

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.

В диссертационной работе представлены результаты разработки и развития методов многопараметрического спектрального анализа и их применения для решения физических задач определения штарковской структуры энергетических уровней эрбия и иттербия с помощью анализа температурной зависимости их спектров флуоресценции, оптимизации комбинированных схем накачки волоконных усилителей, разработки информационных критериев качества материалов волоконных усилителей и прикладных задач оптической диагностики по флуоресцентной калибровке температуры, качественному и количественному многопараметрическому анализу характеристик винных дистиллятов и вин защищенного географического указания, лекарственных средств и крови лабораторных мышей. Содержание и изложенные результаты диссертационной работы полностью соответствуют пункту 3 (спектроскопия твердого тела, жидкостей и биообъектов, люминесценция) раздела «Области исследований» паспорта специальности 01.04.05 – оптика и отрасли «физико-математические науки».

Актуальность темы диссертации.

Актуальность темы диссертации обусловлена необходимостью совершенствования методов спектрального анализа для получения и обработки бóльшего количества информации об объектах исследования, что позволяет расширить круг задач оптической диагностики и повысить качество их решений за счет применения многопараметрического подхода. Именно такой подход позволил разработать метод разрешения штарковской структуры уровней энергии иттербия во фториде кальция и гранате по температурной зависимости спектров флуоресценции в диапазоне температур 305-423 К, который требует простой экспериментальной реализации по сравнению с традиционно применяемыми термостатируемыми установками, работающими при температуре жидкого азота или даже гелия. Результаты диссертационной работы по оптимизации параметров волоконных усилителей и разработке информационных критериев оценки качества их материалов представляют интерес для понимания физических процессов, определяющих особенности их работы, и могут использоваться для разработки новых активных сред и волоконных усилителей.

Тема диссертации Ходасевича М.А. соответствует разделу 6 приоритетных направлений фундаментальных и прикладных научных исследований Республики Беларусь на 2016–2020 годы, утвержденных постановлением Совета министров Республики Беларусь от 12 марта 2015 г. № 190, и разделу 4 приоритетных направлений научной, научно-технической и инновационной деятельности на 2021-2025 годы (Указ Президента Республики Беларусь от 7 мая 2020 г № 156).

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

Результаты диссертации и выносимые на защиту положения являются оригинальными и новыми. Из изложенных в диссертационной работе результатов можно выделить следующие:

1. Установлена причинно-следственная связь между физическими явлениями (перераспределение населенностей термически-связанных уровней энергии ионов эрбия ${}^2\text{H}_{11/2}$ и ${}^4\text{S}_{3/2}$, температурное тушение флуоресценции и перераспределение населенностей штарковских подуровней уровня энергии ионов эрбия ${}^4\text{S}_{3/2}$) и главными компонентами спектров ап-конверсионной флуоресценции активированной эрбием свинцово-фторидной наностеклокерамики.

2. Предложен метод определения штарковской структуры энергетических уровней иона активатора на основе многопараметрического анализа спектров флуоресценции при температурах от комнатной до 423 К, успешно апробированный на примере трёхвалентных ионов иттербия в фториде кальция и гранате при спектральном разрешении 0,2 нм с точностью 2 см^{-1} , которая не уступает точности традиционных методов низкотемпературной абсорбционной и флуоресцентной спектроскопии.

3. Реализована численная многопараметрическая оптимизация комбинированных накачек эрбиевого и тулиевого волоконных усилителей и усилителя на основе вынужденного комбинационного рассеяния света с целью достижения максимального усиления или минимальной неравномерности усиления. Предложены информационные критерии сравнения материалов для волоконных усилителей и показано их преимущество над традиционно используемыми (ширина спектра флуоресценции по полувысоте, пиковая величина сечения стимулированного испускания активатора, время жизни флуоресценции и др.).

4. Разработан многопараметрический метод определения температуры по спектрам флуоресценции активированных сред, в котором используются метод главных компонент, кластерный анализ, метод частичных наименьших квадратов с оригинальным выбором спектральных переменных, повысивший

точность более чем в два раза по сравнению с широко применяемым ратиометрическим методом.

5. С помощью многопараметрического анализа спектров пропускания вин и виноматериалов реализована классификация по производителям, проведена количественная калибровка ряда физико-химических характеристик и выявлена продукция, не соответствующая требованиям присвоения категории защищенного географического указания.

6. Разработан метод выявления поддельной водочной продукции при отсутствии априорной информации о сорте исследуемой водки с помощью применения многопараметрического анализа ультрафиолетового и видимого диапазонов спектров пропускания, показавший стопроцентную точность обнаружения подделок. Приборная реализация апробирована на 153 образцах 110 сортов водок.

7. Получена достоверная многопараметрическая классификация образцов высушенной крови здоровых мышей и зараженных карциномой мышей, облученных терапевтическим лазерным излучением и/или пролеченных противоопухолевым препаратом.

8. Применение многопараметрического анализа данных, полученных методом терагерцовой спектроскопии во временной области, позволило классифицировать ацетилсалициловую кислоту и парацетамол со 100 % точностью, а в трехкомпонентной смеси из парацетамола, дротаверина и ацетилсалициловой кислоты – идентифицировать парацетамол и выявить присутствие моногидрата лактозы в дротаверине.

Обоснованность и достоверность выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертации.

Достоверность и обоснованность выводов обеспечена проведением экспериментальных исследований с применением поверенного стандартного оборудования и использованием общепризнанных методов обработки спектральных данных. Штарковская структура уровней ионов Yb^{3+} , полученная с помощью многопараметрического анализа температурной зависимости спектров флуоресценции, была сопоставлена с опубликованными для аналогичных сред результатами низкотемпературных измерений и продемонстрировала хорошее совпадение. При исследовании параметров вин и виноматериалов подбор исследуемых образцов проводился с учетом разнообразия характеристик и наилучшей возможной равномерности охвата диапазонов изменения калибруемых параметров. Количество исследуемых образцов было достаточным для построения содержательных многопараметрических моделей. Оптимизация схем накачек волоконно-оптических усилителей была проведена с помощью широко применяемого генетического алгоритма и осуществлялась с учетом

литературных данных. Основные результаты, представленные в диссертации, опубликованы в рецензируемых авторитетных научных журналах, трудах международных конференций. Выводы диссертации соответствуют современному состоянию знаний в области оптики и спектроскопии.

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

Научная значимость результатов диссертации заключается в выявлении и использовании возможностей многопараметрического качественного и количественного спектрального анализа для обнаружения новых закономерностей и разработки новых методов оптической диагностики. Развиваемый соискателем многопараметрический подход с выбором спектральных переменных позволил получить более точные или сопоставимые по точности результаты, полученные при применении более простого экспериментального оборудования, по сравнению с традиционными методами анализа. Примером является определение штарковской структуры энергетических уровней иттербия в гранате и фториде кальция по температурной зависимости спектров флуоресценции активатора, когда температура исследуемых сред изменялась от 305 до 423 К с помощью печи для лазерных кристаллов, а не поддерживалась на уровне температуры жидкого азота или гелия в термостатируемой установке. В рамках этого же подхода оригинальный метод определения температуры путём многопараметрического интервального выбора спектральных переменных повысил точность её определения. Результаты моделирования и оптимизации схем накачки волоконных усилителей на основе вынужденного комбинационного рассеяния света позволили уточнить влияние рэлеевского рассеяния на корректное определение шумовых характеристик.

Практическая значимость результатов диссертации заключается в возможности их использования при незначительной модификации для решения задач оптической диагностики не только в научных исследованиях, но и в различных производственных процессах в промышленности и сельском хозяйстве без разработки сложных физико-химических моделей, что существенно снижает требуемые затраты и сроки проведения работ. Примерами могут служить завершаемое задание по разработке комплекса и методик калибровки элементного состава низколегированных сталей и сплавов по лазерно-искровым эмиссионным спектрам низкого разрешения в рамках подпрограммы «Оборудование для перспективных научных исследований» ГНТП «Национальные эталоны и высокотехнологичное исследовательское оборудование», выполнявшийся проект европейской программы «Горизонты-2020», посвященный разработке альтернативных

методов проверки качества и аутентичности продукции сахарной и кондитерской промышленности, планируемая работа по созданию системы оперативного контроля состояния масла в процессе эксплуатации комбайнов ОАО «Гомсельмаш» с помощью применения многопараметрического спектрального анализа.

На основе диссертации в 2023 году планируется публикация монографии «Многопараметрический подход в методах оптической диагностики: основы и применения», которая будет полезна в первую очередь в процессе обучения студентов БГУ, БНТУ и других учреждений образования и при проведении научно-исследовательских работ в Республике Беларусь и за ее пределами (Университет ИТМО, Санкт-Петербургские государственный университет и политехнический университет Петра Великого и другие организации), что свидетельствует о высокой социальной значимости полученных результатов.

Опубликованность результатов диссертации в научной печати

Результаты диссертации были представлены в 73 научных работах. 29 статей опубликованы в рецензируемых научных журналах из Перечня ВАК Республики Беларусь. Остальные работы являются статьями в сборниках трудов 29 международных конференций, на которых были апробированы материалы, представленные в диссертации.

Соответствие оформления диссертации требованиям ВАК.

Автореферат и диссертация оформлены в соответствии с требованиями ВАК. Содержание автореферата полностью соответствует содержанию диссертации. Диссертация содержит перечень сокращений и обозначений, введение, общую характеристику работы, 7 глав, первая из которых является обзором литературы, заключение, список использованных источников, состоящий из библиографического списка из 300 наименований и списка публикаций соискателя ученой степени из 73 наименований. Материал диссертации изложен целостно и логично.

Замечания по диссертации.

1. В диссертационной работе не указаны требования к спектральному разрешению оборудования. Насколько важен данный параметр при анализе материалов, имеющих более узкие спектральные линии по отношению к спектральному разрешению оборудования?

2. Штарковская структура энергетических уровней иттербия во фториде кальция полученная на основе анализа температурной зависимости спектров флуоресценции определена с точностью 2 см^{-1} , что полностью коррелирует со значением спектрального разрешения использованного оборудования (0,2 нм). Является ли спектральное разрешение единственным фактором ограничивающим точность данных о Штарковской структуре уровней?

3. Существуют три понятия использования двух и более температурно-чувствительных физических параметров для сопоставления измеренных значений температуры к её значениям, полученным расчётным путём: мультимодальная термометрия (multimode thermometry), когда имеется более одного параметра, которые могут быть использованы независимо друг от друга; мультипараметрическая термометрия (multiparameter thermometry), одновременно учитывающая несколько температурно-чувствительных параметров, например, с помощью множественной линейной регрессии или её разновидностей с нелинейной предобработкой данных; многопараметрическая термометрия (multivariate thermometry), рассматривающая весь измеренный спектр или его существенную часть. Можно ли считать, что многопараметрическая термометрия является предельным случаем мультипараметрической, когда каждая спектральная переменная представляет собой отдельный температурно-чувствительный параметр и какие преимущества имеет?

4. В главе 6 рассмотрена математическая модель волоконного усилителя на основе вынужденного комбинационного рассеяния света при одновременной оптимизации длин волн и мощностей мультиплексированных накачек, учитывающая вынужденное и спонтанное комбинационное рассеяние света; рэлеевское рассеяние; весь спектр возможных взаимодействий накачек и сигналов. Какие из рассмотренных процессов имеют наибольшее влияние на выходные параметры усилителя для корректных допущений и соответствующего упрощения и ускорения процесса математического моделирования?

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

Представленная соискателем работа, характеризующаяся систематическим подходом к постановке задач, используемыми методиками экспериментальных измерений, соответствием методов математической и статистической обработки данных современному мировому уровню, научная и практическая значимость полученных результатов свидетельствуют о соответствии научной квалификации соискателя ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.05 – оптика.

Выводы.

Диссертационная работа Ходасевича Михаила Александровича «Развитие оптических спектральных методов диагностики материалов и процессов на основе многопараметрического подхода» является завершённой квалификационной научной работой и отвечает всем требованиям ВАК Республики Беларусь, предъявляемым к докторским диссертациям, которые установлены главой 3 «Положения о присуждении ученой степени и

присвоении ученых званий». Она посвящена концептуальному развитию многопараметрического спектрального анализа и содержит принципиально новые научные результаты, совокупность которых является крупным достижением в разработке новых методов оптической диагностики материалов и процессов.

Автор диссертационной работы Ходасевич Михаил Александрович заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.05 – оптика за следующие научные результаты:

- разработку метода определения штарковской структуры энергетических уровней ионов активаторов с помощью многопараметрического анализа температурной зависимости спектров флуоресценции при температурах от комнатной и выше, точность которого сопоставима с точностью традиционных методов абсорбционной и флуоресцентной спектроскопии при температурах жидкого азота;

- разработку многопараметрического метода калибровки температуры с помощью применения оригинального поиска комбинации движущихся окон в методе частичных наименьших квадратов к нормированным спектрам флуоресценции, который показал более чем двукратное повышение точности по сравнению с ратиометрическим методом;

- сравнение пропускной способности как многопараметрического критерия качества материалов волоконных усилителей с традиционными однопараметрическими (ширина спектра флуоресценции по полувысоте, пиковая величина сечения стимулированного испускания активатора и другие), показавшее, что волокно $\text{PbF}_2\text{-SiO}_2$ является предпочтительным для использования активированного эрбием усилителя в полосе длин волн 1480–1600 нм;

- одновременное определение длин волн и мощностей четырех мультиплексированных встречных накачек волоконного усилителя на основе вынужденного комбинационного рассеяния света с помощью применения многопараметрического генетического алгоритма, которые при суммарной мощности около 900 мВт обеспечивают неравномерность спектра усиления менее ± 1 дБ в полосе шириной 80 нм;

- проведение классификации высушенных образцов крови интактных лабораторных мышей и мышей, зараженных карциномой Эрлиха, часть которых была пролечена противоопухолевым препаратом и/или терапевтической дозой лазерного облучения, на основе дерева принятия решений в четырехмерном пространстве счетов в главные компоненты нормированных спектров оптической плотности;

- разработку и апробацию многопараметрического метода выявления поддельной водочной продукции с помощью применения кластерного

– разработку и апробацию многопараметрического метода выявления поддельной водочной продукции с помощью применения кластерного анализа счетов в первые две главные компоненты спектров пропускания в диапазоне длин волн 200-850 нм.

Я, Кисель Виктор Эдвардович, даю согласие на публикацию данного отзыва в открытом доступе на официальном сайте ИНСТИТУТА ФИЗИКИ НАН Беларуси в сети Интернет.

Официальный оппонент
заведующий Научно-исследовательским
центром оптических материалов и технологий
филиала Белорусского национального
технического университета
«Научно-исследовательский политехнический
институт»
доктор физико-математических наук,
профессор

05.06.2023

В.Э. Кисель

