

Протокол № 1

заседания диссертационного совета Д 002.191.01

от 19.02.2016

Состав диссертационного совета утвержден в количестве 21 человек. Присутствовали на заседании 18 человек.

Председатель: доктор физ.-мат.наук Салихов Кев Минуллинович

Ученый секретарь: кандидат физ.-мат.наук Хайбуллин Рустам Ильдусович

Присутствовали: доктор физ.-мат.наук Салихов Кев Минуллинович, доктор физ.-мат.наук Бухараев Анастас Ахметович, кандидат физ.-мат.наук Хайбуллин Рустам Ильдусович, доктор хим.наук Аганов Альберт Вартанович, доктор физ.-мат.наук Аминов Линар Кашифович, доктор физ.-мат.наук Воронкова Виолета Константиновна, доктор физ.-мат.наук Гарифуллин Ильгиз Абдулсаматович, доктор физ.-мат.наук Жихарев Валентин Александрович, доктор хим.наук Зуев Юрий Федорович, доктор физ.-мат.наук Моисеев Сергей Андреевич, доктор физ.-мат.наук Овчинников Игорь Васильевич, доктор физ.-мат.наук Петухов Владимир Юрьевич, доктор физ.-мат.наук Сулейманов Наиль Муратович, доктор физ.-мат.наук Тагиров Ленар Рафгатович, доктор физ.-мат.наук Таланов Юрий Иванович, доктор физ.-мат.наук Тарасов Валерий Федорович, доктор физ.-мат.наук Тейтельбаум Григорий Бенционович, доктор физ.-мат.наук Файзрахманов Ильдар Абдулкабирович.

Официальные оппоненты по диссертации:

- доктор физико-математических наук Тарасов Валерий Федорович, заведующий лабораторией спиновой химии Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт химической физики им. Н.Н. Семенова» РАН;
- кандидат физико-математических наук Гафуров Марат Ревгеревич, старший научный сотрудник кафедры квантовой электроники и радиоспектроскопии Института физики ФГАОУ ВО "Казанский (Приволжский) федеральный университет».

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем химической физики Российской академии наук (Московская обл., г. Черноголовка).

Слушали: Защиту диссертационной работы на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук Правдивцева Андрея Николаевича на тему: «Роль антипересечений уровней энергии при переносе ядерной спиновой гиперполяризации в системах скалярно связанных спинов» по специальности 01.04.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Постановили: присудить Правдивцеву Андрею Николаевичу ученую степень кандидата физико-математических наук.

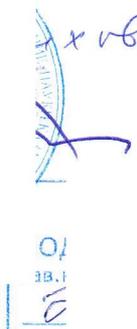
Результаты голосования: «за» - 18, «против» - 0, недействительных бюллетеней - 0.

Председатель совета

Ученый секретарь совета

Салихов Кев Минуллинович

Хайбуллин Рустам Ильдусович



ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 002.191.01,

на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Казанский физико-технический институт им. Е. К. Завойского Казанского научного центра Российской академии наук, ведомственная принадлежность ФАНО России
ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от **19 февраля 2016 г. № 1**

О присуждении **ПРАВДИВЦЕВУ Андрею Николаевичу**, гражданину России, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Роль антипересечений уровней энергии при переносе ядерной спиновой гиперполяризации в системах скалярно связанных спинов»,
по специальности 01.04.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества,

принята к защите «16» декабря 2015 г. протокол № 8 диссертационным советом Д 002.191.01, на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Казанский физико-технический институт им. Е. К. Завойского Казанского научного центра Российской академии наук, ведомственная принадлежность ФАНО России, 420029, г. Казань, Сибирский тракт 10/7, утвержденным приказом Минобрнауки России № 105/нк от 11.04.2012 г.

Соискатель – **ПРАВДИВЦЕВ Андрей Николаевич**, 1991 года рождения, в 2014 году окончил физический факультет Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Новосибирский национальный исследовательский государственный университет» (НГУ), и в этом же 2014 году поступил в аспирантуру НГУ.

работает лаборантом в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институт «Международный томографический центр» Сибирского отделения Российской академии наук, ведомственная принадлежность ФАНО России.

Диссертация выполнена в лаборатории магнитных и спиновых явлений Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт «Международный томографический центр» Сибирского отделения Российской академии наук, ФАНО России.

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, **ИВАНОВ Константин Львович**, ФГБУН Институт «Международный томографический центр» СО РАН, Отдел магнитных явлений, группа Спиновой динамики, ведущий научный сотрудник.

Официальные оппоненты:

1. ТАРАСОВ Валерий Федорович, доктор физико-математических наук, ФГБУН «Институт химической физики им. Н.Н. Семенова РАН», лаборатории спиновой химии, заведующий лабораторией (г. Москва);

2. ГАФУРОВ Марат Ревгеревич, кандидат физико-математических наук, ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский) федеральный университет», Институт физики, кафедра квантовой электроники и радиоспектроскопии, старший научный сотрудник (г. Казань);
дали положительные отзывы о диссертации.

ВЕДУЩАЯ организация: ФГБУН «Институт проблем химической физики Российской академии наук» (г. Черноголовка, Московская обл.) **в своём положительном заключении**, подписанном **Фельдманом Эдуардом Беньяминовичем**, доктором физико-математических наук профессором, заведующим теоретическим отделом, **указала, что** важным достижением данной диссертационной работы является создание экспериментальной установки ЯМР с переключением магнитного поля в широком диапазоне от 0.1 мТл до 7 Тл. Диссертация является завершённой научно-исследовательской работой и содержит решение актуальной научной задачи: создание эффективных методов для значительного увеличения чувствительности спектроскопии ЯМР и магнитной резонансной томографии; полностью удовлетворяет всем требованиям п.9 Положения о порядке присуждения степеней, утвержденного Правительством РФ № 842 от 24.09.2013.

Соискатель имеет 35 опубликованных работ, в том числе **по теме диссертации 35 работ**, их них опубликовано в рецензируемых научных изданиях из перечня ВАК **18 статей** и **17** публикаций в форме тезисов и трудов российских и международных конференций, общим объёмом 25.8 условных печатных листов. В 12-ти статьях соискатель является первым из списка авторов и внес основной вклад в написание данных работ. **Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:**

1. Новая импульсная последовательность для селективной регистрации мультиплетной спиновой поляризации / А. Н. Правдивцев, К. Л. Иванов, А. В. Юрковская, Х.-М. Фит, Р. З. Сагдеев // Доклады Академии наук. Физическая Химия. – 2015. – Т. 465, № 1. – с. 54-57.
2. Spin mixing at level anti-crossings in the rotating frame makes high-field SABRE feasible / A. N. Pravdivtsev, A. V. Yurkovskaya, H.-M. Vieth, K. L. Ivanov // Phys. Chem. Chem. Phys. – 2014 – Т. 16, № 45 – С. 24672-24675.
3. Highly efficient polarization of spin-1/2 insensitive NMR nuclei by adiabatic passage through level anti-crossings / A. N. Pravdivtsev, A. V. Yurkovskaya, N. N. Lukzen, K. L. Ivanov, H.-M. Vieth // J. Phys. Chem. Lett. – 2014 – 5, № 19 – С. 3421-3426.
4. Level anti-crossings are a key factor for understanding para-hydrogen induced hyperpolarization in SABRE experiments / A. N. Pravdivtsev, A. V. Yurkovskaya, H.-M. Vieth, K. L. Ivanov, R. Kaptein // ChemPhysChem – 2013 – Т. 14, № 14 – 3327-3331.

На диссертацию и автореферат поступило 7 отзывов: два отзыва от официальных оппонентов, один - от ведущей организации и 4 отзыва на автореферат от:

1. **Колоколова Д.И.**, к. ф.-м. н., научного сотрудника Института катализа им. Г.К. Борескова СО РАН (г. Новосибирск);
2. **Толстого П.М.**, к. ф.-м. н., директора ресурсного центра «Магнитно-резонансные методы исследования» Санкт-Петербургского государственного университета (СПбГУ), доцента кафедры физической и органической химии СПбГУ (г. Санкт-Петербург);
3. **Марьясова А.Г.**, к. ф.-м. н., старшего научного сотрудника ФГБУН «Институт

химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского» СО РАН (г. Новосибирск);

4. **Стась Д.В.**, к. ф.-м. н., доцента, старшего научного сотрудника ФГБУН «Институт химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского» СО РАН (г. Новосибирск).

Все поступившие отзывы положительные и отражают актуальность, новизну и практическую значимость работы, а также достоверность и обоснованность результатов и выводов работы. Все авторы отзывов считают, что работа полностью соответствует требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а её автор заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества. Более того, официальный оппонент д.ф.-м.н. Тарасов В.Ф. (г. Москва) и один из авторов отзывов на автореферат, к.ф.-м.н. Толстой П.М. (г. Санкт-Петербург) отмечают, что как по научному уровню, так и количеству и качеству научных публикаций, данная работа, гораздо ближе к требованиям, предъявляемым к докторским, чем к кандидатским диссертациям.

Критическими замечаниями в отзывах на диссертацию являлись:

Из отзыва на диссертацию официального оппонента Тарасова В.Ф.:

«Для того чтобы эксперимент мог квалифицироваться, как эксперимент во вращающейся системе координат необходимо, чтобы был реализован режим спинового локинга, или чтобы локальное магнитное поле, которое «видит» рассматриваемый спин во вращающейся системе координат, было существенно меньше амплитуды РЧ-поля. В случае связанных систем ситуация более сложная и менее однозначная хотя бы потому, что условия локинга могут быть реализованы как для отдельного связанного спина, так и для всего ансамбля скалярно связанных спинов вместе»

Из отзыва на диссертацию официального оппонента Гафурова М.Р.:

1. «На стр. 4 достаточно сложно введено понятие поляризации, что может усложнить понимание содержания работы неспециалистами в данной области исследований».

2. «Вызывает некоторое сожаление отсутствие ссылок на русскоязычную литературу. Осознавая всю сложность данного замечания, хотелось бы, тем не менее, увидеть обсуждение работ советских (российских) авторов, проводивших свои исследования в схожих или смежных областях с конца 1950-х годов»

Из отзыва на диссертацию ведущей организации: «Включение в литературный обзор материала по теоретическим методам спиновой динамики представляется нам неоправданным. Элементы этого материала должны быть с соответствующими ссылками даны при изложении результатов теоретической интерпретации выполненных экспериментов. Название “Теория матрицы плотности” не соответствует изложенному материалу. В теоретической физике под этим термином понимают совсем другие аспекты квантовой механики»

Критическими замечаниями в отзывах на автореферат являлись:

Из отзыва на автореферат Колоколова Д.И.: «В одном из примеров приводится величина эффективного переноса в 5% от полной поляризации, что ограничивает реальную эффективность? Достижима ли практически существенно большая величина?»

В дискуссии по диссертации приняли участие Салихов К.М, Аганов А.В., Зуев Ю.Ф., Моисеев С.А., Сулейманов Н.М. и др. Приведенные замечания не затрагивают основные выводы и положения диссертационной работы.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается их компетентностью и высокой квалификацией по теме диссертации.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

разработан метод формирования ядерной спиновой гиперполяризации в сильных магнитных полях в условиях антипересечений спиновых уровней энергии в присутствии РЧ-полей;

доказано, что формирование поляризации субстратов в методике SABRE обусловлено конверсией спинового порядка в областях антипересечений уровней энергии в спиновой системе комплекса SABRE; при этом наличие гетероядер в данной спиновой системе существенно влияет на число антипересечений уровней энергии и, следовательно, на число экстремумов в магнитолевой зависимости поляризации протонов;

предложены новые методы для непрерывной генерации поляризации SABRE в сильных магнитных полях;

введены подходы для анализа антипересечений уровней в различных спиновых системах, позволяющие описывать когерентный перенос поляризации, определять ее знак и положения экстремумов поляризации.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

Доказана ключевая роль антипересечений уровней энергии при переносе поляризации в системах скалярно связанных спинов;

применительно к проблематике диссертации результативно использован комплекс методов ЯМР в сильном магнитном поле и в переключаемых полях и теоретический анализ динамики переноса неравновесной поляризации в системах скалярно связанных спинов;

изложены экспериментальные факты, свидетельствующие в пользу когерентного механизма переноса поляризации в условиях «сильной связи» спинов;

раскрыты когерентная природа переноса спиновой поляризации в слабых магнитных полях и роль антипересечений уровней при таком переносе поляризации;

изучены эффекты переноса спиновой гиперполяризации в сильных полях в присутствии резонансных РЧ-полей;

проведена модернизация представлений о формировании ХПЯ в слабых магнитных полях.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

разработан и внедрен метод проведения ЯМР экспериментов в переключаемых магнитных полях, позволяющий исследовать эффекты фото-ХПЯ, ИППЯ и SABRE в диапазоне полей 0.1 мТл-7 Тл;

определены перспективы применения методов переноса спиновой гиперполяризации, основанных на использовании антипересечений спиновых уровней энергии;

созданы предпосылки для практического применения метода SABRE в целях непрерывной генерации спиновой гиперполяризации в сильном магнитном поле;

представлены методы для существенного усиления сигналов ЯМР гетероядер со спином $1/2$.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

для экспериментальной работы достоверность результатов определяется использованием комплекса современного экспериментального оборудования, а также воспроизводимостью результатов эксперимента;

теория когерентного переноса поляризации в скалярно связанных спиновых системах хорошо согласуется с полученными в данной работе и опубликованными ранее экспериментальными данными;

идея базируется на обобщении совокупности большого объема экспериментальных данных о переносе спиновой гиперполяризации;

использованы данные из ранее опубликованных работ для сопоставления с полученными результатами исследования и подтверждения сделанных выводов;

установлено, что новые результаты, полученные в работе, не противоречат известным литературным данным по исследованию переноса поляризации в скалярно связанных спиновых системах;

использованы современные методы математического моделирования расчета спиновой динамики.

Личный вклад соискателя состоит в следующем:

- в разработке плана исследований и приготвление образцов для экспериментов;
- участие в создании экспериментальных систем для измерений, в том числе уникальной установки ЯМР с переключением внешнего магнитного поля;
- в получении экспериментальных данных, их аналитическое и численное моделирование;
- в написании, оформлении и подготовке статей к публикации; в представлении результатов исследований на конференциях различного уровня.

На заседании 19 февраля 2016 года диссертационный совет принял решение присудить **Правдивцеву Андрею Николаевичу** ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве **18** человек, из них **9** докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из **21** человек, входящих в состав совета, проголосовали: за **18**, против **0**, недействительных бюллетеней **0**.

Председатель диссертационного совета

Ученый секретарь диссертационного совета

Сал
Р



Салихов Кев Минуллинович

Хайбуллин Рустам Ильдусович

«20» февраля 2016 г.