

Отзыв

**на автореферат диссертационной работы Жукова Ивана Владимировича
«Динамика спинов ядер в диамагнитных гетероядерных спиновых системах, в
бирадикальных интермедиах и продуктах фотоиндуцированных реакций в
переключаемых магнитных полях»,
представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических
наук по специальности 1.3.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика
экстремальных состояний вещества**

Работа Жукова Ивана Владимировича посвящена развитию новых методов ядерного магнитного резонанса, в которых использование высоких магнитных полей (до 9.4 Тл) комбинируется с использованием ультраслабых полей (менее 1 мкТл). Первая часть работы посвящена изучению ранее малоизученных гетероядерных долгоживущих состояний, формируемых между спинами протонов и углерода-13. Соискателем были впервые обнаружены такие состояния в изотомерах метилпропиолата, и продемонстрированы долгоживущие нуль квантовые когерентности между спинами ^1H - ^{13}C . Построенная с участием соискателя установка характеризуется высокой стабильностью. Особенно важным для всех экспериментов, представленных в диссертации, было то, что время механического переноса образца между слабым и высоким полем контролировалось с высокой точностью (точнее, чем 1 мс), а также, что механический перенос был синхронизован с выполнением импульсных последовательностей в ЯСР спектрометре. Это, в частности, позволило соискателю измерять биения спиновой намагниченности в слабых полях с частотами порядка 100 Гц по интенсивностям сигналов ЯМР в сильном поле спектрометра (9.4 Тл, 400 МГц ^1H). Данная установка использовалась для всех дальнейших экспериментов, изложенных в автореферате, она также была модифицирована соискателем для проведения фотохимических реакций.

Далее излагается новый метод гетероядерного эксперимента TOCSY, который существенно упрощает процедуру установления молекулярных структур по сравнению с другими ЯМР методиками. Разработанный метод был запатентован в соавторстве с соискателем; гетероядерный метод TOCSY представляется особенно полезным для анализа сложных биологических смесей. Следующая часть работы посвящена сопоставлению двух возможных реализаций эксперимента ЯМР в нулевых полях. Метод прямого детектирования атомными магнетометрами был сравнен с методом непрямого детектирования в экспериментах с циклированием поля. Показаны преимущества последнего подхода, заключающиеся в существенно более высокой чувствительности и наличии информации о химических сдвигах ЯМР-сигналов. Подобное сравнение ранее не проводилось; интересно, чем вызваны различия в спектрах содержащих ^{13}C изотопы метанола и этанола, показанные на рисунке 5.

Две последние работы, изложенные в автореферате Ивана Владимировича, посвящены изучению фотоиндуцируемых реакций переноса электрона в бирадикалах. Проведенные измерения полевых зависимостей химической поляризации ядер в полях порядка 0.1÷100 мТл позволили автору установить знак обменного взаимодействия в флавинадениндинуклеotide, а также провести конформационный анализ данного короткоживущего радикала. Однако вызывает вопрос, почему для моделирования

полевых зависимостей рассматривались «отсеченные» функции нормального распределения, кажущиеся неправдоподобными (см. рисунок 10 автореферата). В финальной части работы была изучена серия модельных диад донор-линкер-акцептор с различными заместителями, были установлены значения констант сверхтонкого взаимодействия и знаки обменных констант в данных соединениях.

Проведенная Иваном Владимировичем работа велика и наукоемка, она требовала от соискателя владения многими методами химической физики, а также навыков математического моделирования и инженерии. Международный уровень данных исследований подтверждается наличием 7 публикаций в признанных международных журналах по химической физике, а также наличием одного патента Российской Федерации. Результаты работы были представлены на многочисленных российских и международных конференциях. Актуальность, новизна и содержательность работы не вызывают никаких сомнений. Считаю, что диссертационная работа «Динамика спинов ядер в диамагнитных гетероядерных спиновых системах, в бирадикальных интермедиатах и продуктах фотоиндуцированных реакций в переключаемых магнитных полях» соответствует квалификационным требованиям ВАК, предъявляемых к кандидатским диссертациям, в частности отвечает п.9 "Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г. (в ред. Постановлений Правительства РФ от 21.04.2016 № 335, от 02.08.2016 № 748, от 29.05.2017 №650, от 28.08.2017 №1024, от 01.10.2018 №1168, от 20.03.2021 № 426, от 11.09.2021 № 1539)", а её автор, Жуков Иван Владимирович, безусловно заслуживает присвоения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

12 декабря 2021 года

Шеберстов Кирилл Федорович

Кандидат физико-математических наук

Специальность 01.04.17 - химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Научный сотрудник (Postdoctoral research fellow)

Лаборатория биомолекул LBM, химический факультет, Высшая Нормальная Школа (Париж);

PSL, Университет Сорбонна, CNRS

75005 Париж, Франция

Телефон: +33 6 99 83 01 42

Электронная почта: kirill.sheberstov@ens.psl.eu

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