

О Т З Ы В

официального оппонента
на диссертационную работу

Правдивцева Андрея Николаевича

«РОЛЬ АНТИПЕРЕСЕЧЕНИЙ УРОВНЕЙ ЭНЕРГИИ ПРИ ПЕРЕНОСЕ ЯДЕРНОЙ СПИНОВОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ В СИСТЕМАХ СКАЛЯРНО СВЯЗАННЫХ СПИНОВ»,
представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний веществ.

Представленная к защите диссертационная работа Андрея Николаевича Правдивцева является замечательным образцом высококлассного научного исследования, затрагивающего актуальнейшие проблемы практического приложения Ядерной Магнитной Резонансной (ЯМР) спектроскопии, в частности Магнитно-Резонансной Томографии (МРТ). Это, во-первых, проблемы генерации неравновесной ядерной намагниченности (гиперполяризации) в мультиспиновых системах с целью резкого увеличения чувствительности метода в $10^4 - 10^6$ раз и, во-вторых, это проблемы управления спиновой динамикой в связанных мультиспиновых ядерных системах. Только на первый взгляд перечисленные проблемы кажутся независимыми друг от друга. При практической реализации алгоритма повышения чувствительности магнитнорезонансных методов (здесь нужно отметить, что в научной литературе можно найти примеры соответствующих исследований *in vivo*, см. ссылки 21, 25 и 28 в рецензируемой работе) удобно манипулировать с двумя подсистемами: подсистемой 1, где производится генерация неравновесных спиновых состояний и подсистемой 2, являющейся предметом резонансного исследования. В таком алгоритме необходимо наличие взаимодействия подсистем для переноса генерируемых в подсистеме 1 когерентностей или намагниченностей в подсистему 2, где перенесенные когерентности трансформируются в намагниченности.

Эффекты антипересечений (АПУ) спин-ядерных мультиспиновых уровней энергии объединенной системы на когерентное перераспределение намагниченностей и когерентностей в подсистеме 2, создаваемых в подсистеме 1 – предмет теоретических и экспериментальных усилий автора, **актуальных** в виду вышесказанного несомненно, и во-многом **пионерских**.

Исследование эффектов АПУ, создаваемых микроволновыми магнитными полями во вращающихся системах координат, позволившее автору сформулировать алгоритм непрерывной генерации гиперполяризации в сильном магнитном поле (PЧ-SABRE), является наиболее весомой и имеющей огромный потенциал практического применения в клинических исследованиях частью диссертационной работы. Автору удалось «усилить сигнал протонов в зависимости от субстрата в 100-300 раз по сравнению с термическим сигналом в поле 4.7 Тл.» В случае индуцированной параводородом поляризации ядер (ИППЯ) «было достигнуто усиление сигнала ЯМР на ядрах ^{13}C ~ 6400 по сравнению с термическим сигналом в поле 9.4 Тл, что соответствует ~5% полной поляризации.»

Авторский список научных работ А.Н. Правдивцева для кандидатской диссертации огромен, он включает 18 научных статей (из них 16 опубликованы в авторитетнейших зарубежных журналах) и 17 тезисов выступлений на международных научных конференциях и симпозиумов. И все это практически за 3 года! Потрясающий пример научной активности.

В методологическом отношении представленное научное исследование является примером глубокого и естественного синтеза теории и эксперимента. **Выводы и научные положения**, выдвигаемые автором, повсеместно подтверждены результатами численного моделирования и, в частности, поэтому не подлежат никакому сомнению.

Автореферат полностью соответствует содержанию диссертационной работы.

В качестве **замечаний**, а лучше сказать, пожеланий, можно отметить следующее:

1. В представленной работе отсутствует обсуждение влияния АПУ на релаксационные процессы в связанных мультиспиновых системах. Сделанное на стр. 35 замечание, что «При моделировании экспериментов по переносу поляризации ХПЯ (см. главу 3) мы в расчете также учитывали релаксацию, а релаксационный супер-оператор рассчитывали, используя теорию Рэдфилда и модель локальных флуктуирующих полей [88, 91, 92]» никак не устраняет этот недостаток. Во-первых, теория Рэдфилда, строго говоря, не относится к случаю парамагнитной релаксации в системах с АПУ. Для связанных спиновых систем существуют дополнительные модели, в основном классифицируемые как коррелированная и некоррелированная релаксация (смотри например: R.L.Vold and R.R.Vold “Nuclear Magnetic Relaxation in Coupled Spin Systems” Progress in NMR

Spectroscopy 12 (1978) 79-133). Во-вторых, наличие АПУ вносит строго спин-селективный характер в релаксационный процесс. (смотри например нашу работу V.F. Tarasov, I.S.M. Saiful, Y. Iwasaki, Y. Ohba, A. Savitsky, K. Mobius, and S. Yamauchi "Electron Spin polarization in an Excited Triplet-Radical Pair System: Generation and Decay of the State" Appl.Magn.Reson. 30 (2006) 619 – 636). Вполне возможно, что для исследованных в диссертационной работе систем, эти вопросы действительно не существенны, но их обсуждение крайне желательно.

2. Второе замечание относится к обсуждению и экспериментам во вращающихся системах координат. Для того, чтобы проводимый эксперимент мог квалифицироваться как эксперимент во вращающейся системе координат необходимо, чтобы был реализован режим спинового локинга, или чтобы локальное магнитное поле, которое «видит» рассматриваемый спин во вращающейся системе координат, было существенно меньше амплитуды РЧ-поля. В случае связанных систем ситуация более сложная и менее однозначная хотя бы потому, что условия локинга могут быть реализованы как для отдельного связанного спина, так и для всего ансамбля скалярно связанных спинов вместе.
3. В тексте рецензируемой работы встречаются лингвистические небрежности, которые, увы, не украшают работу. Смотри, например на стр. 46: «...(а) несмотря на то, что когерентности все-таки были возбуждены, но их амплитуда мала, по сравнению с наблюдаемой;...», или на стр. 50: «...крайне незначительное прямое спин-спиновое взаимодействие» и т.п.

Сделанные замечания никак не снижают превосходную оценку диссертационной работы Андрея Николаевича Правдивцева Представленная диссертация – целостное научное исследование, направленное на решение ясно сформулированных актуальных задач. Автором выполнено исчерпывающее научное исследование, закладывающее основы нового направления физико-химических исследований, РЧ-SABRE, обладающего огромными потенциальными возможностями в клинической практике МРТ диагностики.

Высокое качество экспериментальной работы и глубина теоретического анализа убедительно свидетельствуют в пользу того, что Андрей Николаевич Правдивцев является высококвалифицированным исследователем в области современных методов магнитно-резонансной спектроскопии.

Работа удовлетворяет всем требованиям п. 9, 11, 13 Постановления Правительства России от 24 сентября 2013 г. №842 «О порядке присуждения ученых степеней», предъявляемым к кандидатским диссертациям. Выбранная область исследования соответствует пп. 1, 2, 4, 6 паспорта специальности 01.04.17. Автор работы **Андрей Николаевич Правдивцев заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.**

В заключение, я обязан отметить, что уровень выполненной работы на самом деле гораздо ближе к требованиям, предъявляемым к докторским, чем к кандидатским диссертациям.

Официальный оппонент:

Доктор физ.-мат. наук В. Ф. Тарасов Валерий Федорович Тарасов
Заведующий лабораторией Спиновой Химии **29 января 2016 г.**
Федерального государственного бюджетного
учреждения науки Институт Химической Физики им. Н.Н. Семенова (г. Москва).
119991, г. Москва, ул. Косыгина 4
Рабочий телефон: 8(495)939-7440.
Сайт: <http://www.chph.ras.ru> (организация),
E-mail: icp@chph.ras.ru (организации); valery742@gmail.com (личная).

С
с
у
с

инс
ка В. Ф. Тарасова
ряю
рь В. Ф. Тарасов

