



Проректор по научной работе СПбГУ

Аплонов С.В.

«05» 12 2016 г.

ОТЗЫВ

ведущей организации - Санкт-Петербургского государственного университета
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.

Диссертация Нармандаха Жаргалана посвящена теоретическому и экспериментальному исследованию ряда кинетических процессов, протекающих в растворах фуллеренов разной степени полярности. Фуллерены C_{60} и C_{70} представляют собой уникальные молекулы, размером порядка одного нанометра, и имеют ряд перспективных применений, в том числе в электронике и биомедицине. Полярные растворы фуллерена в настоящее время рассматриваются как модельные растворы, используемые для непосредственного перевода фуллерена в воду и использования в виде лекарств. С фундаментальной точки зрения систематическое описание кинетики роста кластеров в таких растворах интересно для развития представлений о кластерном состоянии вещества, что является важной задачей современной статистической физики и физики конденсированного состояния вещества. В работе Н. Жаргалана выполнено экспериментальное исследование и теоретическое моделирование кинетики растворения, образования комплексов фуллерен C_{60} -растворитель, а также образования и роста кластеров для нескольких типов растворов. Кинетические процессы исследуются преимущественно методом УФ-Вид спектроскопии. Дополнительно представлено экспериментальное исследование агрегации фуллеренов C_{60} и C_{70} в сероуглероде и N-метилпирролидоне (NMP) методами динамического светорассеяния (ДРС) и малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН).

Работа представлена на 103 листах машинописного текста, хорошо структурирована и включает в себя введение, 4 главы основного материала (обзор литературы, описание методов и объектов исследования, две главы собственных результатов диссертанта) и списка опубликованных и цитируемых (119 источников) работ. По материалам диссертации опубликовано 13 работ, 5 из которых – статьи в рецензируемых научных изданиях из списка ВАК. К диссертации приложен автореферат объемом 23 страницы, достаточно полно отражающий материал диссертации.

Первая глава посвящена обзору научной литературы об исследованиях растворения фуллеренов, классификации и некоторым интересным свойствам растворов фуллеренов, таким как образование кластеров, сольватохромный эффект и другим. Приведено описание структура и физико-химические свойства молекул фуллерена C_{60} и C_{70} , перечислены актуальные приложения данных макромолекул. Дан обзор теоретических методов описания кинетики агрегации наночастиц в растворах.

Во второй главе предложены две теоретические модели для описания кинетики роста кластеров фуллерена в полярном растворителе НМП. Базовые кинетические уравнения расширены путем добавления временных коэффициентов формирования кластеров и образования комплексов, соответственно. В результате, получен набор функций $f(R,t)$, отвечающий временам от нескольких часов до нескольких недель эволюции системы. Показано, что полидисперсность распределения агрегатов значительно выше для модели ограниченного роста кластеров по сравнению с капельной моделью. Для обеих моделей получены размеры кластеров в диапазоне 20-200 нм, отвечающие экспериментальным наблюдениям. В рамках развитого теоретического подхода выполнено моделирование кривых МУРН для растворов C_{60} /НМП. Из сравнения полученных результатов с экспериментальными данными МУРН для растворов C_{60} /НМП сделан вывод, что модель ограниченного роста представляет качественно верное описание агрегации фуллеренов.

В третьей главе описано исследование кинетики растворения фуллерена в различных жидкостях. В первой части рассмотрена кинетика растворения в двух слабополярных растворителях, бензоле и толуоле, при различных условиях приготовления. Исследования выполнены с помощью УФ-Вид спектрофотометра. Показано, что растворение фуллерена в данных системах хорошо описывается уравнением Нойеса-Уитни, определены соответствующие параметры и их зависимости от условий приготовления. Вторая часть посвящена изучению кинетики растворения и комплексообразования в полярных растворах фуллерена на примере раствора в НМП. Предложена модель для описания кинетики растворения с учетом образования комплексов фуллерен-растворитель и их влияния на спектр поглощения раствора. В результате, определены зависимости коэффициентов растворения и комплексообразования для полярных растворов от температуры, и скорости перемешивания.

В четвертой главе представлены результаты исследований некоторых растворов фуллерена методом МУРН. В начале главы даны основные принципы экспериментов по малоугловому рассеянию нейтронов, некоторые приближения и методы обработки экспериментальных данных. Далее рассмотрены экспериментальные результаты исследования растворов фуллеренов C_{70} в CS_2 методом МУРН, выполнены обработка и анализ данных. Во второй части главы рассматриваются эксперименты по МУРН и ДРС на полярных растворах C_{60} /НМП, обсуждаются полученные результаты.

Общая оценка диссертации является высокой. Методики исследования и полученные результаты описаны детально. Надёжность результатов не вызывает сомнений. Автор показал, что он достаточно глубоко освоил физические аспекты решаемой проблемы. Личный вклад автора в полученные результаты является значительным.

По диссертации Н. Жаргалана имеется и ряд замечаний:

1. Иногда в тексте встречается не полное описание используемых формул, например на странице 16 нет описания переменной χ , входящей в выражение для коэффициента коагуляции.
2. Используя различные источники для описания предлагаемых моделей, к сожалению, соискатель не позаботился о том, чтобы один и тот же параметр через весь текст диссертации имел одно и то же обозначение. Например, размер кластера имеет обозначение « r » как радиус кластера, « $\langle n \rangle$ » как средний размер кластера, « n_c » как критический размер кластера, « σ » как размер кластера и « n » как размер кластера. В то же время латинская буква « n » используется как число частиц, а « σ » как коэффициент поверхностного натяжения. Такое отсутствие единой системы обозначений затрудняет восприятие содержания.
3. В тексте совершенно отсутствуют ссылки на рисунки 2.4, 2.9, 2.10 и 3.1.
4. Иногда описание рисунка не соответствует тому, что на нем изображено. Например, на странице 41 утверждается, что кластеры фуллеренов имеют размеры порядка 500 нм, однако из предлагаемого рисунка 2.5 видно, что размеры едва достигают 250 нм.
5. В разделе 2.3.3 написано, что кластеры больших размеров не могут быть измерены в МУРН (методом Малоуглового рассеяния нейтронов) из-за сильного некогерентного рассеяния. С чем связано это некогерентное рассеяние в исследуемых растворах C_{60}/NMP ?
6. В том же разделе 2.3.3 на странице 50 написано о параметре « σ », варьирование которого (увеличение в 2 раза) позволяет получить лучшее совпадение экспериментальных и теоретических кривых малоуглового нейтронного рассеяния. Однако, сам параметр « σ » вводится в предыдущем разделе «Двухступенчатой модели роста кластеров» C_{60}/NMP в растворе NMP при описании результатов динамического рассеяния света как дисперсия функции логнормального распределения. Пожалуйста, поясните, что же такое параметр « σ » в описании малоуглового рассеяния нейтронов, и какой физический смысл он несет при описании образующихся кластеров C_{60} в растворах?
7. Из рисунка 3.7а очевидно, что кинетика изменения концентрации раствора C_{60}/C_6H_6 при равновесных условиях приготовления при перемешивании с различной скоростью носит ступенчатый характер, с чем это может быть связано?
8. В работе отмечается, что при малых значениях переданного импульса кривые малоуглового рассеяния нейтронов не анализировались, так как эта часть кривой должна быть отнесены к некоторому «артефакту измерений», а не к структуре частиц. Что является таким артефактом и насколько обоснованно можно делать такой вывод и не включать в рассмотрение именно ту часть кривой, которая должна соответствовать кластерообразованию?
9. В диссертации не обсуждается вопрос влияния формы фуллеренов C_{60} (сферическая) и C_{70} (слегка вытянутая сфера) на рост кластеров в растворах, форму кластеров, возможные особенности кривых малоуглового рассеяния и полученные функции распределения $f(R)$, хотя такое сравнение напрашивается.

Сделанные замечания не умаляют уровня подготовки диссертационной работы, ее содержательной стороны, а также обоснованности выводов и полученных результатов. Материалы диссертационной работы достаточно полно опубликованы в научных журналах, рекомендованных ВАК, и представлены на ряде авторитетных международных совещаний и конференций.

Таким образом, диссертация Нармандаха Жаргалана на тему “Кинетика растворения и рост кластеров в растворах фуллеренов при различных условиях приготовления”, выполненная под научным руководством д.ф.-м.н., член-корреспондента РАН, Аксенова В.Л. и к.ф.-м.н. Тропина Т.В. является научно-квалификационной работой, содержащей решение актуальной задачи в области физики конденсированного состояния. Работа соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям в рамках «Положения о порядке присуждения ученых степеней ВАК», а сам автор достоин присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Работа заслушана и поддержана на семинаре Кафедры ядерно-физических методов исследования 09.11.2016.

Отзыв составил:

доцент Кафедры ядерно-физических методов исследования

федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования

"Санкт-Петербургский государственный университет"



Н.А. Григорьева

Сведения о Григорьевой Наталье Анатольевне

Ученая степень: кандидат физико-математических наук

Специальность: 01.04.07 – физика конденсированного состояния

Почтовый адрес: 198504, Санкт-Петербург, Старый Петергоф, ул. Ульяновская, 1

Телефон: +7 (921) 746-94-88

Электронная почта: natali@lms.pnpi.spb.ru

Наименование организации: Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Санкт-Петербургский государственный университет"

Должность: доцент