

## ОТЗЫВ НАУЧНОГО РУКОВОДИТЕЛЯ

о диссертационной работе Жукова Ивана Владимировича  
«Динамика спинов ядер в диамагнитных гетероядерных спиновых системах, в бирадикальных интермедиатах 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

Жуков Иван Владимирович работает в лаборатории фотохимических радикальных реакций МТЦ СО РАН с 2017 года, где успешно выполнил сначала магистерскую, а затем аспирантскую квалификационную работу. С 2017 по 2021 год он проходил обучение в аспирантуре Новосибирского государственного университета. Диссертационная работа Ивана Владимировича посвящена развитию методов спектроскопии ЯМР высокого разрешения с переключением магнитного поля, и применению этих методов для исследования динамики спинов ядер в диамагнитных гетероядерных спиновых системах в широком диапазоне индукции магнитного поля, в особенности в ультраслабом магнитном поле, и в короткоживущих бирадикалах – интермедиатах фотоиндуцируемых химических реакций.

За время работы в лаборатории он освоил экспериментальные и численные методы исследования методом спектроскопии ЯМР высокого разрешения с переключением внешнего магнитного поля и научился успешно их использовать применительно различным системам. Он принимал самое активное участие на всех этапах научной работы - от постановки задачи и проведения экспериментов до интерпретации результатов и написания статей. Его отличает упорство и тщательность в постановке и проведении экспериментов и расчетов, интерпретации результатов, хорошее знакомство с литературными данными, широкая эрудиция. Результаты его работ опубликованы в высокорейтинговых международных журналах. Необходимо также отметить, что, будучи аспирантом, в 2018 году он являлся стипендиатом посольства Франции в России по программе им. М.В. Остроградского, 2019-2021 году – исполнителем гранта РФФИ «Аспиранты», в 2021 году – лауреатом стипендии президента РФ.

Первая часть работы посвящена развитию методов спектроскопии ЯМР высокого разрешения с переключением магнитного поля. При непосредственном участии Жукова И.В. проводилась работа по запуску и наладке уникальной установки ЯМР высокого разрешения с переключением внешнего магнитного поля в беспрецедентно широком диапазоне – от 5 нТл до 9.4 Тл. В одной из первых серий экспериментов на этой установке им обнаружено формирование долгоживущих состояний в спиновых системах  $^{13}\text{C}$ - $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$ - $^1\text{H}_3$  метилпропиолата. Под руководством д.ф.-м.н. К.Л. Иванова реализован способ численного моделирования проявления долгоживущих состояний в ЯМР спектре в сильном поле, разработан косвенный способ получения спектров ЯМР в нулевом поле, выявляющий корреляцию между сигналами в спектре ЯМР высокого разрешения и спектрами ЯМР нулевого поля, а также разработан и запатентован в РФ новый способ получения двумерных корреляционных спектров ЯМР для полной корреляции сигналов ЯМР всех магнитных ядер с использованием изотропного смешивания спинов в ультраслабом поле – ZULF TOCSY.

Во второй части работы метод химической поляризации ядер (ХПЯ) применяется для исследования двух типов короткоживущих бирадикалов, образующихся при внутримолекулярном фотоиндуцированном переносе электрона. Дополнение уникальной установки ЯМР высокого разрешения с переключением магнитного поля, позволяющее проводить эксперименты с облучением образца в стандартной ЯМР ампуле в произвольном

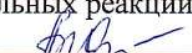
магнитном поле при помощи компактного светодиода, было самостоятельно разработано и реализовано Жуковым И.В.

Первый из двух типов бирадикалов это фотогенерируемый бирадикал флавинадениндинуклеотида (ФАД) – кофактор светочувствительных пептидов, встречающихся в фоторецепторах растений и животных. В своей работе в МТЦ СО РАН Жуков И.В. экспериментально и теоретически изучал динамику спинов электронов и ядер в короткоживущем бирадикале ФАД после фотоиндуцированного переноса электрона, по эффекту ХПЯ наблюдаемого методом ЯМР высокого разрешения с переключением поля. Наблюдаемый на протонах аденина ФАД эффект ХПЯ убедительно доказывает участие аденина в фотоиндуцированных процессах. Моделирование полевой зависимости ХПЯ протона А8 ФАД позволило установить параметры обменного взаимодействия и вид функции распределения по расстояниям между радикальными центрами в короткоживущем бирадикале ФАД.

Жуковым И.В. также была изучена спиновая динамика во втором типе бирадикалов, отличающихся от бирадикала ФАД жесткой пространственной структурой: диадах «донор-линкер-акцептор» D-X-A, перспективных соединений для создания фотоэлектрических преобразователей. Жуковым И.В. были получены уникальные данные о знаке обменного взаимодействия и о роли СТВ в спиновой динамике бирадикальных интермедиатов фотониндуцируемых реакций. Данные о зависимости ХПЯ от магнитного поля и результаты численного моделирования, полученные Жуковым И.В., позволили установить, что эффект ХПЯ во всех изученных диадах формируется по минорному триплетному каналу. Определён положительный знак обменного взаимодействия, получена информация о СТВ с протонами и делокализации электронной спиновой плотности по углеродному остову молекулы в состоянии с разделением заряда.

По теме диссертации Иваном Владимировичем опубликовано 7 статей в рецензируемых изданиях, а разработанный при его активном участии «способ полной корреляционной спектроскопии ЯМР со смешиванием спинов ядер в ультраслабом магнитном поле» зарегистрирован в качестве изобретения в Роспатенте. В настоящий момент в соавторстве с коллегами им опубликовано всего 11 статей, из них 9 статей в рецензируемых изданиях, входящих в базы данных Scopus и Web of Science.

Считаю, что он достиг уровня, позволяющего вести самостоятельную научную деятельность. Диссертация Жукова Ивана Владимировича соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям по специальности 1.3.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества, а ее автор – присуждения степени кандидата физико-математических наук.

Научный руководитель  
Доктор физико-математических наук  
г.н.с. лаборатории фотохимических радикальных реакций  
Юрковская Александра Вадимовна / 

Федеральное государственное  
бюджетное учреждение науки  
Институт «Международный томографический центр»

Сибирского отделения  
Российской академии наук (МТЦ СО РАН)  
ул. Институтская 3а, Новосибирск  
630090, Россия  
Тел.: (383) 333-13-33  
Эл. почта: [yurk@tomo.nsc.ru](mailto:yurk@tomo.nsc.ru)  
13 сентября 2021 г.

Подпись Юрковской А.В.  
заверяю.  
Ученый секретарь МТЦ СО РАН  
к.х.н. Л.В. Яныцкая

13.09.2021

