

**РЕШЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА УрФУ 1.4.01.01  
ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ  
ДОКТОРА НАУК**

от «22» декабря 2023 г. № 25

о присуждении **Ковалевой Елене Германовне**, гражданство Российской Федерации, ученой степени доктора химических наук.

Диссертация **«Метод спиновых зондов и меток для исследования гидратированной поверхности пористых и наноразмерных материалов»** по специальности **1.4.4. Физическая химия** принята к защите диссертационным советом УрФУ 1.4.01.01 16 октября 2023 г. протокол № 19.

Соискатель, **Ковалева Елена Германовна**, 1969 года рождения, в 1992 г. с отличием окончила Уральский политехнический институт имени С.М. Кирова по специальности «Физические методы и приборы контроля качества», в 1998 г. в диссертационном совете, созданном на базе Уральского государственного технического университета защитила диссертацию на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.1. «Неорганическая химия» на тему «Особенности комплексообразования меди (II) со сшитыми полиакрилатами: взаимосвязь рН внутри зерна ионита со структурой и каталитическими свойствами ионитных комплексов», в 2004 г. ей было присвоено звание доцента по кафедре общей и неорганической химии. С 2012 г. по 2015 г. являлась докторантом ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина» по специальности 02.00.04 – Физическая химия. В настоящее время работает доцентом кафедры технологии органического синтеза ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина».

Диссертация **«Метод спиновых зондов и меток для исследования гидратированной поверхности пористых и наноразмерных материалов»** выполнена на кафедре технологии органического синтеза Химико-

технологического института ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина».

Научный консультант – доктор химических наук, профессор **Молочников Леонид Самуилович**, профессор кафедры химии ФГБОУ ВО Уральский государственный лесотехнический университет (умер в 2020 г.).

Официальные оппоненты:

**Багрянская Елена Григорьевна**, доктор физико-математических наук, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Новосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова Сибирского отделения Российской академии наук (НИОХ СО РАН), директор;

**Голубева Елена Николаевна**, доктор химических наук, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», химический факультет, кафедра химической кинетики, профессор;

**Скорб Екатерина Владимировна**, доктор химических наук, Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский университет ИТМО» (г. Санкт-Петербург), лаборатория интеллектуальных технологий в инфохимии, заведующий лабораторией

дали положительные отзывы на диссертацию.

Соискатель имеет 27 научных статей в журналах, рекомендованных ВАК РФ и индексируемых базами данных Web of Science и Scopus, Proceedings международных конференций, 1 главу в коллективной монографии издательства In Tech. Publishing (Хорватия), более 100 тезисов докладов и материалов российских и международных конференций, симпозиумов, конгрессов и совещаний. Общий объем опубликованных работ по теме диссертации 19,93 п.л. / 9,58 п.л. – авторский вклад.

*Статьи, опубликованные в рецензируемых научных журналах и изданиях, определенных ВАК РФ и Аттестационным советом УрФУ:*

1. **Ковалева Е. Г.** Влияние смешанной  $H^+$ - $Na^+$ -формы карбоксильного катионита КБ-2 и pH внутри зерна ионита на состояние ионов Cu (II) и каталитические свойства Cu (II)-содержащих ионитных катализаторов / **Е.Г. Ковалева**, Л.С. Молочников, И.Н Липунов // Журнал физической химии. – 2000. – Vol. 74, №. 8. – С. 1403-1408. 0,38 п.л./0,2 п.л.; на англ. Kovaleva, E. G. The influence of the mixed  $H^+$ - $Na^+$  form of KB-2 carboxyl cationite and of pH within ionite grains on the state of Cu(II) ions and the catalytic properties of ionite catalysts containing Cu(II)/ **E. G. Kovaleva**, L. S. Molochnikov & I. N. Lipunov// Russian Journal of Physical Chemistry. – 2000. – Vol. 74, №. 8. – P. 1262-1267. 0,38 п.л./0,2 п.л. (Scopus, WoS).

2. Molochnikov, L. S. Direct measurement of  $H^+$  activity inside cross-linked functional polymers using nitroxide spin probes / L. S. Molochnikov, **E. G. Kovalyova**, I. A. Grigor'ev, A. A. Zagorodni // The Journal of Physical Chemistry B. – 2004. – Vol. 108, N. 4. – P. 1302-1313. 0,75 п.л./0,4 п.л. (Scopus, WoS).

3. Молочников, Л. С. Метод спинового зонда в исследовании кислотности неорганических материалов / Л.С. Молочников, **Е.Г. Ковалева**, Е.Л. Головкина, И.А. Кирилюк, И.А. Григорьев // Коллоидный журнал. – 2007. – Vol. 69, №. 6. – P. 821-828. 0,5 п.л./0,25 п.л.; на англ. яз. Molochnikov L. S. Spin probe study of acidity of inorganic materials/ L. S. Molochnikov, **E. G. Kovaleva**, E. L. Golovkina, I. A. Kirilyuk & I. A. Grigor'ev// Colloid Journal. – 2007. – Vol. 69, N. 6. – P. 769-776. 0,5 п.л./0,25 п.л. (Scopus, WoS).

4. Паршина, Е. В. Кислотность среды и каталитические свойства композиционных материалов на основе диоксидов кремния и титана и порошковой целлюлозы в присутствии ионов  $Cu^{2+}$  / Е. Паршина, Л. Молочников, **Е. Ковалева**, А. Шишмаков, И. Кирилюк, И. Григорьев // Журнал физической химии. – 2011. – Т. 85, №. 3. – С. 520-525. 0,31 п.л./0,1 п.л.; на англ. яз. Parshina, E. V. Medium acidity and catalytic properties of composite materials based on silica and titania and powder cellulose in the presence of  $Cu^{2+}$  ions/ E. V. Parshina, Molochnikov L. S., **Kovaleva E. G.**, Shishmakov A. B., Mikushina Y. V.,

Kirilyuk I. A., & Grigor'ev I. A. Russian Journal of Physical Chemistry A. – 2011. – V. 85, N. 3. – P. 452-456. 0,31 п.л./0,1 п.л. (Scopus, WoS).

5. **Kovaleva, E. G.** Dynamics of pH-sensitive nitroxide radicals in water adsorbed in ordered mesoporous molecular sieves by EPR Spectroscopy / **E. G. Kovaleva**, L. S. Molochnikov, E. L. Golovkina, M. Hartmann, I. A. Kirilyuk, I. A. Grigor'ev // Microporous and mesoporous materials. – 2013. – Vol. 179. – P. 258-264. 0,44 п.л./0,2 п.л. (Scopus, WoS).

6. **Kovaleva, E. G.** Electrical potential near hydrated surface of ordered mesoporous molecular sieves assessed by EPR of molecular pH-probes / **E. G. Kovaleva**, L. S. Molochnikov, E. L. Golovkina, M. Hartmann, I. A. Kirilyuk, I. A. Grigor'ev // Microporous and Mesoporous Materials. – 2015. – Vol. 203. – P. 1-7. 0,86 п.л./0,38 п.л. (Scopus, WoS).

7. **Kovaleva, E. G.** Electrostatic properties of nanostructured silica assessed by EPR of molecular pH labels / E. G. Kovaleva, L. S. Molochnikov, V. A. Osipova, D. P. Stepanova, V. A. Reznikov // Applied Magnetic Resonance. – 2015. – Vol. 46., N.12 – P. 1367-1382. 1 п.л./0,5 п.л. (Scopus, WoS).

8. **Kovaleva, E. G.** Acid–base properties of nanoconfined volumes of anodic aluminum oxide pores by EPR of pH-sensitive spin probes / **E. G. Kovaleva**, L. S. Molochnikov, U. Venkatesan, A. Marek, D. P. Stepanova, K. V. Kozhikhova, M. A. Mironov, A. I. Smirnov // The Journal of Physical Chemistry C. – 2016. – Vol. 120, №. 5. – P. 2703-2711. 0,56 п.л./0,25 п.л. (Scopus, WoS).

9. **Kovaleva, E. G.** Interfacial electrostatic properties of hydrated mesoporous and nanostructured alumina powders by spin labeling EPR / **E. G. Kovaleva**, L. S. Molochnikov, D. P. Stepanova, A. V. Pestov, D. G. Trofimov, I. A. Kirilyuk, A. I. Smirnov // Cell Biochemistry and Biophysics. – 2017. – Vol. 75. – P. 159-170. 1,06 п.л./0,6 п.л. (Scopus, WoS).

10. **Kovaleva, E. G.** Proton Activity in Nanochannels Revealed by Electron Paramagnetic Resonance of Ionizable Nitroxides: A Test of the Poisson–Boltzmann Double Layer Theory / **E. G. Kovaleva**, L. S. Molochnikov, D. O. Antonov, D. P. Tambasova Stepanova, M. Hartmann, A. N. Tsmokalyuk, A. Marek, A. I. Smirnov //

Journal of Physical Chemistry C. – 2018. – Vol. 122, N. 35. – P. 20527-20538. 1,06 п.л./0,5 п.л. (Scopus, WoS).

11. **Kovaleva, E. G.** Electrostatic properties of inner nanopore surfaces of anodic aluminum oxide membranes upon high temperature annealing revealed by EPR of pH-sensitive spin probes and labels / **E. G. Kovaleva**, L. S. Molochnikov, D.P. Tambasova, A. Marek, M. Chestnut, V. A. Osipova, D. O. Antonov, I. A. Kirilyuk, A. I. Smirnov // Journal of Membrane Science. – 2020. – Vol. 604. – 118084. 0,69 п.л./0,3 п.л. (Scopus, WoS).

На автореферат поступило 5 положительных отзывов: от директора института физики, ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский) Федеральный Университет», д.ф.-м.н. **Гафурова Марата Ревгеровича**, г. Казань; главного научного сотрудника Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семёнова» Российской академии наук, д.х.н. **Чумаковой Натальи Анатольевны**, г. Москва; главного научного сотрудника лаборатории неорганического синтеза ФГБУН Института химии твердого тела Уральского отделения Российской академии наук, д.х.н. **Захаровой Галины Степановны**, г. Екатеринбург; старшего научного сотрудника лаборатории структурного и газового анализа ФГБУН Института химии твердого тела УрО РАН, к.х.н. **Мелкозеровой Марины Александровны**, г. Екатеринбург; доцента отделения материаловедения, ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский Томский политехнический университет», к.х.н. **Вороновой Гульнары Альфридовны**, г. Томск.

Отзывы содержат следующие критические замечания и вопросы: об излишнем объеме автореферата (Гафуров М.Р.); о точности деконволюции спектров ЭПР радикалов в том случае, если содержание одной формы зонда значительно превышает другую (Чумакова Н.А.); об измерении изменения потенциала гидратированной поверхности материала для клиновидных и щелевых пор (Захарова Г.С).

**Выбор официальных оппонентов** обосновывается компетентностью Багрянской Е.Г., Голубевой Е.Н. и Скорб Е.В. в области физической химии и химической физики, а именно их научными достижениями в разработке и применении новых методов магнитного резонанса для изучения механизмов химических реакций, включая ЭПР спектроскопию, в изучении физико-химических, комплексообразующих, сорбционных и каталитических свойств различных соединений методом ЭПР, в создании и исследовании новых функциональных материалов, что подтверждается их публикациями в высокорейтинговых научных журналах.

Диссертационный совет отмечает, что представленная диссертация на соискание ученой степени **доктора химических наук** соответствует требованиям п.9 Положения о присуждении ученых степеней в УрФУ и является научно-квалификационной работой, в которой, на основании выполненных автором исследований, разработан новый метод исследования гидратированной поверхности пористых и наноразмерных материалов и родственных им систем на основе ЭПР спектроскопии рН-чувствительных НР и парамагнитных ионов металлов как спиновых зондов и меток.

Диссертация представляет собой самостоятельное законченное исследование, обладающее внутренним единством. Положения, выносимые на защиту, содержат **новые научные результаты** и свидетельствуют о личном вкладе автора в науку:

Разработан универсальный подход к определению локальной кислотности и электрического потенциала вблизи гидратированной поверхности внутри пор и каналов твердофазных пористых и наноразмерных материалов;

Установлены закономерности влияния природы материала, способа синтеза, состава, размеров частиц, пор и каналов на электроповерхностные свойства пористых и наноразмерных материалов: найдены значения показателя кислотности (рН<sub>loc</sub>) внутри пор для ряда материалов; оценено влияние диаметра пор и каналов на формирование двойного электрического слоя, значение потенциала Штерна и толщину слоя Штерна; установлены значения

констант кислотности функциональных групп на внутренней поверхности пор и каналов для ряда материалов и проведен критический анализ ранее установленных закономерностей их адсорбционного поведения в растворах;

Показана непосредственная взаимосвязь между величиной электрического потенциала вблизи гидратированной поверхности материала, локальными значениями кислотности среды и его сорбционными, комплексообразующими и каталитическими свойствами.

Диссертация является фундаментальным исследованием в области физической химии, химии поверхности, сорбционных, комплексообразующих и каталитических процессов. Установленные с помощью разработанного метода закономерности имеют непосредственное практическое значение для оптимизации условий проведения многих рН-зависимых сорбционных, каталитических процессов и процессов комплексообразования посредством выбора твердофазного материала в качестве катализатора или адсорбента.

На заседании 22 декабря 2023 г. диссертационный совет УрФУ 1.4.01.01 принял решение присудить **Ковалевой Е.Г.** ученую степень **доктора химических наук.**

При проведении тайного голосования диссертационный совет УрФУ 1.4.01.01 в количестве 17 человек, из них 6 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 21 человека, входящего в состав совета, проголосовали: за – 16, против – нет, недействительных бюллетеней – 1.

Председатель диссертационного  
совета УрФУ 1.4.01.01

Черепанов  
Владимир Александрович

Ученый секретарь диссертационного  
совета УрФУ 1.4.01.01  
22.12.2023

Аксенова  
Татьяна Владимировна