

ОТЗЫВ

официального оппонента д.ф.-м.н., профессора Фельдмана Эдуарда Беньяминовича на диссертацию Жукова Ивана Владимировича «Динамика спинов ядер в диамагнитных гетероядерных спиновых системах, в бирадикальных интермедиатах и продуктах фотоиндуцированных реакций в переключаемых магнитных полях», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 «химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества»

Диссертация Жукова Ивана Владимировича посвящена развитию методов спектроскопии ЯМР высокого разрешения с переключением внешнего магнитного поля для изучения спиновой динамики в слабых и ультраслабых магнитных полях. Интерес к теме диссертации непосредственно связан с исключительно важной проблемой повышения чувствительности в спектроскопии ЯМР. В равновесных условиях величина спиновой поляризации, в конечном счете определяющая чувствительность, чрезвычайно мала (порядка 10^{-4}). Поэтому диссертационная работа И.В. Жукова, в которой разрабатываются новые методы многомерной корреляционной спектроскопии ЯМР, комбинирующие свойства ЯМР в сильном и в нулевом поле, безусловно, является актуальной. Важнейшим результатом представленной диссертации является проведенное исследование свойств долгоживущих гетероядерных состояний, а также нуль-квантовых когерентностей в ультраслабом магнитном поле в ряде спиновых систем, что весьма существенно в связи с работами по созданию квантового компьютера.

Диссертационная работа изложена на 121 странице машинописного текста, содержит 41 рисунок и 6 таблиц. Работа состоит из введения, обзора литературы (глава 1), описания методов исследования (глава 2), результатов и обсуждения (глава 3), заключения, основных результатов и выводов, списка используемых сокращений, списка цитируемой литературы из 136 наименований и одного приложения.

Во введении автор обосновывает актуальность исследований, проведенных при выполнении диссертационной работы, формулирует цели и задачи работы, научную новизну и практическую значимость проведенных исследований. Приводятся также сведения об апробации и публикации полученных результатов, формулируются положения, выносимые на защиту.

Первая глава диссертации представляет собой подробный обзор литературы,

который, в основном, посвящен физическим основам используемых методов. И.В. Жуков дает ясную и полезную трактовку долгоживущих состояний ядерных спинов, подробное описание методов ЯМР в нулевом поле. Подробно проанализирована химическая поляризация ядер в реакциях с участием короткоживущих бирадикалов. Особое внимание уделено механизмам формирования химической поляризации ядер в продуктах фотоиндуцированных химических реакций. Представляет методический интерес краткий обзор методов моделирования химической поляризации ядер в бирадикалах.

Во второй главе автор представил подробное описание методов проведенных исследований. Подробно описана установка ЯМР с быстрым переключением поля в ультра-широком диапазоне магнитных полей. Эксперименты проведены на ЯМР спектрометре высокого разрешения Bruker Avance III HD, оснащенный устройством для переключения магнитного поля. Существенно, что в разработке этого принципиального устройства принимал участие диссертант. Автор подробно и тщательно описывает экспериментальную организацию переключения поля от 9.4 Тл до ультра-слабых величин магнитного поля на разработанной установке. Ряд методических находок был найден И.В.Жуковым при измерении полевой зависимости эффекта химической поляризации ядер. Автор описывает также методику приготовления образцов, использованных для проведенных исследований.

Третья глава диссертации является наиболее интересной и посвящена полученным автором оригинальным результатам. И.В. Жукову удалось зарегистрировать долгоживущие состояния в ультраслабом магнитном поле в ^{13}C - ^1H и ^{13}C - $^1\text{H}_3$ фрагментах метилпропиолата. И.В. Жуков установил, что основным механизмом релаксации углерода-13 в этих фрагментах является модуляция локального поля, создаваемого магнитными моментами протонов, из-за стохастической переориентации молекулы в растворе. Автор показал, что для конверсии разницы населённостей состояний сильного поля в гетероядерное долгоживущие состояние, переключение поля должно производиться адиабатически. И.В. Жуков получил очень интересный результат, состоящий в том, что в результате адиабатического переключения магнитного поля, действующего на вещество в растворе, фрагменты молекулы которого содержат магнитные ядра разных изотопов в положениях с высокой пространственной симметрией от нескольких тесла до

ультраслабого поля порядка 100 нТл и слабее, возможно спонтанное формирование долгоживущих гетероядерных состояний спинов. Отметим также разработку диссертантом косвенного способа получения спектров ЯМР в нулевом поле, что позволило провести исследование поведения гетероядерных нуль-квантовых когерентностей в ультраслабом поле в ряде спиновых систем. Также, разработан и запатентован способ полной корреляции сигналов всех магнитных ядер в стандартном спектре ЯМР высокого разрешения с использованием изотропного смешивания спинов в ультраслабом поле.

Основные результаты работы опубликованы в семи статьях в международных журналах первого и второго квартилей. По результатам диссертации получен патент Российской Федерации на изобретение. Автор выступал на ряде международных научных конференций с устными докладами, что подтверждает достоверность и обоснованность полученных результатов.

Диссертация достаточно хорошо оформлена, написана ясным и четким языком, схемы и рисунки адекватно иллюстрируют изложенный материал. Автор продемонстрировал высокий уровень экспериментальной и теоретической подготовки по спектроскопии ЯМР высокого разрешения и спиновой химии.

Представленная работа носит самостоятельный законченный характер и вносит важный вклад в развитие методов ЯМР высокого разрешения с переключением внешнего магнитного поля. Автор разработал косвенный способ получения спектров ЯМР в нулевом поле, выявляющий корреляцию между сигналами в спектре ЯМР высокого разрешения и спектрами ЯМР нулевого поля. Новизна работы не вызывает сомнений.

Автореферат правильно и полно отражает содержание диссертации.

В качестве одного из недостатков можно отметить неточность в Главе 1(стр.14), где члены гамильтониана $\Gamma x, i \cdot \Gamma x, j + \Gamma y, i \cdot \Gamma y, j$ названы несекулярными. Они действительно являются несекулярными в случае слабой связи, и не являются такими в случае сильной связи.

Описание применения теоретических методов обработки экспериментальных данных дано в очень сжатой форме (например, Глава 3, стр. 99), что не позволяет проследить за деталями примененных подходов.


Указанные недостатки носят рекомендательный характер и ни в коей мере не умаляют общей высокой оценки проведенного исследования.

Выполненная соискателем работа соответствует паспорту специальности 1.3.17 –химическая физика, физика горения, физика экстремальных состояний вещества по **формуле специальности и областям исследования** пп. 1,5.

Заключение по диссертационной работе

На основании вышеизложенного можно заключить, что диссертационная работа Жукова Ивана Владимировича «Динамика спинов ядер в диамагнитных гетероядерных спиновых системах, в бирадикальных интермедиатах и продуктах фотоиндуцированных реакций в переключаемых магнитных полях» по актуальности темы, научной новизне, практической значимости полученных результатов, обоснованности сделанных выводов и уровню исполнения является логически законченным исследованием, содержащим решение важной научной задачи, и соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, в том числе п. 9 "Положения о присуждении ученых степеней", утвержденного Постановлением № 842 Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 года (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). Автор работы, Жуков Иван Владимирович, заслуживает присуждения ему искомой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 - «химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества».

Официальный оппонент
Фельдман Эдуард Беньяминович
д.ф.-м.н., профессор
Специальность 01.04.17 – химическая физика, в том числе физика горения и взрыва
главный научный сотрудник лаборатории спиновой динамики и спинового компьютеринга



Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института проблем

химической физики РАН (ИПХФ РАН),

142432, Московская область, г. Черноголовка,
проспект ак. Семенова, 1

Телефон: 8(49652) 2-12-77

Электронная почта: efeldman@icp.ac.ru

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

Подпись сотрудника ИПХФ РАН Э.В. Фельдмана заверяю:

Ученый секретарь ИПХФ РАН

д.х.н.



Б.Л. Психа

6 ноября 2021 г.