

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации 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**

Представленная работа посвящена экспериментальному и теоретическому исследованию спиновой динамики в связанных спиновых системах в переключаемых магнитных полях. В роли изучаемых объектов выступают гиперполяризованные ядерные системы нескольких типов, которые надлежащим выбором внешнего магнитного поля переводятся в режим сильной связи ядерных спинов, когда базисом спиновой системы становятся коллективные спиновые состояния нескольких ядер и неравновесная ядерная населенность переносится с исходно поляризованных спинов на скалярно связанные с ними другие ядра, а для детектирования затем используется ЯМР высокого разрешения с обратным переносом спиновой системы в сильное магнитное поле и ее возвращением в привычный зеемановский базис. Эти работы являются следующим этапом развития методологии ЯМР с гиперполяризацией ядерных спиновых систем, в значительной мере решившей проблему низкой чувствительности ЯМР за счет создания близкой к 1 разности населенности ядерных спинов подуровней. Перевод же гиперполяризованной по ядрам какого-либо одного типа спиновой системы в режим сильной связи позволяет донести эту поляризацию до других, исходно недоступных ядер, причем только ядер, скалярно связанных с уже имеющим поляризацию ядром, что резко повышает информативность ЯМР исследований при сохранении достигнутой высокой чувствительности. Ярким примером этого является продемонстрированный в данной работе метод ZULF-TOCSY, позволивший полностью восстановить сеть скалярно связанных спинов в довольно сложной многоспиновой ядерной системе в растворе с небольшой концентрацией изучаемых молекул. Такие исследования находятся на переднем крае современной спектроскопии ЯМР, а их результаты очень востребованы во всех областях, где ЯМР используется как неинвазивный физико-химический метод исследования, от медицинской томографии до материаловедения, и своевременность и востребованность предпринятого в диссертации исследования не вызывают никаких сомнений. Коллектив, в котором работает автор, является одним из признанных и активно работающих мировых лидеров в области развития ЯМР и смежных задач спиновой динамики в плане концептуального продвижения, экспериментальной техники и теоретического описания, так что корректность выбранных для проводимого исследования этого методов и подходов также не вызывает никаких сомнений.

В представленной работе проведен весьма значительный объем экспериментальных исследований и их теоретического моделирования, и автор продемонстрировал свою квалификацию во всех ключевых аспектах современного физико-химического исследования, от доработки готового очень сложного прибора под проведение конкретного нового эксперимента до формулировки адекватной для поставленного эксперимента упрощенной теоретической модели, уже проходимой для численного расчета на доступных вычислительных мощностях. Работа весьма логично поставлена и выполнена. Отдельно хочу отметить умение автора работать в коллективе и взаимодействовать с коллегами-специалистами разного профиля, и затем корректно такое взаимодействие указывать при

представлении результатов. Я не вижу необходимости пересказывать и разбирать здесь конкретные результаты, поскольку работа очень хорошо опубликована и апробирована. Однако я хотел бы выделить один полученный в работе результат, который я считаю особенно ценным, хотя в общем изложении он и не акцентирован: демонстрацию положительности обменного интеграла в изученных жестких мостиковых диадах с фоторазделением заряда. Проблема «положительного обмена» в бирадикалах висела в воздухе много лет без, насколько мне известно, особого продвижения, и в работе автора впервые удалось удовлетворительно ее разрешить, поскольку оказалось возможным явно определить, происходит пересечение синглетного состояния с T_+ или T триплетным подуровнем в короткоживущем бирадикале – они приводят к индуцированной ядерной поляризации противоположного знака.

Результаты проведенных исследований опубликованы в профильных международных физико-химических журналах и неоднократно докладывались на конференциях. Считаю, что диссертационная работа «Динамика спинов ядер в диамагнитных гетероядерных спиновых системах, в бирадикальных интермедиатах и продуктах фотоиндуцированных реакций в переключаемых магнитных полях» соответствует требованиям п. 9 «Положения о порядке присуждения 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), предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, и является научно-квалификационной работой, в которой решена задача развития экспериментальных и теоретических подходов к исследованию скалярно связанных гиперполяризованных ядерных систем в переключаемых магнитных полях, что может быть использовано для повышения чувствительности и информативности широкого спектра приложений ЯМР в самых разных областях науки, технологии и медицины, а ее автор, Жуков Иван Владимирович, заслуживает присуждения ему искомой ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 - химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Стась Дмитрий Владимирович,
К.ф.-м.н., специальность 01.04.17 - химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества,
доцент, старший научный сотрудник Лаборатории быстропротекающих процессов
Федерального государственного бюджетного учреждения науки
Института химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского
Сибирского отделения Российской академии наук
630090, Новосибирск, Институтская ул., 3; <http://www.kinetics.nsc.ru/>
Телефон (раб.): (383) 333 1561, электронная почта: stass@ns.kinetics.nsc.ru
15 декабря 2021 г.

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

Подпись Стась Д.В. удостоверение



Ученый секретарь
ИХКГ СО РАН
К.Ф.-М.Н.
Пыряева А.П.