

## 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.

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

Диссертация Ходасевича Михаила Александровича **«Развитие оптических спектральных методов диагностики материалов и процессов на основе многопараметрического подхода»** посвящена разработке методов многопараметрического анализа спектров флуоресценции активированных сред в видимом и ближнем инфракрасном диапазонах и спектров оптической плотности крови лабораторных мышей, лекарственных средств и пищевых продуктов в ультрафиолетовом, видимом, ближнем инфракрасном и терагерцовом диапазонах. Соискателем выполнено исследование возможностей определения штарковской структуры энергетических уровней эрбия и иттербия по спектрам флуоресценции при температурах от комнатной и выше, разработаны критерии сравнения материалов волоконных усилителей по их информационным характеристикам, предложены новые методы флуоресцентной термометрии с интервальным выбором спектральных переменных, позволившие значительно улучшить точность измерений, оптимизированы комбинированные схемы накачки волоконных усилителей с помощью применения эвристического генетического алгоритма поиска. Многопараметрические спектральные методы также использованы для решения качественных и количественных прикладных задач оптической диагностики по определению характеристик лекарственных средств, крови лабораторных мышей, вин защищенного географического указания и винных дистиллятов. Анализ содержания диссертации однозначно позволяет заключить, что данная диссертация полностью соответствует пункту 3 (спектроскопия твердого тела, жидкостей и биообъектов, люминесценция) раздела «Области исследований» паспорта специальности 01.04.05 – оптика, относящейся к физико-математическим наукам.

***2. Актуальность темы диссертации.***

Многопараметрические методы анализа на сегодняшний день де-факто являются исключительно востребованными в оптической спектроскопии и диагностике. Это направление динамично развивается на протяжении уже более двух десятилетий, затрагивая все новые области исследований и привлекая научные группы со всего мира к разработке новых методов. Активно работающие научные школы в США, ЕС, России, Китае, Южной Африке, Чили, Турции и других странах добиваются значимых результатов в решении в первую очередь прикладных задач. Как пример можно привести сотрудничество Ходасевича М.А. с коллегами из Турции, Южной Африки и Чили, результатом которого стало доказательство возможности замены эталонного метода релаксометрии ядерного магнитного резонанса для классификации растительных источников белых рафинированных сахаров на экспрессный и дешевый многопараметрический спектральный анализ. Этот пример иллюстрирует актуальность темы диссертации, описанные в которой многопарамет-

рические методы путем обработки бóльшего количества спектральной информации об объектах исследования дают возможность охватить более широкий круг задач. Среди решаемых в диссертации задач выделяется фундаментальная задача по разрешению штарковской структуры уровней энергии иттербия в кристаллических средах по зависимости спектров флуоресценции при умеренно положительных температурах. Многопараметрический подход позволил отказаться от проведения исследований при температурах жидкого азота или даже гелия, но обеспечил сравнимую с ними точность. С этой задачей напрямую связана многопараметрическая калибровка температуры методами главных компонент и частичных наименьших квадратов, точность которой превышает точность применяемых на сегодняшний день однопараметрических методов. Таким образом, диссертационная работа Ходасевича М.А., посвященная развитию многопараметрической спектральной диагностики материалов и процессов, является, несомненно, актуальной. Тема диссертации соответствует приоритетным направлениям фундаментальных и прикладных научных исследований Республики Беларусь на 2016–2020 годы (раздел 6 постановления Совета министров Республики Беларусь от 12 марта 2015 г. № 190), и на 2021-2025 годы (раздел 4 Указа Президента Республики Беларусь от 7 мая 2020 г № 156).

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

В диссертационной работе Ходасевича М.А. развиты методы многопараметрического спектрального анализа и подробно рассмотрено их применение для качественной и количественной оптической диагностики объектов в задачах научного и прикладного характера, при решении которых получен ряд новых результатов:

– на основании многопараметрического анализа зависимости спектров флуоресценции иттербия в гранате и фториде кальция при положительных температурах до 150 С определена штарковская структура энергетических уровней активатора с точностью  $2 \text{ см}^{-1}$ , не уступающей точности измерений при криогенных температурах;

– проведена одновременная оптимизация мощностей и длин волн четырех источников накачки усилителя на основе вынужденного комбинационного рассеяния света. При суммарной мощности накачек около 900 мВт в спектральном диапазоне шириной 80 нм достижима минимальная неравномерность усиления  $\pm 1 \text{ дБ}$ ;

– для выбора материала волоконного усилителя разработаны критерии на основе информационных характеристик (спектральная эффективность передачи информации и пропускная способность);

– разработана не требующая стабилизированного источника возбуждения многопараметрическая флуоресцентная калибровка температуры, которая включает в себя нормировку спектров, метод главных компонент, кластерный анализ, метод частичных наименьших квадратов с выбором спектральных переменных поиском комбинации движущихся окон, содержащих на одну спектральную переменную больше, чем количество латентных переменных в широкополосной калибровке. Точность разработанной калибровки в два раза превышает точность метода отношения интенсивности флуоресценции;

– с помощью построения классификационного дерева по главным компонентам нормированных спектров оптической плотности образцов высушенной крови определены здоровые мыши и зараженные карциномой мыши, получившие три вида лечения;

– проведена количественная калибровка физико-химических характеристик вин по спектрам пропускания в ультрафиолетовом, видимом и ближнем инфракрасном диапазонах спектра;

– методами кластерного анализа в маломерном пространстве главных компонент спектров пропускания водок в ультрафиолетовом и видимом диапазонах длин волн продукция без унифицированной добавки обнаруживается со стопроцентной вероятностью.

Полученные в диссертации новые научные результаты четко сформулированы в виде положений, выносимых на защиту, и выводов.

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

Выводы и заключения в диссертации Ходасевича М.А. сделаны на основе глубокого и всестороннего анализа измерений спектров большого количества объектов при решении каждой поставленной задачи. Измерения проводились как на стандартном спектрофотометрическом оборудовании, так и с помощью созданной соискателем установки по измерению температурной зависимости спектров флуоресценции. Результаты, полученные с помощью проведения измерений на этой установке, были сопоставлены с литературными данными и показали совпадение в пределах экспериментальной погрешности. Формирование представительных выборок обеспечивало статистическую значимость результатов и достоверность моделей в пределах исследуемого диапазона изменения калибруемого параметра. Оптимизация параметров волоконных усилителей проводилась в рамках моделей скоростных уравнений. Предельные величины шум-фактора эрбиевого волоконного усилителя, полученные на основе расчета по экспериментальным данным для квазитрехуровневой накачки были сопоставлены с результатами моделирования с использованием соотношения Степанова. Многопараметрические методы исследования базировались на широко применяемых методах главных компонент и частичных наименьших квадратов. Все вышеперечисленное свидетельствует об обоснованности и достоверности результатов и выводов, сформулированных в диссертации.

#### ***5. Научная, практическая, экономическая и социальная значимость результатов диссертации с указанием рекомендаций по их использованию.***

Научная значимость результатов диссертации заключается в выявлении новых областей применения методов многопараметрического спектрального анализа для обнаружения физических закономерностей и кардинальной модификации методов оптической диагностики. С помощью флуоресцентной спектроскопии установлена связь влияния трех физических явлений (перераспределение населенностей энергетических уровней  $^2\text{H}_{11/2}$  и  $^4\text{S}_{3/2}$ ; температурное тушение флуоресценции и перераспределение населенностей штатовских подуровней уровня  $^4\text{S}_{3/2}$ ) на главные компоненты спектров. Выбор спектральных переменных, реализованный при решении фундаментальных и прикладных задач позволил повысить точность результатов, получаемых с помощью экспериментального оборудования низкого спектрального разрешения или более простой конструкции. Это под-

тверждается на примере определения штарковской структуры энергетических уровней итербия в гранате и фториде кальция, когда флуоресценция измерялась при температурах от 305 до 423 К, а не при температуре жидкого азота.

Практическая значимость работы заключается в том, что развитый многопараметрический подход может быть обобщен для решения задач оптической диагностики в различных научных и производственных процессах и не требует создания физико-химических моделей. Такой универсальный подход был применен соискателем при дальнейшем развитии представленных в диссертации исследований, результаты которых не включены в работу. Многопараметрическая калибровка концентраций основных примесей и легирующих добавок в низколегированных сталях с помощью лазерно-искровой эмиссионной спектроскопии низкого разрешения показала количественный характер для углерода, марганца, кремния, хрома, никеля, меди, титана и ванадия. Также развитый в диссертации многопараметрический качественный анализ планируется применить для классификации растительного лекарственного сырья, востребованного китайской народной медициной. Практическая значимость диссертации заключается и в возможности ее использования в образовательном процессе. Обзорная глава, по сути являющаяся требующей небольшой доработки монографией, достаточно полно описывает современное состояние многопараметрических методов и их применения в оптической спектроскопии. В качестве добавления целесообразно ввести краткое описание эффекта Штарка и его влияния на спектроскопические характеристики активных сред и устройств на их основе. Планируемая публикация монографии «Многопараметрический подход в методах оптической диагностики: основы и применения» будет полезна в процессе современного обучения студентов оптических и спектроскопических специальностей.

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

По материалам диссертации опубликованы 73 научных работы, из них 29 статей в рецензируемых научных журналах из Перечня ВАК Республики Беларусь («Journal of Luminescence» – одна статья, «Journal of Advances in Applied Physics» – одна, «Lithuanian Journal of Physics» – две, «Оптика и спектроскопия» – двенадцать, «Оптический журнал» – одна, «Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики» – одна, «Физика и механика материалов» – одна, «Журнал прикладной спектроскопии» – четыре, «Nonlinear Phenomena in Complex Systems» – одна, «Весті НАН Беларусі» – две, «Приборы и методы измерений» – три). Остальные результаты представлены статьями в сборниках трудов международных конференций.

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

Диссертация и автореферат оформлены в соответствии с требованиями ВАК. Диссертационная работа состоит из введения, общей характеристики работы, семи глав, заключения, библиографического списка и приложений. Объем диссертации составляет 287 страниц, включая 153 иллюстрации и 24 таблицы, список использованных источников состоит из 300 наименований. Материал диссертации излагается последовательно, логично, очень хорошим языком и на высоком научном уровне. Цели и задачи, содержание и выводы согласованы. Автореферат полностью соответствует содержанию диссертации.

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

Анализ содержания диссертационной работы позволяет с уверенностью заключить, что соискатель в совершенстве владеет современными методами многопараметрического подхода в оптической диагностике материалов и процессов. Изложение экспериментального и теоретического материалов и обсуждение полученных результатов проведено систематически, аргументированно и с привлечением большого объема литературной информации, что свидетельствует о соответствии квалификации Ходасевича М.А. искомой ученой степени доктора физико-математических наук. Это подтверждается и высоким уровнем и количеством публикаций автора в рецензируемых журналах, активным участием в международных конференциях и государственных и международных программах исследований. Особо можно отметить самостоятельность соискателя на протяжении выполнения всех этапов работы, начиная от постановки задач и разработки методик экспериментальных измерений и заканчивая формулировкой выводов. Высокий профессиональный уровень Ходасевича М.А. проявился не только в разработке новых методов многопараметрического спектрального анализа, но и в создании их приборных реализаций.

Следует сделать несколько замечаний, которые не влияют на общую положительную оценку диссертации.

1. При проведении сравнения одно-и многопараметрических калибровок температуры использовались величины относительного и среднеквадратичного отклонения. Почему не проводилось сравнение также по относительной чувствительности калибровки?

2. При классификации образцов крови подопытных мышей нормировка спектров оптической плотности осуществлялась на длине волны 576 нм одного из максимумов спектра оксигемоглобина. Почему был выбран именно этот пик и какие еще нормировки рассматривались?

3. Методы выбора спектральных переменных описаны и применены в диссертации при проведении количественного многопараметрического анализа. Применяются ли они при проведении качественного анализа?

## **9. Заключение.**

Сделанные замечания носят характер уточнений и рекомендаций на дальнейшее продолжение работы и не влияют на высокий уровень представленной диссертации. Принимая во внимание совокупность полученных соискателем результатов, можно сделать заключение о соответствии диссертации Ходасевича М.А. всем требованиям ВАК Республики Беларусь, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени доктора физико-математических наук и установленных главой 3 «Положения о присуждении ученой степени и присвоении ученых званий».

Автору диссертации Ходасевичу Михаилу Александровичу следует присудить искомую ученую степень по специальности 01.04.05 – Оптика за новые научно обоснованные результаты, совокупность которых является крупным достижением в разработке новых методов оптической диагностики материалов и процессов:

– разработку многопараметрического метода нахождения шариковой структуры энергетических уровней активаторов по температурной зависимости спектров флуорес-

ценции при температурах до 150 °С с точностью не хуже традиционных методов абсорбционной и флуоресцентной спектроскопии при криогенных температурах;

– разработку метода калибровки температуры с помощью комбинации четырех многопараметрических методов: главных компонент, частичных наименьших квадратов, кластерного анализа и поиска комбинации движущихся окон, содержащих на одну спектральную переменную больше, чем количество латентных переменных в широкополосной калибровке. Применение разработанного метода к нормированным спектрам флуоресценции показало повышение точности в два раза по сравнению с ратиометрическим методом;

– применение спектральной эффективности передачи информации и пропускной способности как критериев качества материалов эрбиевых волоконных усилителей в полосе длин волн 1480–1600 нм;

– одновременную многопараметрическую оптимизацию длин волн и мощностей четырех мультиплексированных накачек волоконного усилителя на основе вынужденного комбинационного рассеяния света, в результате которой показана возможность достижения неравномерности спектра усиления менее  $\pm 1$  дБ в полосе шириной 80 нм при суммарной мощности накачек около 900 мВт;

– установление возможности классификации лабораторных мышей по признаку заражения карциномой и трем видам лечения противоопухолевым препаратом и лазерным облучением на основе построения дерева принятия решений в четырехмерном пространстве счетов в главные компоненты нормированных спектров оптической плотности высушенной крови;

– разработку многопараметрического метода обнаружения поддельной водочной продукции по отсутствию в ней унифицированной легализующей добавки с помощью применения иерархического кластерного анализа счетов в двумерном пространстве главных компонент спектров пропускания в диапазоне длин волн 200-850 нм.

Я, Джагаров Борис Михайлович, даю согласие на публикацию данного отзыва в открытом доступе на официальном сайте ИНСТИТУТА ФИЗИКИ НАН Беларуси в сети Интернет.

Официальный оппонент  
главный научный сотрудник центра «Фотоника и фотохимия молекул» ИНСТИТУТА ФИЗИКИ  
НАН Беларуси  
доктор физико-математических наук, профессор

07.06.2023

Б.М. Джагаров

