

О Т З Ы В

на автореферат диссертационной работы Правдивцева Андрея Николаевича «Роль антипересечений уровней энергии при переносе ядерной спиновой гиперполяризации в системах скалярно связанных спинов», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества

Диссертационная работа Правдивцева А.Н. посвящена установлению роли антипересечений ядерных спиновых уровней энергии в процессе перераспределения ядерной спиновой гиперполяризации в скалярно связанных многоспиновых системах для разработки эффективных подходов создания и переноса гиперполяризации. Эти подходы в принципе позволяют усиливать сигналы ЯМР вплоть до нескольких порядков величины, что открывает возможности для новых ЯМР и МРТ приложений. В частности метод динамической поляризации ядер позволяет получать информацию о метаболизме внутри организма. Т.к. проблема низкой чувствительности ЯМР и МРТ является одним из основных факторов, ограничивающих применение данных методов в науке и медицине, то тему работы Правдивцева А.Н. следует признать актуальной.

Целью работы явилось создание установки ЯМР высокого разрешения с быстрым переключением внешнего магнитного поля и возможностью создания гиперполяризации фото-ХПЯ (фотохимическая поляризация ядер, photo-CIDNP), ИППЯ (индуцированная пара-водородом поляризация ядер, PHIP) и SABRE в произвольном магнитном поле. На этой установке проводилось исследование магнитопольевых зависимостей фото-ХПЯ аминокислот в водных растворах, а также магнитопольевых зависимостей ИППЯ и SABRE на примере гидрирования пара-водородом диметилацетилендикарбоксилата для определения оптимальных условий переноса поляризации.

В результате проведенных исследований диссертантом установлено, среди прочего, что наблюдаемая ХПЯ определяется спиновой эволюцией в радикальной паре и когерентным переносом поляризации в диамагнитном продукте её рекомбинации. Также установлено, что механизм образования поляризации SABRE в слабых магнитных полях обусловлен когерентным переносом спинового порядка в областях антипересечения ядерных спиновых уровней энергии. Одним из интересных подходов, примененных в работе, является использование антипересечения ядерных спиновых уровней энергии в слабых и в сильных магнитных полях во вращающейся системе отсчета.

Проведенное исследование четко изложено в автореферате, изложено хорошим языком, четко структурировано и в целом оставляет чрезвычайно приятное впечатление. Особо следует отметить, что основные результаты работы опубликованы в большом числе статей в международных журналах с высоким ИМПАКТ фактором (*Phys. Chem. Chem. Phys.*, *RSC Adv.*, *J. Chem. Phys.*, *Prog. Nucl. Magn. Reson. Sp.* и др., всего 18 статей). Тем самым, по количеству и по качеству публикаций, выносимых на защиту, работа выходит за рамки обычной кандидатской диссертации, как по объему полученного экспериментального материала, так и по значимости сделанных диссертантом выводов.

В целом работа Правдивцева А.Н. выполнена на высоком экспериментальном и теоретическом уровне и полностью отвечает требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а диссертант заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук.

Кандидат физико-математических наук,
директор ресурсного центра «Магнитно-резонансные методы исследования» СПбГУ,
доцент кафедры физической органической химии
Санкт-Петербургского государственного университета (институт Химии)
198504, г. Санкт-Петербург, Университетский пр. 26
Тел. +7 (812) 363-68-99, email: peter.tolstoy@spbu.ru



Толстой Петр Михайлович

**Начальник отдела кадров
Института Химии
22 января 2016 г.**



О Т З Ы В

на автореферат диссертационной работы Правдивцева Андрея Николаевича «Роль антипересечений уровней энергии при переносе ядерной спиновой гиперполяризации в системах скалярно связанных спинов», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества

Диссертационная работа Правдивцева А.Н. посвящена установлению роли антипересечений ядерных спиновых уровней энергии в процессе перераспределения ядерной спиновой гиперполяризации в скалярно связанных многоспиновых системах для разработки эффективных подходов создания и переноса гиперполяризации. Эти подходы в принципе позволяют усиливать сигналы ЯМР вплоть до нескольких порядков величины, что открывает возможности для новых ЯМР и МРТ приложений. В частности метод динамической поляризации ядер позволяет получать информацию о метаболизме внутри организма. Т.к. проблема низкой чувствительности ЯМР и МРТ является одним из основных факторов, ограничивающих применение данных методов в науке и медицине, то тему работы Правдивцева А.Н. следует признать актуальной.

Целью работы явилось создание установки ЯМР высокого разрешения с быстрым переключением внешнего магнитного поля и возможностью создания гиперполяризации фото-ХПЯ (фотохимическая поляризация ядер, photo-CIDNP), ИППЯ (индуцированная пара-водородом поляризация ядер, PHIP) и SABRE в произвольном магнитном поле. На этой установке проводилось исследование магнитополевых зависимостей фото-ХПЯ аминокислот в водных растворах, а также магнитополевых зависимостей ИППЯ и SABRE на примере гидрирования пара-водородом диметилацетилендикарбоксилата для определения оптимальных условий переноса поляризации.

В результате проведенных исследований диссертантом установлено, среди прочего, что наблюдаемая ХПЯ определяется спиновой эволюцией в радикальной паре и когерентным переносом поляризации в диамагнитном продукте её рекомбинации. Также установлено, что механизм образования поляризации SABRE в слабых магнитных полях обусловлен когерентным переносом спинового порядка в областях антипересечения ядерных спиновых уровней энергии. Одним из интересных подходов, примененных в работе, является использование антипересечения ядерных спиновых уровней энергии в слабых и в сильных магнитных полях во вращающейся системе отсчета.

Проведенное исследование четко изложено в автореферате, изложено хорошим языком, четко структурировано и в целом оставляет чрезвычайно приятное впечатление. Особо следует отметить, что основные результаты работы опубликованы в большом числе статей в международных журналах с высоким ИМПАКТ фактором (*Phys. Chem. Chem. Phys.*, *RSC Adv.*, *J. Chem. Phys.*, *Prog. Nucl. Magn. Reson. Sp.* и др., всего 18 статей). Тем самым, по количеству и по качеству публикаций, выносимых на защиту, работа выходит за рамки обычной кандидатской диссертации, как по объему полученного экспериментального материала, так и по значимости сделанных диссертантом выводов.

В целом работа Правдивцева А.Н. выполнена на высоком экспериментальном и теоретическом уровне и полностью отвечает требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а диссертант заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук.

Кандидат физико-математических наук,
директор ресурсного центра «Магнитно-резонансные методы исследования» СПбГУ,
доцент кафедры физической органической химии
Санкт-Петербургского государственного университета (институт Химии)
198504, г. Санкт-Петербург, Университетский пр. 26
Тел. +7 (812) 363-68-99, email: peter.tolstoy@spbu.ru

Толстой Петр Михайлович

**Начальник отдела кадров
Института Химии
22 января 2016 г.**

ПОДПИСЬ РУКИ *П. М. Толстой*
ЗАВЕРЯЮ, НАЧАЛЬНИК
ОТДЕЛА
Н.И.
22.01.2016 г.