

## 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»

Диссертация Маркелова Данила Андреевича посвящена важнейшей проблеме - повышению чувствительности метода ядерного магнитного резонанса (ЯМР), в данном случае, ЯМР спектроскопии ядер  $^{15}\text{N}$ , применение которой в практических условиях крайне затруднительно без специальных методов ядерной спиновой гиперполяризации. В качестве метода гиперполяризации автором был выбран метод SABRE, основанный на использовании параводорода, немагнитного спинового изомера молекулярного водорода, для усиления ЯМР сигналов ядер  $^{15}\text{N}$ . В работе Маркелова Д.А. особое внимание было уделено повышению эффективности метода SABRE именно в сильном магнитном поле ЯМР спектрометра, поэтому полученные автором результаты являются перспективными для повышения чувствительности в рутинных ЯМР исследованиях, что особенно актуально для прикладных задач в области биологии, химии и медицины.

Для переноса спиновой поляризации на ядра  $^{15}\text{N}$ , Маркеловым Д.А. были разработаны новые высокоэффективные импульсные последовательности радиочастотного магнитного поля. Им была построена теоретическая модель синглет-триплетной конверсии в молекулярном водороде, объясняющая формирование неравновесно поляризованного по ядерному спину ортоводорода. Кроме того, автором было показано существенное влияние процесса конверсии на эффективность поляризации ядер  $^{15}\text{N}$ , а также предложены экспериментальные протоколы, корректно учитывающие начальное состояние молекулярного водорода в растворе. На основе этого Маркелову Д. А. удалось добиться значительного усиления сигнала ЯМР ядер  $^{15}\text{N}$ , которое, в зависимости от используемого субстрата, составило 1000-2500 относительно равновесного сигнала в магнитном поле 9.4 Т. Следует также отметить, что в качестве субстратов автором были выбраны важные биомолекулы, среди которых имеются антибиотики: метронидазол, секнидазол и другие.

Результаты проведенного исследования обладают выраженной научной новизной и имеют существенную практическую ценность. Изложение материалов диссертации демонстрирует глубокое понимание автором предметной области и его высокую профессиональную компетентность. Разработанные методики и полученные данные создают прочный фундамент для дальнейшего совершенствования технологии гиперполяризации и её успешной апробации в реальных научных и прикладных задачах.

К автореферату диссертации замечаний не имеется, есть только небольшие вопросы по содержанию и оформлению текста кандидатской диссертации.

Приведенную в литературном обзоре волновую функцию (формула (1)) нельзя, строго говоря, называть *полной* волновой функцией молекулы водорода, поскольку опущены её колебательная и электронная ( $^1\Sigma_g^+$ ) части.

В модельных расчетах автором в основном использовались величины 0.99 и 0.1 для параметров  $C^{12}$  корреляции локальных магнитных полей и для отношения концентрации связанного водорода к свободному, соответственно. Хотелось бы видеть пояснения к выбору именно этих значений.



Аналогично, хотелось бы знать, насколько выбор прямоугольного с шириной 8 Гц по  $^1\text{H}$  распределения неоднородности магнитного поля в модельных расчетах (стр. 94) соответствует экспериментальному?

В тексте пропущено слова “конверсию” в конце стр. 60, также есть пропуск слова в первом предложении раздела 3.1.4.

Объём и качество представленного материала значительно превышают требования, предъявляемые к научно-квалификационной диссертационной работе. 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. Автор диссертации, 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».

Шубин Александр Аркадьевич,  
к.ф.-м.н., специальность 01.04.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика  
экстремальных состояний вещества,  
доцент, старший научный сотрудник Группы теоретической и вычислительной химии  
твёрдого тела Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт  
химии твёрдого тела и механохимии СО РАН,  
630090, г. Новосибирск, ул. Кутателадзе 18

/ Шубин А.А. /

Согласен на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой  
диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Подпись Шубина А.А. заверяю  
Ученый секретарь ИХТТМ СО РАН  
д.х.н.

06 октября 2025 г.



/ Шахматов Т.П. /