

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Маркелова Данила Андреевича «Спиновая динамика в индуцируемой параводородом поляризации ядер: спиновый порядок и гетероядерный перенос поляризации в сильном магнитном поле», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности

1.3.17 – «химическая физика горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества»

Работа Маркелова Д. А. посвящена актуальной задаче, связанной с повышением чувствительности спектроскопии ЯМР и МРТ, широко используемых в физико-химических исследованиях и медицине. Одним из наиболее эффективных подходов к решению этой задачи является ядерная спиновая гиперполяризация, суть которой заключается в создании неравновесной населенности ядерных спиновых уровней энергии. В настоящее время для этих целей в основном применяется динамическая поляризация ядер (ДПЯ), использующая крайне сложное и дорогостоящее криогенное оборудование, имеющееся лишь в единицах лабораторий во всем мире. В качестве альтернативного, существенно более доступного метода, автором была выбрана гиперполяризация ядер, создаваемая за счет применения параводорода (метод SABRE) – немагнитного ядерного спинового изомера молекулярного водорода. Важно заметить, что особое внимание в работе Маркелова Д. А. уделяется переносу поляризации с параводорода на субстрат в сильном магнитном поле, поскольку это позволяет проводить гиперполяризацию ядер внутри ЯМР спектрометра или МРТ томографа без применения внешних устройств-поляризаторов. Так, результаты, полученные Данилом Андреевичем, крайне важны для дальнейшего развития и применения  $^{15}\text{N}$ -поляризованных флюидов в реальных химико-биологических системах.

В процессе выполнения работы автором был выполнен значительный объем экспериментальных и теоретических исследований по разработке, применению и оптимизации новых импульсных последовательностей для создания гиперполяризации ядер  $^{15}\text{N}$ . Так, в качестве субстратов автором работы были выбраны важные антибактериальные препараты группы 5-нитроимидазола. Кроме того, Маркелов Д. А. прекрасно овладел и применил численные расчеты достаточно сложной спиновой динамики SABRE, которая включает в себя когерентную, некогерентную, а также химическую динамику. На основе этого автором была показана особая важность учитывать процессы синглет-триплетного смешивания в молекулярном водороде и конструировать импульсные последовательности исходя из этого обстоятельства. Все вышесказанное позволило автору провести эффективную гиперполяризацию ядер  $^{15}\text{N}$  молекул и достичь более 0.5 % ядерной поляризации, используя

когерентный перенос поляризации в сильном магнитном поле, индуцированный радиочастотными магнитными полями с оптимизированными параметрами.

Автореферат работы и сама работа написаны хорошим языком и производят положительное впечатление. Результаты работы соответствуют высокому уровню и представляют интерес для дальнейших исследований.

В процессе чтения работы у меня возникло несколько замечаний:

- 1) В автореферате работы часть соединений приводится без графического представления структуры, что затрудняет понимание полученных результатов.
- 2) Рисунок 9 автореферата организован хаотично, что затрудняет его анализ. Кроме этого, не обсуждается некоторое отклонение в численном анализе в случае 9а (вместо второго максимума наблюдается минимум).

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

#### КОНТАКТНАЯ ИНФОРМАЦИЯ

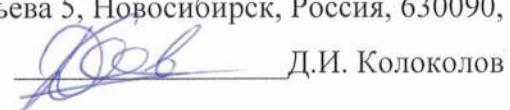
Доктор химических наук, старший научный сотрудник

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки

«Федеральный исследовательский центр «Институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук»

(ИК СО РАН).

Пр-т Академика Лаврентьева 5, Новосибирск, Россия, 630090,

  
Д.И. Колоколов

Дата: 10 сентября 2025 года



Зам. начальника отдела кадров  
10.09.2025





Телефон: 89139063769 E-mail:

kdi@catalysis.ru

О.Г.Колотовкина