

ОТЗЫВ НАУЧНОГО РУКОВОДИТЕЛЯ

о диссертационной работе 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

Маркелов Данил Андреевич работает в МТЦ СО РАН с 2020 года, и за это время он успешно выполнил сначала бакалаврскую и магистерскую, а затем аспирантскую квалификационную работу. С 2022 он проходит обучение в аспирантуре Новосибирского государственного университета. Диссертационная работа Даниила Андреевича посвящена развитию методов повышения чувствительности спектроскопии магнитного резонанса ядер (ЯМР) за счет рационального использования молекулярного параводорода.

В ходе работы Маркелов Д. А. зарекомендовал себя наилучшим образом. Данил Андреевич с высокой степенью самостоятельности занимался как теоретическими, так и экспериментальными ЯМР исследованиями неравновесных спиновых систем. Маркелов Д. А. самым активным образом проявлял себя при постановке задач, проведении экспериментов и расчетов, теоретической интерпретации результатов и подготовке публикаций в рецензируемых научных журналах. При активном участии аспиранта Д. А. Маркелова были подготовлены четыре научные статьи, в каждой из которых он является первым автором. В настоящее время он выступает исполнителем в двух грантах Российского Научного Фонда, и ранее был исполнителем грантов РНФ и мегагранта. Помимо научной работы, Маркелов Д. А. третий год ведет семинарские занятия по курсу «Молекулярная физика и термодинамика» для студентов первого курса ФФ НГУ.

Результаты работы Маркелова Д. А., представленные в диссертационной работе, являются важным шагом в области индуцированной параводородом поляризации ядер (ИППЯ), создаваемой неразрушающим методом за счет обратимого взаимодействия молекул параводорода и субстрата с каталитическим комплексом (SABRE). Для оптимизации методов повышения чувствительности SABRE, Даниилом Андреевичем был подробным образом изучен вопрос об определении спинового порядка растворенного в образце молекулярного водорода в экспериментах SABRE. Им было показано, что растворенный в образце молекулярный водород при проведении экспериментов SABRE представляет собой смесь параводорода и неравновесного ортоводорода, а конверсия параводорода в ортоводород происходит на каталитическом комплексе. Д. А. Маркелов выполнил численные расчеты спиновой динамики на основе стохастического уравнения Лувилля и продемонстрировал, что формирование неравновесного ортоводорода происходит на каталитическом комплексе когерентным образом за счет смешивания синглетного и центрального триплетного состояний. Маркеловым Д. А. также была экспериментально показана важность процесса конверсии параводорода в ортоводород и был сделан вывод необходимости учитывать этот процесс при рассмотрении спиновой динамики и дальнейшей оптимизации метода SABRE как в сильных, так и ультраслабых магнитных полях.

Особое внимание в работе Д. А. Маркелова уделяется разработке новых импульсных последовательностей радиочастотных (РЧ) импульсов магнитного поля для переноса поляризации на спины ядер ^{15}N методом SABRE в сильном магнитном поле. Перенос поляризации в сильном магнитном поле особенно важен для научного ЯМР сообщества, поскольку позволяет применять метод SABRE на базе стандартного ЯМР спектрометра без привлечения сторонних устройств-поляризаторов. Так, Маркеловым Д. А. были впервые исследованы возможности адиабатических процессов для переноса поляризации методом SABRE. Для переноса поляризации на спины ядер ^{15}N им использовалось радиочастотное магнитное поле с адиабатической разверткой амплитуды, на основе чего показано

преимущество предложенного подхода в случае долгих времен жизни каталитического комплекса. Данил Андреевич также разработал высокоэффективные импульсные последовательности РЧ поля для переноса поляризации в спиновых системах каталитического комплекса, содержащего химически неэквивалентные гидридные ядра ^1H . На основе аналитического рассмотрения спиновой динамики для переноса поляризации им было предложено использовать слабые селективные магнитные РЧ поля с амплитудой порядка нескольких Гц. Высокая эффективность предложенных Д. А. Маркеловым импульсных последовательностей была показана экспериментально для ряда биологически важных субстратов: антибиотиков группы 5-нитроимидазола и потенциального противоопухолевого препарата группы селенадиазолов. Так, предложенные Данилом Андреевичем подходы позволили применить перенос поляризации методом SABRE в сильных магнитных полях к биологически важным молекулам с высокой эффективностью.

На основании написанного, считаю, что Маркелов Д. А., несомненно, достиг уровня, позволяющего самостоятельно определять цели исследования, ставить необходимые задачи и успешно выполнять их. Диссертация, представленная Маркеловым Данилом Андреевичем, соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям по специальности 1.3.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества, а ее автор – присуждения степени кандидата физико-математических наук.

Научный руководитель
Доктор физико-математических наук
г.н.с. лаборатории фотохимических радикальных реакций

Юрковская Александра Вадимовна / 

Федеральное государственное
Бюджетное учреждение науки
Институт «Международный томографический центр»
Сибирского отделения
Российской академии наук (МТЦ СО РАН)
ул. Институтская 3а, Новосибирск
630090, Россия
Тел. : (383) 333-13-33
Эл. почта: yurk@tomo.nsc.ru
06 мая 2025 г.

Подпись 
заверяю.
Ученый секретарь МТЦ СО РАН

К.Х.Н. Л.В. Янышин
06.05.2025

