

ОТЗЫВ
официального оппонента на диссертацию
на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук Бочкина
Георгия Алексеевича на тему: «Динамика и релаксация многоквантовых
когерентностей ЯМР в одномерных спиновых цепочках»
по специальности 1.3.17 – «Химическая физика, горение и взрыв, физика
экстремальных состояний вещества»

Диссертационная работа Г. А. Бочкина посвящена теоретическому анализу многоквантовых когерентностей в системе ядерных спинов твердого тела, изучаемых методами ЯМР. Многоквантовый (МК) ЯМР является одним из наиболее информативных и изощренных разновидностей ЯМР спектроскопии. Он практикуется в самых передовых лабораториях мира, и в том числе – в Черноголовке, в ФИЦ проблем химической физики, где курируется научной школой профессора Э. Б. Фельдмана. К этой авторитетной научной школе принадлежит и рассматриваемая диссертационная работа Г. А. Бочкина.

Главной особенностью этой работы, придающей ей новизну и эффективность, является подробное, строгое теоретическое рассмотрение квазиодномерных спиновых систем. Такие системы – не выдумка теоретиков; они реально существуют в ряде кристаллов в виде цепочек обладающих спинами ядер, dipольное взаимодействие между которыми намного сильнее их взаимодействия с окружением. Есть и соответствующий экспериментальный материал, который успешно привлекается диссидентом для сравнения с теорией. Выбор такого объекта очень важен, так как позволяет довести до конца сложные теоретические расчеты, практически невыполнимые в системах более высокой размерности, и приводит к решению ряда принципиально важных задач, которые долгое время казались непривлекательными. Все это делает диссертацию Г. А. Бочкина весьма актуальной.

Перейдем к конкретной характеристике содержания диссертации. Она состоит из введения, пяти глав, заключения и основных выводов; список использованной литературы содержит 71 наименование. Не пересказывая всего содержания диссертации, остановлюсь на тех ее результатах, которые представляются наиболее важными.

Прежде всего, это корректный математический анализ динамики и релаксации МК когерентностей на подготовительном периоде и периоде свободной эволюции МК ЯМР эксперимента на одномерных цепочках спинов (главы 2 и 3). Диссидент удачно выбрал подходящие приближения: zz модель для вычисления интенсивностей и метод вторых моментов, сопряженный с фермионным представлением, для анализа формы линии и релаксации. В этих рамках им впервые получены фундаментальные результаты, включая полуфеноменологическую теорию релаксации МК когерентностей, хорошо

согласующиеся с экспериментальными данными. Нет сомнений, что эти новые результаты войдут в основной фонд ЯМР спектроскопии и будут широко использоваться при дальнейших исследованиях.

Далее, диссертант успешно обобщил развитые им теоретические подходы, распространив их на анализ ориентационных и гетероядерных эффектов (гл. 4), а также на гораздо более широкий класс объектов – неоднородные спиновые цепочки с различными значениями дипольных взаимодействий для ближайших соседей (гл. 5). Эти задачи успешно решены в диссертации с использованием фермионного представления и, в ряде случаев, численных расчетов. Практически все новые теоретические результаты сопоставлены с экспериментальными данными, полученными соавтором Г. А. Бочкина, С. Г. Васильевым, на соответствующих объектах (кристаллах фторапатита, содержащих квазиодномерные цепочки ядер фтора). Хорошее согласие с экспериментом, равно как и безупречно корректный, строгий подход к теоретическим выкладкам, не оставляет сомнений в достоверности результатов диссертации. Из сказанного ясно, что актуальность, научная новизна и практическая ценность диссертационной работы Г. А. Бочкина заслуживают высокой оценки.

В качестве критического замечания отмечу чрезмерную лаконичность изложения. В частности, хотелось бы иметь более подробное и конкретное изложение тех перспектив, которые МК спектроскопия ЯМР открывает для структурных исследований, а также в квантовых вычислениях. Особенно это относится к одномерным спиновым цепочкам, составляющим предмет диссертации.

Эти замечания не снижают высокой оценки диссертации в целом. Исходя из объема, количества и качества проведенных исследований, считаю, что диссертация Г. А. Бочкина является законченной квалификационной работой. Представленные результаты являются оригинальными, они прошли апробацию на научных семинарах и конференциях и были опубликованы в 6 рецензируемых научных статьях.

Заключение

Диссертация Бочкина Г.А. соответствует всем критериям Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 №842 со всеми последующими изменениями, предъявляемым к кандидатским диссертациям. Содержание диссертации соответствует паспорту специальности 1.3.17 – «Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества» (по физико-математическим наукам). Автореферат правильно отражает содержание диссертации. Соискатель Бочкин Георгий Алексеевич заслуживает присуждения ученой степени

кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 – «Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества».

Официальный оппонент:

профессор, доктор физико-математических наук,

главный научный сотрудник лаборатории исследования свойств магнитных и оптических микро- и наноструктур

Федерального государственного бюджетного учреждения науки

«Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН»

Ацаркин Вадим Александрович

15.11.2023 г.

Године в.а. ацаркина заверено:
Ученый секретарь ИРЭ им. В.А. Котельникова РАН



и.и. Чусов

15.11.2023