

## РЕЦЕНЗІЯ

на дисертаційну роботу

**Овчаренка Артура Юрійовича**

на тему «Виявлення змін оптичних властивостей та структурних неоднорідностей матеріалів методами рентгенівського фазового контрасту»,  
представлену на здобуття ступеня доктора філософії  
в галузі знань 10 «Природничі науки»  
за спеціальністю 104 «Фізика та астрономія»

### **Актуальність теми дисертації.**

Рентгенівське випромінювання широко використовується у медицині, матеріалознавстві, дефектоскопії, геології, археології та багатьох інших галузях у якості неруйнівного методу дослідження. У зв'язку з розвитком науки постають задачі розробки компактного та дешевого рентгенівського обладнання, покращення якості одержуваних зображень на існуючих лабораторних приладах шляхом використання масок та оптичних лінз з нових матеріалів у рентгенівському діапазоні.

У даний час одним із потужних методів досліджень є комп'ютерне моделювання. Його застосування для дослідження взаємодії рентгенівського випромінювання з речовиною дозволяє отримати певні оптичні характеристики матеріалів за відсутності їх значень з експерименту. Окрім цього це надає можливість проводити подібні дослідження з меншими матеріальними затратами. Серед досліджуваних оптичних параметрів матеріалів при цій взаємодії випромінювання з речовиною є декременти заломлення та коефіцієнти поглинання рентгенівського випромінювання металевих сплавів. Добре відомо, що ці характеристики залежать від електронної густини речовини. У свою чергу електронна густина змінюється суттєво при тепловому розширенні, механічних деформаціях, фазових переходах та інш. Також електронна густина залежить від концентрації компонентів у металевих сплавах, від їх кристалічної структури, наявності дефектів та структурних неоднорідностей. Нажаль, у загальному доступі конкретні числові данні наведених оптичних параметрів, зокрема, для металевих сплавів з певною концентрацією компонентів відсутні. Тому розробка способів отримання таких оптичних характеристик та їх змін для конкретних сплавів та матеріалів є важливим на сьогоднішній день. Дисертаційне дослідження А.Ю.Овчаренка спрямоване на розв'язання задачі з виявлення змін оптичних властивостей та структурних неоднорідностей матеріалів методами рентгенівського фазового



контрасту з використанням числового моделювання, що робить її вельми актуальною.

### **Оцінка обґрунтованості наукових результатів дисертації, їх достовірності та новизни.**

Наукові результати дисертаційної роботи А.Ю. Овчаренка. переважно стосуються вивчення взаємодії рентгенівського випромінювання з різними матеріалами та встановлення взаємозв'язків між експериментальними параметрами з метою одержання найбільш якісних фазоконтрастних зображень. Дані результати повністю узгоджуються з теоретичними уявленнями та не суперечать відомим експериментальним даним, що свідчить про їх достовірність.

Наукова новизна результатів дисертації полягає в тому, що створено підхід для моделювання взаємодії рентгенівського випромінювання з тривимірними об'єктами довільної геометричної форми зі складною структурою та різною природою матеріалів. Запропонований аналітичний критерій для визначення мінімальних розмірів об'єктів, які можна виявити за допомогою рентгенівського випромінювання. Запропоновано спосіб розрахунку оптичних властивостей матеріалів у рентгенівському діапазоні з використанням результатів моделювання методами молекулярної динаміки. Показано можливість виявлення оптично неоднорідних та багатошарових об'єктів методами моделювання рентгенівського фазового контрасту. Запропоновано спосіб побудови тривимірних зображень об'єктів на основі результатів дифракційних досліджень. Проведено моделювання дифракції рентгенівського випромінювання для металів і їх сплавів в умовах деформації, теплового розширення, фазових переходів. Запропоновано та реалізовано спосіб знаходження глибини проникнення рентгенівського випромінювання у металеві сплави.

Дисертаційну роботу виконано у лабораторії №31 "Рентгенівської фазоконтрастної томографії на основі малогабаритних прискорювачів" Інституту прикладної фізики НАН України і є частиною досліджень, які проводилися за темами: "Діагностичне обладнання для фазового контрасту на компактному джерелі рентгенівського випромінювання" (№0119U100151, т.в. 01.01.2019 – 31.12.2021), "Розробка елементів рентгенівської оптики із використанням протонно-променевої літографії для рентгенівської фазоконтрастної томографії" (№0121U110846, т.в. 10.02.2021 – 31.01.2022), "Фізичні основи формування рентгенівських фазоконтрастних зображень з використанням джерел квазімонохроматичного випромінювання на базі компактних прискорювачів протонів і електронів" (№0122U000417, т.в.



01.01.2022 – 01.01.2026), "Застосування рентгенівського фазового контрасту та анігіляційної спектроскопії для дослідження дефектної структури матеріалів" (№0124U002466, т.в. 19.02.2024 – 31.12.2025). А також у рамках наукового співробітництва з Асоційованою міжнародною лабораторією лінійних прискорювачів (LIA) при виконанні Міжнародного дослідницького проекту (IRP) "Інструментальні розробки для експериментів на прискорювальних установках і прискорювальні технології" (IDEATE): "Розробка детекторних систем для експериментів на прискорювачах та технологій для фізики прискорювачів. Етап1: Теоретичне обґрунтування проекту створення дослідних установок рентгенівського фазового контрасту на базі компактних прискорювачів в IJCLab (LAL, ThomX) та ІПФ НАН України для ранньої медичної діагностики" (№0120U103425, т.в. 15.06.2020 – 31.12.2020), "Розробка детекторних систем для експериментів на прискорювачах та технологій для фізики прискорювачів.

#### **Оцінка змісту дисертації, її завершеність та дотримання принципів академічної доброчесності.**

За своїм змістом дисертаційна робота здобувача А.Ю. Овчаренка повністю відповідає Стандарту вищої освіти зі спеціальності 104 "Фізика та астрономія" та напрямкам досліджень відповідно до освітньо-наукової програми «Фізика».

Дисертаційна робота є завершеною науковою працею.

Розглянувши звіт подібності за результатами перевірки дисертаційної роботи на текстові співпадіння, можна зробити висновок, що дисертаційна робота Овчаренка Артура Юрійовича є результатом самостійних досліджень здобувача і не містить елементів фальсифікації, компіляції, фабрикації, плагіату та запозичень. Використані ідеї, результати, тексти і графічний матеріал інших авторів мають належні посилання на відповідне джерело.

#### **Мова та стиль викладення результатів.**

Дисертаційна робота написана українською мовою. Матеріал роботи викладений структуровано і послідовно, що дає можливість доволі повно ознайомитися з методами та результатами дослідження. Дисертація проілюстрована відповідним графічним матеріалом за результатами числових розрахунків.

Робота складається зі вступу, чотирьох розділів, висновків, списку літератури та одного додатку. Загальний обсяг дисертації 158 сторінок.

У вступній частині обґрунтовано важливість теми дисертаційного дослідження, визначено мету та завдання роботи, а також описано об'єкт,



предмет і методи дослідження. Також розкрито зв'язок дисертації з науковими напрямами Інституту прикладної фізики НАН України, а також зазначено наукову та практичну новизну отриманих результатів. Окремо виділено особистий внесок здобувача та представлено інформацію про апробацію результатів дисертації та публікації.

Перший розділ присвячений аналізу сучасних літературних джерел, що охоплюють застосування рентгенівського випромінювання у медицині та матеріалознавстві. Проведено порівняння різних джерел рентгенівського випромінювання з урахуванням їх характеристик, фізичних параметрів та придатності для наукових досліджень. Огляд методів реалізації рентгенівського фазового контрасту показує їх переваги в порівнянні зі звичайною рентгенографією. Крім того, розглянуто публікації, що стосуються моделювання дифракції рентгенівського випромінювання. Виявлено, що здебільшого в літературі дослідження обмежені моделюванням простих об'єктів з певною симетрією та однорідними оптичними властивостями, що підкреслює необхідність подальшого розвитку методів моделювання взаємодії рентгенівського випромінювання з речовиною.

У другому розділі детально описано методику створення тривимірних моделей об'єктів різної геометрії та розмірів: як оптично однорідних, так і неоднорідних багат шарових структур з випадковим розташуванням внутрішніх компонент. Автором запропоновано підхід до обчислення товщин об'єктів і зсувів фаз рентгенівського випромінювання, що значно розширює можливості моделювання дифракції в порівнянні з попередніми роботами. На основі відомих теоретичних співвідношень та методів молекулярної динаміки вперше запропоновано підхід для обчислення декрементів заломлення та коефіцієнтів поглинання металевих сплавів у контексті змін електронної густини.

Третій розділ містить результати моделювання дифракції рентгенівського випромінювання на тривимірних об'єктах довільної форми з малими значеннями декрементів заломлення, характерними для біологічних тканин. На основі отриманих дифракційних картин для різних просторових орієнтацій об'єкта було виконано відновлення його геометричної форми і розмірів. Запропоновано спосіб утворення тривимірних числових моделей оптично неоднорідних багат шарових структур зі змінним декрементом заломлення. Проведено порівняння результатів моделювання для оптично однорідних і багат шарових об'єктів, що продемонструвало можливість розрахункової моделі відрізняти незначні зміни оптичних властивостей, викликані шаруватою структурою об'єкта. Встановлено, що якість рентгенівського фазоконтрастного зображення залежить від кількості зон Френеля, які потрапляють у геометричну



тінь об'єкта. Знайдено аналітичний критерій для визначення мінімальних розмірів об'єктів або структурних неоднорідностей, які можуть бути візуалізовані за заданих умов.

У четвертому розділі проведено аналіз змін оптичних параметрів металевих сплавів на основі Fe-Cu-Ni під час механічних деформацій стиснення та розтягу. Показано ефективність методу рентгенівського фазового контрасту для виявлення механічних деформацій у металевих конструкціях. На базі запропонованої методики було розраховано оптичні параметри сплавів Fe-Cr-Al в умовах теплового розширення. Продемонстровано можливість використання рентгенівського випромінювання для ідентифікації фазових переходів у металах на прикладі взаємодії дифракції рентгенівського випромінювання з кристалами альфа-Zr і бета-Zr. Запропоновано метод визначення глибини проникнення рентгенівського випромінювання для металевих сплавів, встановлено, що глибина проникнення збільшується зі збільшенням температури та концентрації алюмінію. Отримані результати добре корелюють з експериментальними даними. Досліджено формування дифракційних зображень від протяжних джерел рентгенівського випромінювання з урахуванням їх когерентності. Визначено розміри зони когерентності квазімонохроматичного джерела та оптимальні параметри відстані від джерела до об'єкта для отримання чітких зображень.

Основний текст дисертації завершується висновками щодо проведеного дослідження. Додаток містить перелік публікацій здобувача за темою дисертаційного дослідження.

На основі цього можна зробити висновок, що у дисертаційній роботі виконано поставлені наукові завдання, а здобувач продемонстрував достатньо високий науковий рівень і здатність займатись науковою роботою.

Дисертаційну роботу оформлено відповідно до вимог наказу МОН України від 12 січня 2017 р. № 40 «Про затвердження вимог до оформлення дисертації».

#### **Оприлюднення результатів дисертаційної роботи.**

Наукові результати дисертації опубліковані у 15 наукових працях здобувача, серед яких: 4 статті у наукових виданнях, включених на дату опублікування до переліку наукових фахових видань України і проіндексованих у наукометричних базах даних Web of Science Core Collection та/або Scopus, з них 2 статті опубліковані у наукових виданнях, які віднесені до четвертого квартилю (Q4) та 2 статті опубліковано у наукових виданнях, які віднесені до третього квартилю (Q3) відповідно до класифікації SCImago Journal and Country Rank.



Результати дисертаційної роботи були апробовані в 11 доповідях на наукових фахових конференціях.

Описані в дисертаційній роботі наукові результати повністю висвітлені у наукових публікаціях здобувача.

#### **Недоліки та зауваження до дисертаційної роботи.**

1. Тривимірні об'єкти досліджень для проведення моделювання задаються як геометричне місце точок, які формують поверхню досліджуваних зразків, але при цьому залишилось поза увагою питання про достатню мінімальну кількість точок для одержання коректних результатів, оскільки вона впливає на точність вимірювання товщин об'єктів дослідження у напрямку поширення рентгенівського випромінювання та відповідних зсувів фаз.

2. Вивчення прояву розмірних ефектів при взаємодії матеріалів з рентгенівським випромінюванням проводилось на прикладі біологічних об'єктів без врахування коефіцієнта поглинання. Було показано, що якщо в область геометричної тіні об'єкта потрапляє менше однієї зони Френеля, то об'єкт стає невидимим для даного дослідження. При цьому, з тексту роботи не зрозуміло чи буде виконуватись така сама умова видимості для металевих сплавів, де, як відомо, нехтувати поглинанням рентгенівського випромінювання не можна, а декременти заломлення та коефіцієнти поглинання у металах та їх сплавах на 1-2 порядки є більшими у порівнянні з об'єктами біологічної природи.

3. При дослідження глибини проникнення рентгенівського випромінювання у металеві сплави на профілях інтенсивності рентгенівського випромінювання від циліндричних зразків на рис. 4.8 є максимуми інтенсивності, однак їх природу не пояснено.

4. Реальні джерела рентгенівського випромінювання не є строго монохроматичними. Результати у дисертаційній роботі одержані для монохроматичних джерел, що є певною ідеалізацією. Доцільно було б пояснити вплив ступеню монохроматичності рентгенівського випромінювання на якість фазоконтрастних зображень досліджуваних об'єктів.

Вважаю, що висловлені зауваження не зменшують загальну наукову новизну та практичну значимість результатів і не впливають на позитивну оцінку дисертаційної роботи. Матеріал у дисертації викладено послідовно, всі основні результати обґрунтовані і мають чітке наукове пояснення.



**Висновок про дисертаційну роботу.**

Вважаю, що дисертаційна робота здобувача ступеня доктора філософії Овчаренка Артура Юрійовича на тему «Виявлення змін оптичних властивостей та структурних неоднорідностей матеріалів методами рентгенівського фазового контрасту» виконана на високому науковому рівні, не порушує принципів академічної доброчесності та є закінченим науковим дослідженням, сукупність результатів якого розв'язує наукове завдання. Дисертаційна робота за актуальністю, практичною цінністю та науковою новизною повністю відповідає вимогам чинного законодавства України, що передбачені в п.6 – 9 «Порядку присудження ступеня доктора філософії та скасування рішення разової спеціалізованої вченої ради закладу вищої освіти, наукової установи про присудження ступеня доктора філософії», затвердженого Постановою Кабінету Міністрів України від 12 січня 2022 р. № 44.

Вважаю, що здобувач А.Ю.Овчаренко безумовно заслуговує на присудження ступеня доктора філософії в галузі знань 10 “Природничі науки” за спеціальністю 104 “Фізика та астрономія”.

**Рецензент:**

Зав. відділу моделювання радіаційних ефектів  
та мікроструктурних перетворень у  
конструкційних матеріалах

Інституту прикладної фізики НАН України,  
д.ф.-м.н., проф.

 Дмитро ХАРЧЕНКО


Підпис д.ф.-м.н., проф.

Харченка Д.О.

засвідчую учений секретар

ІПФ НАН України, к.ф.-м.н., с.н.с.



 Олексій ВОРОШИЛО