

**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 1998 г. в диссертационном совете, созданном на базе Уральского государственного технического университета защитила диссертацию на соискание ученой степени кандидата химических наук на тему «**Особенности комплексообразования меди (II) со сшитыми полиакрилатами: взаимосвязь рН внутри зерна ионита со структурой и каталитическими свойствами ионитных комплексов**»; с 01.11. 2012 г. по 01.11. 2015 г. являлась докторантом ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина» по специальности 02.00.04 – Физическая химия; работает в должности доцента кафедры технологии органического синтеза ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина» Минобрнауки России.

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, ФГБОУ ВО Уральский государственный лесотехнический университет, кафедра химии, профессор (умер в 2020 г.).

Официальные оппоненты:

Багрянская Елена Григорьевна, доктор физико-математических наук, профессор, 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, доцент, 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 161 научную публикацию, в том числе по теме диссертации – 35 работ, из них 27 статей опубликовано в рецензируемых научных журналах, в том числе 24 в изданиях, индексируемых базами данных Web of Science и Scopus; 1 главу в коллективной монографии. 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 КВ-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., с.н.с. **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 Инженерной школы новых производственных технологий 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, что имеет существенное значение для развития химической, нефтехимической отрасли и металлургического комплекса России в контексте оптимизации рН-зависимых сорбционных, каталитических процессов и процессов комплексообразования, создания новых катализаторов и адсорбентов крупных и малых молекул с оптимизированными характеристиками.

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 (pH_{loc}) 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 pH-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

Ученый секретарь диссертационного
совета УрФУ 1.4.01.01

22.12.2023




Черепанов
Владимир Александрович


Аксенова
Татьяна Владимировна