

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 Д. А. Маркелова представляет собой значимое исследование в области повышения чувствительности ЯМР и МРТ. Для повышения чувствительности автором используется метод SABRE, основанный на применении параводорода в качестве источника ядерной спиновой поляризации. Выбранный Маркеловым Д. А. метод особенно привлекателен для научного сообщества, поскольку существенно упрощает и удешевляет техническую реализацию методов гиперполяризации, зачастую подразумевающих использование криогенных условий. Научная новизна исследования заключается в разработке и оптимизации новых методов для переноса поляризации с параводорода на ядра ^{15}N субстрата в условиях сильного магнитного поля. Так, предложенные автором подходы позволяют эффективно осуществлять гиперполяризацию непосредственно в стандартных ЯМР-спектрометрах и МРТ-сканерах, в то время как в большинстве случаев для этих целей используются сложные внешние устройства-поляризаторы.

При выполнении работы автор проявил себя разносторонним исследователем, выполнив значительный объем как численных расчетов спиновой динамики, так экспериментальных оптимизаций. Автором были исследованы различные схемы для переноса поляризации в сильном поле, в том числе со слабыми селективными РЧ полями, а также с адиабатически модулированными РЧ полями. На основе комплексной систематической оптимизации предложенных подходов автором были получены гиперполяризованные ^{15}N ЯМР спектры субстратов, в том числе антибиотиков (секнидазол, тинидазол, метронидазол, орнидазол), а также потенциального противоопухолевого препарата (3-метил[1,2,4]селенадиазола[4,5-а]пиридин-4-иум бромида).

Представленные в работе результаты отличаются научной новизной и практической значимостью. Материалы диссертации изложены последовательно, что свидетельствует о высоком уровне квалификации автора. Полученные результаты открывают перспективы для дальнейшего развития методов гиперполяризации и их внедрения в исследовательскую практику.

В процессе чтения работы у меня возник вопрос:

Для молекул 3-метил[1,2,4]селенадиазола[4,5-а]пиридин-4-иум бромида автором показывается эффективность в ^{15}N поляризации основного пика в спектре (рис. 9), а также его ^{77}Se сателлитов. Можно ли предложенным автором методом провести поляризацию данного соединения по ядрам ^{77}Se , которые также обладают спином $1/2$?

Результаты проведенных исследований опубликованы в профильных международных физико-химических журналах и неоднократно докладывались на конференциях. Считаю, что диссертационная работа «Спиновая динамика в индуцируемой параводородом поляризации ядер: спиновый порядок и гетероядерный перенос поляризации в сильном магнитном поле» соответствует требованиям п. 9 «Положения о порядке присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г. (в действующей редакции), предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, и является научно-квалификационной работой, в которой решена задача развития экспериментальных и теоретических подходов к повышению чувствительности ЯМР и МРТ с использованием метода SABRE на основе применения параводорода в качестве источника ядерной спиновой поляризации, что может быть использовано для существенного упрощения и удешевления технической реализации методов гиперполяризации, позволяя эффективно осуществлять гиперполяризацию непосредственно в стандартных ЯМР-спектрометрах и МРТ-сканерах для повышения чувствительности ЯМР и МРТ, а ее автор, Маркелов Данил Андреевич, заслуживает присуждения ему степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 - «химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества».

Стась Дмитрий Владимирович,
К.ф.-м.н., специальность 01.04.17 - химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества,
доцент, старший научный сотрудник Лаборатории быстропротекающих процессов
Федерального государственного бюджетного учреждения науки
Института химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского
Сибирского отделения Российской академии наук
630090, Новосибирск, Институтская ул., 3; <http://www.kinetics.nsc.ru/>
Телефон (раб.): (383) 333 1561, электронная почта: stass@kinetics.nsc.ru
22 сентября 2025 г.

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

Підпис Стась Д. В. удостоверяю

