

ВІДЗИВ

офіційного опонента на дисертаційну роботу ВЕЛІХОВСЬКОГО Гліба Олеговича *“Динамічна теорія розсіювання у некристалічних багатошарових об’єктах довільної форми”*, представлену на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.07 - фізика твердого тіла

Актуальність теми досліджень

Для встановлення взаємозв'язку між структурою та властивостями матеріалів необхідно створення нових і вдосконалення існуючих методів кількісної діагностики характеристик дефектів в кристалах, які визначають їх властивості, що забезпечує можливість контролю якості створюваних матеріалів, і, отже, є *актуальним завданням*.

Досліджувані об’єкти можуть складатися із різноманітних речовин і матеріалів та мати складну будову. При цьому в залежності від сфери застосування розмір та форма об’єктів змінюються у широких межах. Тому розвиток методів, що дозволяють покращити чутливість та підвищити інформативність діагностики за рахунок врахування нових фізичних ефектів, є важливою задачею.

Сучасні методи структурної діагностики засновані на формуванні за допомогою різних типів випромінювань картини розсіювання об’єкта, яка містить інформацію про його внутрішню будову і склад, та її подальшій розшифровці на основі використання теорій, що описують зв’язок між параметрами об’єкта та дифракційною картиною. Отримання детальної інформації про складні об’єкти потребує варіювання параметрів експерименту і призводить до збільшення часу діагностики та, в результаті, дози опромінення, що зазвичай має негативний вплив на досліджуваний об’єкт. Найбільш критичним є створення такої ситуації при дослідженні некристалічних біологічних об’єктів, для яких саме дифракційні методи не можуть бути застосовані.

Традиційні методи рентгенографічної діагностики некристалічних об’єктів засновані на явищі поглинання, що для переважної більшості речовин проявляється набагато слабкіше ніж заломлення. При цьому у більш сучасних підходах, що базуються на явищі заломлення випромінювання та дозволяють одержувати так звані фазо-контрастні зображення, зазвичай використовують спрощену теорію для опису процесу розсіювання як в безпосередньо досліджуваних об’єктах, так і в елементах оптичних схем. Зазвичай використовується наближення геометричної оптики, яке не враховує вплив багатьох факторів. Водночас, для опису розсіювання випромінювання на елементах оптичних схем, які є монокристалами, майже завжди застосовують або кінематичну, або динамічну теорії розсіювання, але лише для ідеальних кристалів та наближення геометричної оптики, що унеможливорює точний опис формування фазо-контрастних зображень. Отже, для збільшення інформативності сучасних методів діагностики некристалічних об’єктів важливим є створення теорій, які дають більш адекватний опис процесів розсіювання і, відповідно, формування фазо-контрастних зображень.

Таким чином, теоретична модель тривісного способу формування фазо-контрастних зображень на основі динамічної теорії розсіювання з урахуванням наявності мікродефектів у монокристалах оптичної схеми та процесів багатократного розсіювання в некристалічних багатошарових об’єктах довільної форми може дати змогу принципово збільшити інформативність діагностики і суттєво зменшити дозу випромінювання та отримувати зображення, чутливі до структурних особливостей, що є непомітними для традиційних методів. Тому задача створення такої теорії, що дає більш повний опис процесу формування фазо-контрастних зображень і при цьому може забезпечити розв’язок оберненої задачі розсіювання, є актуальною. На підставі вищевикладеного можна стверджувати, що дана дисертаційна робота присвячена *актуальній проблемі*.

Обґрунтованість та достовірність отриманих результатів підтверджується тим, що

для досягнення поставленої мети в рамках квантово-механічного підходу при застосуванні колонкового розбиття був проведений систематичний порівняльний аналіз впливу на картину розсіяння як параметрів самого некрystalічного об'єкта, так і однорідно та неоднорідно розподілених дефектів у кристалах монохроматора і аналізатора та інших інструментальних факторів. Було використано сучасні методи теоретичної фізики та обчислювальної фізики, комп'ютерного моделювання. Отримані результати добре узгоджуються з відомими літературними та експериментальними даними. Тому викладені в даній роботі результати та висновки є фізично обґрунтованими.

Дисертаційна робота виконана у рамках науково-дослідницької тематики Інституту металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України.

Дисертація структурно складається з чотирьох розділів і основних висновків. Коротко зупинимось на аналізі кожного з них.

Перший розділ дисертації присвячено огляду наукових праць з аналізом сучасних методів неруйнівної діагностики некрystalічних об'єктів. Зокрема, відмічено, що для найбільш поширених методів, які використовують рентгенівське випромінювання та для більшості досліджуваних матеріалів, в тому числі і некрystalічних, коефіцієнт, що відповідає за заломлення променів суттєво більший за коефіцієнт, що описує поглинання.

У другому розділі дисертації викладено теоретичні засади для опису процесів розсіяння рентгенівського випромінювання у різних елементах оптичної схеми.

Зокрема, обґрунтовується використання так званого колонкового розбиття для опису процесів у складних об'єктах довільної форми з використанням певного набору теоретичних спрощень, але без обмеження коректності результатів, що дозволяє встановити межі застосовності розвиненої таким чином теорії.

Для обраного фазо-контрастного методу, а саме схеми з кристалом-аналізатором, для досліджуваних об'єктів, що складаються з різних речовин і мають складну будову, представлено модель опису рефракції у тривісній схемі побудови зображень та проведено аналітичний опис процесів заломлення випромінювання для двошарових систем, які утворені шарами кристалічної та/або аморфної речовини.

Зокрема, розглянуто простий випадок аморфної плоско-паралельної однорідної пластини. Далі проведено узагальнення теорії на випадок двошарової системи. В рамках динамічного підходу отримано вираз для амплітуди хвилі після проходження двошарової системи, що містить інформацію про обидва шари. При цьому вказано, яким шляхом можна отримати узагальнені вирази для багатошарової системи.

З метою вичерпного опису та подальшого врахування всіх можливих ефектів у кристалах монохроматора і аналізатора представлено аналіз процесу заломлення на монокристалічній плоско-паралельній пластині. При цьому отримано вираз для коефіцієнта проходження хвилі, що описує когерентне розсіяння в кристалі та ефект екстинкції. Окремо вказано шляхи до врахування статистично розподілених дефектів кристалів та відповідно описання дифузного розсіяння. При цьому розглянуто граничні переходи, в межах яких результат динамічної теорії зводиться до відповідного результату кінематичної теорії розсіяння. Після цього отримано розв'язок для системи з монокристалічного та аморфного плоско-паралельних шарів. Зокрема, показано, що в такому випадку вплив аморфного шару на відбивну здатність кристала зводиться до поглинання.

Додатково проведено аналіз розсіяння на двошаровій кристалічній системі двома різними методами: методом підсумовування амплітуд та методом граничних умов. Метод підсумовування амплітуд явно враховує багатократне перерозсіяння відбитого випромінювання між двома шарами як ітеративний процес. Спрямувавши порядок

врахованих перерозсіювань до нескінченності, отримано вирази для повних коефіцієнтів відбивання і проходження даної системи. Встановлено аналітичний зв'язок між окремими множниками та трьома відповідними механізмами — фотоелектричним поглинанням, екстинкцією та багатократним перерозсіюванням.

Продemonстровано еквівалентність результатів, отриманих методом сумування амплітуд та методом граничних умов, що свідчить про повноту і можливість використання останнього в якості основного у подальшому аналізі.

Третій розділ “Формування зображення некристалічних багаточасткових об'єктів довільної форми” присвячено розгляду розсіювання випромінювання у некристалічних об'єктах довільної форми та з багатьма шарами і представлено чисельні розрахунки для простих модельних систем на основі створеної теорії.

Показано, що для випадку високоенергетичного випромінювання рівняння, що описують процес рефракції при переході в імпульсний простір будуть мати однаковий вигляд з точністю до позначень для випадків як рентгенівського, так і інших типів випромінювання, наприклад нейтронів.

Отримано вираз, що пов'язує потенціал взаємодії речовини і випромінювання з хвильовою функцією після розсіювання. При цьому показано перехід до відомих формул Френеля для коефіцієнтів проходження та відбиття. Показано також, що зручною величиною при описанні процесу розсіювання є коефіцієнт акомодатії випромінювання.

З метою детального послідовного розвитку теорії розглянуто випадок одношарового об'єкта з нормальним падінням на першу (вхідну) поверхню та відповідно падінням під певним кутом, що пов'язаний з формою об'єкта на другу (вихідну) поверхню. В рамках динамічного підходу отримано вираз для залежності хвильової функції випромінювання після виходу з об'єкта від таких параметрів, як товщина, кут між поверхнями та потенціал взаємодії з речовиною. Показано зміни, що виникають при довільному куті падіння на вхідну поверхню. В рамках даного розгляду встановлено принципи формування рефрагованого променя та відповідного кута рефракції.

Детально описано модель формування зображень в рамках методу з кристалом-аналізатором. Дана модель використовує вирази для відбивних здатностей монохроматора і аналізатора та рівняння, що описують розсіювання всередині досліджуваного некристалічного об'єкта. В рамках даного методу визначальними величинами є поглинання та кут рефракції, що безпосередньо пов'язані з такими характеристиками об'єкта як форма (кути нахилу), товщина і склад (параметри речовини).

Для подальшого узагальнення розглянуто та досліджено випадок багаточасткового об'єкта. Дане узагальнення проводиться у вигляді ітеративної процедури поступового розгляду процесу розсіювання на кожному шарі в межах кожної колонки. При цьому встановлюється кількісний зв'язок між необхідними спрощеннями та межами застосовності теорії, що дає перевагу над іншими моделями, які одразу використовують грубі наближення та не розглядають випадки, коли наближення не виконуються.

В останньому **четвертому розділі** дисертації “Вплив інструментальних факторів при розв'язку прямої і оберненої задач розсіювання” на основі використання розвинутої теорії було визначено вплив на фазо-контрастні зображення неоднорідностей досліджуваного об'єкта і певних інструментальних факторів, а також продемонстровано можливість розв'язання оберненої задачі діагностики некристалічних об'єктів із врахуванням вищезазначених аспектів.

Було розглянуто вплив на формування профілів інтенсивності параметрів монохроматора і аналізатора. Показано, що для достатньо однорідних об'єктів вплив оптичної схеми на зображення об'єкта можна характеризувати згорнутими кривими, які описують залежність результуючої інтенсивності від кута зміщення аналізатора відно-

сно монохроматора без об'єкта. Продemonстровано, що шляхом відповідного вибору кристалів монохроматора і аналізатора можна сформувати згорнуту криву з необхідними наперед заданими параметрами.

Крім того, показано суттєвий вплив неоднорідностей поверхні та складу об'єкта менших за розміри колонки, на процес формування зображення некристалічних об'єктів. Описано вплив масштабів оптичної схеми, а саме відстані між досліджуванним об'єктом і детектором на криву розсіювання і відповідно зображення, що обумовлює необхідність врахування відповідних факторів для отримання точного зображення.

Наприкінці розділу коротко описано розв'язок оберненої задачі розсіювання. Показано можливі шляхи відтворення характеристик об'єкта із різних спостережуваних величин.

Основні результати та їх наукова новизна

Найбільш важливими результатами, що виносяться на захист, вважаю наступні:

1. Вперше побудовано теоретичну тривісну модель динамічного розсіювання та формування зображень багатошарових некристалічних об'єктів довільної форми з урахуванням ефектів багатократності розсіювання як у об'єкті, так і в монокристалах монохроматора і аналізатора. Зокрема, обґрунтовано і адаптовано колонкове наближення для опису формування топографічних зображень багатошарових некристалічних об'єктів довільної форми та проведено врахування не лише динамічного розсіювання у шарах, а також і багатократності перерозсіювання між шарами. При цьому встановлено можливості та особливості суттєвого впливу на картину розсіювання як параметрів самого багатошарового некристалічного об'єкта, так і паразитного впливу однорідно та неоднорідно розподілених дефектів у кристалах монохроматора і аналізатора.

2. Вперше з використанням побудованої моделі аналітично встановлено взаємозв'язок характеристик досліджуваного некристалічного багатошарового об'єкта, а саме форми, розмірів, коефіцієнтів заломлення і поглинання для шарів кожної колонки, тобто параметрів неоднорідностей структури об'єкта, зі спостережуваними експериментально параметрами картини розсіювання, та відповідно кутами рефракції, змінами фаз, коефіцієнтами екстинкції. На цій основі розроблено принципи фазо-варіаційної діагностики неоднорідних багатошарових некристалічних об'єктів.

3. На основі побудованої тривісної моделі та отриманих аналітичних формул запропоновано фазо-варіаційний метод розв'язку оберненої задачі розсіювання для багатошарових некристалічних об'єктів. При цьому забезпечено можливість вирішення проблеми захисту від паразитного впливу інструментальних факторів на зображення та чисельним експериментом підтверджено працездатність та ефективність розробленого підходу у діагностиці таких об'єктів.

Ці результати складають основу наукової задачі, розв'язаної в даній дисертації. Зміст дисертації належним чином відображає мету роботи та основні поставлені завдання. Тому вважаю, що мету, поставлену в роботі повністю досягнуто.

Важливість результатів роботи для наукових досліджень і практики

У роботі створено фізичні основи діагностики з якісно новими функціональними можливостями для некристалічних багатошарових об'єктів, що забезпечує перспективи подальшої розробки і широкого практичного використання найбільш високочутливого та інформативного фазо-варіаційного підходу до діагностики параметрів структури та характеристик складних (багато-параметричних) некристалічних, зокрема медико-біологічних об'єктів, в тому числі на мікроскопічних масштабах.

Розроблена модель дозволяє враховувати інструментальні фактори, що підвищує чутливість та інформативність порівняно з існуючими методами діагностики та дозво-

ляє уникнути паразитного впливу цих факторів на картину розсіяння і як наслідок зменшує імовірність хибної діагностики.

До роботи хочу зробити наступні зауваження:

1. Що означає поняття екстинкції для некристалічних об'єктів?
2. Чому наближення геометричної оптики не підходить для опису рентгенівської дифракції на некристалічних об'єктах із неоднорідностями мікроскопічного масштабу (який саме типовий масштаб цих неоднорідностей)? Аналіз результатів В. Бушуєва свідчить, що співпадіння досить непогане, знову ж для певного діапазону розмірів.
3. Варто було для підтвердження своїх теоретичних викладок та розрахунків відновити зображення для медико-біологічних об'єктів (бажано 3-D), що значно підсилює висновки і практичне значення дисертації.
4. Застосовність даних досліджень для некристалічних біологічних об'єктів досить слабо обґрунтована, порівняно з сучасними підходами, що базуються на явищі заломлення випромінювання та дозволяють одержувати так звані фазо-контрастні зображення, використовуючи при цьому спрощену теорію для опису процесу розсіяння в безпосередньо досліджуваних об'єктах.
5. У тексті дисертації і автореферату зустрічаються окремі стилістичні та термінологічні неточності (стор.100-101 – переплутані посилання в підписах до рис.3.8, 3.9, підпис до рис.4.1 на стор.109, вираз «... буде розглянуто в наступних роботах...» недоречний в дисертації), а також багато граматичних помилок.

Загалом дисертація є цілісною та завершеною науковою роботою. Наукові положення, котрі в ній сформульовані, опубліковані в наукових виданнях та обговорені на конференціях. Зроблені зауваження стосуються окремих сторін роботи і не викликають ніяких сумнівів стосовно дисертації в цілому, яка виконана на високому науковому рівні. Стиль викладення в дисертації є логічним і обґрунтованим. Зміст автореферата повністю відображає зміст дисертаційної роботи.

Таким чином, за рівнем новизни, наукової та практичної значимості отриманих результатів дисертація *“Динамічна теорія розсіяння у некристалічних багаточарових об'єктах довільної форми”* є завершеною науково-дослідницькою роботою, яка за важливістю та практичним значенням повністю задовольняє вимогам до дисертацій на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.07 – фізика твердого тіла, а її автор **ВЕЛІХОВСЬКИЙ Гліб Олегович** заслуговує присудження йому вказаного наукового ступеня.

Офіційний опонент:

Член-кореспондент НАН України,
доктор фізико-математичних наук,
професор, завідувач відділу
рентгеноструктурного і елементного
аналізу матеріалів і систем
Інституту фізики напівпровідників
ім. В.Є. Лашкарьова НАН України

Підпис В.П. Кладька засвідчую:
Вчений секретар ІФН НАН України
доктор хімічних наук, професор



В.П. Кладько

В.М. Томашик