

ВИСНОВОК

Про наукову новизну, теоретичне та практичне значення результатів дисертаційного дослідження

Марфуніна Микити Олексійовича

«ФОРМУВАННЯ АГРЕГАТИВ ФУЛЕРЕНУ C_{70} ТА КОАГУЛЯЦІЯ ЕЛЕКТРОЛІТАМИ В РОЗЧИННИКАХ РІЗНОЇ ПРИРОДИ»

Яка подається на здобуття ступеня доктора філософії з галузі знань 10 (Природничі науки) за спеціальністю 102 (Хімія)

1. Оцінка роботи здобувача у процесі підготовки дисертації та виконання запланованої роботи.

Аспірант Марфунін М.О. виконав роботу у повному обсязі. Індивідуальний план (наукова та освітня складові) виконані вчасно. Аспірант сумлінно та якісно виконував поставлені задачі, показав високий рівень знань, наявність необхідних навичок та вміння проводити науковий експеримент.

2. Обґрунтування вибору теми дослідження.

Останнім часом фулерени увійшли до найбільш популярних хімічних сполук. Вони використовуються як у новітніх нанотехнологіях (мікроелектроніка, оптика, паливні елементи, тощо), так і у біохімії та біомедицині. Як правило, їх використання пов'язане з виготовленням та подальшим застосуванням розчинів (істинних, або таких, що містять кластери фулеренів).

Здебільшого наявні дослідження фулеренів у неводних середовищах стосуються визначення деяких фізико-хімічних параметрів (наприклад, розчинності) та агрегації (структура кластерів, наявність фрактальної структури, розмір агрегатів, оборотність агрегації чи кінетика процесу). Коагуляція фулеренів електролітами у неводному середовищі, на відміну від гідрозолів та

водних суспензій, є вкрай мало дослідженою, за цією темою працює лише відносно невелике коло науковців.

Таким чином, у рамках даної дисертаційної роботи досліджується актуальна, але тим не менш мало досліджена область, що стосується одержання та характеристик як молекулярних, так і колоїдних розчинів фулерену C_{70} у неводних розчинниках та їх сумішах.

Отже, метою дисертаційної роботи було виявлення особливостей формування агрегатів фулерену C_{70} та коагуляції електролітами в розчинниках різної природи.

3. Об'єкт та предмет дослідження

Об'єктом дослідження є розчини (істинні та колоїдні) фулерену C_{70} у розчинниках різної природи

Предмет дослідження – перебіг процесу агрегації (утворення кластерів) та коагуляції частинок фулерену у різних розчинниках під дією електролітів різних типів.

4. Основні завдання дисертаційної роботи:

1) Дослідити можливість одержання та стабільність золів у різних розчинниках та їх сумішах (у широкому діапазоні їх фізико-хімічних властивостей)

2) Дослідити коагулятивну стійкість одержаних дисперсій фулерену C_{70}

3) Проаналізувати одержані експериментальні дані з використанням сучасних підходів у рамках теорії ДЛФО:

- Виявити ключові особливості поведінки фулеренів у розчинниках різної природи

- Розрахувати константи двохчастинкової взаємодії фулерену (константи Гамакера)

- Провести порівняльний аналіз одержаних триманих результатів для різних розчинників, зробити висновок на вплив розчинника на перебіг процесів.

5. Для проведення експерименту та обробки результатів використано наступні методи та підходи:

- 1) Спектрофотометрія (спектроскопія в УФ- та видимій області): для дослідження змін, спричинених сольватацією, агрегацією та коагуляцією одержаних систем.
- 2) Динамічне розсіювання світла (ДРС): для одержання даних про розміри, електрокінетичні потенціали, а також динаміку їх змін за різних умов.
- 3) Моделювання діаграм Гамакера у рамках теорії ДЛФО: для визначення констант Гамакера, A_{FF}

6. Зв'язок роботи з науковими грантами, програмами та темами.

Наукова робота тривала у рамках наступних наукових тем, грантів та проєктів:

1. Наносистеми та нановпорядковані матеріали: дизайн, фізико-хімічні характеристики, оптимізація умов використання у високих технологіях, медицині, аналізі. НДР 0116U000834 (14.03.2016 – 31.12.2018).

2. Фундаментальні засади керування фізико-хімічними та експлуатаційними властивостями мікро- та наноструктур: теоретичне прогнозування та експериментальне вивчення. НДР 0119U002532. (01.01.2019 р. – 31.12.2021 р.).

3. Ліофільні агрегати, біосумісні золі, гібридні матеріали, фотоелектричні перетворювачі. НДР 0122U001485 (01.01.2022 р. – 31.12.2024 р.).

4. “Nanostructures: Experimental and Theoretical Studies”, 1 November 2022 – 31 October 2023. Simons Foundation, США, Номер 1030292.

5. Фундаментальні засади керування фізико-хімічними та експлуатаційними властивостями мікро- та наноструктур: теоретичне прогнозування та експериментальне вивчення. Номер державної реєстрації 0222U001940.

7. Особистий внесок дисертанта в одержання результатів

- 1) Планування експерименту – сумісно з науковим керівником
- 2) Проведення експериментальної частина – самостійно (окрім приготування гідрозолів фулерену C_{70} , проведеного сумісно з Клочковим В.К; описано в дисертаційній роботі)
- 3) Аналіз та візуалізація одержаних результатів (моделювання діаграм Гамакера, розрахунок констант Гамакера, побудова графіків та діаграм, тощо)
- 4) Обробка результатів – аналіз та формування висновків: сумісно з науковим керівником

8. Обґрунтованість та достовірність одержаних результатів

Експериментальна частина дослідження проведена на сучасному обладнанні з використанням науково визнаних методів та підходів. Умови проведення експерименту зафіксовано та описано. Це забезпечує можливість простежування та перевірки отриманих результатів.

Обробка результатів проведена з використанням обґрунтованих методів та підходів до проведення розрахунків. Результати аналізу даних також порівняно з даними інших авторів та поточними загальними науковими уявленнями про процеси, що протікають у подібних до вивчених системах.

Таким чином, отримані результати є обґрунтованими та достовірними.

9. Новизна одержаних результатів

1) Виявлено явище вибіркової сольватації молекул фулерену C_{70} (у тому числі у складі агрегатів) ароматичними та оснóвними компонентами змішаних розчинників.

2) Запропоновано новий метод отримання стабільних дисперсій фулеренів у «поганих» оснóвних розчинниках ДМСО та ДМФА, а також гібридних органогідрозолів. Досліджено особливості стійкості таких дисперсій з плином часу та під дією електролітів.

3) Вперше досліджено агрегативну стійкість і коагуляцію електролітами агрегатів фулерену C_{70} в органічних розчинниках. В той час як пороги швидкої коагуляції в ацетонітрилі і метанолі на три порядки менші ніж у воді, в ДМСО стабільність дисперсій фулеренів спостерігається на рівні такої для гідрозолів.

4) Розроблено новий підхід до визначення констант Гамакера, для фулеренів, що дозволило стверджувати про наявність додаткового стабілізуючого фактору в разі гідрозолів та одержати більш точні значення констант Гамакера.

10. Наукове, теоретичне та практичне значення одержаних результатів

1) Одержані відомості про електрокінетичні потенціали (в тому числі можливість перезарядження колоїдних агрегатів) можуть бути використані для прогнозування транспортних властивостей та поведінки фулеренів у електрохімічних процесах.

2) Запропоновано метод отримання золів у ДМСО та сумішах ДМСО–вода, які є досить стабільними та нетоксичними, що потенційно може бути використано у медицині.

3) Підхід до оцінювання констант Гамакера, розроблений на прикладі фулеренів, дозволить покращити розуміння та прогнозування стабільності золів інших нановуглецевих структур (вуглецеві нанотрубки, графен, наноалмази).

11. Публікація та апробація результатів дослідження

Усі найважливіші аспекти дисертації було опубліковано.

Наукові праці, в яких опубліковані основні наукові результати дисертації, у періодичних наукових виданнях держав, що входять до міжнародних наукометричних баз Scopus або Web of Science

- 1 Mchedlov-Petrosyan M.O., Marfunin M.O. Formation, Stability, and Coagulation of Fullerene Organosols: C₇₀ in Acetonitrile–Toluene Solutions and Related Systems. / *Langmuir*, 2021. 37 (23), 7156–7166. <https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.1c00722>
- 2 Mchedlov-Petrosyan N.O., Marfunin M.O., Tykhonov V.O., Shekhovtsov S.V. Unexpected Colloidal Stability of Fullerenes in Dimethyl Sulfoxide and Related Systems / *Langmuir*, 2022. 38 (32), 10000–10009 <https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.2c01408>

Наукові праці, в яких опубліковані основні наукові результати дисертації, у фахових періодичних наукових виданнях, що не входять до міжнародних наукометричних баз

- 1 Mchedlov-Petrosyan N.O., Marfunin N.A. Behavior of fullerene C₇₀ in binary organic solvent mixtures as studied using UV-Vis spectra and dynamic light scattering. / *Kharkiv University Bulletin. Chemical Series*, 2019. (33), 77-87. <https://doi.org/10.26565/2220-637X-2019-33-06>
- 2 Mchedlov-Petrosyan N.O., Marfunin M.O., Klochkov V.K., Radionov P.M. Hydrosol of C₇₀ fullerene: synthesis and stability in electrolytic solutions. / *Ukrainian Chemistry Journal*, 2021. 87 (10), 63-73. <https://doi.org/10.33609/2708-129X.87.10.2021.63-73>
- 3 Mchedlov-Petrosyan, N.; Marfunin, M.; Kriklya, N.N. Colloid Chemistry of Fullerene Solutions: Aggregation and Coagulation / *Liquids* 2024, 4, 32-72. <https://doi.org/10.3390/liquids4010002>

За темою дисертації опубліковано 2 тез доповідей.

1. Марфунин Н.А. Агрегативная устойчивость фуллерена C70 в смешанном растворителе ацетонтрил-толуол // *Science, society, education: topical issues and development prospects. Abstracts of the 1st International scientific and practical conference. SPC "Sci-conf.com.ua"*. Kharkiv, Ukraine. 2019. Pp. 167-172.

2. Marfunin M., Tykhonov V. Unexpected stability of fullerenes sols in dimethyl sulfoxide and N,N-dimethylformamide // *Modern research in world science. Proceedings of the 5th International scientific and practical conference. SPC "Sci-conf.com.ua"*. Lviv, Ukraine. 2022. Pp. 157 – 163.

Участь з доповіддю "The fullerene C70 colloidal properties: aggregation, coagulation" на міжнародній конференції «Chance for Science», 08-09 Dec. 2020, Universität Leipzig, Німеччина

12. Оцінка структури, мови та стилю дисертації.

Матеріал дисертації викладено структуровано та логічно, поділ дисертації на розділи відповідає тематичним напрямкам дослідження. Дисертація написана науковим стилем мовлення. Структура та оформлення дисертаційної праці відповідає поточним вимогам.

13. Відповідність змісту дослідження спеціальності, за якою дисертація подається на захист

Дисертаційне дослідження повністю відповідає вимогам спеціальності 102 (Хімія), за якою дисертація подається на захист.

14. Дотримання академічної доброчесності

Текст дисертації було перевірено на наявність плагіату. Згідно до отриманих результатів перевірки, дисертаційна робота відповідає вимогам академічної доброчесності.

15. Результати презентації дослідження та обговорення. Рекомендація дисертації до захисту.

Здобувач представив своє дослідження на розширеному засіданні кафедри фізичної хімії хімічного факультету Харківського національного університету імені В.Н. Каразіна. Результати роботи було подано у формі презентації з доповіддю.

На засіданні були присутні 11 осіб: доповідач, співробітники кафедри та рецензенти.

Доповідачу було поставлено 7 запитань, на які він надав відповіді.

Рецензенти, Водолазька Н.О. та Кириченко О.В, виступили з коментарями та зауваженням. Також вони надали схвальні відгуки на дисертаційну роботу.

У рамках розширеного засідання кафедри (протокол № 8 від 18.04.2024 р.) було ухвалено рішення про рекомендацію дисертаційної роботи аспіранта Марфуніна М.О. «Формування агрегатів фулерену C_{70} та коагуляція електролітами в розчинниках різної природи» до захисту на здобуття наукового ступеню доктора філософії за спеціальністю 102 – Хімія (Галузь знань 10 – Природничі науки).

Усього присутніх: 10

За: 10

Проти: 0

Утримались: 0

Головуючий

к.х.н., доцент

Олександр ЛЕБІДЬ