

ВІДГУК ОФІЦІЙНОГО ОПОНЕНТА

на дисертаційну роботу

Овчаренка Артура Юрійовича

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

1. Актуальність теми дисертаційної роботи

Метод рентгенівського фазового контрасту як потужний метод неруйнівного дослідження має ряд суттєвих переваг порівняно з традиційною рентгенівською абсорбційною візуалізацією. По-перше, такий підхід демонструє високу чутливість до візуалізації слабо поглинаючих матеріалів та забезпечує контраст між матеріалами з близькими значеннями коефіцієнтів поглинання. Зокрема, метод фазового контрасту є особливо ефективним для візуалізації таких об'єктів як біологічні тканини та полімери. По-друге, метод рентгенівського фазового контрасту потребує менших доз опромінення для отримання якісних зображень порівняно з рентгенографією, що відіграє ключову роль у медичній діагностиці та дозволяє проводити більш тривалі дослідження живих тканин з меншим ризиком для здоров'я. Крім того, даний метод знайшов своє широке застосування у матеріалознавстві (дослідження властивостей композитів, пористих матеріалів), біологічних дослідженнях (вивчення клітинних структур), а також у промисловій дефектоскопії.

Дисертаційна робота Овчаренка А.Ю. присвячена виявленню структурних змін та візуалізації внутрішньої будови об'єктів різної природи методами рентгенівського фазового контрасту, дослідженню зміни оптичних властивостей матеріалів у рентгенівському діапазоні в умовах деформації, теплового розширення, фазових переходів, варіацій елементного складу. Дисертантом проведено комп'ютерне моделювання дифракції рентгенівського випромінювання на об'єктах різної геометричної форми та розмірів: оптично-однорідних та неоднорідних багат шарових з наявністю внутрішніх компонент. Вперше на основі результатів молекулярно-динамічного моделювання та відомих теоретичних співвідношень було запропоновано та реалізовано методику розрахунку декрементів заломлення та коефіцієнтів поглинання рентгенівського випромінювання для металів і їх сплавів у залежності від концентрації компонентів та температури. Розробка нових підходів та вдосконалення вже наявних методів для проведення комп'ютерного моделювання взаємодії рентгенівських променів з різними матеріалами є досить важливими задачами для різних галузей медицини та матеріалознавства і свідчить про актуальність теми дисертаційної роботи Овчаренка А.Ю.

2. Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами фундаментальних та прикладних досліджень

Дисертаційна робота виконувалась 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 (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.

3. Основні положення та висновки роботи, їх новизна, обґрунтованість та достовірність

Теорія Френеля-Кірхгофа дозволяє доволі точно описувати дифракційні ефекти, але процес моделювання фазоконтрастних зображень на її основі має певні труднощі. Це пояснює відносно невелику кількість наукових робіт у цій галузі та підкреслює значення нових підходів до її вдосконалення. Це пов'язано з необхідністю високоточного чисельного інтегрування, що є ресурсомістким процесом, особливо для значних за розмірами об'єктів, які потребують великої кількості точок розбиття площини інтегрування. Також можуть виникати суттєві труднощі при моделюванні великих об'єктів, які потребують високої деталізації. Для часткового вирішення даної проблеми дисертантом було використано технологію паралельних обчислень OpenCL. Крім цього, запропонована

методика розрахунку товщин і зсувів фаз РВ враховує кут падіння променів у площині об'єкта, що підвищує точність розрахунків.

До найбільш значних та нових результатів дисертаційної роботи слід віднести наступні.

- ❖ Розроблено інноваційний метод комп'ютерного моделювання складних об'єктів з різними оптичними властивостями, який забезпечує високу точність відтворення деталей та дозволяє обчислювати фазові зміни і товщину об'єктів при проходженні рентгенівських променів у різних напрямках.
- ❖ Запропоновано метод для симуляції дифракції рентгенівських променів на тривимірних об'єктах з різними кутами падіння випромінювання, що дає можливість реконструювати форму досліджуваних зразків за їх проекціями по аналогії з комп'ютерною томографією.
- ❖ Виявлено значну чутливість рентгенівського випромінювання до варіацій електронної густини матеріалів, яка пов'язана з механічними деформаціями, тепловим розширенням, структурними перетвореннями та іншими процесами, що впливають на об'єм або внутрішню будову об'єктів.
- ❖ Визначено математичний критерій для розрахунку мінімальних розмірів структур, які можна виявити за допомогою рентгенівської візуалізації.
- ❖ Розроблено і апробовано метод обчислення оптичних характеристик матеріалів (декрементів заломлення та коефіцієнтів поглинання) у рентгенівському діапазоні, який базується на теоретичних співвідношеннях та результатах моделювання методами молекулярної динаміки, що було продемонстровано на прикладі сплавів Fe-13%Cr-(2,4,6,8)%Al та Fe-1.3%Cu-1%Ni при різних фізичних умовах.
- ❖ Впроваджено методику визначення глибини проникнення рентгенівського випромінювання в різні матеріали. Отримані результати повністю узгоджуються з передбаченнями скалярної дифракційної теорії Френеля-Кірхгофа.
- ❖ Розроблено веб-застосунок для моделювання взаємодії рентгенівського випромінювання з речовиною, який дозволяє варіювати довжину хвилі та типи джерел випромінювання, визначати оптимальні параметри для отримання якісних зображень та умови когерентності випромінювання.

Усе зазначене вище свідчить про те, що в дисертаційній роботі було розв'язано ряд важливих задач, пов'язаних з розвитком рентгенівської фазоконтрастної візуалізації методом вільного поширення.

Наукові твердження, висновки та рекомендації, викладені автором у роботі представлені у логічній послідовності та ретельно обґрунтовані, виходячи з результатів досліджень.

Достовірність, обґрунтованість і коректність наукових результатів та висновків дисертаційної роботи забезпечується систематичністю і повторюваністю отриманих даних та узгодженням їх з результатами інших авторів.

4. Наукова і практична дисертаційної роботи та новизна результатів

У медицині та біології високоточне моделювання фазоконтрастних зображень допомагає розробляти нові методи діагностики. Візуалізація слабопоглинаючих структур розмірів, таких як судини, нерви чи тонкі тканини, потребує детального розрахунку зміни фази променів. Тому нові моделі, що враховують взаємодію хвильової фази з об'єктом, значно поліпшують діагностичні можливості, особливо у випадках, де використання контрастних рідин є небажаним або неможливим. Метод рентгенівського фазового контрасту також знайшов своє широке застосування у промисловій дефектоскопії як потужний інструмент для перевірки якості складних конструкцій і компонентів мікроелектроніки. Вдосконалені моделі, побудовані на основі теорії Френеля-Кірхгофа, забезпечують кращу симуляцію взаємодії РВ неоднорідностями у зразках, дозволяючи виявляти навіть найдрібніші дефекти, що підвищує точність контролю та надійність продукції.

Таким чином, розробка нових підходів для моделювання рентгенівських фазоконтрастних зображень - це важлива задача, спрямована на вдосконалення діагностичних і дослідницьких можливостей сучасної науки. Даний напрямок сприяє підвищенню точності і якості зображень, оптимізації обладнання і відкриттю нових шляхів для вивчення складних об'єктів та процесів.

5. Оцінка змісту дисертаційної роботи, її оформлення, завершеність та академічна доброчесність

Дисертаційна робота Овчаренка Артура Юрійовича є завершеною науковою працею, яка складається з анотації, вступу, чотирьох розділів, висновків, переліку використаних джерел та додатку. Дисертацію викладено на 158 сторінках друкованого тексту.

Анотація належним чином відображає основний зміст дисертації, повно висвітлює наукові висновки та практичне значення даної роботи.

У *вступі* зазначається актуальність теми дисертаційної роботи, чітко визначені мета та основні завдання, описана наукова новизна та практичне значення отриманих результатів. Також відзначається особистий внесок автора, наведено дані про структуру та обсяг роботи.

У *першому розділі* проаналізовано сучасні літературні джерела, що стосуються використання рентгенівського випромінювання (РВ) в медицині та матеріалознавстві. Проведено порівняння джерел РВ за їх характеристиками,

фізичними розмірами та придатністю до певних наукових досліджень. Огляд методів реалізації рентгенівського фазового контрасту продемонстрував їх переваги над традиційною рентгенографією. Також розглянуто публікації з моделювання дифракції РВ, де здебільшого обиралися прості об'єкти з певною симетрією та однорідністю оптичних властивостей. Обґрунтовано потребу у вдосконаленні методів моделювання взаємодії РВ з речовиною.

Другий розділ присвячено створенню тривимірних моделей об'єктів довільної форми й розмірів: однорідних та багатошарових з довільним розташуванням внутрішніх компонентів. Запропоновано методу обчислення товщин та фазових зсувів РВ, що значно розширює перелік об'єктів для моделювання дифракції. Використовуючи відомі теоретичні співвідношення та методи молекулярної динаміки, вперше було запропоновано підхід для розрахунку декрементів заломлення й коефіцієнтів поглинання металів та їх сплавів для процесів, пов'язаних зі зміною електронної густини.

У *третьому розділі* показано результати моделювання дифракції РВ на тривимірних об'єктах з низькими значеннями декрементів заломлення, характерних для біологічних тканин. Виконано відновлення геометричної форми та розмірів об'єкта на основі дифракційних картин для різних орієнтацій об'єкта у просторі. Запропоновано метод створення моделей оптично неоднорідних багатошарових об'єктів з варіаціями декрементів заломлення. Порівняння результатів для однорідних і багатошарових об'єктів показало високу чутливість підходу до змін оптичних властивостей, спричинених шаруватою структурою. Виявлено залежність якості рентгенівського фазоконтрастного зображення від кількості зон Френеля, які перекриває об'єкт та знайдено критерій для визначення мінімальних розмірів об'єктів або структурних неоднорідностей у зразках, які можна "побачити" при заданих параметрах.

Четвертий розділ містить розрахунки змін оптичних параметрів металевих сплавів на основі Fe-Cu-Ni в умовах механічних деформацій стиснення та розтягу. Показано ефективність методу рентгенівського фазового контрасту для виявлення механічних деформацій у металевих конструкціях. На основі молекулярно-динамічного моделювання визначено оптичні параметри сплавів Fe-Cr-Al при тепловому розширенні, досліджено взаємодію РВ з кристалами α -Zr і β -Zr і показана можливість ідентифікації фазових переходів у металах методом рентгенівського фазового контрасту. Запропоновано дифракційний метод визначення глибини проникнення РВ для металів і їх сплавів у залежності від температури й концентрації компонентів. Одержані результати моделювання добре узгоджується з експериментальними даними. Досліджено формування дифракційних зображень об'єктів від протяжних джерел РВ з урахуванням ступеня їх когерентності, визначено розміри зони

когерентності квазімонохроматичного джерела, а також оптимальні параметри відстані від джерела до об'єкта для отримання чіткого зображення зразка.

Висновки автора належним чином адаптовані до визначених мети та завдань дисертаційної роботи. Їх структура чітко відображає основні результати наукових досліджень, проведених автором в рамках роботи.

За мовою, структурою змістом та стилем написання дисертаційна робота Овчаренка А.Ю. повністю відповідає вимогам до оформлення дисертацій, затверджених МОН України, наказ №40 від 12.11.2017 року.

У дисертаційній роботі та наукових публікаціях дисертанта не було виявлено порушень академічної доброчесності, що стосуються подання основних наукових результатів. Автор дотримувався високих стандартів наукової доброчесності та об'єктивності у викладенні отриманих даних. Наведені у дисертації результати є об'єктивним відображенням проведених наукових досліджень, а автор виявив належний рівень професійної етики у поданні власних висновків та інтерпретації отриманих результатів.

7. Повнота викладу основних результатів дисертації в опублікованих працях

Проаналізувавши наукові праці Овчаренка А.Ю., можна стверджувати, що отримані дисертантом нові наукові результати та висновки відповідають умовам наукової новизни і вимогам МОН України, які висуваються до дисертацій на здобуття наукового ступеня доктора філософії.

Основні результати дисертаційної роботи Овчаренка А.Ю. опубліковані у 15 працях. З них 4 статті в наукових фахових виданнях України, які індексуються в наукометричних базах Scopus та/або Web of Science Core Collection, та 11 тез доповідей на наукових конференціях. В усіх опублікованих працях Овчаренком А.Ю. ґрунтовно та в повному обсязі висвітлені основні наукові положення, результати і висновки дисертаційної роботи. Отримані дисертантом наукові положення і результати досліджень апробовані на наукових конференціях різного рівня.

8. Недоліки та зауваження до дисертаційної роботи

Дисертаційна робота Овчаренка Артема Юрійовича “Виявлення змін оптичних властивостей та структурних неоднорідностей матеріалів методами рентгенівського фазового контрасту” виконана на високому професійному рівні та в цілому залишає позитивне враження, однак, на мою думку має певні недоліки.

1. Не зовсім коректно в дисертаційній роботі сформульований об'єкт дослідження, тому вважаю за необхідне уточнити його таким чином: «...фізичні процеси при взаємодії рентгенівського випромінювання з

тривимірними об'єктами живої і неживої природи, спричинені механічною деформацією, тепловим розширенням, фазовими переходами та зміною внутрішньої структури; розмірні, температурні і концентраційні ефекти в оптичних властивостях металів та сплавів.

2. У розділі 3 наведені результати моделювання дифракції для об'єктів з малими значеннями декременту заломлення δ , проте не було враховано коефіцієнт поглинання β (поглинанням знехтувано).
3. У підрозділі 4.5, де було розглянуто моделювання дифракції рентгенівського випромінювання від протяжних джерел, протяжне джерело апроксимувалося квадратом, по вершинам якого розташовані точкові джерела. Було зазначено, що наближено дане джерело вважалось круглим, так як вершини квадрата лежать на колі певного діаметра. Наскільки допустиме дане наближення? Чи суттєво зміниться дифракційна картина при розміщенні точок джерела у вигляді іншого довільного правильного многокутника та при додаванні точок всередину?
4. Для моделювання автором роботи використовувалась фіксована довжина хвилі рентгенівського випромінювання 1.5\AA , але відомо, що реальні джерела не є ідеально монохроматичними і завжди мають певний спектр випромінювання та розподіл за довжинами хвиль, що може суттєво впливати на якість дифракційних зображень. Вважаю, що доцільно було б провести дослідження впливу ступеню монохроматичності на дифракційні зображення об'єктів та порівняти їх з попередніми результатами.

Усі вказані зауваження носять рекомендаційний характер і не впливають на загальну позитивну оцінку дисертаційної роботи Овчаренка Артема Юрійовича, яка є одноособово створеною кваліфікаційною науковою працею, що містить сукупність результатів і наукових положень, поданих автором для публічного захисту, та відповідає спеціальності 104 «Фізика та астрономія».

Загальний висновок

Дисертаційна робота Овчаренка Артура Юрійовича на тему «Виявлення змін оптичних властивостей та структурних неоднорідностей матеріалів методами рентгенівського фазового контрасту» є завершеним науковим дослідженням, яке характеризується актуальністю, науковою новизною, достовірністю та практичною цінністю отриманих результатів.

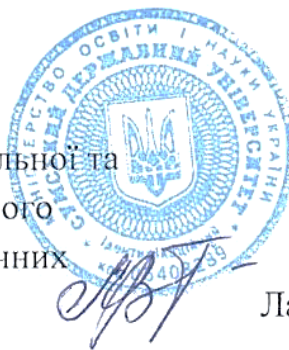
У роботі вирішено науково-технічну задачу сучасної фізики, яка полягає у визначенні особливостей формування рентгенівських фазоконтрастних зображень об'єктів та впливу зовнішніх фізичних полів на оптичні властивості металів і сплавів.

Зміст дисертаційної роботи Овчаренка А.Ю. повністю відповідає поставленим на початок дослідження завданням та меті. Текст дисертації виконано науковим стилем і термінологією, він логічно структурований та містить необхідну для дисертації кількість висновків. Кожен розділ супроводжується обґрунтованими і логічними висновками. За кількістю та обсягом наукові публікації відповідають чинним вимогам МОН України щодо можливості присудження наукового звання доктора філософії.

Дисертаційна робота 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, а її автор, Овчаренко Артур Юрійович, заслуговує присудження ступеня доктора філософії за спеціальністю 104 «Фізика та астрономія».

ОФІЦІЙНИЙ ОПОНЕНТ:

Завідувачка кафедри електроніки, загальної та прикладної фізики Сумського державного університету, доктор фізико-математичних наук, професор



Лариса ОДНОДВОРЕЦЬ

