

«УТВЕРЖДАЮ»

Проректор по научной работе

Федерального государственного

бюджетного образовательного

учреждения высшего образования

«Санкт-Петербургский государственный университет»

С. В. Микушев

2023 г.

ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет» на диссертационную работу **Бочкина Георгия Алексеевича «Динамика и релаксация многоквантовых когерентностей ЯМР в одномерных спиновых цепочках»**, представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 - «химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества»

Многоквантовая (МК) спектроскопия ЯМР является эффективным методом для изучения пространственного распределения ядерных спинов в твёрдых телах, для создания и управления многоспиновыми когерентностями ЯМР, для установления количества ядерных спинов в многоспиновых кластерах. МК ЯМР открывает также новые пути для решения различных проблем квантовой информатики. В частности, в эксперименте МК ЯМР можно наблюдать возникновение и рост коррелированных кластеров на подготовительном периоде МК эксперимента ЯМР и их декогеренцию на периоде свободной эволюции. Развитие аналитических и численных методов МК динамики в МК экспериментах ЯМР является **актуальным** направлением в исследовании физико-химических свойств вещества, квантовых корреляций и квантовой коммуникации. Одномерные цепочки ядерных спинов являются простейшими системами для изучения эволюции МК когерентностей в ЯМР, однако на их примере целесообразно разрабатывать новые направления теоретического описания наблюдаемых в

экспериментах эффектов.

Диссертационная работа Бочкина Георгия Алексеевича посвящена исследованию динамики и эволюции многоквантовых когерентностей ЯМР в одномерных спиновых цепочках. *Среди значительных результатов*, полученных в диссертации, отметим вычисление вторых моментов форм линий МК когерентностей нулевого и второго порядков, а также развитие теории затухания МК когерентностей ЯМР нулевого и второго порядков на периоде эволюции МК эксперимента ЯМР. Важно также отметить, что результаты, полученные с помощью развитых теоретических методов, сопоставлены с экспериментальными данными, полученными в ФИЦ ПХФ и МХ РАН. Достаточно хорошее согласие теоретических результатов с экспериментальными данными можно считать большим достижением этой диссертационной работы.

Диссертационная работа изложена на 83 страницах машинописного текста и включает в себя 16 рисунков. Она состоит из введения, пяти глав и заключения. Список литературы насчитывает 71 наименование.

Во **введении** обоснована актуальность темы диссертации, сформулированы цель и задачи исследования, а также основные положения, выносимые на защиту, описан личный вклад соискателя, показана научная новизна проведенных исследований и очерчена их практическая и теоретическая ценность.

Первая глава представляет собой литературный обзор, в котором описаны теоретические и экспериментальные методы многоквантового ЯМР гомоядерных однородных одномерных систем и вводятся основные понятия, используемые в диссертации. Кратко описана схема эксперимента ЯМР, который рассматривается в диссертации, и изложены предшествующие теоретические результаты, на которые опирается диссертационная работа, в частности, 1) метод диагонализации двухспинового/двухквантового гамильтониана, описывающего систему на подготовительном периоде, с помощью преобразования Йордана-Вигнера, и 2) полученные ранее аналитические выражения для матрицы плотности системы в конце подготовительного периода МК эксперимента ЯМР и для расчётных интенсивностей МК когерентностей в однородных цепочках (проведено также сравнение последних с экспериментальными данными).

Вторая глава посвящена точному расчёту интенсивностей МК когерентностей на периоде свободной эволюции в так называемой zz -модели, где пренебрегается «флип-флоп частью» гамильтониана. В рамках этой модели автором рассчитаны интенсивности МК когерентностей порядков 0 и ± 2 (показано, что других МК когерентностей в рассматриваемой модели не возникает). На основе эргодической гипотезы автором рассчитана стационарная интенсивность МК когерентности 0-го порядка для больших длительностей периода свободной эволюции с

учетом «флип-флоп части» гамильтониана. Показано, что полученный результат удовлетворительно согласуется с экспериментом.

В третьей главе диссертации автором предложен вариант теории спада МК когерентностей ЯМР на периоде свободной эволюции, в котором используются теоретически рассчитанные вторые моменты форм линий МК когерентностей и рассчитанная в главе 2 стационарная интенсивность. Проведено сравнение с экспериментальными данными и показано, что наблюдается лучшее согласие с экспериментом по сравнению с результатами гл. 2.

В четвертой главе диссертационной работы проведено теоретическое исследование ориентационной зависимости и влияния гетероядерного взаимодействия во фторапатите на интенсивности МК когерентностей ЯМР. Автором показано, что при пренебрежении гетероядерными взаимодействиями эволюция МК когерентности в одномерных цепочках при различных ориентациях кристалла относительно внешнего магнитного поля отличается лишь масштабом времени. Автором проведён также численный расчёт вторых моментов форм линий МК когерентностей для 16-спиновой цепочки с учётом гетероядерных взаимодействий. Проведено сравнение с экспериментом и отмечено хорошее согласие результатов расчётов с экспериментальными данными.

В пятой главе для неоднородных цепочек, в которых константы диполь-дипольного взаимодействия (ДДВ) всех пар соседних спинов могут быть различными, теоретически рассчитываются интенсивности МК когерентностей ЯМР на подготовительном периоде в приближении взаимодействия ближайших соседей. Автором показано, что, как и в однородном случае, здесь возникают МК когерентности только порядков 0 и ± 2 , но полученные для них выражения включают так называемый однофермионный спектр системы, который зависит от констант ДДВ спинов системы, но не может быть выражен через них аналитически.

Рецензируемая работа не имеет существенных недостатков, которые могли бы препятствовать ее успешной защите, однако всё же *диссертация содержит некоторое количество неточностей и недостатков*. Перечислим некоторые из них.

1. Неудачно сформулированы некоторые положения, выносимые на защиту (первое, отчасти третье, четвёртое): они написаны как перечень результатов (отсутствует необходимый признак потенциальной дискуссионности), в них не отражена суть методов достижения результатов.
2. Литературный обзор излишне краток, недостаточно демонстрирует спектр широких применений МК ЯМР и сосредоточен на непосредственно предшествующих исследованию работах. Практически не отражён пласт обратных задач, решаемых с помощью МК спектроскопии ЯМР, что представляет основную цель любого теоретического исследования.

3. Многочисленные математические выкладки местами содержат недостаточно пояснений к формулам, что затрудняет их восприятие и понимание. Во многих формулах вводимые символы не комментируются. В формуле (2.22), правая часть которой должна получаться путём возведения в квадрат правой части формулы (2.21), приведено выражение из формулы (2.20), которое верно лишь для больших длин цепочек. На стр. 43 приводится разложение матрицы плотности в ряд Тейлора без достаточного обоснования, и эта формула не упоминается в дальнейшем.

4. В диссертации имеются терминологические, стилистические и другие погрешности. Приведём несколько примеров:

- 1) По нашему мнению, в диссертации применяется неудачный термин «полуфеноменологическая теория дипольной релаксации МК когерентностей» (начиная с третьего положения, выносимого на защиту, стр. 7 диссертации и стр. 6 автореферата, см. также главу 3). Поскольку в диссертации рассматривается статическое (а не флуктуирующее) дипольное взаимодействие, корректнее использовать редакцию типа «(полуфеноменологическая) теория МК когерентностей на периоде свободной эволюции».
- 2) Стр. 10: «Название «многоквантовый ЯМР» подчёркивает, что в нём происходит поглощение нескольких квантов электромагнитного поля» (каких «нескольких квантов»?)
- 3) Смысл интервала времени τ на рис. 1.1 противоречит обозначению τ в основном тексте. Кстати, в диссертации не обоснован выбор импульсной последовательности, представленной на рис. 1.1.
- 4) Пример стилистической погрешности (стр. 47): «... в каждом члене $\rho(\tau)$ один (?) повышающий оператор действует на чётный спин, а один (?) – на нечётный...».
- 5) В подписях к рис. 2.4 и 2.6 упоминаются экспериментальные данные, которые не представлены на них.

Указанные недостатки не являются принципиальными, не снижают ценности выполненного научного исследования и не изменяют общего благоприятного впечатления.

В целом, диссертационная работа Бочкина Г.А. является логически *завершённой научно-квалификационной работой*, в которой успешно решена поставленная перед соискателем задача исследования динамики МК когерентностей ЯМР в одномерных цепочках спинов $I = 1/2$.

Научная новизна и значимость исследования не вызывает сомнений и обусловлены как актуальностью изучаемой проблемы и выбором метода исследования, так и объёмом и качеством полученных результатов.

Достоверность и апробация результатов: Основные результаты работы полностью

отражены в научной печати. По материалам диссертации опубликовано 6 печатных работ в высокорейтинговых журналах, входящих в базы научного цитирования Scopus и Web of Science. Результаты доложены на нескольких конференциях. Можно, правда, выразить сожаление, что не приведена информация о докладах на конференциях после 2019 года.

Судя по диссертации, Г.А. Бочкин является сформировавшимся специалистом по МК спектроскопии ЯМР. Как следует из представленной информации, личный вклад Бочкина Г.А. в диссертационную работу является определяющим. Автором был проделан значительный объем теоретической работы.

Автореферат диссертации соответствует основным положениям диссертации, ее содержанию, выдержан по форме и объему.

Результаты работы могут быть использованы в организациях, в которых проводятся исследования методами ЯМР твердого тела, таких как ФИЦ “Химическая физика имени Н.Н.Семенова”, Международный томографический центр СО РАН, Институт химической кинетики и горения СО РАН, Физико-технологический институт имени К. А. Валиева РАН, Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, Казанский научный центр РАН и др.

Заключение по диссертационной работе

Диссертационная работа Бочкина Георгия Алексеевича «**Динамика и релаксация многоквантовых когерентностей ЯМР в одномерных спиновых цепочках**» по актуальности темы, научной новизне, практической значимости полученных результатов, обоснованности сделанных выводов и уровню исполнения является логически законченным исследованием, содержащим решение важной научной задачи, является законченной научно-квалификационной работой, которая по уровню выполнения, объёму, актуальности, новизне, значимости и достоверности полученных результатов удовлетворяет требованиям п. 9-14 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г. № 842 (с изменениями постановления Правительства Российской Федерации от 18 марта 2023 г. № 415), предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, а её автор, **Бочкин Георгий Алексеевич**, заслуживает присуждения ему искомой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 - химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Отзыв подготовлен доктором физико-математических наук по специальностям 1.3.4 – радиофизика и 1.3.8 – физика конденсированного состояния, профессором по кафедре радиофизики, профессором кафедры ядерно-физических методов исследования федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет» Владимиром Ивановичем Чижиком.

Отзыв обсужден и одобрен на заседании кафедры ядерно-физических методов исследования СПбГУ 03 ноября 2023 года, протокол № 44/12/8-02-6.

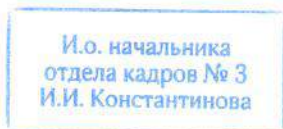
Зам. заведующего кафедрой ядерно-физических методов исследования СПбГУ, профессор, д.ф.-м.н.

И. А. Митропольский

Профессор кафедры ядерно-физических методов исследования СПбГУ

В. И. Чижик

Подписи Ивана Андреевича Митропольского и Владимира Ивановича Чижика заверяю


07.11.2023

Сведения о ведущей организации:

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет»

Адрес: 199034, Санкт-Петербург, Университетская набережная, д. 7-9.

Телефон (812) 328-97-01

E-mail: spbu@spbu.ru