

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Шеберстова Кирилла Федоровича «Долгоживущие состояния в системах ядерных спинов, близких к эквивалентности», представленной на соискание степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.17 – Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Исследование долгоживущих квантовых состояний применительно к спектроскопии ЯМР является актуальной задачей, решение которой приведет к более детальному пониманию многообразия релаксационных процессов в сложных спиновых системах, а так же может стимулировать развитие новых экспериментальных подходов к изучению медленных физико-химических процессов. Данная диссертационная работа посвящена исследованию долгоживущих синглетных спиновых состояний в системах, близких к эквивалентности. Этот класс систем представляется наиболее перспективным для применения, например, в качестве спиновых меток, поскольку синглетное состояние пары спинов в них может быть сгенерировано “на месте” без дополнительных химических реакций или усложнений эксперимента, таких как циклирование поля или мощный спин-локинг.

К наиболее важным результатам работы можно отнести:

1. Разработан метод двумерной деконволюции сигнала по сигналу эталона, что позволяет измерять константы спин-спиновых взаимодействий в многоспиновых взаимодействиях в присутствии неоднородности поля  $B_0$  и в условиях перекрывания резонансных линий. Опубликованы компьютерные программы для деконволюции и анализа спектров по форме линии.
2. Усовершенствован экспериментальный протокол измерения времен релаксации синглетных состояний. Использование ЯМР вкладышей, ограничивающих выход молекул, несущих синглетный порядок, за пределы активной области катушки, позволяет избежать искажений релаксационных кривых и, в то же время, не ухудшает спектральное разрешение из-за краевых эффектов неоднородности поля  $B_0$ . Кроме того, было предложено использовать преднасыщающий импульс SLIC для разрушения остаточного синглетного порядка между отдельными сканами при релаксационных измерениях. Данный подход ускоряет эксперимент и устраняет потенциальные искажения кинетики затухания сигнала.
3. Экспериментально измерены времена жизни долгоживущего состояния спинов  $^{15}\text{N}$  в азобензоле. При этом время синглетной релаксации превысило константу  $T_1$  в 250 раз. Показана зависимость времени жизни синглетного состояния от симметрии возмущающих взаимодействий, приводящих к спиновой релаксации.
4. Приведенный теоретический анализ показал, что максимальные степени конверсии для адиабатических методов генерации синглетного порядка на десятки

процентов выше, по сравнению с широко используемыми резонансными методами SLIC и M2S.

5. Предложены методы для генерации внутренней и внешней синглет-триплетных когерентностей в производной нафталина  $^{13}\text{C}_2\text{-I}$  для пары спинов  $^{13}\text{C}$ , близких к эквивалентности. Показано, что время жизни этих состояний также может превышать соответствующее время продольной релаксации в несколько раз.

Основные результаты работы опубликованы в ведущих физических журналах, таких как Physical Chemistry Chemical Physics, Journal of Chemical Physics, Journal of Magnetic Resonance, Magnetic Resonance in Chemistry, Applied Magnetic Resonance, и представлены на многочисленных международных и российских конференциях.

К недостаткам автореферата можно отнести использование жаргонизмов, например "...схем детектирования ... по каналу азотов", и ряд опечаток, что, однако, не ведет к ухудшению качества изложения.

Диссертационная работа, выполненная К. Ф. Шеберстовым, является существенным вкладом в развитие спектроскопии долгоживущих квантовых состояний. К. Ф. Шеберстов выполнил большой объем экспериментальной и теоретической работы и успешно использовал вычислительные методы для интерпретации своих результатов. Публикации полностью отражают основные результаты работы.

Научная новизна и актуальность диссертации, а также достоверность результатов не вызывают сомнений.

Диссертационная работа Шеберстова Кирилла Федоровича как по объему проведенных исследований, так и ценности полученных научных результатов удовлетворяет требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям согласно п. 9 Положения ВАК о присуждении учёных степеней (утверждённым постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. № 842), а ее автор заслуживает присуждения искомой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.17 – Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Научный сотрудник лаборатории биомолекулярного ЯМР

Санкт-Петербургского государственного университета,

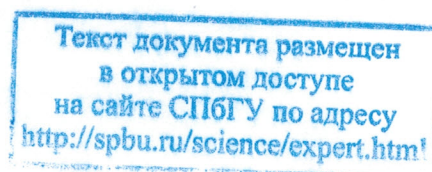
198504, г. Санкт-Петербург, ул. Ботаническая 17.

e-mail: [b.kharkov@spbu.ru](mailto:b.kharkov@spbu.ru)

к. ф.-м. н. по специальности 01.04.11 –

Физика магнитных явлений.

Борис Борисович Харьков



ДОКУМЕНТ  
ПОДГОТОВЛЕН  
ПО ЛИЧНОЙ  
ИНИЦИАТИВЕ