

ОТЗЫВ

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

Работа К. Ф. Шеберстова посвящена изучению долгоживущих состояний ядерных спинов, в ней предложен ряд методов для усовершенствования эффективности создания таких состояний, исследованы долгоживущие состояния в спиновых парах, близких к эквивалентности, а также разработан ряд новых теоретических моделей. Физика долгоживущих спиновых состояний – активно развивающаяся область спектроскопии ЯМР и МРТ. Возможность сохранять и манипулировать спиновыми порядками на временах, существенно превышающих характерные времена релаксации ядерной намагниченности, открыла возможность для изучения целого ряда медленных процессов с помощью ЯМР, таких как диффузионные процессы, медленный химический обмен и конформационные превращения в белках. Также долгоживущие состояния используются для сохранения ядерной спиновой гиперполяризации.

В работе изучались молекулы, обладающие рекордными временами жизни спиновых состояний ядер – время релаксации синглетного состояния спинов ^{13}C в изученном производном нафталина в слабых полях превышает час в жидкости при комнатной температуре. К.Ф. Шеберстовым были развиты методы для эффективной генерации синглетно-триплетных когерентностей в спиновых парах, близких к эквивалентности. Эти методы позволили наблюдать нуль-квантовую когерентность в упомянутом производном нафталина со временем жизни более 3 минут, что превысило соответствующее время T_1 в несколько раз. Стоит отметить, что этот феномен интересен сам по себе, однако он может найти и практическое применение: когерентность с таким долгим временем жизни позволяет устанавливать значение константы спин-спинового взаимодействия с беспрецедентной точностью, что в свою очередь может быть использовано для зондирования малых изменений в химическом окружении.

Для изучения долгоживущих состояний в изомерах ^{15}N азобензола были:

- 1) Установлены значения констант спин-спинового взаимодействия в *цис*- и *транс*-азобензолах с использованием методов анализа спектров ЯМР по полной форме линии, разработанных автором.

- 2) Построены модели, описывающие создание синглетных состояний в системах типа $AA'X_2X'_2$ и рассчитаны максимальные степени конверсии намагниченности в синглет, достижимые при унитарных преобразованиях (РЧ импульсами ЯМР).
- 3) Экспериментально показано наличие в молекуле *транс*-азобензола долгоживущих состояний с временами релаксации T_s до 20 минут в сильных магнитных полях (до 16.4 Тл). Важной особенностью данных синглетных состояний является возможность их создания за счёт намагниченности связанных с ними спинов *орто*-протонов.
- 4) Обнаружена возможность создания спиновой гиперполяризации методом SABRE, что позволило усилить ЯМР сигналы в тысячи раз в *цис*-азобензоле.

Помимо этого в ходе работы были разработаны и опубликованы компьютерные программы по обработке спектров ЯМР для: (i) анализа спектров многоспиновых систем по полной форме линии (продемонстрирован анализ спектров системы, включающей 23 связанных спина), (ii) метод двумерной деконволюции по сигналу эталона и (iii) программа для автоматического сравнения качества двумерных спектров. По результатам диссертации было опубликовано 7 научных статей в рецензируемых международных научных журналах, входящих в перечень ВАК.

Работа К.Ф. Шеберстова полностью удовлетворяет условиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям, изложенным в п. 9 «Положении о присуждении ученых степеней», утвержденном Постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. № 842. Автор работы, Кирилл Федорович Шеберстов заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Колягин Юрий Геннадьевич

Кандидат химических наук по специальности 02.00.15 – Катализ, старший научный сотрудник лаборатории Кинетики и катализа кафедры физической химии Химического факультета федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова» 119991, Москва, Ленинские горы, дом 1, строение 3, ГСП-1, МГУ, химический факультет

Согласен на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета и дальнейшую обработку

Тел. +7(495) 939-20-54

Email: kolyagin@mail.ru

«09» октября 2019 г.

Колягин

