

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Козиненко Виталия Павловича

«Индукцируемая параводородом поляризация ядерных спинов под воздействием переключаемых статических и осциллирующих магнитных полей», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 – «химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества»

Целью диссертационной работы Козиненко Виталия Павловича являлось развитие методов переноса неравновесной спиновой поляризации с параводорода на молекулы, содержащие магнитные изотопы углерода ^{13}C или азота ^{15}N , для усиления сигналов этих гетероядер в спектрах ЯМР. В работе Виталия Павловича решались следующие задачи: 1) повышение эффективности переноса неравновесной спиновой поляризации с параводорода на ядра ^{13}C диметилового эфира малеиновой кислоты в сильном магнитном поле спектрометра с помощью оптимизации адиабатической двухрезонансной радиочастотной схемы; 2) Поиск наиболее эффективного способа переноса неравновесной спиновой поляризации с параводорода на ядра ^{13}C малеиновой кислоты и аллилурирата в ультраслабом магнитном поле с помощью теоретического анализа и экспериментов с разными схемами переключения поля; 3) Создание методики переноса гиперполяризации на ядра *цис*- и *транс*- изомеров азобензола с использованием подхода SABRE и фотоизомеризации в ультраслабом магнитном поле; 4) Разработка метода переноса гиперполяризации на ядра ^{15}N пиридина в подходе SABRE в слабых полях.

В процессе исследований Козиненко использовал уникальную установку, разработанную в МТЦ СО РАН, позволяющую проводить барботирование образца газом и менять магнитное поле в образце в автоматическом режиме. При этом оборудование позволяет проводить облучение светом с помощью лазерной системы в слабых полях. Таким образом, соискатель смог исследовать процессы переноса неравновесной спиновой поляризации с параводорода как в сильных, так и слабых магнитных полях. В результате, Козиненко В.П. достиг поставленной в работе цели, что позволило осуществить перенос гиперполяризации на гетероядра нескольких простых органических молекул и даже зарегистрировать рекордные усиления сигналов ядер ^{13}C при использовании методики когерентного переноса в сильных полях. Помимо экспериментов соискатель проводил теоретические моделирования задач спиновой динамики, в том числе численными методами, для подбора условий и объяснения наблюдаемых результатов.

Автореферат работы и сама работа производят хорошее впечатление в плане оформления и подачи результатов. Сама работа выполнена на достойном современном уровне, результаты представляют интерес для дальнейших исследований.

В процессе чтения работы у меня возникло несколько вопросов и замечаний:

1) В работе соискатель использует термины «поляризация», «намагниченность», «интегральная намагниченность», «чистая намагниченность» при этом иногда измеряя их в количестве процентов. Для лучшего понимания работы стоило привести определение этих терминов в контексте работы, формулы для расчета, в том числе теоретической эффективности переноса намагниченности и итоговой поляризации гетероядер, учитывая, что в конечном итоге в ЯМР напрямую детектируется только часть намагниченности, в виде минус одноквантовых когерентностей.

2) В работе соискатель измерял параметры T_1 и $T_{1\rho}$ ядра азота ^{15}N в полях 500 нТл и 100мкТл, при этом используя зависимость процента поляризации на ядре от величины задержки. Как мерялись эти параметры учитывая, что в таких полях получается сильно-связанная спиновая система? Какая аналитическая функция использовалась для подгонки изменения процента поляризации от времени?

3) Каким образом измерялись сверхслабые магнитные поля в образцах? Какова была точность измерения напряженности и однородности таких полей в образце?

4) Любопытно как соискателю удалось использовать «все возможные способы оптимизации» как упоминается на стр. 11 автореферата?

Я считаю, что диссертационная работа Козиненко Виталия Павловича полностью соответствует критериям, установленным пунктами 9-14 «Положения о присуждении учёных степеней», утверждённого постановлением правительства РФ №842 от 24.09.2013. Козиненко Виталий Павлович, несомненно, заслуживает присуждения степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 – «химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества».

к.х.н. (02.00.03 –органическая химия) Шернюков Андрей Владимирович,

с.н.с. Лаборатории магнитной радиоспектроскопии,

Федерального государственного бюджетного учреждения
науки Новосибирского института органической химии

им. Н.Н. Ворожцова Сибирского отделения Российской академии наук (НИОХ СО РАН)

Адрес: Российская Федерация. 630090. г. Новосибирск,

проспект Академика Лаврентьева, д.9

Для телеграмм: Новосибирск 90, НИОХ

Телефон:(383)330-88-50

Факс:(383)330-97-52

e-mail: benzol@nioch.nsc.ru

Подпись к.х.н. А.В.Шернюкова заверяю
ученый секретарь НИОХ СО РАН



Фредихин Р.А.

дата:

25.06.2024