 MNiSW=70p

[H7] Vraneš M., **Kinart Z.**, Borović T.T., Papović S., Tomáš R.*

The physicochemical properties of selected imidazolium chloride ionic liquids in tetraethylene glycol: Experimental and computational approach (2023) Journal of Molecular Liquids, 372, art. no. 120763.

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na współudziale w: tworzeniu koncepcji pracy, napisaniu części manuskryptu i interpretacji wyników dotyczącej

badan konduktometrycznych, wykonaniu obliczeń uzyskanych wyników badan konduktometrycznych, opracowaniu metodyki badan oraz analizy i interpretacji wyników

IF₂₀₂₁=6.633 MNiSW=100p

[H8] **Tomaš R., Kinart Z., Tot A., Papović S., Teodora Borović T., Vraneš M.***

Volumetric properties, conductivity and computation analysis of selected imidazolium chloride ionic liquids in ethylene glycol (2022) Journal of Molecular Liquids, 345, art. no. 118178.

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na współudziale w: tworzeniu koncepcji pracy, wykonaniu obliczeń wyników badan konduktometrycznych, napisaniu części manuskryptu i interpretacji wyników dotyczących badan konduktometrycznych.

IF₂₀₂₁=6.633 MNiSW=100p

[H9] **Kinart Z.***, **Tomaš R.**

Studies of the Formation of Inclusion Complexes Derivatives of Cinnamon Acid with α -Cyclodextrin in a Wide Range of Temperatures Using Conductometric Methods (2022) Molecules, 27 (14), art. no. 4420,.

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na współudziale w: tworzeniu koncepcji pracy, wykonaniu obliczeń wyników badan konduktometrycznych, napisaniu części manuskryptu i interpretacji wyników dotyczących badan konduktometrycznych. Jako autor korespondencyjny przygotowałem odpowiedzi na recenzje, a także byłem odpowiedzialny za kontakt z wydawnictwem.

IF₂₀₂₁=4.927 MNiSW=140p

[H10] **Kinart Z.***

Stability of the Inclusion Complexes of Dodecanoic Acid with α -Cyclodextrin, β -Cyclodextrin and 2-HP- β -Cyclodextrin (2023) Molecules, 28 (7), art. no. 3113.

IF₂₀₂₁=4.927 MNiSW=140p

Praca monoautorska

[H11] **Kinart Z.***

Conductometric Studies of Formation the Inclusion Complexes of Phenolic Acids with β -Cyclodextrin and 2-HP- β -Cyclodextrin in Aqueous Solutions (2023) Molecules, 28 (1), art. no. 292.

Praca monoautorska

IF₂₀₂₁=4.927 MNiSW=140p

II WYKAZ AKTYWNOŚCI NAUKOWEJ ALBO ARTYSTYCZNEJ**1 Wykaz opublikowanych monografii naukowych (z zaznaczeniem pozycji niewymienionych w pkt I.1)**

-

2 Wykaz opublikowanych rozdziałów w monografiach naukowych

-

3 Wykaz członkostwa w redakcjach naukowych monografii

-

4 Wykaz opublikowanych artykułów w czasopismach naukowych (z zaznaczeniem pozycji niewymienionych w pkt I.2)**4.1 Wykaz opublikowanych artykułów w czasopismach naukowych, wydanych po uzyskaniu stopnia naukowego doktora****[P1] Kinart Z.***, Ćwiklińska A

Studies on the internal structure of the binary mixtures of N,N-dimethylacetamide with 2-methoxyethanol, 2-ethoxyethanol, 2-propoxyethanol and 2-butoxyethanol by means of measuring their densities and relative permittivities at 298.15 K (2019) *Physics and Chemistry of Liquids*, 57 (6), pp. 779-787.

[P2] Kinart Z.*

Conductance studies of sodium salts of some aliphatic carboxylic acids in water at different temperature (2017) *Journal of Molecular Liquids*, 248, pp. 1059-1064.

[P3] Bald A., Kinart Z.*

Viscosity coefficients of KCl, NaCl, NaI, KNO₃, LiNO₃, NaBPh₄ and Bu₄NI in water-rich binary mixtures containing propan-2-ol at 298.15 K (2017) *Physics and Chemistry of Liquids*, 55 (3), pp. 386-395.

[P4] Kinart W.J., Kinart Z.*

Catalysis of organic reactions in binary solvent mixtures and concentrated solutions of inorganic salts (2017) *Current Organic Synthesis*, 14 (3), pp. 477-486.

- [P5] **Kinart Z.***, Bald A., Domańska A.
Viscosity coefficients of KCl, NaCl, NaI, NaBr, KNO₃, LiNO₃, AgNO₃, NaClO₄, NaBPh₄, Bu₄NI and Et₄NI in rich of water binary mixtures containing propan-1-ol at 298.15 K (2016) *Physics and Chemistry of Liquids*, 54 (1), pp. 14-26.
- [P6] Kinart C.M.* , Kinart W.J., Ćwiklińska A., **Kinart Z.**
Density and relative permittivity of (pyridine + 2-methoxyethanol, 2-ethoxyethanol, 2-propoxyethanol, and 2-butoxyethanol) binary mixtures at 298.15 K (2014) *Physics and Chemistry of Liquids*, 52 (5), pp. 627-635.
- [P7] Kinart C.M.* , Maj-Rudnicka, M., Kinart W.J., Ćwiklińska A., **Kinart Z.**
Studies on intermolecular interactions in sulfolane + alkoxyethanol binary mixtures by speed of sound and 1H NMR measurements at T = 303.15 K (2013) *Journal of Molecular Liquids*, 186, pp. 28-32.
- [P8] Bald A.* , **Kinart Z.**, Tomaš R.
Volumetric studies of aqueous solutions of monosodium salts of some aliphatic dicarboxylic acids at 298.15 K. A new method of data analysis (2013) *Journal of Molecular Liquids*, 178, pp. 94-98.
- [P9] Kinart C.M*., Ćwiklińska A., **Kinart Z.**, Bald, A., Kinart W.J.
Studies on the intermolecular interactions in the binary mixtures of nitrobenzene with 2-methoxyethanol, 2-ethoxyethanol, 2-propoxyethanol and 2-butoxyethanol at T = 298.15 K (2012) *Physics and Chemistry of Liquids*, 50 (5), pp. 679-696.
- [P10] Kinart C.M*., Ćwiklińska A., Bald A., **Kinart Z.**
Studies on intermolecular interactions in (nitrobenzene + alkoxyethanol) binary mixtures by relative permittivity measurements at T = (293.15, 298.15, 303.15, 308.15, and 313.15) K (2012) *Journal of Chemical Thermodynamics*, 50, pp. 37-42.
- [P11] Kinart C.M*., Maj M., Bald A., **Kinart Z.**
Volumetric properties of ternary mixtures of sulfolane with 2-alkoxyethanols and ethylene glycols at T = 303.15K (2012) *Journal of Molecular Liquids*, 169, pp. 87-94.

[P12] **Kinart Z.**, Bald A*.

Apparent molal volumes of sodium salts of some aliphatic carboxylic acids in water at 298.15K (2011) *Physics and Chemistry of Liquids*, 49 (3), pp. 366-378.

[P13] Bald A., **Kinart Z***.

Volumetric properties of some aliphatic monoand dicarboxylic acids in water at 298.15 K (2011) *Journal of Solution Chemistry*, 40 (1), pp. 1-16.

[P14] Bald A., **Kinart Z***., Toma R.

Viscosity Coefficients of KCl, NaCl, NaI, KNO₃, LiNO₃, NaBPh₄ and Bu₄NI in water-dimethyl sulfoxide binary mixtures with a low organic solvent content (2016) *Croatica Chemica Acta*, 89 (3), pp. 345-353.

[P15] Tomaš R., Vraneš M*., Krešo A., **Kinart Z.**, Borović T.T., Papović S.

Volumetric Properties of the Dilute Solutions of Imidazolium-Based Ionic Liquids in Butan-2-ol or Butan-2-one (2023) *Journal of Solution Chemistry*, 52(1), pp. 134–146

4.2 Wykaz opublikowanych artykułów w czasopismach naukowych, wydanych przed uzyskaniem stopnia naukowego doktora

[D1] Kinart W.J., Kinart C.M*., Kozak, M., **Kinart Z.**

Studies on the reaction of cyclopentadienyltri-n-butyltin with diethyl azodicarboxylate
(2006) Main Group Metal Chemistry, 29 (5), pp. 257-262. Cited 1 time.

[D2] Kinart C.M*., Nowak K., Bald A., Kinart W.J., **Kinart Z.**

Excess molar volumes of binary mixtures containing dipropylene glycol monomethyl ether with water and 2-methoxyethanol (2004) Physics and Chemistry of Liquids, 42 (3), pp. 291-295. Cited 1 time.

[D3] Kinart C.M*., Bald A., Kinart W.J., Nowak K., **Kinart Z.**

Density, relative permittivity and refractive index for propylene glycol mono n-butyl ether + 2-methoxyethanol mixtures (2004) Physics and Chemistry of Liquids, 42 (1), pp. 95-102. Cited 6 times.

5 Wykaz osiągnięć projektowych, konstrukcyjnych, technologicznych (z zaznaczeniem pozycji niewymienionych w pkt I.3)

-

6 Wykaz publicznych realizacji dzieł artystycznych (z zaznaczeniem pozycji niewymienionych w pkt I.3)

nie dotyczy

7 Wykaz wystąpień na krajowych lub międzynarodowych konferencjach naukowych lub artystycznych, z wyszczególnieniem przedstawionych wykładów na zaproszenie i wykładów plenarnych

[K1] Kinart Zdzisław

Physicochemical properties of selected imidazolium chloride ionic liquids in selected alkoxyalcohols. European Meeting on Physical Organic Chemistry. 5-9 June 2023 Karpacz.

Wystąpienie ustne

[K2] Kinart Zdzisław; Tomaš Renato

Physicochemical properties of selected imidazolium chloride ionic liquids in tetraethylene glycol. *Czech Chemical Society ; Symposium Series Olomouc*, 2022. str. 241-241

Wykład

[K3] Tomaš Renato; Pehar Ivan; Papović Snežana; Kinart Zdzisław; Borović Teona Teodora; Vraneš, Milan

Volumetric properties of solutions of 1- methylimidazolium acetate in N,N- dimethylacetamide, N,N-dimethylformamide and dimethyl sulfoxide // *Book of Abstracts, 19th Ružička Days, Today Science - Tomorrow Industry / Babić, Jurislav ; Lauš, Ivana*

Osijek, Zagreb: University of Josip Juraj Strossmayer in Osijek ; Croatian Society of Chemical Engineers, 2022. str. 58-58

poster

[K4] Tomaš Renato; Kinart Zdzisław; Papović Snežana; Vraneš Milan; Borović Teona Teodora

Conductometric study of solutions of 1-methyl-3- octylimidazolium chloride ionic liquid in formamide and N,N-dimethylformamide at different temperatures // *8th EuChemS Chemistry Congress (ECC8) : Book of Abstracts*

Lisabon: Sociedade Portuguesa de Química, 2022. str. 741-741

poster

[K5] Tomaš Renato; Burnić Filip; Kinart Zdzisław; Tot Aleksandar; Papović Snežana; Borović Teona Teodora; Vraneš Milan

Volumetric properties of some imidazolium chloride ionic liquids in butan-1-ol at different temperatures // *Book of Abstracts - 27th Croatian Meeting of Chemists and Chemical*

Engineers and 5th Symposium Vladimir Prelog, Veli Lošinj / Marković, Dean ; Meštrović, Ernest (ur.).

Zagreb: Croatian Chemical Society, 2021. str. 129-129

poster

[K6] Kinart Zdzislaw; Ćwiklińska Aneta; Tomaš Renato; Tot Aleksandar; Vraneš Milan

Conductometric properties of selected ionic liquids in ethylene glycol in the temperature range $T = (278.15 - 313.15) \text{ K}$ // 63. *ZJAZD NAUKOWY POLSKIEGO TOWARZYSTWA CHEMICZNEGO / Łódź: Polskie Towarzystwo Chemiczne, 2021. S07 P004,*

poster

[K7] Kinart Zdzislaw; Tomaš Renato; Tot Aleksandar; Vraneš Milan

Conductometric studies of the physicochemical properties of selected ionic liquids in tetraethylene glycol in the temperature range $T = (278.15 - 313.15) \text{ K}$ // 63. *ZJAZD NAUKOWY POLSKIEGO TOWARZYSTWA CHEMICZNEGO / Łódź, 2021. S07 P005,*

poster

[K8] **Zdzisław Kinart**, Aneta Ćwiklińska

National Scientific Conference „e-Factory of Science” VII edition 2022

Conductometric methods for the determination for the formation inclusion complexes of derivatives cinnamon acid with 1-cyclodextrin in a wide range of temperatures.

Wystąpienie ustne

[K9] **Zdzisław Kinart**

Conductance studies of sodium salts of selected dicarboxylic acids in water at temperatures of 283.15k to 313.15k National Scientific Conference „e-Factory of Science” V edition

Wystąpienie ustne

[K10] **Zdzisław Kinart**

The volumetric studies of selected electrolytes in mixtures of water with alkoxyalcohols

69 Zajazd Chemikov 7-11 september 2017 Vysoke Tatry, Horny Smokovec

Wystąpienie ustne

[K11] **Zdzisław Kinart**

The determination of formation constants inclusion complexes of derivatives of cinnamon acid with α -cyclodextrin by Conductometric methods in a wide range temperatures.

70 Sjezd českých a slovenských chemických společností, Zlin 9-12. Wrzesień 2018r.

Wystąpienie ustne

[K12] Zdzisław Kinart

Conductometric studies as a criterion for the thermodynamic evaluation of stability and construction of inclusion complexes of cinnamon ions and its derivatives with α and β cyclodextrin in a wide range of temperatures.

UPAC Paryż 5-12 lipiec 2019r

Wykład

[K13] Zdzisław Kinart

The determination of formation constants inclusion complexes of derivatives of cinnamon acid with cyclodextrin by Conductometric methods in the temperature range 283.15 - 308.15K.

40th European Meetin on Physical Organic Chemistry. Łódź – Spała 3-7 June 2019r

Wystąpienie ustne

[K14] Zdzisław Kinart, Adam Bald

Viscosity coefficients B of KCl, NaCl, NaI, KNO₃, LiNO₃, AgNO₃, NaClO₄, NaBPh₄, Bu₄NI and Et₄NI in rich of water binary mixtures containing propan-1-ol at 298.15K.

67 Zajazd Chemikov 7-11 september 2015 Vysoke Tatry, Horny Smokovec

Wystąpienie ustne

[K15] Zdzisław Kinart, Adam Bald

Conductometric studies od formation complexes 15-crown-5-ether with NaI, NaBr and NaCl i H₂O –propan -1-ol mixtures at 298.15K.

67 Zajazd Chemikov 7-11 september 2015 Vysoke Tatry, Horny Smokovec

Wykład

[K16] Zdzisław Kinart

Viscosity coefficients B of KCl, NaCl, NaI, KNO₃, LiNO₃, NaBPh₄ and Bu₄NI in rich of water binary mixtures containing sulfoxide (DMSO) at 298.15K

68 Zajazd Chemikov 4-7 september 2016 Praha.

Wykład

[K17] Zdzisław Kinart, Adam Bald

Conductometric studies of formation of complexes 15-crown-5 ether with NaBr and NaCl in water – 2-methoxyethanol mextures at 298.15K

68 Zajazd Chemikov 4-7 september 2016 Praha

Wykład

[K18] Dorota chęcińska-Majak Zdzisław Kinart, Adam Bald.

Dielektryczne właściwości mieszanin wody z 2-alkoksyalkoholami

Zjazd Naukowy PTCHEM i SiTCHEM Częstochowa

poster

- [K19] **Zdzisław Kinart**, Dorota Chęcińska – Majak, Adam Bald.
Konduktometryczne badania tworzenia kompleksów eteru dibenzo-18-korona-6 z kationem sodu w mieszaninach DMSO – propan-1-ol w temperaturze 298.15K
Zjazd Naukowy PTCHEM i SiTCHEM Częstochowa 2014 **Wystąpienie ustne**
- [K20] Zdzisław Kinart, Anna Kinart, Ilona Trzcińska, Adam Bald
Wiskozymetryczne badania roztworów mocnych elektrolitów w rozpuszczalniku mieszanym woda – DMSO o dużej zawartości wody w temperaturze 298.15K.
Zjazd Naukowy PTCHEM i SiTCHEM Siedlce 2013 **poster**
- [K21] Zdzisław Kinart, Dorota Chęcińska-Majak, Adam Bald.
Dielektryczne właściwości mieszanin wody z 2-propoksyetanolem.
Zjazd Naukowy PTCHEM i SiTCHEM Siedlce 2013 **poster**
- [K22] Katarzyna Aramczyk, Ilona Trzcińska, **Zdzisław Kinart**, Adam Bald
Konduktometryczne badania β -cyklodekstryny i HP- β -cyklodekstryny z wybranymi anionami karboksylanowymi w zakresie temperatur 283.15K – 318.15K
Zjazd Naukowy PTCHEM i SiTCHEM Siedlce 2013 **Wystąpienie ustne**
- [K23] Zdzisław Kinart, Adam Bald
Dielektryczne badania mieszanin woda- glikol dietylenowy.
Zjazd Naukowy PTCHEM i SiTCHEM Lublin 2011 **poster**
- [K24] **Zdzisław Kinart**, Adam Bald, Ewa Stronka- Lewkowska.
Badania densymetryczne wpływu temperatury i ciśnienia na funkcje termodynamiczne mieszanin wody z di-, tri-, i tetraetylenoglikolem.
Zjazd Naukowy PTCHEM i SiTCHEM Lublin 2011 **Wystąpienie ustne**
- [K25] **Zdzisław Kinart**, Adam Bald
Przewodnictwo elektryczne wodnych roztworów kwasów karboksylowych i ich różnych soli sodowych.
Zjazd Naukowy PTCHEM i SiTCHEM Lublin 2011 **Wykład**

Ponadto, liczne wystąpienia seminaryjne, w tym 3 na zaproszenie**[K26] Z. Kinart Wykład przed habilitacyjny na zaproszenie Uniwersytet Wrocławski 2022**

Wykorzystanie badań fizykochemicznych do opisu procesu solwatacji i asocjacji wybranych kwasów karboksylowych, cieczy jonowych i cyklodekstryn w wybranych rozpuszczalnikach wodno-organicznych z punktu widzenia analizy zmian wartości funkcji termodynamicznych opisujących te zjawiska

[K27] Z. Kinart Wykład na zaproszenie

Na Wydziale Faculty of Chemistry and Technology Uniwersytetu w Splicie w formie zdalnej z platformy google meet 2021

„The application of conductometric methods in the study of solvato-associative processes”

[K28] Z. Kinart Wykład na zaproszenie

Na wydziale Faculty of Chemistry and Technology Uniwersytecie w Splicie w formie zdalnej z platformy google meet Listopad 2020

“Conductometric and densimetric measurements of carboxylic acids.

Przed uzyskaniem stopnia doktora**[K29] Zdzisław Kinart, Agnieszka Chmielewska, Adam Bald.**

Przewodnictwo elektryczne soli sodowych wybranych kwasów mono i dikarboksylowych w wodzie w temperaturze 298.15 K.

Zjazd Naukowy PTChem i SiTChem Poznań 2005

poster

[K30] Zdzisław Kinart, Agnieszka Chmielewska, Adam Bald.

Temperaturowe badania przewodnictwa elektrycznego soli sodowych kwasów monokarboksylowych w wodzie.

Zjazd Naukowy PTChem i SiTChem Gdańsk 2006

poster

[K31] Zdzisław Kinart, Anna Wypych-Stasiewicz, Adam Bald.

Przewodnictwo molowe wybranych kwasów monokarboksylowych w wodzie w temperaturze 298.15 K.

Zjazd Naukowy PTChem i SiTChem Toruń 2007

poster

[K32] Zdzisław Kinart, Adam Bald

Cząsteczkowe objętości molowe soli sodowych wybranych alifatycznych kwasów karboksylowych w wodzie w temperaturze 298.15 K.

Zjazd Naukowy PTChem i SiTChem Łódź 2009

poster

[K33] Zdzisław Kinart, Adam Bald

Objętościowe właściwości wodorosoli sodowych wybranych alifatycznych kwasów dikarboksylowych w wodzie w temperaturze 298.15 K.

Zjazd Naukowy PTChem i SiTChem Łódź 2009

poster

[K34] Zdzisław Kinart, Adam Bald.

Analiza zmian granicznych wartości cząstkowych objętości molowych w funkcji łańcucha węglowego badanych alifatycznych kwasów mono i i dikarboksylowych w wodzie w temperaturze 298.15 K.

Zjazd Naukowy PTChem i SiTChem Łódź 2009

poster

[K35] **Zdzisław Kinart**, Krzysztof Klimaszewski, Adam Bald.

Konduktometryczne badania funkcji termodynamicznych asocjacji w wodnych roztworach wybranych kwasów monokarboksylowych

Zjazd Naukowy PTChem i SiTChem Gliwice 2010

komunikat

[K36] Zdzisław Kinart, Krzysztof Klimaszewski, Adam Bald.

Badanie przewodnictwa elektrycznego roztworów cieczy jonowych: (emin) BF₄ i (bmim) BF₄ w N,N – dimetyloformamidzie w zakresie temperatur 283.15K – 313.15K.

Zjazd Naukowy PTChem i SiTChem Gliwice 2010

poster

[K37] Krzysztof Klimaszewski, Zdzisław Kinart, Adam Bald

Sonochemiczne badania mieszanin 2-metoksy, 2-Etoksy i 2-propoksyetanolu z wodą w zakresie temperatur 288.15 K – 318.15 K.

Zjazd Naukowy PTChem i SiTChem Gliwice 2010

poster

[K38] Krzysztof Klimaszewski, Zdzisław Kinart, Adam Bald

Wyznaczanie liczb solwatacji NaCl, KCl, NaBr i KBr metodą pomiaru szybkości rozchodzenia się ultradźwięków w mieszaninach wody z 2-etoksyetanolem o dużej zawartości wody.

Zjazd Naukowy PTCHEM i SiTCHEM Gliwice 2010

poster

Wykaz udziału w komitetach organizacyjnych i naukowych konferencji krajowych lub międzynarodowych, z podaniem pełnionej funkcji

- Członek komitetu organizacyjnego międzynarodowej konferencji naukowej: PTCHEM „2009”, Łódź
- Członek komitetu organizacyjnego międzynarodowej konferencji naukowej: 40th European Meeting on Physical Organic Chemistry Łódź – Spała 3-7 Czerwiec 2019.

9. Wykaz uczestnictwa w pracach zespołów badawczych realizujących projekty finansowane w drodze konkursów krajowych lub zagranicznych, z podziałem na projekty zrealizowane i będące w toku realizacji, oraz z uwzględnieniem informacji o pełnionej funkcji w ramach prac zespołów

a) **Grant** [2018/02/X/ST4/00279], Narodowe Centrum Nauki (NCN) **Miniatura II**

Temat projektu: „Badania konduktometryczne jako kryterium oceny termodynamicznej stabilności i budowy kompleksów inkluzyjnych jonów kwasu cynamonowego i jego pochodnych z α i β cyklodekstryną w szerokim przedziale temperatur”

Kierownik

b) **Grant** – sfinansowanie tematu badawczego z środków finansowych na działalność polegającą na prowadzeniu badań naukowych lub prac rozwojowych oraz zadań z nimi związanych, służących rozwojowi młodych naukowców oraz uczestników studiów doktoranckich finansowanych w wewnętrznym trybie konkursowym w 2011r

Temat projektu: „Zaprojektowanie, konstrukcja i przetestowanie zestawu do precyzyjnych badań statycznej względnej przenikalności elektrycznej cieczy oraz wykonanie badań w wybranych rozpuszczalnikach typu woda – etylenoglikole”

Kierownik

- c) **Grant** – sfinansowanie tematu badawczego z środków finansowych na działalność polegającą na prowadzeniu badań naukowych lub prac rozwojowych oraz zadań z nimi związanych, służących rozwojowi młodych naukowców oraz uczestników studiów doktoranckich finansowanych w wewnętrznym trybie konkursowym w 2012r.

Temat projektu: „Rozbudowa precyzyjnego zestawu do pomiarów statycznej względnej przenikalności elektrycznej cieczy oraz wykonanie pomiarów w rozpuszczalnikach typu woda- alkoksyalohole.”

Kierownik

- d) **Grant** – sfinansowanie tematu badawczego z środków finansowych na działalność polegającą na prowadzeniu badań naukowych lub prac rozwojowych oraz zadań z nimi związanych, służących rozwojowi młodych naukowców oraz uczestników studiów doktoranckich finansowanych w wewnętrznym trybie konkursowym 2013 .

Temat projektu: „Opracowanie nowej konduktometrycznej metody badania kompleksów kationów ze związkami koronowymi”.

Kierownik

- e) **Grant** – sfinansowanie tematu badawczego z _środków finansowych na działalność polegającą na prowadzeniu badań naukowych lub prac rozwojowych oraz zadań z nimi związanych, służących rozwojowi młodych naukowców oraz uczestników studiów doktoranckich finansowanych w wewnętrznym trybie konkursowym 2014r.

Zespół w składzie : dr Zdzisław Kinart – adiunkt w Zakładzie Fizykochemii Roztworów
mgr Katarzyna Abramczyk – słuchaczka Studium Doktoranckiego

Temat projektu: Konduktometryczne i wolumetryczne badania kompleksów inkluzyjnych wybranych jonów karboksylanowych z β -cyklodekstryną i HP- β -cyklodekstryną w przedziale temperatur 283.15 K – 318.15 K.

Kierownik

10. Wykaz członkostwa w międzynarodowych lub krajowych organizacjach i towarzystwach naukowych wraz z informacją o pełnionych funkcjach

Członkostwo w Polskim Towarzystwie Chemicznym od 2017 roku

11. Wykaz staży w instytucjach naukowych lub artystycznych, w tym zagranicznych, z podaniem miejsca, terminu, czasu trwania stażu i jego charakteru**a) Zagraniczny staż naukowy:**

Nazwa instytucji: University of Split,

Faculty of Chemistry and Technology

Department of Physical Chemistry

Adres instytucji: Ulica Ruđera Boškovića 31 21000 Split

Czas trwania: od 11.07 2016 r. do 02.09.2016 r.

Czas trwania: od 14.07.2017 r. do 30.08.2017 r.

Czas trwania: od 12.07.2018 r. do 30.08.2018 r.

Opiekun: Prof. Renato Tomas

b) Trzykrotny wyjazd z programu ERASMUS + na tygodniowe wyjazdy do University of Split, w latach 2018, 2019, 2020,**12. Wykaz członkostwa w komitetach redakcyjnych i radach naukowych czasopism wraz z informacją o pełnionych funkcjach (np. redaktora naczelnego, przewodniczącego rady naukowej, itp.)**

-

13. Wykaz recenzowanych prac naukowych lub artystycznych, w szczególności publikowanych w czasopismach międzynarodowych

- Physics and Chemistry of Liquids
- Journal of Molecular Liquids
- Journal of Solution Chemistry
- Molecules
- Journal of Chemical Thermodynamics

Łącznie zrecenzowałem 67 artykułów w w.w. czasopismach.

- Recenzje 5 prac magisterskich
- Recenzje 17 prac licencjackich

14. Wykaz uczestnictwa w programach europejskich lub innych programach międzynarodowych

Trzykrotny wyjazd z programu ERASMUS + na tygodniowe wyjazdy do University of Split, w latach 2018, 2019, 2020.

15. Wykaz udziału w zespołach badawczych, realizujących projekty inne niż określone w pkt. II.9

Kierownik projektu: dr Anna Wypych – Stasiewicz , prof. UŁ

1. Wykonawca projektu zespołowego

„Wykonawca Uczestnictwo jako wykonawca w projekcie pt "Modelowe kształcenie przyszłych nauczycieli przedmiotów matematyczno-przyrodniczych w Uniwersytecie Łódzkim" realizowanym w ramach programu operacyjnego wiedza Edukacja Rozwój, na podstawie umowy nr POWR.03.01.00-00-KN53/18-00 realizowaną na Wydziale Chemii Uniwersytetu Łódzkiego. realizowaną w latach 2020/21

Wykonawca projektu.

III WSPÓŁPRACA Z OTOCZENIEM SPOŁECZNYM I GOSPODARCZYM

- 1 Wykaz dorobku technologicznego.**
-
- 2 Współpraca z sektorem gospodarczym.**
-
- 3 Wykaz uzyskanych praw własności przemysłowej, w tym uzyskanych patentów krajowych lub międzynarodowych.**
-
- 4 Wykaz wdrożonych technologii.**
-
- 5 Wykaz wykonanych ekspertyz lub innych opracowań wykonanych na zamówienie instytucji publicznych lub przedsiębiorców.**
-
- 6 Wykaz udziału w zespołach eksperckich lub konkursowych.**
-
- 7 Wykaz projektów artystycznych realizowanych ze środowiskami pozaartystycznymi.**

nie dotyczy

IV DANE NAUKOMETRYCZNE

Mój sumaryczny dorobek naukowy obejmuje 29 publikacji.

Artykuły wchodzące w skład osiągnięć naukowych

[H1] (2015) Ionics, 21 (10), pp. 2781-2787.

CI= 6 IF₂₀₂₁=2.961 MNiSW=70p

[H2] (2013) Journal of Molecular Liquids, 182, pp. 14-24.

CI=11 IF₂₀₂₁=6.633 MNiSW=100p

[H3] (2020) International Journal of Electrochemical Science, 15, pp. 10007-10027.

CI=4 IF₂₀₂₀=1.541 MNiSW=70p

[H4] (2019) Journal of Molecular Liquids, 292, art. no. 111405.

CI=5 IF₂₀₂₁=6.633 MNiSW=100p

[H5] (2021) Journal of Molecular Liquids 337, 116262.

CI=1 IF₂₀₂₁=6.633 MNiSW=100p

[H6] (2020) International Journal of Electrochemical Science, 15 (1), pp. 5560-5570.

CI=9 IF₂₀₂₀=1.541 MNiSW=70p

[H7] (2023) Journal of Molecular Liquids, 372, art. no. 120763.

CI=5 IF₂₀₂₁=6.633 MNiSW=100p

[H8] (2022) Journal of Molecular Liquids, 345, art. no. 118178.

CI=9 IF₂₀₂₁=6.633 MNiSW=100p

[H9] (2022) Molecules, 27 (14), art. no. 4420.

CI=2 IF₂₀₂₁=4.927 MNiSW=140p

[H10] (2023) Molecules, 28 (7), art. no. 3113.

CI=0 IF₂₀₂₁=4.927 MNiSW=140p

[H11] (2023) Molecules, 28 (1), art. no. 292.

CI=2 IF₂₀₂₁=4.927 MNiSW=140p

SUMA (prace H1-H11)

CI=54 IF=53.989 MNiSW=1130p

Artykuły opublikowane po uzyskaniu stopnia naukowego doktora, nie wchodzące w skład osiągnięcia habilitacyjnego

- [P1] **Kinart Z***, Ćwiklińska A.
(2019) *Physics and Chemistry of Liquids*, 57 (6), pp. 779-787.
CI=8 IF=1.838 MNiSW=40p
- [P2] **Kinart Z***.
(2017) *Journal of Molecular Liquids*, 248, pp. 1059-1064. Cited 9 times.
CI=11 IF=6.633 MNiSW=100p
- [P3] Bald A., **Kinart Z***.
(2017) *Physics and Chemistry of Liquids*, 55 (3), pp. 386-395.
CI=8 IF=1.838 MNiSW=40p
- [P4] Kinart W. J.*, **Kinart Z.**
(2017) *Current Organic Synthesis*, 14 (3), pp. 477-486.
CI=15 IF=1.987 MNiSW=40p
- [P5] **Kinart Z.***, Bald A., Domańska A.
(2016) *Physics and Chemistry of Liquids*, 54 (1), pp. 14-26.
CI=7 IF=1.838 MNiSW=40p
- [P6] Kinart C.M.*, Kinart W.J., Ćwiklińska A., **Kinart Z.**
(2014) *Physics and Chemistry of Liquids*, 52 (5), pp. 627-635.
CI=16 IF=1.838 MNiSW=40p
- [P7] Kinart C.M.*, Maj-Rudnicka M., Kinart W.J., Ćwiklińska A., **Kinart Z.**
(2013) *Journal of Molecular Liquids*, 186, pp. 28-32.
CI=19 IF=6.633 MNiSW=100p
- [P8] Bald A.*, **Kinart Z.**, Tomaš R.
(2013) *Journal of Molecular Liquids*, 178, pp. 94-98.
CI=15 IF=6.633 MNiSW=100
- [P9] Kinart C.M.*, Ćwiklińska A., **Kinart Z.**, Bald A., Kinart W.J.
(2012) *Physics and Chemistry of Liquids*, 50 (5), pp. 679-696.
CI=20 IF=1.838 MNiSW=40p

- [P10] Kinart C.M.*, Ćwiklińska A., Bald A., **Kinart Z.**
(2012) Journal of Chemical Thermodynamics, 50, pp. 37-42.
CI=22 IF=3,269 MNiSW=100p
- [P11] Kinart C.M.*, Maj M., Bald A., **Kinart Z.**
(2012) Journal of Molecular Liquids, 169, pp. 87-94.
CI=9 IF=6.633 MNiSW=100p
- [P12] **Kinart Z.**, Bald A.*
(2011) Physics and Chemistry of Liquids, 49 (3), pp. 366-378.
CI=19 IF=1.838 MNiSW=40p
- [P13] Bald A., **Kinart Z.***
(2011) Journal of Solution Chemistry, 40 (1), pp. 1-16.
CI=15 IF=2.000 MNiSW=40p
- [P14] Bald A., **Kinart Z.***, Tomaš R.
(2016) Croatica Chemica Acta, 89 (3), pp. 345-353.
CI=10 IF=0.659 MNiSW=20p
- [P15] Tomaš R., Vraneš M.*, Krešo A., **Kinart Z.** .Borović T.T., Papović S.
(2023) Journal of Solution Chemistry, 52(1), pp. 134–146.
CI=4 IF=2.000 MNiSW=40p

SUMA (prace P1-P15)

CI=198 IF=47.475 MNiSW= 880p

Artykuły opublikowane przed uzyskaniem stopnia naukowego doktora

[D1] Kinart W.J.*, Kinart C.M., Kozak M., **Kinart Z.**

(2006) Main Group Metal Chemistry, 29 (5), pp. 257-262.

CI=4 IF=0.972 MNiSW=40p

[D2] Kinart C.M.*, Nowak K., Bald A., Kinart W.J., **Kinart Z.**

(2004) Physics and Chemistry of Liquids, 42 (3), pp. 291-295.

CI=4 IF=1.838 MNiSW=40p

[D3] Kinart C.M.*, Bald A., Kinart W.J., Nowak K., **Kinart Z.**

(2004) Physics and Chemistry of Liquids, 42 (1), pp. 95-102.

CI=14 IF=1.838 MNiSW=40p

SUMA (prace D1-D2)

CI= 22 IF=4.648 MNiSW=120p

SUMA (prace H+P+D)

IF=106.112 MNiSW=2130p

1. Impact Factor (w dziedzinach i dyscyplinach, w których parametr ten jest powszechnie używany jako wskaźnik naukometryczny)

- Sumaryczna punktacja Impact Factor wszystkich opublikowanych prac wynosi **106.112 (3.659)**
- Sumaryczna punktacja Impact Factor prac wchodzących w skład osiągnięcia naukowego wynosi **53.989 (4.908)**
- Sumaryczna punktacja Impact Factor wszystkich prac opublikowanych po uzyskaniu stopnia naukowego doktora wynosi **101.464 (3.902)**
- Sumaryczna punktacja Impact Factor prac opublikowanych przed uzyskaniem stopnia naukowego doktora wynosi **4.648 (1.549)**

2. Liczba cytowań publikacji wnioskodawcy.

- a. Sumaryczna liczba cytowań wszystkich opublikowanych prac wynosi **274 (241)**
- b. Sumaryczna liczba cytowań prac wchodzących w skład osiągnięcia naukowego wynosi **54 (45)**
- c. Sumaryczna liczba cytowań wszystkich prac opublikowanych po uzyskaniu stopnia naukowego doktora wynosi **252 (223)**
- d. Sumaryczna liczba cytowań prac opublikowanych przed uzyskaniem stopnia naukowego doktora wynosi **22 (18)**

3. Informacja o posiadanym indeksie Hirscha: 8

Indeks Hirscha podany jest według bazy Scopus na dzień 30.05.2023r (liczony z autocytowaniami, wyłącznie dla prac indeksowanych w bazie WoS).

4. Informacja o liczbie punktów MNiSW[□]

- a. Sumaryczna liczba punktów MNiSW wszystkich opublikowanych prac wynosi **2130p (73.44)**
- b. Sumaryczna liczba punktów MNiSW prac wchodzących w skład osiągnięcia naukowego wynosi **1130p (102.72)**
- c. Sumaryczna liczba punktów MNiSW wszystkich prac opublikowanych po uzyskaniu stopnia naukowego doktora wynosi **2010p (77.31)**
- d. Sumaryczna liczba punktów MNiSW prac opublikowanych przed uzyskaniem stopnia naukowego doktora wynosi **120p (40)**



(Podpis wnioskodawcy)