

ОТЗЫВ НАУЧНЫХ РУКОВОДИТЕЛЕЙ

на диссертацию Нармандаха Жаргалан на тему «**Кинетика растворения и рост кластеров в растворах фуллеренов при различных условиях приготовления**», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Жаргалан Нармандах начал свою работу в Лаборатории нейтронной физики имени И.М. Франка Объединенного института ядерных исследований (ЛИФ ОИЯИ) в 2010 году при выполнении работы для магистерской диссертации. После ее защиты в Институте Физики и Технологии (Улан-Батор, Монголия) в 2011 году он был принят на работу в Лабораторию нейтронной физики им. И.М. Франка ОИЯИ, где посещал лекции УНЦ и МГУ по профильным направлениям. За прошедший период им были в полном объеме усвоены дисциплины, предусмотренные программой послевузовской подготовки, а также сданы все необходимые экзамены кандидатского минимума. Развиваемая диссертантом тематика является в настоящее время актуальным направлением в физике конденсированного состояния вещества – исследованием растворов и коллоидных систем на основе наночастиц. Объект исследований – фуллерены C_{60} и C_{70} – новая аллотропная форма углерода, открытая в конце прошлого столетия, являются актуальной системой в том числе и для прикладных исследований. Агрегация этих калиброванных наночастиц в различных растворах ставит перед исследователями новые задачи, связанные и с фундаментальными вопросами кластерного состояния вещества.

На начальных этапах работы по теме диссертации Ж. Нармандах в короткие сроки освоил теорию нуклеации и кинетический подход к описанию образования и роста кластеров, успешно использовал полученные уравнения для моделирования агрегации фуллеренов C_{60} в слабополярных растворах. В составе научной группы, Жаргалан участвовал в разработке новых моделей для описания агрегации в полярных растворах фуллерена в N-метилпирролидоне. В 2010-2012 годы активно обсуждалась связь между агрегацией наночастиц и комплексообразованием в этих растворах. Так, основным на тот момент был вопрос о влиянии комплексообразования на рост кластеров – является ли один процесс инициатором другого, или, наоборот, причиной стабилизации коллоидов? С участием Ж. Нармандаха были выполнены компьютерные расчеты функций распределения для двух разных моделей, отвечающих описанным гипотезам. С помощью развитого на основе экстраполяции метода была произведена оценка стационарных функций распределения и выполнены расчеты модельных кривых малоуглового рассеяния нейтронов. На основании полученных данных был сделан вывод о применимости модели ограниченного роста для описания растворов C_{60} . По результатам данных исследований были опубликованы три отдельные работы в рецензируемых журналах, а также обобщающая статья в журнале *Journal of Molecular Liquids*.

В последующие годы, Ж. Нармандах продолжил работу с растворами фуллерена. Были рассмотрены новые задачи, связанные с определением кинетических коэффициентов, необходимых для получения численных результатов из составленных ранее кинетических уравнений. Именно, необходимо было определить скорости растворения и комплексообразования в растворах. Также, интерес представляла их зависимость от температуры – информация, которую никто ранее не получал. Жаргалан

выполнил предварительные эксперименты, исследуя методом УФ-Вид кинетику растворения в слабополярных растворах фуллерена, где концентрацию можно было определять напрямую из спектра поглощения, пользуясь законом Бугера-Ламберта-Бэра. В результате, были получены значения коэффициентов растворения для растворов C_{60} в бензоле и толуоле разных концентраций, при разных температурах и скоростях перемешивания. Опираясь на опыт данных исследований, Жаргалан в дальнейшем выполнил аккуратные измерения эволюции спектров поглощения раствора C_{60}/NMP при разных условиях. В полярных растворах имеет место временной сольватохромный эффект – УФ-Вид спектр изменяет свой характер со временем, и, следовательно, определить концентрацию раствора напрямую уже невозможно. Чтобы обойти эту трудность, с участием диссертанта была предложена модель, по которой концентрацию можно было рассчитывать по эволюции пика поглощения при $\lambda=330$ нм. В этой модели учитывалось, что в растворе одновременно с растворением протекают процессы комплексообразования. В результате, Ж. Нармандахом была построена диаграмма скоростей растворения и комплексообразования, в зависимости от температуры и скорости перемешивания. В дальнейшем, полученные зависимости будут использованы для теоретического описания кинетики агрегации частиц в полярных растворах фуллерена.

Другая часть работы Жаргалана Нармандаха была посвящена постановке и интерпретации экспериментов по малоугловому рассеянию нейтронов (МУРН) растворами фуллеренов C_{60} и C_{70} . Растворы C_{60} в N-метилпирролидоне исследовались с целью обнаружить кластеры в диапазоне размеров 1-100 нм. Было показано, что для получения сигнала высокой интенсивности необходимо точно рассчитывать время для проведения экспериментов. Второй задачей было исследование структуры частиц в слабополярном растворе C_{70}/CS_2 . Интерес к этой системе возник после ранних работ по исследованию раствора C_{60} в сероуглероде, где был обнаружен эффект завышенного размера радиуса инерции частиц (~10-20%). Существовало несколько гипотез о причине данного явления, в том числе сольватация фуллерена и образование малых агрегатов C_{60} . Окончательный ответ на вопрос был дан в 2010 году с помощью данных молекулярной динамики и компьютерных расчетов. Ж. Нармандах рассмотрел следующую задачу: провести аналогичные исследования для «старшего» фуллерена C_{70} и проверить, имеет ли место аналогичный эффект. В ходе исследований было показано, что точно такой же эффект имеет место – в растворе фуллерена C_{70} в сероуглероде присутствуют димеры, тримеры и другие малые агрегаты данных наночастиц, что приводит к завышенным значениям радиуса инерции, определяемого методом малоуглового нейтронного рассеяния.

За время работы Жаргалан показал себя квалифицированным специалистом, овладевшим предметом исследования и обладающим необходимыми навыками проведения теоретических расчетов и экспериментов, а также работы с литературными данными по теме проводимого исследования. С набором поставленных задач диссертант справился в полном объеме. Диссертация Ж. Нармандаха представляет собой законченную квалификационную работу, полностью соответствующую требованиям, предъявляемым к диссертационным работам на соискание ученой степени кандидата наук. Содержание и значимость работы Нармандаха Жаргалана позволяют считать автора

достойным присуждения степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Научные руководители:

Научный руководитель ФГБУ ПИЯФ НИЦ «Курчатовский институт»,
доктор физико-математических наук, член-корреспондент РАН

В.Л. Аксенов

старший научный сотрудник ЛНФ ОИЯИ,
кандидат физико-математических наук

Т.В. Тропин

Подписи В.Л. Аксенова и Т.В. Тропина заверяю,
ученый секретарь ЛНФ ОИЯИ



Д. Худоба