

Сведения о члене экспертной комиссии

1	ФИО (полностью)	Сафонова Любовь Петровна
2	Дата рождения (полная)	04.08.1953
3	Гражданство	РФ
4	Ученая степень (с указанием шифра специальности научных работников, по которой защищена диссертация)	доктор химических наук 02.00.04 – физическая химия
5	Ученое звание (по кафедре, специальности)	профессор по кафедре неорганической химии
6	Место работы:	
	Почтовый индекс, адрес, web-сайт, электронный адрес организации	153045 Иваново, ул. Академическая, 1, http://www.isc-ras.ru , adm@isc-ras.ru
	Полное наименование организации в соответствии с уставом	Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук
	Ведомственная принадлежность организации	Министерство науки и высшего образования
	Тип организации	Научная
	Наименование подразделения	Научно-исследовательский отдел «Развитие подходов и методов физической химии в исследовании многокомпонентных супрамолекулярных, молекулярных и ион-молекулярных систем как перспективных материалов»
	Должность	Главный научный сотрудник
7	Основные публикации в области диссертационного исследования	
	<ol style="list-style-type: none"> 1. Л. П. Сафонова, Л. Э. Шмуклер Полимерные электролиты на основе полибензимидазола, поли(винилиденфторид-<i>co</i>-гексафторпропилена) и ионных жидкостей / Высокомолекулярные соединения. Серия А, 2023, 65 (4), 249-274. DOI: 10.31857/S2308112023700566, EDN: VDZUKH L. P. Safonova and L. E. Shmukler Polymer Electrolytes Based on Polybenzimidazole, Poly(Vinylidene Fluoride-co-Hexafluoropropylene), and Ionic Liquids // <u>Polymer Science, Series A</u>, 2023, 65(4), 312-336. DOI: 10.1134/S0965545X23701080 2. Irina V. Fedorova, Liubov P. Safonova Proton Transfer between Sulfonic Acids and Various Propylamines by Density Functional Theory Calculations / Journal of Molecular Modeling 2023, 29, 230 https://doi.org/10.1007/s00894-023-05624-2 3. Л. Э. Шмуклер, Ю. А. Фадеева, Н. М. Стельмах, Л. П. Сафонова Мембраны на основе PVdF – HFP и алкиламмониевых протонных ионных жидкостей: термические и транспортные свойства // Ж. физ. химии, 2023, 97(1), 166-174. L.E. Shmukler, Yu.A. Fadeeva, N.M. Stel'makh, L.P. Safonova Membranes Based on PVDF-HFP and Alkylammonium Protic Ionic Liquids: Thermal and Transport Properties // Russ. J. Phys. Chem. A, 2023, 97 (1), 235-242. DOI: 10.1134/S0036024423010272 4. Irina V. Fedorova, Mikhail A. Krestyaninov, Lyubov P. Safonova Effects of non-specific and specific solvation on structure of tripropylammonium-based protic ionic liquids: insight from computational modeling / Journal of Molecular Liquids 2023, 388, 122732 https://doi.org/10.1016/j.molliq.2023.122732 5. Irina V. Fedorova, Liudmila E. Shmukler, Yuliya A. Fadeeva, Matvey S. Gruzdev, Liubov 	

- P. Safonova On structure and properties of tripropylammonium–based protic ionic liquids with bis(trifluoromethylsulfonyl)imide and hydrogen sulfate anions // *Ionics* 2023, **29**, pages661–674 <https://doi.org/10.1007/s11581-022-04844-5>
6. Irina V. Fedorova, Mikhail A. Krestyaninov, Lyubov P. Safonova. Structure of ethylammonium hydrogen sulfate protic ionic liquid through DFT calculations and MD simulations: the role of hydrogen bonds // *Structural Chemistry*, 2023, **34**, 879-890 <https://doi.org/10.1007/s11224-022-02042-7>
7. L.E. Shmukler, I.V. Fedorova, Yu.A. Fadeeva, M.S. Gruzdev, L.P. Safonova Alkylimidazolium Protic Ionic Liquids: Structural Features and Physicochemical Properties // *ChemPhysChem* 2022, **23**, e202100772. <https://doi.org/10.1002/cphc.202100772>
8. I.V. Fedorova, M.A. Krestyaninov, L.P. Safonova Computational approaches to structural properties investigation of triethylammonium- and triethanolammonium-based protic ionic liquids // *Journal of Molecular Liquids* 360 (2022) 119481. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2022.119481>
9. I. V. Fedorova, M. E. Yablokov, and L. P. Safonova Quantum-Chemical Study of Acid–Base Interaction between Alkylamines and Different Brønsted Acids // *Russian Journal of Physical Chemistry A*, 2022, Vol. 96, No. 12, pp. 2704–2711 DOI: 10.1134/S003602442212010X
10. И. В. Федорова, Шмуклер Л.Э., Фадеева Ю.А., Крестьянинов М.А., Сафонова Л.П. Влияние структуры алкилимидазольных протонных ионных жидкостей на их физико-химические свойства // *Ж. физ. химии*, 2022, **96**(4), 575-581. Fedorova, I.V., Shmukler, L.E., Fadeeva, Y.A. *et al.* Effect of the Structure of Alkylimidazolium Protic Ionic Liquids on Their Physicochemical Properties. *Russ. J. Phys. Chem.* **96**, 786–792 (2022). <https://doi.org/10.1134/S0036024422040070>
11. Irina V. Fedorova, Lyubov P. Safonova Comparisons of NH...O and OH...O Hydrogen Bonds in Various Ethanolammonium – Based Protic Ionic Liquids // *Structural Chemistry*, 2021, **32**, 2061-2073 doi.org/10.1007/s11224-021-01792-0.
12. Yuliya A Fadeeva, Liudmila E Shmukler, Matvey S Gruzdev, and Liubov P Safonova Imidazolium zwitterion based protic ionic liquids: from monomers to polymer membranes // *Polymer International*, 2021, **70**, 1582-1589, doi: 10.1002/pi.6238
13. L.E. Shmukler, I.V. Fedorova, Yu.A. Fadeeva, L.P. Safonova The Physicochemical Properties and Structure of Alkylammonium Protic Ionic Liquids of $R_nH_{4-n}NX$ ($n = 1-3$) Family. A Mini–Review // *J. Mol. Liq.* 2021, **321**, 114350-(19) doi: 10.1016/j.molliq.2020.114350
14. I.V. Fedorova, M.A. Krestyaninov, L.P. Safonova Structure and Ion-Ion Interactions in Trifluoroacetate-Based Ionic Liquids: Quantum Chemical and Molecular Dynamics Simulation Studies // *Journal of Molecular Liquids*, 2021, **328**, 115449 (10) doi: 10.1016/j.molliq.2021.115449
15. Dmitriy M. Makarov and Lyubov P. Safonova Volumetric properties of ammonium-based salts in *N,N*-Dimethylformamide over the temperature range 298.15 K to 348.15 K // *J. Chem. Thermodynamics* 2021, **155**, 106371 (7) doi: 10.1016/j.jct.2020.106371
16. Фадеева Ю.А., Кузьмин С.М., Шмуклер Л.Э., Сафонова Л.П. ПБИ-мембраны допированные протонной ионной жидкостью: получение и свойства // *Известия Академии наук. Серия химическая*, 2021, **70**, 56-61 Yu. A. Fadeeva, S. M. Kuzmin, L. E. Shmukler, and L. P. Safonova Membranes based on polybenzimidazole and protic ionic liquid: preparation and properties // *Russ. Chem. Bull.* 2021, **70**, 56-61 doi: 10.1007/s11172-021-3056-z
17. Irina V. Fedorova & Lyubov P. Safonova Ion Pair Structures and Hydrogen Bonding in R_nNH_{4-n} Alkylammonium Ionic Liquids with Hydrogen Sulfate and Mesylate Anions by DFT Computations // *J. Phys. Chem. A*, 2020, **124**, 3170-3179. DOI: 10.1021/acs.jpca.0c01282
18. Y.A. Fadeeva, I.V. Fedorova, M.A. Krestyaninov, L.P. Safonova Structural characterization of

- H₃PO₃ and H₃PO₄ acids solutions in DMF: Spectral analysis and CPMD simulation // J. Mol. Liq. 2020, 300, 112342/ <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2019.112342>
19. Yuliya Fadeeva, Matvey Gruzdev, Nadezhda Kudryakova, Liudmila Shmukler, Lyubov Safonova Physico-chemical characterization of alkyl-imidazolium protic ionic liquids // Journal of Molecular Liquids, 2020, 297, 111305, doi: 10.1016/j.molliq.2019.111305
 20. M. S. Gruzdev, A. M. Kolker, M. A. Krestyaninov, L. P. Safonova Thermal properties of protic ionic liquids derivatives triethanolamine-based salts of mineral and organic acids // Journal of Thermal Analysis and Calorimetry, 2019, V. 138, pp. 703-712. doi: 10.1007/s10973-019-08239-z.
 21. Л. Э. Шмуклер, И. В. Федорова, М. С. Груздев, Ю. А. Фадеева, Л. П. Сафонова Ионные жидкости на основе диэтиламина: квантово-химические расчеты и эксперимент // Известия Академии наук. Серия химическая, 2019, № 11, 2009-2019. L. E. Shmukler, I. V. Fedorova, M. S. Gruzdev, Yu. A. Fadeeva, and L. P. Safonova Diethylamine-based ionic liquids: quantum chemical calculations and experiment // Russian Chemical Bulletin, International Edition, 2019, Vol. 68, No. 11, pp. 2009—2019 (<https://doi.org/10.1007/s11172-019-2660-7>)
 22. L. E. Shmukler, I. V. Fedorova, M. S. Gruzdev, and L. P. Safonova Triethylamine-Based Salts: Protic Ionic Liquids or Molecular Complexes? // J. Phys. Chem. B 2019, 123 (50), 10794-10806 DOI: 10.1021/acs.jpcc.9b08032
 23. Irina V. Fedorova & Lyubov P. Safonova Quantum Chemical Modeling of the Structure and H Bonding in Triethanolammonium-Based Protic Ionic Liquids with Sulfonic Acids // J. Phys. Chem. A 2019, 123, 3735–3742 DOI: 10.1021/acs.jpca.9b01189
 24. Liudmila E. Shmukler, Ekaterina Glushenkova, Yuliya Fadeeva, Matvey Gruzdev, Nadezhda Kudryakova, Lyubov Safonova Polymer electrolytes based on PVdF-HFP doped with protic ionic liquids containing different cations // Journal of Molecular Liquids, 2019, V. 283, pp. 338-345. doi: 10.1016/j.molliq.2019.03.093
 25. Fedorova, Irina; Safonova, Lyubov Ab Initio Investigation of the Interionic Interactions in Triethylammonium - Based Protic Ionic Liquids: The Role of Anions in the Formation of Ion Pair and Hydrogen Bonded Structure // The Journal of Physical Chemistry A 2019, V. 123 (1), pp 293–300 DOI: 10.1021/acs.jpca.8b10906
 26. Dmitriy M. Makarov and Lyubov P. Safonova Volumetric properties of protic ionic liquids based on alkylammonium cations at T = (293.15 – 353.15) K and atmospheric pressure // J. Chem. Eng. Data, 2019, 64 (1), pp 211–217, DOI: 10.1021/acs.jced.8b00725
 27. Сафонова Л.П., Шмуклер Л.Э., Федорова И.В. Протонные ионные жидкости // Ионные жидкости: теория и практика (Проблемы химии растворов) / отв. ред. А. Ю. Цивадзе. – Иваново: АО «Ивановский издательский дом», 2019. – С. 225-264.

8 Контактный телефон члена экспертной комиссии (желательно мобильный)

9 Адрес электронной почты