

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.1.108.02, СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ НАУКИ ФЕДЕРАЛЬНОГО ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО ЦЕНТРА ПРОБЛЕМ ХИМИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ И МЕДИЦИНСКОЙ ХИМИИ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК, ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № \_\_\_\_\_

решение диссертационного совета от «07» декабря 2023 г. № 7

О присуждении Бочкину Георгию Алексеевичу, гражданство РФ, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Динамика и релаксация многоквантовых когерентностей ЯМР в одномерных спиновых цепочках» по специальности 1.3.17. Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества принята к защите 21 сентября 2023 года (протокол № 5) диссертационным советом 24.1.108.02 (Д 002.082.03), созданным на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук (ФИЦ ПХФ и МХ РАН), подведомственного Министерству науки и высшего образования РФ: 142432, Московская область, г. Черноголовка, пр. академика Семенова, д. 1 (адрес сайта: <http://www.icp.ac.ru>); диссертационный совет утвержден приказом Минобрнауки РФ о создании от 03.03.2016 г. № 245/нк с внесением частичных изменений в состав совета от 17.04.2019 г. № 327/нк, от 18.11.2020 г. № 692/нк, от 19.04.2022 г. №384/нк, от 12.07.2023 г. №1512/нк и в наименование организации от 03.10.2022 г. №1088/нк.

Соискатель Бочкин Георгий Алексеевич, 1992 года рождения, в 2014 году окончил Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова" (ведомственная принадлежность - Правительство Российской Федерации), получив квалификацию специалиста по специальности «Математик». Для сдачи кандидатских экзаменов соискатель был прикреплен в качестве экстерна к ФИЦ ПХФ и МХ РАН по направлению подготовки высшего образования 1.3 (03.06.01) – физические науки, по специальности 1.3.17. (01.04.17) Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества (с 09.04.2018 г.). Соискатель в настоящее время работает в должности научного сотрудника в ФИЦ ПХФ и МХ РАН.

Диссертация выполнена в лаборатории спиновой динамики и спинового

компьютинга теоретического отдела ФИЦ ПХФ и МХ РАН.

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, профессор Фельдман Эдуард Бенъяминович, ФИЦ ПХФ и МХ РАН, теоретический отдел, главный научный сотрудник.

Официальные оппоненты:

1. Ацаркин Вадим Александрович, доктор физико-математических наук (1.3.4. Радиофизика), профессор, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова Российской академии наук, лаборатория исследования магнитных и оптических микро- и наноструктур, главный научный сотрудник;

2. Лундин Андрей Арнольдович, доктор физико-математических наук (01.04.17 – химическая физика, в том числе физика горения и взрыва), старший научный сотрудник, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр химической физики имени академика Н.Н. Семенова Российской академии наук, отдел кинетики и катализа, лаборатория теоретической химической физики, ведущий научный сотрудник;

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет» (СПбГУ), г. Санкт-Петербург, в своем положительном отзыве, подписанном д.ф.-м.н., профессором Чижиком Владимиром Ивановичем, и заместителем заведующего кафедрой, д.ф.-м.н., профессором Иваном Андреевичем Митропольским, работающими на кафедре ядерно-физических методов исследования СПбГУ, и утвержденном проректором по научной работе к.ф.-м.н. Микушевым Сергеем Владимировичем, указала, что: «Результаты работы могут быть использованы в организациях, в которых проводятся исследования методами ЯМР твёрдого тела, таких как ФИЦ «Химическая физика имени Н.Н. Семенова», Международный томографический центр 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.

<...> 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, 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 ее 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».

Соискатель имеет 10 опубликованных работ по теме диссертации (общий объем 60 стр.), в том числе 6 статей в рецензируемых научных изданиях, рекомендуемых ВАК РФ и индексируемых в РИНЦ, Web of Science и Scopus. Все научные работы опубликованы в соавторстве (вклад соискателя не менее 70%) и процитированы в тексте диссертации, недостоверные сведения об опубликованных работах отсутствуют. Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1) Dipolar relaxation of multiple quantum NMR coherences in one-dimensional systems / G.A. Bochkin, E.B. Fel'dman, S.G. Vasil'ev, V.I.Volkov // Chem. Phys. Lett. — 2017. — Vol. 680. — P. 56-60.

2) Вторые моменты формы линий многоквантовых когерентностей ЯМР в одномерных системах / Г.А. Бочкин, С.Г. Васильев, И.Д. Лазарев, Э.Б. Фельдман // ЖЭТФ. — 2018. — Т. 154, № 3. — С. 621-628.

3) Bochkin, G.A. Theoretical analysis of multiple quantum NMR dynamics in one-dimensional inhomogeneous spin systems ( $s = 1/2$ ) / G.A. Bochkin, E.B. Fel'dman, S.G. Vasil'ev // Applied Magnetic Resonance. — 2022. — May. — Vol. 53. — P. 1439-1448.

В вышеперечисленных работах представлены теоретические результаты: расчёт спада многоквантовых (МК) когерентностей в однородных спиновых цепочках на

периоде свободной эволюции МК эксперимента ЯМР двумя способами: аналитически в  $zz$ -модели и на основе полуфеноменологической теории; ориентационная зависимость динамики и релаксации МК когерентностей ЯМР в однородных спиновых цепочках; расчёт динамики МК когерентностей в неоднородных спиновых цепочках на подготовительном периоде МК эксперимента ЯМР.

На диссертацию и автореферат поступило 6 отзывов, все положительные. В отзыве д.ф.-м.н. Н.Н. Лукзена замечаний нет. В отзыве г.н.с. Института физики им. Л.В. Киренского СО РАН д.ф.-м.н. В.Е. Зобова замечания технического характера. В 4-х отзывах содержатся критические замечания. В отзыве ведущего научного сотрудника АО ГНИИХТЭОС к.ф.-м.н. Д.А. Чешкова приведены 2 замечания: «автор не привёл в автореферате схему импульсной последовательности  $\langle \dots \rangle$ » и «имеется некоторая неоднозначность с обозначением «т», похоже, что автор в одних местах использовал его для обозначения временных задержек между радиочастотными импульсами, а в других местах – для обозначения длительности всего блока импульсов периода подготовки». В отзыве с.н.с. ФТИАН им. К.А. Валиева РАН к.ф.-м.н. А.Ю. Чернявского имеется одно замечание: «стоит отметить отсутствие в автореферате самого определения МК когерентностей». В отзыве в.н.с. ФТИАН им. К.А. Валиева РАН к.ф.-м.н. Л.Е. Федичкина содержится одно замечание: «Можно отметить отсутствие сравнения точности и преимуществ описания МК, достигаемой в полуфеноменологической модели автора с точностью и особенностями альтернативной модели, также предложенной для описания релаксации МК ранее в работе «Collective decoherence of nuclear spin clusters», A. Fedorov and L. Fedichkin, J. Phys.: Cond. Matter 18, p. 3217 (2006)». В отзыве профессора кафедры теоретической физики ФГАОУ ВО «Пермский государственный национальный исследовательский университет» д.ф.-м.н. В.К. Хеннера и доцента той же кафедры к.ф.-м.н. К.Б. Циберкина содержатся два замечания: «оценивалась ли величина поправки, которую может дать учёт флип-флоп слагаемого к результатам  $zz$ -приближения?» и «в главе 3 указано, что экспериментальные данные по релаксации МК когерентностей хорошо описываются гауссовой кривой с добавлением постоянного члена.  $\langle \dots \rangle$  универсальна ли такая эмпирическая зависимость, или существуют классы систем, где релаксация МК когерентностей описывается иными законами?»

Диссертационный совет решил, что на все поступившие замечания соискатель



Бочкин Г.А. дал полные и исчерпывающие ответы.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается тем, что В.А. Ацаркин является крупнейшим специалистом по магнитному резонансу и спиновой динамике (более 130 цитируемых в Web of Science работ), лауреатом премии им. Е.К. Завойского. Его большой опыт в экспериментальных и теоретических исследованиях магнитного резонанса позволяет получить надежную экспертизу развитой в диссертации полуфеноменологической теории МК когерентностей ЯМР и методов сравнения теоретических результатов с экспериментальными данными. А.А. Лундин – автор более 45 индексируемых в Web of Science работ по ЯМР, включая многоквантовый ЯМР и ЯМР в твёрдых телах. Его опыт в этой области полезен, поскольку в рассматриваемой диссертационной работе исследуется динамика и релаксация многоквантовых когерентностей ЯМР в спиновых цепочках в твёрдых телах.

Выбор СПбГУ в качестве ведущей организации обусловлен тем, что на физическом факультете СПбГУ в течение многих лет проводятся теоретические и экспериментальные исследования ядерной спиновой динамики и релаксации в твердых телах.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

выведены аналитические формулы для расчёта интенсивностей многоквантовых когерентностей в эксперименте ЯМР в однородной одномерной цепочке в  $zz$ -модели на периоде свободной эволюции;

предложена полуфеноменологическая теория релаксации МК когерентности на периоде свободной эволюции;

установлена зависимость динамики МК когерентностей от ориентации цепочки во внешнем магнитном поле и рассчитана динамика МК когерентностей на подготовительном периоде в неоднородных цепочках.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что описана релаксация МК когерентностей в одномерных цепочках на периоде свободной эволюции и её ориентационная зависимость. Разработанные теоретические методы представляют интерес для интерпретации МК экспериментов ЯМР и развития новых подходов в задачах квантовой теории информации.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что разработаны методы, позволяющие интерпретировать спектры МК эксперименты ЯМР одномерных систем. Эти методы использованы для интерпретации проведённых в ФИЦ ПХФ и МХ РАН экспериментов по МК ЯМР и показали хорошее согласие с экспериментальными данными.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

теоретический расчёт динамики системы на периоде свободной эволюции согласуется с результатами экспериментов, которые были опубликованы в рецензируемых научных журналах.

Личный вклад соискателя состоит в разработке метода исследования релаксации МК когерентностей ЯМР на периоде эволюции МК эксперимента ЯМР в одномерной цепочке; разработке аналитических методов вычисления вторых моментов форм линий МК когерентностей ЯМР; обобщении метода вычисления МК когерентностей ЯМР на случай различных констант диполь-дипольного взаимодействия между соседними спинами в цепочке; разработке полуфеноменологической теории релаксации МК когерентностей ЯМР на периоде свободной эволюции; численном исследовании ориентационной зависимости релаксации МК когерентностей ЯМР путём расчётов вторых моментов форм линий МК когерентностей ЯМР в однородной цепочке из 16 спинов; сопоставлении теоретических результатов с экспериментальными данными.

В ходе защиты диссертации были высказаны следующие критические замечания: 1. В работе приведено сравнение с экспериментальными данными, полученными на фторапатитах. Неясно, применимы ли полученные закономерности к другим системам. 2. Непонятно, существенный ли вклад даст учет других слагаемых гамильтониана, кроме  $zz$ -части.

Соискатель Бочкин Г.А. ответил на задаваемые ему в ходе заседания вопросы и привел собственную аргументацию: 1. Обычно считается, что профиль МК когерентностей имеет гауссов вид. Эксперименты показали, что иногда он может лучше описываться экспоненциальной функцией. Вопрос о форме линии остаётся открытым. Вероятно, полученные результаты применимы к другим системам, кроме систем с 1-2 спинами. 2. При расчёте вторых моментов форм линий интенсивностей МК когерентностей для порядка 0 учёт флип-флоп части не влияет на результат, а для

порядков  $\pm 2$  увеличивает второй момент приблизительно в 1.5 раза, что в используемой модели соответствует уменьшению времени релаксации приблизительно в 1.2 раза.

На заседании 7 декабря 2023 года диссертационный совет принял решение:

За решение научной задачи теоретического описания спада многоквантовых когерентностей в одномерных спиновых цепочках на периоде эволюции МК эксперимента ЯМР, имеющей значение для развития химической физики, присудить Бочкину Георгию Алексеевичу ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 16 человек, из них 16 докторов наук по специальности 1.3.17. Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества, участвовавших в заседании, из 20 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за присуждение ученой степени – 16, против присуждения ученой степени – нет, недействительных бюллетеней – нет.

Председатель диссертационного совета  
д.ф.-м.н., профессор

Разоренов Сергей Владимирович

Ученый секретарь диссертационного совета  
д.х.н.

Золотухина Екатерина Викторовна

07.12.2023 г.