

«УТВЕРЖДАЮ»

И.о. директора ФИЦ ПХФ и МХ РАН
член-корреспондент РАН Ломоносов И.В.



2023 г.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федерального государственного бюджетного учреждения науки
Федерального исследовательского центра проблем химической физики и
медицинской химии Российской академии наук (ФИЦ ПХФ и МХ РАН)
(142432, Московская обл., г. Черноголовка, проспект академика Семёнова, д. 1,
адрес сайта: <https://www.icp.ac.ru/>)

Диссертация Бочкина Георгия Алексеевича «Динамика и релаксация
многоквантовых когерентностей ЯМР в одномерных спиновых цепочках» на
соискание ученой степени кандидата физико-математических наук выполнена в
лаборатории спиновой динамики и спинowego компьютеринга теоретического отдела
ФИЦ ПХФ и МХ РАН.

Бочкин Г.А. в 2014 году окончил механико-математический факультет
Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова, получив
квалификацию специалиста по направлению «Математик», и в 2017-2018 гг.
экстерном сдал кандидатские экзамены по специальности 1.3.17 - химическая
физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества. Справка о
результатах сдачи всех кандидатских экзаменов выдана отделом аспирантуры ФИЦ
ПХФ и МХ РАН в качестве подтверждающего документа.

Основная часть диссертации выполнена соискателем во время работы в ФИЦ
ПХФ и МХ РАН в лаборатории спиновой динамики и спинowego компьютеринга
теоретического отдела.

В период подготовки диссертации экстерн Бочкин Г.А. работал в ФИЦ ПХФ
и МХ РАН в должностях младшего научного сотрудника и научного сотрудника, в

настоящее время работает в должности научного сотрудника в лаборатории спиновой динамики и спинowego компьютеринга теоретического отдела.

Научный руководитель: Фельдман Эдуард Бенъяминович, доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук, теоретический отдел, лаборатория спиновой динамики и спинowego компьютеринга.

По результатам рассмотрения диссертации на заседании секции № 8 Ученого совета ФИЦ ПХФ и МХ РАН принято следующее заключение:

Актуальность работы. Многоквантовая (МК) спектроскопия ЯМР является эффективным методом для изучения пространственного распределения ядерных спинов в твёрдых телах. МК ЯМР открывает 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. Одномерные системы ядерных спинов являются простейшими системами для изучения динамики и релаксации МК когерентностей ЯМР. Развитие аналитических и численных методов МК динамики и релаксации в МК экспериментах ЯМР является актуальным направлением в исследовании физико-химических свойств вещества, квантовых корреляций и квантовой коммуникации.

Целью работы являлось исследование динамики и релаксации многоквантовых когерентностей ЯМР в одномерных спиновых цепочках, их зависимости от ориентации образца во внешнем магнитном поле и длительностей подготовительного периода и периода свободной эволюции.

Теоретическая значимость. В работе содержится завершённое исследование динамики и релаксации МК когерентностей ЯМР в одномерных однородных цепочках. Впервые разработана полуфеноменологическая теория релаксации МК когерентностей на периоде свободной эволюции МК эксперимента ЯМР. Также впервые исследована динамика МК когерентностей ЯМР в одномерных системах в зависимости от ориентации относительно внешнего

магнитного поля, и МК динамика ЯМР на подготовительном периоде в неоднородных цепочках. Разработанные теоретические методы представляют интерес для интерпретации МК экспериментов ЯМР и развития новых подходов в задачах квантовой теории информации.

Практическая значимость. Разработанные в диссертации методы динамики и релаксации одномерных систем могут использоваться для интерпретации экспериментальных данных, полученных в МК экспериментах ЯМР. Разработанные в диссертации методы полезны для решения задач квантовой теории информации (исследование квантовых корреляций (запутанности и дискорда), многоспиновой запутанности, декогеренции).

Положения, выносимые на защиту:

1. Интенсивности МК когерентностей ЯМР (порядков 0 и ± 2) на периоде эволюции МК эксперимента ЯМР в конечных открытых спиновых цепочках в рамках zz -модели и приближении взаимодействия ближайших соседей.
2. Релаксация МК когерентностей ЯМР на периоде свободной эволюции. Теоретическое выражение для остаточной (стационарной) интенсивности МК когерентности нулевого порядка для бесконечных цепочек и конечных цепочек произвольной длины.
3. Вторые моменты форм линий МК когерентностей ЯМР нулевого и ± 1 -второго порядков в одномерной системе. Полуфеноменологическая теория дипольной релаксации МК когерентностей нулевого и второго порядков в открытой линейной спиновой цепочке.
4. Ориентационная зависимость интенсивностей МК когерентностей ЯМР.
5. Теория МК динамики ЯМР в неоднородных спиновых цепочках с произвольными константами взаимодействия ближайших соседей.

Наиболее существенные результаты, полученные соискателем:

1. Аналитически рассчитана интенсивность МК когерентностей ЯМР (порядков 0 и ± 2) в конечных открытых спиновых цепочках в рамках zz -модели и приближении взаимодействия ближайших соседей.

2. Показано, что интенсивность МК когерентности порядка 0 не спадает до нуля при увеличении длительности периода свободной эволюции, и найдено

аналитическое выражение для остаточной МК когерентности нулевого порядка как для бесконечных, так и для конечных цепочек.

3. Аналитически рассчитаны вторые моменты форм линий МК когерентностей ЯМР нулевого и ± 1 второго порядков в одномерной системе. На их основе построена полуфеноменологическая теория дипольной релаксации МК когерентностей нулевого и второго порядков в открытой линейной спиновой цепочке, исходя из экспериментально установленного гауссова закона релаксации МК когерентностей на периоде свободной эволюции МК эксперимента ЯМР

4. Исследована ориентационная зависимость интенсивностей МК когерентностей ЯМР. Показано, что в рассматриваемой модели зависимость интенсивностей МК когерентностей ЯМР от длительностей подготовительного периода и периода свободной эволюции для разных углов наклона цепочки к внешнему магнитному полю отличается лишь масштабом времени, если угол наклона далёк от т.н. магического. Исследовано влияние гетероядерного взаимодействия во фторapatите на ориентационную зависимость.

5. Разработана теория МК динамики ЯМР на подготовительном периоде МК эксперимента ЯМР в неоднородных спиновых цепочках с произвольными константами взаимодействия ближайших соседей. Показано, что, как и в случае однородных цепочек, при эволюции системы возникают лишь МК когерентности порядков 0 и ± 2 , и их интенсивности выражены через однофермионный спектр системы.

Степень достоверности результатов проведенных исследований обеспечивается хорошим согласованием с экспериментальными результатами, а также опубликованием статей по теме работы в рецензируемых ведущих изданиях, включенных в системы цитирования Scopus, Web of Science, РИНЦ и в перечень ВАК. Основные результаты диссертации докладывались на российских и международных конференциях.

Всего по материалам диссертации опубликовано 6 статей в журналах, рекомендуемых ВАК РФ для защиты диссертаций на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук.

Степень новизны полученных результатов и отличие от результатов других авторов.

Все основные результаты, полученные в работе, являются оригинальными.

В работе используется ранее известное выражение для матрицы плотности однородной цепочки на подготовительном периоде МК эксперимента ЯМР, но получены новые выражения для состояния системы на периоде свободной эволюции МК эксперимента ЯМР в zz -модели и для вторых моментов форм линий МК когерентностей 0-го и 2-го порядков, также исследована ориентационная зависимость и получено выражение для матрицы плотности неоднородной цепочки на подготовительном периоде МК эксперимента ЯМР через однофермионный спектр системы.

Апробация работы. Основные результаты работы доложены на международных и российских конференциях: Международной молодежной научной Школе «Актуальные проблемы магнитного резонанса и его применение» (Казань-2016, Казань-2018, Казань-2019) и Международной конференции «Математическое моделирование и вычислительная физика» (ММСР-2017, Дубна).

Исследования по теме диссертации выполнялись в рамках тематической карты ФИЦ ПХФ и МХ РАН (номер госрегистрации АААА-А19-119071190017-7) и поддержаны грантами Российского фонда фундаментальных исследований (проекты 16-03-00056, 19-32-80004 и 20-03-00147) и грантом Минобрнауки России № 075-15-2020-779.

Статьи в журналах, рекомендуемых ВАК РФ:

1. Bochkin, G. A. Relaxation of Multiple Quantum NMR Coherences in Quasi-One-Dimensional Spin Systems / G. A. Bochkin, E. B. Fel'dman, S. G. Vasil'ev // *Z. Phys. Chem.* — 2017. — Vol. 231, no. 3. — P. 513-525.
2. 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.
3. 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.
4. Orientational dependencies of dynamics and relaxation of multiple quantum NMR coherences in one-dimensional systems / G.A. Bochkin, E.B. Fel'dman, I.D. Lazarev, A.A. Samoilenko, S.G. Vasil'ev // *Journal of Magnetic Resonance.* — 2019. — Vol. 301. — P. 10-18.
5. 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.

6. ^1H multiple quantum NMR in alternating quasi-one-dimensional spin chains of hambergite / G.A. Bochkin, E.B. Fel'dman, D.P. Kiryukhin, P.P.Kushch, S.G. Vasil'ev // *Journal of Magnetic Resonance*. — 2023. — Vol.350. — P. 107415.

Тезисы докладов:

1. G.A. Bochkin, E.B. Fel'dman, S.G. Vasil'ev. Dipolar relaxation of multiple-quantum MNR coherences in a linear homogeneous chain of ^{19}F nuclei in calcium fluoroapatite // XIX Международная молодежная научная Школа "Актуальные проблемы магнитного резонанса и его применение", Казань, Россия, 24-28 октября 2016. Сборник тезисов. - С. 67
2. Bochkin G., Fel'dman E., Vasil'ev S. The dipolar relaxation of multiple quantum coherences as a model for an investigation of decoherence processes in many-qubit clusters in multiple-quantum NMR // Математическое моделирование и вычислительная физика (ММСР'2017): Тезисы докладов международной конференции (Дубна, 3–7 июля 2017 г.). — Дубна: ОИЯИ, 2017. — С.131.
3. Бочкин Г.А., Фельдман Э.Б., Лазарев И.Д., Васильев С.Г. Вторые моменты формы линий многоквантовых когерентностей ЯМР в одномерных системах. // XX Международная молодежная научная Школа "Актуальные проблемы магнитного резонанса и его применение", Казань, Россия, 24-29 сентября 2018. Сборник тезисов. - С. 43-46.
4. G.A. Bochkin, A.V.Fedorova, E.B.Fel'dman, S.G.Vasil'ev. Investigation of the free induction decay in fluorine spin chains in fluorapatite in multi-pulse NMR experiment // XXI Международная молодежная научная Школа "Актуальные проблемы магнитного резонанса и его применение", Казань, Россия, 23-27 сентября 2019. Сборник тезисов. - С. 179.

Личный вклад автора. Постановка задач и формулировка выводов выполнены соискателем совместно с научным руководителем. Соискателем лично выполнены: разработка метода вычисления релаксации МК когерентностей ЯМР на периоде эволюции МК эксперимента ЯМР в одномерной цепочке; разработка аналитических методов вычисления вторых моментов форм линий МК когерентностей ЯМР; обобщение метода вычисления МК когерентностей ЯМР на случай различных констант ДДВ между соседними спинами в цепочке; разработка полуфеноменологической теории релаксации МК когерентностей ЯМР на периоде свободной эволюции; численное исследование ориентационной зависимости релаксации МК когерентностей ЯМР путём расчётов вторых моментов форм линий МК когерентностей ЯМР в однородной цепочке из 16 спинов; проведение сравнения теоретических результатов с экспериментальными данными.

Написание статей и опубликование результатов в научных журналах выполнялось совместно с соавторами. Экспериментальные данные получены в лаборатории ЯМР ФИЦ

ПХФ и МХ РАН. Анализ и обобщение полученных данных выполнены соискателем лично.

Общее заключение. Диссертация Бочкина Георгия Алексеевича на тему «Динамика и релаксация многоквантовых когерентностей ЯМР в одномерных спиновых цепочках» соответствует пп. 1 и 5 паспорта специальности 1.3.17 - химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества, является завершенной научно-квалификационной работой по совокупности критериев, установленных Положением о присуждении ученых степеней (утверждено постановлением Правительства РФ № 842 от 24.04.2013 г. со всеми последующими изменениями) применительно к кандидатским диссертациям, и рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 - химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Заключение принято на заседании семинара теоретического отдела при секции № 8 Ученого совета ФИЦ ПХФ и МХ РАН 6 июня 2023 года. Присутствовало на заседании семинара 21 человек. Результаты голосования: «за» – 21, «против» – нет, «воздержались» – нет (протокол № 2 от 06.06.2023).

Председатель секции № 8

Ученого совета ФИЦ ПХФ и МХ РАН

доктор физико-математических наук, профессор



Э.Б. Фельдман

Секретарь секции № 8

Ученого совета ФИЦ ПХФ и МХ РАН

кандидат физико-математических наук



А.Л. Смирнов