

ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА на диссертацию Нармандаха Жаргалана

«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

Уникальные свойства фуллеренов породили много надежд на их применение в качестве антиоксидантов, ингибиторов ферментации, нейропротективных и противовирусных средств. Естественно, что биомедицинские применения связывались с возможностью получения различных растворов фуллеренов. Именно поэтому два последних десятилетия отмечены интенсивными исследованиями физико-химических свойств растворов фуллеренов, в первую очередь фуллеренов C₆₀ и C₇₀. При этом особое внимание уделяется изучению тенденции к агрегации, приводящей к образованию кластеров, имеющих размеры в диапазоне от 10 до 100 нм., изучению кинетики процессов агрегации и равновесного распределения кластеров фуллеренов в растворе. Обнаруженная *in vitro* корреляция между токсичностью фуллеренов и формой агрегатов, а также степенью их агрегации (Lyon, D. Y. et al. J. Environ. Sci. Tech., 2006) подчеркивает важность такого рода исследований. Сказанное иллюстрирует **актуальность темы** диссертационной работы Нармандаха Жаргалана.

Сформулированные задачи работы состояли в теоретическом описании и экспериментальном исследовании кинетики роста кластеров в полярных растворах фуллеренов и предусматривали как разработку моделей, учитывающих влияние комплексообразования на кинетику роста кластеров, так и развитие методов обработки экспериментальных данных по малоугловому рассеянию нейтронов в растворах фуллеренов C₆₀ и C₇₀ разной полярности, изучению зависимости агрегации фуллерена от условий их приготовления.

Диссертация построена по традиционной схеме. Во введении сформулирована цель работы, обсуждаются актуальность, новизна и практическая значимость намеченных исследований.

Первая глава представляет собой литературный обзор, достаточно подробно обсуждаются теоретические методы описания кинетики необратимых процессов, в том числе кинетические уравнения, описывающие сегрегацию частиц в растворах. Рассмотрены свойства фуллерена C₆₀ и C₇₀, перечислены их возможные применения. Собственные результаты и их анализ представлены во второй, третьей и четвертой главах.

Во второй главе представлено теоретическое описание роста кластеров фуллерена в полярных растворах. Базовые кинетические уравнения расширены путем добавления

временных коэффициентов формирования кластеров и образования комплексов, соответственно. Показана возможность моделирования экспериментальных кривых малоуглового рассеяния нейтронов в рамках двух моделей: модели ограниченного роста и двухступенчатой модели кластерообразования.

В третьей главе исследуется кинетика растворения фуллерена в различных растворителях методом спектроскопии в видимой и ближней ультрафиолетовой областях спектра. Представлены и анализируются экспериментальные данные о кинетике растворения фуллерена C₆₀ в слабополярных растворителях – бензоле и толуоле, при различных исходных концентрациях фуллерена. Полученные данные сопоставлены с кинетикой растворения фуллерена C₆₀ в полярном растворителе N-метил-2-пирролидоне (NMP).

В четвертой главе излагаются результаты исследований малоуглового рассеяния нейтронов в растворах фуллеренов C₇₀ в слабополярном растворителе сероуглероде - CS₂ и растворов фуллерена C₆₀ в полярном растворителе NMP. При этом в последнем случае проведено сопоставление с данными, полученными методом динамического рассеяния света.

В заключении сформулированы основные выводы и приведен список цитированной литературы, содержащий 119 ссылок.

Рассматривая полученные результаты следует отметить большой объем весьма трудоемкой экспериментальной работы и новизну полученных экспериментальных данных. Действительно, в литературе существует крайне ограниченное число публикаций, касающихся исследований растворов фуллеренов в сероуглероде. Всего несколько публикаций посвящено изучению свойств растворов фуллеренов в NMP. Безусловно к новым результатам следует отнести также комплекс исследований распределение частиц по размерам в растворах фуллерена C₇₀ в CS₂. В целом, **оценивая новизну и значимость полученных результатов**, следует отметить впервые предложенное теоретическое описание кинетики кластерообразования в полярных растворах фуллеренов, учитывающее образование комплексов фуллерен-растворитель, а также результаты подробного изучения фуллеренов в растворах сильной и слабой полярности методом малоуглового рассеяния нейтронов.

Достоверность полученных результатов подтверждается выполненным сопоставлением расчетных и экспериментальных данных, подробным описанием методики эксперимента, проведением экспериментов на серии образцов различной концентрации (таблицы на стр. 60 и стр. 84 диссертации), результатами сопоставления полученных данных с известными из литературы.

С практической точки зрения интересными результатами представляются данные о кинетике растворения фуллерена C₆₀ в слабополярных растворах – бензоле и толуоле, результаты изучения временной зависимости сольватохромного эффекта (глава 3).

Как и к любому исследованию, к диссертационной работе можно высказать ряд замечаний.

1. В главе 2 при теоретическом описании кинетики роста кластеров фуллерена в растворах, автор пишет «в рамках настоящей работы временные коэффициенты будут оставлены в условных единицах, при этом следует держать в уме, что всегда можно грубо сопоставить их со шкалой реального времени. Следует отметить, что в рамках данной модели, мы рассматриваем раствор как изначально пересыщенный относительно роста кластеров. Характерные значения параметра τ , должны быть от 10^5 у.е. и выше. (стр. 45)». Как следует понимать выражение «изначально пересыщенный относительно роста»? Как можно «грубо сопоставить» временные коэффициенты со шкалой реального времени? Какова будет при этом ожидаемая величина ошибки?
2. При анализе литературных данных (рис.2.5б, стр. 42), а также собственном экспериментальном исследовании агрегации в растворах C₆₀/NMP рис.4.14, стр. 87) приводятся данные, полученные методом динамического рассеяния света. Однако никак не анализируется тот факт, что этот метод может привести к существенным ошибкам в том случае, если в растворе присутствует два и более типа частиц с существенно отличающимися размерами. Заметим, что в отличие от методики эксперимента по малоугловому рассеянию нейтронов, не приведены данные о методике и использованном измерительном приборе.
3. Во второй главе диссертации анализируются две теоретические модели агрегации (ограниченного роста и двухступенчатого роста) в растворах C₆₀/NMP, которые приводят к разным результатам. Остается непонятным, считает ли автор этот результат следствием использованных параметров моделей или несовершенством самих моделей (стр. 49, стр.50).
4. Необходимо отметить и ряд недостатков в оформлении диссертации и автореферата, например:
 - положения, выносимые на защиту, сформулированы не как научные утверждения, а как выводы,
 - ошибочно утверждение (глава 1, стр. 19) о том, что «атомы С в составе фуллерена характеризуются sp^2 – гибридизацией». На самом деле, sp^2 – гибридизация соответствует только плоскому «графеновому» листу, в случае фуллерена имеет

место смешанная гибридизация, обозначаемая как sp^{2+x} или sp^{3-x} , достаточно обратиться к классической монографии о фуллеренах - M.S.Dresselhaus, G.Dresselhaus, P.C.Eklund. Science of fullerenes and carbon nanotubes. 1995, - применения фуллеренов в первой главе (п.1.2.3, стр. 23) излагаются не в связи с основными исследованиями, проведенными в диссертации.

Сделанные замечания, разумеется, не могут повлиять на общую высокую оценку диссертационной работы Нармандаха Жаргалан, которая представляет собой законченное и цельное научное исследование, выполненное на современном уровне, прошла апробацию на нескольких Международных конференциях. Результаты диссертации опубликованы в 5 статьях и 8 тезисах докладов.

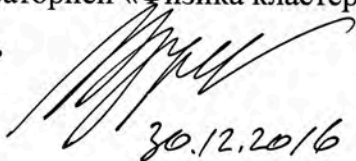
Автореферат и опубликованные работы отражают основные результаты диссертации. Автореферат полностью соответствует содержанию диссертации.

В целом работа «Кинетика растворения и рост кластеров в растворах фуллеренов при различных условиях приготовления» удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым ВАК к кандидатским диссертациям, и ее автор - Нармандах Жаргалан, безусловно, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Официальный оппонент

доктор физико-математических наук, профессор
зав.лабораторией «Физика кластерных структур»

А.Я.Вуль


30.12.2016

