

## **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 з галузі знань 10 «Природничі науки» за спеціальністю 104 «Фізика та астрономія»

### **Актуальність теми дисертації**

Методи рентгенівського фазового контрасту відіграють важливу роль у науці та промисловості завдяки своїм перевагам при візуалізації структурних особливостей матеріалів та біологічних тканин у порівнянні із традиційними методами. На відміну від класичної рентгенографії, яка заснована на використанні явища поглинання рентгенівських променів, методи фазового контрасту базуються на вимірюванні фазового зсуву хвиль, який виникає при проходженні променів через об'єкт, що дозволяє отримати зображення об'єктів з низькою поглинальною здатністю. Це дозволяє аналізувати структуру матеріалів на мікрорівні, виявляючи, зокрема, мікродофекти та неоднорідності, що важливо для галузей, де якість матеріалу критично впливає на безпеку та продуктивність. Крім цього, даний метод посідає важливе місце в медицині для діагностики патологій за рахунок його високої чутливості до змін показника заломлення та, в результаті, можливості виявлення близьких за своїми поглинальними властивостями об'єктів. Зокрема, даний метод дозволяє виявити структурні зміни в кістковій тканині або пухлинах з більш високою точністю, ніж звичайна рентгенографія. Крім того, використання методів фазового контрасту дозволяє отримати чітке зображення внутрішньої структури об'єктів із низькою густиною без шкоди для пацієнта завдяки меншій дозі опромінення.

У дисертаційному дослідженні Артура Юрійовича Овчаренка було вирішено низку науково-дослідних задач, пов'язаних із створенням нових підходів для комп'ютерного моделювання рентгенівських фазоконтрастних зображень, одержаних методом вільного поширення. Проведено моделювання дифракції рентгенівського випромінення на об'єктах різної геометричної форми та розмірів з варіаціями оптичних властивостей в широкому діапазоні. На основі відомих теоретичних співвідношень та результатів молекулярно-динамічного моделювання запропоновано методику розрахунку оптичних властивостей металевих стопів в умовах деформацій, теплового розширення, фазових переходів.

Отже, дисертаційна робота Овчаренка А.Ю. «Виявлення змін оптичних властивостей та структурних неоднорідностей матеріалів методами рентгенівського фазового контрасту» має важливе теоретичне та практичне значення для розвитку методів рентгенівської фазоконтрастної візуалізації та є, безумовно, актуальною.

## **Оцінка обґрунтованості наукових результатів дисертації, їхньої достовірності та новизни**

Наукова новизна результатів дисертаційного дослідження полягає в наступному.

Запропоновано новий метод створення комп'ютерних моделей багатокомпонентних оптично неоднорідних об'єктів довільної геометричної форми, що забезпечує високу деталізацію та дає змогу розрахувати товщини і зсуви фаз для цих об'єктів у будь-якому напрямку проходження рентгенівського випромінення. Розроблено підхід для моделювання дифракції рентгенівського випромінення на тривимірних зразках під різними кутами, що дає змогу відтворювати геометричну форму об'єктів. Продемонстровано, що параметри розсіяного рентгенівського випромінення чутливі до змін електронної густини матеріалів, які виникають внаслідок механічних деформацій, теплового розширення, фазових переходів. Встановлено аналітичний критерій для оцінки мінімальних розмірів об'єктів, які можуть бути ідентифіковані за допомогою розсіяння рентгенівського випромінення, залежно від початкових параметрів. Використовуючи відомі теоретичні співвідношення та результати молекулярно-динамічного моделювання на прикладі стопів Fe-13% Cr-(2, 4, 6, 8)% Al та Fe-1,3% Cu-1% Ni для різних температур та концентрацій компонентів, було розроблено та застосовано методику розрахунку оптичних властивостей матеріалів (декрементів заломлення та коефіцієнтів поглинання) у рентгенівському діапазоні. Розроблено та реалізовано підхід для визначення глибини проникнення рентгенівського випромінення в різні речовини. Також створено веб-застосунок, який дозволяє моделювати взаємодію рентгенівського випромінення від точкових і протяжних джерел з довільними довжинами хвиль з речовинами.

Слід зазначити, що поставлене в дисертаційній роботі наукове завдання виконано повністю, а здобувач в повній мірі оволодів методологією наукової діяльності.

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

За своїм змістом дисертаційна робота здобувача Овчаренка А.Ю. повністю відповідає Стандарту вищої освіти за спеціальності 104 «Фізика та астрономія» та напрямам досліджень відповідно до освітньої програми «Фізика». Дисертаційна робота є завершеною науковою працею, а одержані автором наукові результати засвідчують наявність особистого внеску здобувача у науковий напрям «Фізика пучків заряджених частинок».

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

## **Мова та стиль викладення результатів**

Дисертаційна робота написана українською мовою. Матеріал дисертації загалом викладено послідовно та доступно, стиль мовлення прийнятний з використанням загальноприйнятої термінології для галузі рентгенівської оптики.

Дисертація складається з вступу, 4 розділів, висновків, списку літератури та додатку. Загальний обсяг дисертації 158 сторінок.

У вступі коротко представлено основну проблематику, пов'язану з використанням методу рентгенівського фазового контрасту для потреб сучасної медицини та матеріалознавства. Обґрунтовано актуальність обраної теми дисертаційної роботи. Показано її зв'язок з науково-дослідними програмами Інституту прикладної фізики НАН України. Послідовно і чітко викладено завдання та мету дисертаційного дослідження, вказано їхній логічний взаємозв'язок та способи реалізації.

**Перший розділ** присвячено комплексному аналізу сучасних наукових публікацій щодо використання рентгенівського випромінення у медичних дослідженнях та матеріалознавстві. Здійснено детальне порівняльне дослідження різних джерел рентгенівського випромінення з урахуванням їхніх специфічних характеристик, габаритних параметрів та можливостей практичного застосування в різноманітних наукових експериментах.

Представлено систематичний огляд існуючих методик реалізації методів рентгенівського фазового контрасту та докладно висвітлено їхні суттєві переваги порівняно з традиційними методами рентгенографії. Особливу увагу приділено аналізу наукових робіт, присвячених моделюванню дифракційних процесів рентгенівського випромінення.

Виявлено, що переважну більшість досліджень присвячено моделюванню дифракції на геометрично простих об'єктах, які характеризуються певною симетрією та ізотропними оптичними властивостями. На основі проведеного аналізу обґрунтовано необхідність подальшого вдосконалення та розвитку методологічних підходів до моделювання процесів взаємодії рентгенівського випромінення з різними матеріалами та середовищами.

Проведений літературний огляд демонструє актуальність розробки більш складних та універсальних методів моделювання, які б враховували різноманітні фізичні параметри досліджуваних об'єктів та особливості їхньої взаємодії з рентгенівським випроміненням.

У **другому розділі** представлено новий підхід щодо моделювання фазоконтрастних рентгенівських зображень, одержаних методом вільного поширення, на основі теорії Френеля–Кірхгофа. Створено генератор тривимірних комп'ютерних моделей оптично неоднорідних багатошарових та багатокомпонентних зразків довільної геометричної форми, а також розроблено алгоритм розрахунку товщин та зсувів фаз рентгенівського випромінення при проходженні через досліджувані об'єкти. Запропоновано методику обчислення декрементів заломлення та коефіцієнтів поглинання металів та стопів на основі відомих теоретичних співвідношень та результатів молекулярно динамічного моделювання.

**Третій розділ** демонструє результати моделювання дифракції рентгенівського випромінення у методі вільного поширення на зразках мікроскопічних розмірів порядку 0,1 мм з оптичними декрементами заломлення, характерними для біологічних тканин. У результаті дослідження розраховано розподіл інтенсивності та зміну фази рентгенівського випромінення на детекторі, що показало можливість одержання чітких зображень об'єктів з малими значеннями декрементів заломлення. Реалізовано на практиці методику відновлення форми та розмірів тривимірного об'єкта за допомогою програмного оброблення результатів дифракції, отриманих під різними кутами. На основі створеного алгоритму генерування комп'ютерних моделей багат шарових тривимірних об'єктів неправильної геометричної форми з різними декрементами заломлення для кожного шару проведено дослідження внутрішньої багат шарової структури оптично неоднорідних об'єктів за допомогою методу рентгенівської фазово-контрастної візуалізації. Вивчено вплив розмірних ефектів на взаємодію матеріалів з рентгенівським випроміненням. Показано, що якість зображення на екрані залежить від кількості зон Френеля, які потрапляють в область геометричної тіні досліджуваного зразка при поширенні хвильового фронту.

У **четвертому розділі** представлено результати моделювання дифракції для металевих зразків на основі стопу Fe–1,3% Cu–1% Ni, що знаходяться під дією механічної деформації стиснення–розтягу. Виконано ідентифікацію фазових переходів Zr методом рентгенівської дифракції. Показано високу чутливість методу рентгенівського фазового контрасту до процесів, пов'язаних зі зміною електронної густини. Досліджено особливості формування дифракційних картин об'єктів при використанні протяжних джерел рентгенівського випромінення з урахуванням ступеню їхньої просторової когерентності. Використовуючи теорему Ван Циттерта–Церніке, було проведено розрахунки розмірів області когерентності для квазімонохроматичного джерела. При цьому враховувались такі важливі параметри як: фізичні розміри джерела, характер розподілу інтенсивності випромінення та його довжина хвилі. На основі отриманих даних було визначено оптимальні відстані між джерелом випромінювання та досліджуваним об'єктом, що забезпечують максимальну чіткість та якість зображення зразка при заданих експериментальних умовах.

В якості загальної оцінки дисертаційного дослідження слід зазначити, що отримані наукові результати мають високу цінність та є основою для подальшого розвитку методів рентгенівського фазового контрасту на основі вільного поширення.

Дисертаційна робота оформлена відповідно до вимог наказу МОН України від 12 січня 2017 р. № 40 «Про затвердження вимог до оформлення дисертації».

### **Оприлюднення результатів дисертаційної роботи**

Основні наукові результати дисертаційного дослідження опубліковано в 4 статтях у 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.

Також результати дисертації було апробовано на 11 наукових фахових конференціях.

Представлені наукові публікації, на яких ґрунтується виконане дисертаційне дослідження, мають високий рівень, опубліковані в рейтингових наукових журналах та відповідають принципам академічної доброчесності, що свідчить про важливість одержаних наукових результатів.

Таким чином вважаю, що наукові результати, представлені в дисертаційній роботі, повністю висвітлені у наукових публікаціях здобувача.

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

1. У роботі запропоновано методика розрахунку оптичних параметрів металів та їхніх стопів у рентгенівському діапазоні. Оскільки метод рентгенівського фазового контрасту широко застосовується і в медицині, то доцільно було б узагальнити методика розрахунку оптичних параметрів для конкретних органічних сполук. Це дало б змогу значно розширити коло об'єктів дослідження.

2. Електронна густина, яка використовувалась для обчислення декрементів заломлення та коефіцієнтів поглинання металевих стопів, визначалась методами молекулярної динаміки. Відомо, що точність молекулярно-динамічного моделювання суттєво залежить від вибору потенціалу міжатомної взаємодії. Однак, у дисертаційній роботі відсутній аналіз коректності вибору потенціалу, що використовувався для проведення моделювання. Доцільно було б провести такий аналіз, а також використати квантово-механічні методи визначення електронної густини матеріалів.

3. Реальні джерела рентгенівського випромінювання є протяжними. Більшість результатів моделювання, наведених у дисертації, відносяться до точкових джерел, що є певною ідеалізацією. У роботі було б варто приділити більше уваги також вивченню взаємодії рентгенівського випромінювання від протяжних джерел з різними об'єктами.

4. При моделюванні багат шарових об'єктів в роботі вважалось, що декремент заломлення змінюється плавно від шару до шару. Цікаво було розглянути задачу формування фазоконтрастного зображення для випадку, коли декремент заломлення певного шару чи шарів відрізняється суттєво, адже такі об'єкти часто зустрічаються і в природі, і в технологіях.

Проте зроблені зауваження не впливають на загальну високу оцінку результатів роботи, що виносяться на захист, та, певною мірою, носять характер побажань для подальших наукових досліджень.

### **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.

Дисертаційна робота за рівнем актуальності вибраної тематики, новизни, наукового та практичного значення отриманих результатів 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 Артур Юрійович Овчаренко заслуговує присудження йому наукового ступеня доктора філософії з галузі знань 10 «Природничі науки» за спеціальністю 104 «Фізика та астрономія».

**ОФЦІЙНИЙ ОПОНЕНТ:**

заступник директора з наукової роботи  
Інституту металофізики ім. Г.В. Курдюмова  
Національної академії наук України,  
доктор фізико-математичних наук, професор



Вячеслав ЛІЗУНОВ