

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Маркелова Даниила 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 Даниилом Андреевичем, крайне важны для дальнейшего развития и применения ^{15}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}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}N молекул и достичь более 0.5 % ядерной поляризации, используя

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

Аннотация 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 аннотации работы часть соединений приводится без графического представления структуры, что затрудняет понимание полученных результатов.
- 2) Рисунок 9 аннотации 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 Даниила Андреевича полностью соответствует критериям, установленным пунктами 9-14 «Положения о присуждении учёных степеней», утверждённого постановлением правительства РФ №842 от 24.09.2013. Маркелов Даниил 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

Телефон: 89139063769 E-mail:

kdi@catalysis.ru



Личную подпись Колоколова Д.И.

Зам. начальника отдела кадров

10.09.2025



О.Г. Колотовкина