

## ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу

Ходасевича Михаила Александровича

«Развитие оптических спектральных методов диагностики материалов и процессов на основе многопараметрического подхода»,  
представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.05 – Оптика.

**Соответствие диссертации специальности и отрасли науки, по которым она представлена к защите.**

Целью диссертации Ходасевича М.А. «Развитие оптических спектральных методов диагностики материалов и процессов на основе многопараметрического подхода» является разработка новых методов анализа многопараметрических данных, получаемых с помощью абсорбционной и флуоресцентной спектроскопии, а также комбинированное применение уже разработанных методов в этой области оптики. Для представленной к защите работы характерен широкий охват объектов исследований, включающих в себя активированные оптические среды, кровь лабораторных мышей, лекарственные средства, пищевые продукты и алкогольные напитки, что свидетельствует об универсальном характере разработанных методов оптической диагностики. В диссертации представлены разработанные соискателем оригинальные методы и полученные результаты многопараметрического спектрального анализа: определение шарковской структуры энергетических уровней активаторов с помощью флуоресцентной спектроскопии при температурах от комнатной до 150 °С, выбор материалов волоконных усилителей по информационным критериям качества, уменьшение неравномерности спектра усиления рамановского волоконного усилителя, повышение точности флуоресцентной термометрии, регрессионное определение характеристик винных дистиллятов и вин защищенного географического указания, классификация лекарственных средств и крови лабораторных мышей. Полученные результаты и содержание работы в целом свидетельствуют, что данная диссертация полностью соответствует отрасли «физико-математические науки» и пункту 3 (спектроскопия твердого тела, жидкостей и биообъектов, люминесценция) раздела «Области исследований» паспорта специальности 01.04.05 – оптика.

**Актуальность темы диссертации.**

Многопараметрический анализ применяется для повышения точности количественных измерений, а также для решения нового класса количественных и качественных задач либо получения результатов, более точных или сопоставимых по точности с уже известными. Для сравнения приводятся результаты, полученные ранее в рамках классических методов, которые используют малое количество спектральных переменных или измерений на небольшом количестве выделенных длин волн (частот). Обе такие возможности отражены в диссертации Ходасевича М.А. Применение предложенных соискателем методов многопараметрической флуоресцентной термометрии позволило повысить ее

точность по сравнению с наиболее востребованным в настоящее время методом определения отношения интенсивности флуоресценции при переходах с двух термально связанных уровней энергии активатора. Анализ нагрузок в две главные компоненты спектров флуоресценции иттербия в кристаллических средах позволил определить штарковскую структуру уровней энергии при умеренно положительных температурах вместо использования криогенной экспериментальной техники. Результаты разработки качественных и количественных моделей анализа характеристик лекарственных средств и пищевых продуктов характеризуются актуальностью в условиях повышения требований к их качеству и значительного роста числа исследований по этой тематике, выполняемых во всех развитых странах мира.

Диссертационная работа Ходасевича М.А., посвященная развитию методов многопараметрического спектрального анализа, без сомнения, является актуальной. Тема диссертации соответствует приоритетным направлениям фундаментальных и прикладных научных исследований Республики Беларусь на 2021-2025 годы (раздел 4 Указа Президента Республики Беларусь от 7 мая 2020 г № 156).

**Степень новизны результатов диссертации и научных положений, выносимых на защиту.**

Полученные в диссертационной работе Ходасевича М.А. результаты и выносимые на защиту положения являются новыми. Среди результатов работы по степени их оригинальности и научной значимости можно выделить следующие:

– определение штарковской структуры энергетических уровней иттербия в гранате и фториде кальция с точностью  $2 \text{ см}^{-1}$ , не уступающей точности абсорбционных и флуоресцентных измерений при криогенных температурах, с помощью анализа нагрузок в две главные компоненты спектров флуоресценции при температурах от 305 до 423 К;

– характеризующаяся мировым приоритетом разработка многопараметрического метода флуоресцентной термометрии, который состоит из четырех этапов. Первый предусматривает нормировку спектров флуоресценции на максимум, что позволяет использовать нестабилизированный источник возбуждения. На втором этапе методом главных компонент проводится определение выбросов в экспериментальных данных. На третьем этапе выполняется широкополосная калибровка температуры, учитывающая все измеренные спектральные переменные, и определяется оптимальное количество латентных переменных. Четвертый этап состоит в поиске необходимой комбинации движущихся спектральных окон, количество спектральных переменных в каждом из которых на единицу больше оптимального количества латентных переменных. Точность разработанного метода флуоресцентной термометрии значительно превосходит точность других современных методов;

– разработка информационных критериев качества – спектральной эффективности передачи информации и пропускной способности, при выборе материала эрбиевого волоконного усилителя и сравнение результатов, полученных

для квази-трёхуровневой схемы накачки, с зависимостями от материала волокна таких характеристик, как ширина спектра флуоресценции по полувысоте и пиковая величина сечения стимулированного испускания активатора;

– одновременная оптимизация мощностей и длин волн источников накачки рамановского усилителя, осуществленная впервые и показавшая возможность достижения неравномерности усиления  $\pm 1$  дБ в спектральном диапазоне шириной 80 нм при суммарной мощности четырех накачек около 900 мВт;

– достоверные классификации, выполненные методами кластерного анализа для образцов высушенной крови лабораторных мышей по признаку болезни и лечения, для лекарственных средств, для легальных и поддельных водок по наличию унифицированной добавки, для вин по квалификационной категории защищенного географического происхождения.

### **Обоснованность и достоверность выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертации.**

При разработке и применении многопараметрических методов спектрального анализа необходимо обязательное выполнение двух условий: измерения спектров в широком спектральном диапазоне и наличие представительной выборки исследуемых объектов. Объем выборки зависит в том числе от упорядоченности изменений независимого параметра при проведении количественного анализа. При проведении исследований все эти условия соискателем были выполнены. Сопоставление результатов, полученных для спектров флуоресценции рассмотренных сред и температурных зависимостей этих спектров, путём применения многопараметрических методов, с литературными данными показало хорошее совпадение с результатами, опубликованными для аналогичных сред. Многопараметрическая оптимизация параметров волоконных усилителей проводилась с помощью общепринятых моделей скоростных уравнений. Во всех решенных задачах многопараметрические методы исследования базировались на широко применяемых методах частичных наименьших квадратов и главных компонент. Основные результаты диссертации достаточно полно опубликованы, а выводы отвечают современному состоянию многопараметрического спектрального анализа. Все изложенное выше подтверждает обоснованность и достоверность приведенных в диссертации результатов и выводов.

### **Научная, практическая, экономическая и социальная значимость результатов диссертации, рекомендации по их использованию.**

Научная значимость результатов диссертации заключается в создании новых методов многопараметрического спектрального анализа и получении с их помощью новой или уточненной информации, позволяющей решать фундаментальные и прикладные физические задачи. Многопараметрическая флуоресцентная термометрия с применением оригинального интервального метода выбора спектральных переменных, характеризующаяся мировым уровнем новизны, позволила в разы повысить точность калибровки температуры. Установление влияния физических явлений (трех в случае рассмотрения флуоресценции эрбия и

двух для иттербия) на главные компоненты спектров флуоресценции активированных сред позволило создать экспериментальную установку для определения штарковской структуры активаторов с диапазоном изменения температуры от комнатной до 150 °С вместо применения криогенной техники.

Практическая значимость работы заключается в том, что развитый многопараметрический подход помогает решать широкий класс задач оптической диагностики в производственных процессах, сельском хозяйстве и при экспертизе произведений искусства. В качестве примеров таких задач можно привести количественную многопараметрическую калибровку концентраций основных примесей и легирующих добавок в низколегированных сталях, выполняемую по лазерно-искровым эмиссионным спектрам низкого разрешения, классификацию рафинированных сахаров по растительному источнику, калибровку содержания белков в ботве сахарной свеклы, а также датировку исторических артефактов.

Социальная значимость диссертации состоит в возможности её использования в образовательном процессе в университетах Беларуси и России, например БГУ, Гомельском государственном университете имени Ф. Скорины, Университете ИТМО, Санкт-Петербургском государственном университете и Санкт-Петербургском политехническом университете Петра Великого.

#### **Опубликованность результатов диссертации в научной печати**

Результаты диссертации опубликованы в 73 научных работах. Из них в рецензируемых научных журналах из Перечня ВАК Республики Беларусь опубликованы 29 статей, в том числе в журналах «Оптика и спектроскопия», «Журнал прикладной спектроскопии», «Приборы и методы измерений», «Физика и механика материалов», «Journal of Luminescence». Оставшиеся работы являются статьями в сборниках трудов международных конференций.

#### **Соответствие оформления диссертации требованиям ВАК.**

Оформление диссертации и автореферата соответствует требованиям ВАК. Диссертационная работа содержит введение, общую характеристику работы, одну главу с обзором литературы, шесть глав с изложением оригинальных результатов, заключение, библиографический список из 300 наименований и восемь приложений. Объем диссертации составляет 287 страниц, в которые включены 153 иллюстрации (из них 2 в приложении А) и 24 таблицы (из них 7 в приложениях). Материал диссертации изложен логично и на высоком научном уровне. Автореферат соответствует содержанию диссертации.

#### **Замечания по диссертации**

По результатам рассмотрения работы можно сделать несколько замечаний, которые не влияют на общую положительную оценку диссертации.

1. В обзорной главе описано обнаружение выбросов в наборе обрабатываемых спектров по величинам их размаха (leverage) – квадрата расстояния Махаланобиса (или суммы квадратов координат в пространстве главных компонент, нормированных на соответствующие собственные значения). При проведении

многопараметрической калибровки температуры выбросы определяются по отклонению счетов в первую главную компоненту от аппроксимирующей зависимости. В диссертации не указано, почему не был применен первый способ.

2. При калибровке температуры по отношению интенсивности флуоресценции при переходах с двух термально-связанных уровней энергии активатора выбранные длины волн соответствуют пикам спектров флуоресценции. Этим же пикам соответствуют экстремумы спектра нагрузок в первую главную компоненту для свинцово-фторидной стеклокерамики, активированной эрбием. Они показывают положение длин волн, ратиометрическая калибровка по которым характеризуется максимальной относительной чувствительностью. В диссертации не указано, применялся ли для других активированных сред выбор длин волн с помощью анализа спектров нагрузок в главные компоненты для повышения чувствительности калибровки.

### **Соответствие научной квалификации соискателя ученой степени, на которую он претендует.**

Обзорная глава представленной диссертационной работы показывает, что автор смог провести тщательное обобщение современного состояния многопараметрических методов, выбранных им для дальнейшего развития, и их актуальных применений в оптической спектроскопии. Привлечение большого объема информации, используемой для сравнения, позволяет утверждать о научной новизне и практической значимости полученных результатов. Объединение в диссертации большого объема экспериментальных и теоретических работ, высокий научный уровень обсуждения результатов, апробация работ на многочисленных международных конференциях и публикация 29 статей в рецензируемых научных журналах свидетельствуют о соответствии научной квалификации соискателя ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.05 – оптика.

### **Выводы.**

По совокупности разработанных методов и изложенных в работе результатов можно сделать вывод, что диссертация Ходасевича М.А. соответствует всем требованиям ВАК Республики Беларусь, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени доктора физико-математических наук и установленным главой 3 «Положения о присуждении ученой степени и присвоении ученых званий».

Автор диссертации Ходасевич Михаил Александрович заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.05 – Оптика за принципиально новые научно обоснованные результаты, совокупность которых является крупным достижением в разработке методов оптической диагностики материалов и процессов:

– разработку метода определения штарковской структуры энергетических уровней активаторов с помощью анализа главных компонент температурной зависимости спектров флуоресценции при умеренных положительных температурах, который при разрешении спектров 0,2 нм характеризуется точностью

не хуже  $2 \text{ см}^{-1}$ , что не уступает точности методов абсорбционной и флуоресцентной спектроскопии при низких температурах;

– разработку метода многопараметрической калибровки температуры, повышение точности которого по сравнению с ратиометрическим методом достигается за счет поиска комбинации движущихся окон, содержащих на одну спектральную переменную больше, чем количество латентных переменных в широкополосной калибровке;

– установление зависимости спектральной эффективности передачи информации и пропускной способности эрбиевых волоконных усилителей от материала волокна и сравнение этих характеристик как критериев качества волокна с шириной спектра флуоресценции по полувысоте и пиковой величиной сечения стимулированного испускания активатора;

– многопараметрическую оптимизацию длин волн и мощностей мультиплексированных накачек волоконного усилителя на основе вынужденного комбинационного рассеяния света при учете всех возможных взаимодействий излучений накачек и сигналов, которая показала возможность получения неравномерности спектра усиления менее  $\pm 1 \text{ дБ}$  в полосе шириной  $80 \text{ нм}$  при суммарной мощности накачек около  $900 \text{ мВт}$ ;

– разработку многопараметрического метода обнаружения отсутствия унифицированной легализующей добавки в поддельной водочной продукции с помощью кластерного анализа главных компонент спектров пропускания в диапазоне длин волн  $200\text{-}850 \text{ нм}$ ;

– обнаружение подделки льняного масла с низким процентным содержанием нерафинированного подсолнечного на уровне  $1,2 \%$ , с помощью применения многопараметрической регрессии частичных наименьших квадратов с поиском комбинации движущихся окон в спектрах оптической плотности бинарных смесей рассматриваемых растительных масел.

Я, Семченко Игорь Валентинович, даю согласие на публикацию данного отзыва в открытом доступе на официальном сайте ИНСТИТУТА ФИЗИКИ НАН Беларуси в сети Интернет.

Официальный оппонент

заместитель генерального директора по научной деятельности ГНПО «Оптика, оптоэлектроника и лазерная техника»

доктор физико-математических наук, профессор,  
член-корреспондент НАН Беларуси



И.В. Семченко

13.06.2023