



УТВЕРЖДАЮ  
Директор Лаборатории  
нейтронной физики им. И.М. Франка  
В.Н. Швецов  
"29 июня" 2016 г.

### ВЫПИСКА

из протокола заседания Научно-технического совета  
НЭО НИКС ЛНФ от 23 июня 2016 г.

Численный состав НТС – 16 человек.

**ПРИСУТСТВОВАЛИ:** 38 человек, из них 12 членов НТС.

**СЛУШАЛИ:** сообщение НАРМАНДАХА ЖАРГАЛАНА о содержании, основных положениях и выводах диссертационной работы «КИНЕТИКА РАСТВОРЕНИЯ И РОСТ КЛАСТЕРОВ В РАСТВОРАХ ФУЛЛЕРЕНОВ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ УСЛОВИЯХ ПРИГОТОВЛЕНИЯ» на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния. Научные руководители: доктор физико-математических наук, член-корреспондент РАН В.Л. Аксенов; кандидат физико-математических наук Т.В. Тропин.

На обсуждении было отмечено, что работа отвечает требованиям, предъявляемым к диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, и соответствует специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния. Диссертация рекомендована к защите в диссертационном совете Д 720.001.06 при Лаборатории нейтронной физики и Лаборатории ядерных реакций ОИЯИ.

Заключение о диссертационной работе.

В диссертационной работе «Кинетика растворения и рост кластеров в растворах фуллеренов при различных условиях приготовления» предложено теоретическое описание кинетики кластерообразования в полярных растворах фуллерена, с учетом влияния процессов образования комплексов фуллерен-растворитель, а также проведены экспериментальные структурные исследования и исследования кинетических процессов в растворах  $C_{60}$  и  $C_{70}$  разной полярности. Разработан метод расчета стационарных функций распределения кластеров по размерам в растворах фуллерена средней полярности и выполнено моделирование данных малоуглового рассеяния нейтронов для предложенных теоретических моделей; представлено их сравнение с экспериментом. Разработка упомянутых теоретических моделей для кинетики роста кластеров и сопутствующих процессов важны как с точки зрения фундаментальных знаний (развитие представлений о кластерном состоянии), так и с практической точки зрения – исследуемые полярные растворы являются модельными системами для ряда перспективных с точки зрения применений систем.

Основные результаты работы:

1. Предложено теоретическое описание кинетики кластерообразования в полярных растворах фуллерена, учитывающее влияние процессов образования комплексов фуллерен-растворитель. Рассмотрены две модели для описания данного эффекта: модель ограниченного роста и двухступенчатая модель кластерообразования.

- Составлены системы кинетических уравнений, отвечающие предложенным моделям, и получены их решения в виде эволюции функции распределения кластеров по размерам на определенном временном интервале.
2. Разработан метод оценки стационарных функций распределения, отвечающих экспериментальным данным. Получены полидисперсные распределения агрегатов в диапазоне размеров 20-200 нм, что соответствует экспериментальным данным динамического светорассеяния. Выполнено моделирование данных малоуглового рассеяния нейтронов по полученным профилям распределения агрегатов  $C_{60}$  по размерам для разных моментов времени и параметров моделей.
  3. Методом малоуглового рассеяния нейтронов проведено исследование растворов фуллерена  $C_{70}$  в слабополярном растворителе сероуглероде  $CS_2$ . Для нескольких серий образцов, приготовленных различными методами (равновесное растворение, перемешивание и ультразвук) определены радиусы инерции частиц в растворе. Полученные значения радиуса инерции ( $R_g$ ) находятся в интервале 3.72-4.55 Å (погрешность измерения – 0.24 Å), корреляции с методом приготовления не установлено. Различия в полученных значениях составляют не более 10% и объясняются наличием в растворе малых кластеров – димеров, тримеров, и так далее. Таким образом, размер частиц в слабополярных растворах  $C_{70}$  не зависит от метода приготовления.
  4. Методами малоуглового рассеяния нейтронов и динамического светорассеяния выполнено исследование двух полярных растворов  $C_{60}/NMP$  разного возраста. Для обеих систем показано, что размеры образующихся устойчивых кластеров превышают 100 нм. На основании этих данных выполнено сравнение предложенных теоретических моделей роста кластеров  $C_{60}$  с экспериментом. Показано, что модель ограниченного роста лучше соответствует экспериментальным данным малоуглового рассеяния нейтронов, чем двухступенчатая модель.
  5. Методом спектрофотометрии исследована кинетика растворения фуллерена  $C_{60}$  в слабополярных растворах – бензоле ( $C_6H_6$ ), толуоле ( $C_6H_5CH_3$ ) различных концентраций в диапазоне температур 15 – 35 °С и при различных скоростях перемешивания. Определены зависимости скорости растворения от скорости перемешивания раствора и температуры.
  6. Методом спектрофотометрии исследована кинетика растворения и комплексообразования  $C_{60}$  в полярном ( $\epsilon = 32.2$ ) растворителе N-метил-2-пирролидон (NMP). Предложен метод определения кинетических коэффициентов по эволюции коэффициента поглощения при  $\lambda=330$  нм. Получена диаграмма зависимостей скоростей растворения и образования комплексов от скорости перемешивания раствора и температуры.

Основные результаты, изложенные в диссертации, получены при определяющем вкладе автора.

Результаты, представленные в работе, докладывались на международных и российских конференциях, на семинарах в отделе Нейтронных исследований конденсированных сред Лаборатории нейтронной физики им. И.М. Франка:

1. Международной научной конференции Нанотех-2011, г. Уланбатор, Монголия, 2011 г.
2. “International Conference on Material Science”, г. Уланбатор, Монголия, 2012 г.
3. XXII Международном совещании и Международной молодежной конференции «Использование рассеяния нейтронов в исследованиях конденсированного состояния - РНИКС-2012», г. Санкт Петербург, 2012 г

4. V Международной конференции по вопросам современной физики (V International Conference on Contemporary Physics - ICCP-V), г. Уланбатор, Монголия, 2013 г.
5. IV международной молодежной научной школе «Приборы и методы экспериментальной ядерной физики Электроника и автоматика экспериментальных установок», г. Дубна, 2013 г.
6. XXXVII и XXXIX заседания ПКК по физике конденсированных сред ОИЯИ, г. Дубна, 2013 и 2014 гг.
7. Международной конференции «Исследований конденсированных сред на реакторе ИБР-2», г. Дубна, 2014 и 2015 гг.
8. XIX международной научной конференции молодых ученых и специалистов к 100-летию Ф.Л. Шапиро, г. Дубна, 2015 г.
9. XII Международной конференции «Современные углеродные наноструктуры», г. Санкт Петербург, 2015 г.
10. IX Центральной европейской школе по методам нейтронных исследований, г. Будапешт, Венгрия, 2015 г.

Основное содержание диссертации опубликовано в работах:

1. T.V. Tropin, M.V. Avdeev, O.A. Kyzyma, R.A. Yeregin, **N. Jargalan**, M.V. Korobov, V.L. Aksenov, Towards description of kinetics of dissolution and cluster growth in  $C_{60}$ /NMP solutions // *Physica Status Solidi B*, 11, 2728-2731, (2011)
2. T.V. Tropin, **N. Jargalan**, M.V. Avdeev, O.A. Kyzyma, R.A. Eremin, D. Sangaa, V.L. Aksenov, Kinetics of cluster growth in polar solutions of fullerene: experimental and theoretical study of  $C_{60}$ /NMP solution // *Journal of Molecular Liquids*, 175, 4–11, (2012).
3. T.V. Tropin, **N. Jargalan**, M.V. Avdeev, O.A. Kyzyma, R.A. Eremin, D. Sangaa, V.L. Aksenov, Kinetics of cluster growth in polar solutions of fullerene: experimental and theoretical study of  $C_{60}$ /NMP solution // *JINR Preprint*, E-17-2012-49, (2012).
4. Т.В.Тропин, **Н.Жаргалан**, М.В.Авдеев, О.А.Кизима, D.Sangaa, В.Л.Аксенов, Расчет функций распределения кластеров по размерам и данных малоуглового рассеяния нейтронов для раствора  $C_{60}$ /N-метилпирролидон // *Физика твердого тела*, 56(1), 147-150, (2014).
5. **Н. Жаргалан**, Т.В. Тропин, М.В. Авдеев, В.Л. Аксенов, Исследование кинетики растворения фуллерена  $C_{60}$  в растворителях разной полярности методом УФ-Вид спектроскопии // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*, 1, с. 16-20, (2015).
6. **N. Jargalan**, T. V. Tropin, M. V. Avdeev, V. L. Aksenov, Investigation and modeling of evolution of  $C_{60}$ /NMP solution UV-Vis spectra // *Journal Nanosystems: physics, chemistry, mathematics*, 7(1), 99–103, (2016).
7. Т.В. Тропин, **Н. Жаргалан**, М.В. Авдеев, О.А. Кизима, Р.А. Еремин, Д. Сангаа, В.Л. Аксенов, “Кинетика роста кластеров фуллерена в полярных растворах: экспериментальное и теоретическое исследование раствора  $C_{60}$ /NMP”, VII Международная научная конференция: Кинетика и механизм кристаллизации. Кристаллизация и материалы нового поколения, Сборник тезисов конференции, стр. 25, (2012).
8. **N. Jargalan**, T.V. Tropin, M.V. Avdeev, V.L. Aksenov, “Investigation of dissolution kinetics for fullerene  $C_{60}$  in toluene, benzene and NMP solvents”, *Proceedings of Institute of Physics and Technology*, Vol 40, pp 15-18, (2013).
9. **N. Jargalan**, O.A. Kyzyma, T.V. Tropin, A.A. Tomchuk, L.A. Bulavin, M.V. Avdeev, V.L. Aksenov, “Formation and growth of clusters in non-polar and polar fullerene solutions: experimental and theoretical aspects”, International Conference “Condensed Matter Research at the IBR-2, *Book of abstracts*, p.23, (2014).

10. **N. Jargalan**, T. V. Tropin, M. V. Avdeev, V. L. Aksenov, "Investigation and modeling of evolution of UV-Vis spectra of C60/NMP solution", International conference Advanced Carbon Nanostructures (ACNS-2015), Book of abstracts, p.23, (2015).

**ПОСТАНОВИЛИ:**

1. Рекомендовать представленную НАРМАНДАХОМ ЖАРГАЛАНОМ диссертацию на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния к защите в диссертационном совете Д 720.001.06 при Лаборатории нейтронной физики и Лаборатории ядерных реакций ОИЯИ.
2. Утвердить текст заключения о диссертационной работе НАРМАНДАХА ЖАРГАЛАНА

Председатель НТС НЭО НИКС ЛНФ



А.М. Балагуров

Секретарь НТС НЭО НИКС ЛНФ



Ю.Е. Горшкова

Ученый секретарь ЛНФ ОИЯИ



Д. Худоба