

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.

Візуалізація внутрішньої структури об'єктів за допомогою методів рентгенівського фазового контрасту (РФК) є надзвичайно важливим завданням у багатьох галузях науки і техніки. Традиційна рентгенографія базується на поглинанні рентгенівських променів, що дозволяє отримати зображення внутрішньої структури об'єкта. Однак цей метод має свої обмеження, особливо коли мова йде про м'які тканини або матеріали з малими коефіцієнтами поглинання. Тому в таких випадках доцільним є використання методу рентгенівського фазового контрасту, в основі якого лежить явище заломлення рентгенівських променів.

Основна перевага рентгенівського фазового контрасту полягає в тому, що він дозволяє візуалізувати навіть ті структури, які мають слабе поглинання рентгенівських променів, використовуючи інформацію про зміну фази променів після їх проходження через об'єкт. У результаті таких змін хвильового фронту відбувається перерозподіл інтенсивності рентгенівського випромінювання і на екрані формується відповідна дифракційна картина.

Метод рентгенівського фазового контрасту дає можливість отримати високо контрастні зображення м'яких тканин без необхідності використання контрастних речовин, що є особливо важливим у діагностиці захворювань, вивченні органів або при дослідженні біологічних зразків.

Оцінка обґрунтованості наукових результатів дисертації, їх достовірності та новизни.

Наукова новизна отриманих результатів:

1. Запропоновано новий спосіб створення комп'ютерних моделей багатокомпонентних оптично неоднорідних об'єктів довільної геометричної форми з високим ступенем деталізації і можливістю розраховувати для цих об'єктів товщини та зсуви фаз у будь-якому напрямку поширення рентгенівського випромінювання через них при проведенні комп'ютерного моделювання.
2. Розроблено підхід для моделювання дифракції рентгенівського випромінювання на тривимірних зразках під різними кутами, що дозволяє відтворювати геометричну форму досліджуваних об'єктів за їхніми зображеннями на екрані подібно до того, як це робиться у комп'ютерній томографії.

3. Показано, що результати взаємодії рентгенівського випромінювання з речовинами є дуже чутливими до змінним електронної густини матеріалів, спричиненої технічними деформаціями, тепловим розширенням, фазовими переходами та іншими процесами, де відбувається зміна об'єму або внутрішньої структури об'єктів.
4. Встановлено математичний критерій для оцінки мінімальних розмірів об'єктів, які можна ідентифікувати за допомогою рентгенівського випромінювання.
5. На прикладі сплавів Fe-13%Cr-(2,4,6,8)%Al та Fe-1.3%Cu-1%Ni для різних температур та концентрацій компонентів створено та реалізовано на практиці метод розрахунку оптичних властивостей (декрементів заломлення та коефіцієнтів поглинання) матеріалів у рентгенівському діапазоні на основі відомих теоретичних співвідношень та результатів молекулярно-динамічного моделювання.
6. Розроблено і реалізовано на практиці підхід визначення глибини проникнення рентгенівського випромінювання у різні речовини і встановлена повна відповідність одержаних результатів зі скалярною теорією дифракції Френеля-Кірхгофа.
7. Створено веб-застосунок, який дозволяє проводити комп'ютерне моделювання взаємодії з речовиною рентгенівського випромінювання з будь-якою допустимою довжиною хвилі від точкових та протяжних джерел, визначати оптимальні відстані для одержання найбільш якісних зображень, досліджувати умови когерентності та ін.

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.

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

За своїм змістом дисертаційна робота здобувача Овчаренка А.Ю. 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 іншим дослідникам можливість зрозуміти методи та результати дослідження. Дисертація проілюстрована графічним матеріалом у вигляді рисунків та графіків за результатами числових розрахунків.

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

У **вступі** обґрунтовано актуальність теми дисертаційного дослідження, сформульовано мету і завдання дослідження, вказано об'єкт, предмет і методи дослідження, зв'язок дисертаційного дослідження з науковими тематиками Інституту прикладної фізики НАН України, а також наукова та практична новизна отриманих результатів. Зазначено особистий внесок здобувача та представлена інформація щодо апробації результатів дисертації та публікацій.

У **першому розділі** були проаналізовані літературні джерела останніх років, що стосуються напрямів застосування РВ у галузях медицини та матеріалознавства. Виконано порівняння джерел рентгенівського випромінювання з урахуванням їх характеристик, фізичних розмірів та придатності до використання в тих чи інших наукових дослідженнях. Наведено огляд методів реалізації рентгенівського фазового контрасту та виділено їх переваги у порівнянні зі звичайною рентгенографією. Крім цього, було розглянуто публікації з тематики моделювання дифракції рентгенівського випромінювання. У більшості випадків автори обмежувалися моделюванням дифракції відносно простих об'єктів з наявністю певної симетрії та однорідними оптичними властивостями. Показано, що існує потреба у подальшому розвитку методів моделювання взаємодії РВ з речовиною.

У **другому розділі** показано методику створення тривимірних моделей об'єктів довільної геометричної форми та розмірів: оптично-однорідних, та неоднорідних багатопланових з довільним розташуванням внутрішніх компонент. Запропонована власна методика обчислення товщин об'єктів та

зсувів фаз рентгенівського випромінювання, що значно розширює коло об'єктів для проведення моделювання дифракції. На основі відомих теоретичних співвідношень та методів молекулярної динаміки було вперше запропоновано та використано підхід для обчислення декрементів заломлення та коефіцієнтів поглинання металів і їх сплавів для процесів, пов'язаних зі зміною електронної густини.

У **третьому розділі** показано результати моделювання дифракції РВ на тривимірних об'єктах довільної форми з малими значеннями декрементів заломлення, характерних для біологічних тканин. На основі дифракційних картин, одержаних для різних просторових орієнтацій об'єкта, виконано відновлення його геометричної форми і розмірів. Запропоновано спосіб створення комп'ютерних моделей оптично неоднорідних багатошарових об'єктів зі змінним декрементом заломлення. Виконано порівняння результатів моделювання дифракції оптично однорідного та багатошарового об'єктів. Показано високу чутливість даного підходу до незначних змін оптичних властивостей об'єктів, зумовлених шаруватою структурою. Встановлено, що якість рентгенівського фазоконтрастного зображення об'єкта залежить від кількості зон Френеля, які потрапляють в область його геометричної тіні. Знайдено аналітичний критерій, який дає змогу встановити мінімальні розміри об'єктів чи структурних неоднорідностей всередині зразків, які можуть бути візуалізовані при заданих умовах.

У **четвертому розділі** проведено розрахунки змін оптичних параметрів металевих сплавів на основі Fe-Cu-Ni в умовах механічних деформацій стиснення та розтягу. Показано придатність методу рентгенівського фазового контрасту для виявлення механічних деформацій у металевих конструкціях. На основі запропонованої методики розраховано оптичні параметри сплавів Fe-Cr-Al в умовах теплового розширення. На основі результатів молекулярно динамічного моделювання і взаємодії РВ з кристалами α -Zr і β -Zr показана можливість застосування рентгенівського випромінювання для ідентифікації фазових переходів у металах. Запропоновано спосіб визначення глибини проникнення рентгенівського випромінювання для металів та їх сплавів. Встановлено, що глибина проникнення РВ збільшується при підвищенні температури та збільшенні концентрації алюмінію. Одержані результати добре узгоджуються з реальними експериментальними даними. Вивчено формування дифракційних зображень об'єктів від протяжних джерел рентгенівського випромінювання з урахуванням ступеню їх когерентності. На основі теореми Ван-Циттерта Церніке були визначені розміри зони когерентності квазімонохроматичного джерела з урахуванням його геометричних розмірів, розподілу інтенсивності та довжини хвилі, а також розраховані оптимальні параметри відстані від джерела до об'єкта для спостереження чіткого зображення досліджуваного зразка за даних умов.

Основний текст дисертації завершено висновками дослідження. Дисертація містить додаток, у якому наведено 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.

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.

Наукові результати дисертації висвітлені у 15 наукових публікаціях 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. У літературному огляді недостатньо детально висвітлено переваги методу на основі вільного поширення, схему якого було обрано для моделювання дифракційних зображень, у порівнянні з іншими методами реалізації рентгенівського фазового контрасту.

2. Дані у таблиці 1.1 на сторінці 38 першого розділу написані англійською мовою.

3. Оптичні системи реальних приладів, призначених для дослідження матеріалів методами рентгенівського фазового контрасту, є значно складнішими у порівнянні з моделлю Френеля-Кірхгофа, яку було використано автором у даній роботі. У дисертації не проведений аналіз впливу цих факторів на точність одержаних результатів у порівнянні з реальними експериментами.

4. В роботі слід було б більш розгорнуто обґрунтувати вибір методу Френеля-Кірхгофа у порівнянні із іншими методами моделювання дифракції.

Вважаю, що висловлені зауваження не є визначальними і 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 Овчаренко А.Ю. заслуговує на присудження ступеня доктора філософії в галузі знань 10 “Природничі науки” за спеціальністю 104 “Фізика та астрономія”.

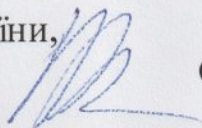
Рецензент:

Старший науковий співробітник

відділу радіаційної біофізики

Інституту прикладної фізики НАН України,

кандидат фізико-математичних наук



Олексій КАЛІНКЕВИЧ

Підпис к.ф.-м.н., с.н.с. відділу №20

Калінкевича О.М.

засвідчую учений секретар

ІПФ НАН України, к.ф.-м.н., с.н.с



Олексій ВОРОШИЛО