

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 720.001.06

на базе Объединённого института ядерных исследований

(международная межправительственная организация)

по диссертации на соискание учёной степени

кандидата физико-математических наук

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 9 марта 2017 г. №239

о присуждении **Нармандах Жаргалану** ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Кинетика растворения и рост кластеров в растворах фуллеренов при различных условиях приготовления» в виде рукописи по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния принята к защите 17 октября 2016, протокол №237 диссертационным советом Д720.001.06 на базе международной межправительственной организации Объединённый институт ядерных исследований, 141980, г. Дубна Московской обл., ул. Жолио-Кюри, д. 6.

Соискатель Нармандах Жаргалан, 1987 года рождения в 2011 году окончил магистратуру Государственного образовательного учреждения высшего профессионального образования Национального университета Монголии (University str. 1, 210646 Ulaanbaatar, Mongolia). В 2016 году Жаргалан Н. окончил аспирантуру Учебно-научного центра Объединённого института ядерных исследований, 141980, г. Дубна Московской обл., ул. Жолио-Кюри, д. 6.

Жаргалан Н. работает научным сотрудником Научно-экспериментального отдела нейтронных исследований конденсированных сред Лаборатории нейтронной физики имени И.М. Франка Объединённого института ядерных исследований, 141980, г. Дубна Московской обл., ул. Жолио-Кюри, д. 6.

Диссертация выполнена в Лаборатории нейтронной физики имени И.М. Франка Международной межправительственной организации Объединённый институт ядерных исследований.

Научные руководители – Научный руководитель Лаборатории нейтронной физики им. И.М. Франка Международной межправительственной организации

Объединенный институт ядерных исследований, доктор физико-математических наук, профессор, член-корреспондент РАН Аксенов В.Л. и старший научный сотрудник Лаборатории нейтронной физики им. И.М. Франка международной межправительственной организации Объединенный институт ядерных исследований, кандидат физико-математических наук Тропин Т.В.

Официальные оппоненты: Вуль А.Я., доктор физико-математических наук, профессор, заведующий лабораторией физики кластерных структур, Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук и Рожкова Н.Н. доктор химических наук, заведующая лабораторией физико-химических исследований наноуглеродных материалов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института геологии Карельского научного центра, Российской академии наук дали положительные отзывы о диссертации.

Ведущая организация - Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет», г. Санкт-Петербург в своём положительном заключении (заключение составила Григорьева Н.А., кандидат физико-математических наук, доцент, ученый секретарь кафедры ядерно-физических методов исследования) подписанном проректором по научной работе СПбГУ, доктором геолого-минералогических наук, профессором Аплоновым С.В. отметила, что 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.

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 (НМП) методами динамического светорассеяния (ДРС) и малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН).

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.

Соискатель имеет 13 опубликованных работ по теме диссертации, из которых 5 статей в научных журналах и изданиях, которые включены в перечень российских рецензируемых научных журналов и изданий для опубликования основных научных результатов диссертаций, имеющих переводные версии; 14 работ опубликовано в материалах всероссийских и международных конференций и симпозиумов.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации (в скобках указаны выходные данные переводных версий):

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 // *Phys. Stat. 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 // *J. Mol. Liq.*, 175, 4–11, (2012).
3. Т.В. Тропин, **N. Jargalan**, 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 // *ФТТ*, 56(1), 147-150, (2014). (T.V. Tropin, **N. Jargalan**, M.V. Avdeev, O.A. Kyzyma, D. Sangaa, V.L. Aksenov, “The calculation of cluster size distribution functions and SANS data for C_{60} /NMP solution”, *Journal Physics of the solid state*, Vol. 56(1), pp. 148-151, (2014)).

4. **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). (**N. Jargalan**, T.V. Tropin, M.V. Avdeev, V.L. Aksenov, “Investigation of the dissolution kinetics of fullerene C_{60} in solvents with different polarities by UV-Vis spectroscopy”, Journal of surface investigation. X-ray, synchrotron and neutron techniques, Vol. 9, Issue 1, pp. 12-16, 2015.).
5. **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).

Выбор оппонентов и ведущей организации обосновывается известностью их работ в научных кругах, применением в исследованиях наиболее передовых современных методов и технологий.

Диссертационный совет отмечает, что в своей работе, соискателю удалось сочетать экспериментальное и теоретическое исследование кинетических процессов, протекающих в растворах фуллеренов C_{60} и C_{70} разной полярности. Данный подход позволил детально исследовать характер образования и роста кластеров в модельной системе C_{60} /N-метилпирролидон (НМП) и получить новую информацию о кинетических коэффициентах, их зависимости от условий приготовления, а также смоделировать эволюцию функции распределения кластеров по размерам и экспериментальных спектров малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН).

В экспериментальной части работы, диссертантом выполнено подробное исследование кинетики растворения и образования комплексов фуллерен-растворитель в растворах различной полярности, приготовленных различным образом, методом УФ-Вид спектроскопии. Для неполярных систем по эволюции пика поглощения света длиной волны 330 нм, была определена зависимость концентрации растворов C_{60} /бензол и C_{60} /толуол от времени в широком диапазоне температур и скоростей перемешивания. Показано, что данные кинетические кривые хорошо описываются законом Нойеса-Уитни. Для полярных растворов C_{60} /НМП, предло-

жена модифицированная модель растворения, учитывающая образование комплексов между молекулами фуллерена и молекулами растворителя, получены зависимости коэффициентов растворения и комплексообразования от скорости перемешивания и температуры системы.

Теоретическая значимость исследования обусловлена тем, что соискателем предложены две новые теоретические модели для системы C_{60} -НМП, которые учитывают влияние образования комплексов фуллерен-растворитель на рост кластеров C_{60} . Выполнены численные расчеты и получена эволюция функции распределения кластеров по размерам на начальном этапе кластерообразования. Поскольку дальнейшие расчеты ограничены производительной мощностью вычислительных систем, соискателем был предложен и использован метод расчета стационарных функций распределения, основанный на экстраполяции численных данных. Таким образом, выполнена качественная оценка распределения частиц в полярных растворах фуллерена на разных этапах эволюции системы.

На основании полученных функций распределения соискателем выполнено моделирование экспериментальных спектров для обеих моделей, и сравнение результатов между собой и с данными МУРН. Показано, что модель ограниченного роста кластеров, в основе которой лежит предположение о замедлении агрегации фуллерена при образовании комплексов фуллерен-растворитель, подходит для описания рассматриваемых систем.

Результаты диссертационной работы могут быть использованы в исследовательских организациях, занимающихся изучением и поиском методов применения растворов фуллерена, а также при разработке новых методов диспергирования углеродных наночастиц в различных растворителях, в том числе и в воде. Теоретические методы расчета кинетики растворения и агрегации фуллерена могут в дальнейшем применяться для описания роста кластеров и в других системах, включая дисперсии наноалмазов, бинарные системы и так далее. Дополнительно, растворы фуллеренов в НМП представляют интерес как модельные системы при переходе к описанию коллоидных водных растворов C_{60} , актуальных для медицинских и биологических применений.

Оценка достоверности результатов исследования выявила, что разработанный подход основан на общих фундаментальных принципах, не включает в себя свободные подгоночные параметры. В расчетах применяются современные численные алгоритмы, которые широко используются при моделировании радиационных эффектов в физике твердого тела. Основные приближения модели были проверены путем сравнения промежуточных результатов с независимыми источниками, принятыми в сообществе, а также с экспериментальными данными. Результаты работы опубликованы в ведущих отечественных и зарубежных журналах, входящих в список ВАК, докладывались на национальных и международных конференциях, хорошо известны специалистам в данной отрасли.

Личный вклад диссертанта - основные результаты, изложенные в диссертации, получены при непосредственном участии автора. Автор диссертации выполнял работы по приготовлению образцов, получению, обработке и анализу данных при экспериментальных исследованиях растворов фуллерена методом малоуглового рассеяния нейтронов и УФ-Вид спектроскопии. В теоретической части работы автор участвовал в разработке обсуждаемых в диссертации моделей, составлении соответствующих кинетических уравнений и программной реализации их численного решения. Также автором диссертации выполнено моделирование кривых МУРН по данным теоретических моделей.

Диссертация охватывает основные вопросы поставленной научной задачи и соответствует критериям внутреннего единства, что подтверждается анализом результатов и сравнением их с опубликованными данными и имеющимися систематиками, что подтверждает их достоверность. Выводы, сделанные в диссертации, концептуально взаимосвязаны.

Диссертационный совет пришёл к выводу о том, что диссертация представляет собой научно-квалификационную работу, которая соответствует критериям, установленным Положением о порядке присуждения ученых степеней, утвержденным постановлением, и принял решение присудить Нармандаху Жаргалану ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 21 человека, из них 7 докторов наук по профилю рассматриваемой диссертации,

участвовавших в заседании, из 25 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за присуждение ученой степени 21, против присуждения ученой степени нет, недействительных бюллетеней нет.

Председатель диссертационного совета,
академик РАН

Ю.Ц. Оганесян

Ученый секретарь
диссертационного совета

А.Г. Попеко