

## О Т З Ы В

на автореферат диссертации Ковтунова Кирилла Викторовича  
на тему: «Индукцированное параводородом усиление сигнала ЯМР в  
гетерогенно-каталитических процессах», представленной на соискание  
ученой степени доктора химических наук по специальности

**02.00.04– физическая химия**

**Актуальность работы.** Диссертация Ковтунова Кирилла Викторовича посвящена применению метода индуцированной параводородом поляризации ядер (ИППЯ) для исследования стехиометрии и механизмов гетерогенных каталитических реакций с участием водорода. В гомогенном катализе данный метод хорошо себя зарекомендовал начиная с 1990-х годов и в настоящее время является эффективным методом изучения механизмов реакций, позволяющим детектировать короткоживущие интермедиаты и побочные продукты. Возможность использования ИППЯ в гетерогенном катализе была показана только двенадцать лет назад. В лаборатории магнитно-резонансной микротомографии МТЦ СО РАН проводятся систематические исследования методом ИППЯ каталитических реакций с участием водорода. Работа К.В. Ковтунова занимает одно из центральных мест в этом направлении. В диссертационной работе К.В. Ковтунова с помощью метода ИППЯ исследованы реакции гидрирования таких субстратов, как 1-бутина, тиофен, шестичленные циклические углеводороды, фуран, дигидрофураны, 1,3-бутадиен и др. Также изучены и сопоставлены кинетические особенности парного и непарного присоединения водорода к пропилену и пропину.

Одной из важных особенностей метода ИППЯ является возможность получения веществ с неравновесной заселённостью ядерных спиновых уровней – так называемых гиперполяризованных соединений. В связи с низкой чувствительностью методов ядерного магнитного резонанса (ЯМР) и

ИНСТИТУТ КАТАЛИЗА  
Вх. № 1524  
ДАТА 20.12.2019

магнитно-резонансной томографии (МРТ) развитие подходов, позволяющих значительно усилить сигнал ЯМР, является крайне актуальным. Гетерогенное гидрирование параводородом является одним из таких подходов, позволяющим получать гиперполяризованные соединения в растворах и в газовой фазе с перспективой их дальнейшего использования в качестве контрастных агентов для МРТ.

Важно отметить, что наблюдение эффектов ИППЯ возможно только в случае парного присоединения параводорода, что означает, что два атома из молекулы параводорода оказываются в составе одной и той же молекулы продукта реакции. Данное направление исследований также отражено в диссертации на примере гетерогенных каталитических систем с различными металлами. Кроме того, в диссертации продемонстрирована практическая значимость исследований в области ИППЯ в гетерогенных каталитических реакциях на примере парного присоединения водорода к различным ненасыщенным органическим молекулам.

Также важно, что автор не ограничился просто ЯМР спектральными эффектами усиления сигналов, но и продемонстрировал возможности подхода на примере  $^1\text{H}$  3D МРТ изображения спиралевидных труб, по которым протекает гиперполяризованный газообразный пропан-d6.

#### **Замечание и пожелание.**

1. На заре создания метода ЯМР классиками были предложены две шкалы химических сдвигов:  $\delta$  и  $\tau$ . В работе в подписях к спектрам ЯМР я не нашёл упоминания о том, какая использована шкала (хотя из контекста видно, что использована шкала  $\delta$ ). Справедливости ради, нужно отметить, что во многих международных публикациях, так же, как и в настоящей работе, пишут в подписях к спектрам «химический сдвиг, м.д.» без упоминания шкалы  $\delta$ .
2. На рисунках 5 и 6 представлены спектры, которые соответствуют достаточно сложным много компонентным системам в ходе необратимых

реакций и при ИППЯ. Наглядность результатов только бы выиграла, если бы на рисунках были представлены спектры исходного вещества и некоторых формирующихся продуктов, снятых в чистом виде без ИППЯ.

Однако перечисленные выше замечания носят технический и оформительский характер и не затрагивают суть и выводов проделанной работы. Диссертационная работа К.В. Ковтунова соответствует критериям, установленным пунктами 9-14 «Положения о присуждении учёных степеней», утверждённом постановлением правительства РФ №842 от 24.09.2013. Ковтунов Кирилл Викторович безусловно заслуживает присвоения ученой степени доктора химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Доктор химических наук,  
ведущий научный сотрудник Федерального  
государственного бюджетного учреждения  
науки, Института неорганической химии  
им. А.В. Николаева Сибирского  
отделения Российской академии наук,

Бабайлов С. П.

Подлинность подписи д.х.н., ведущего научного сотрудника Института неорганической химии им. А. В. Николаева Сибирского отделения Российской академии наук Бабайлова С. П.

Ученый секретарь

д.х.н.

Почтовый адрес  
ИНХ СО РАН

Герасько О.А.

Лаврентьева, 3,