

Шугаева Тілектес Жалғасовнаның
6D060400 - "Физика" мамандығы бойынша философия докторы
(PhD) дәрежесін алуға арналған диссертациясына

АНДАТПА

Статикалық және уақытаралық масс-спектрометрлеріндегі зарядталған бөлшектер шоғының динамикасын модельдеу

Зерттеудің өзектілігі

Масс-спектрометрия ерікті агрегаттық күйдегі заттың элементтік, химиялық және изотоптық құрамын анықтаудың әмбебап және ең дәл әдісі болып табылады. Өзінің кең мүмкіндіктерінің арқасында ол ғылымның, техниканың және өндірістің әртүрлі салаларында қолданыла бастады. Қазіргі уақытта жаңа зерттеу әдістері дамыды, мысалы, хромато-масс-спектрометрия, тандемдік масс-спектрометрия және т.б., масс-спектрометриялық талдау мүмкіндіктерін едәуір кеңейтті. Сонымен, хромато-масс-спектрометрлердің көмегімен Ұлы Канада көлдеріндегі целлулоидты өндірістің улы ластаушысы диоксиннің құрамын анықтау мәселесі шешілді. Соңғы кездері үлгілерді иондаудың жұмсақ әдістерін әзірлеуге байланысты масс-спектрометрия сонымен қатар "өмір туралы ғылымдар" (life sciences): протеомика, геномика, биохимия, фармацевтика және медицина деп аталатын саладағы таптырмас зерттеу әдісіне айналды. Мұнда әсіресе уақытаралық масс-спектрометрлер сәтті қолданылады.

Осылайша, дұрыс физикалық және математикалық теорияларға негізделген және аналитикалық мүмкіндіктері жақсартылған құрылғыларды жобалауға және есептеуге мүмкіндік беретін есептеу технологияларының өсіп келе жатқан мүмкіндіктерін пайдаланатын статикалық және уақытаралық масс-спектрометрлердің физикалық және аспаптық сипаттамаларын есептеу мен модельдеудің жаңа әдістерін әзірлеу корпускулалық оптика мен ғылыми аспап жасаудың өзекті міндеті болып табылады.

Статикалық масс-спектрометрлердің физикалық және аспаптық сипаттамаларын есептеу кезінде қолданылған әдістер: ажыратымдылық, сезімталдық және аберрация – бұл корпускулалық оптиканың дәстүрлі әдістері. Корпускулалық оптика (КО) немесе оны электронды немесе иондық оптика деп те атайды, мөлдір ортада жарықтың таралуы мен электр және магнит өрістеріндегі зарядталған бөлшектердің қозғалысы арасындағы ұқсастықтан пайда болды. КО көптеген эксперименттік зерттеу әдістерінің ғылыми-техникалық даму деңгейін және корпускулалық-оптикалық аспаптар мен құралдардың көптеген түрлерін жасауға негізделген негізгі принциптерді анықтай отырып, ғылыми аспаптардың негізінде жатыр. Бұл құрылғылар: катодты сәулелік түтіктер, растрлық және эмиссиялық электронды және иондық микроскоптар, энергия және масс-спектрометрлер, әртүрлі электронды-оптикалық түрлендіргіштер, зарядталған бөлшектерді

тасымалдау үдеткіштері мен жүйелері, молекулалық сәулелік эпитаксияға арналған тасымалдау кешендерінің иондық-оптикалық арналары және т. б.

КО-ның теориялық негізі-классикалық электродинамика. Электродинамикада электр және магнит өрістеріндегі зарядталған бөлшектердің қозғалысы Лоренц күшінің әсерімен анықталады. Алайда, КО жеке зарядталған бөлшектердің қозғалысын ғана емес, сонымен қатар зарядталған бөлшектердің сәулелерін қалыптастыруға және сол ағындарды басқаруға байланысты мәселелерді қарастырады. Ең алдымен, бұл жерде масса мен энергия спектроскопиясында шешілетін масса мен энергия бойынша зарядталған бөлшектердің шоғырларын бөлу міндеттерін, сондай - ақ электронды және иондық микроскопияда пайда болатын сәулелерді қалыптастыру және фокустау мәселелерін атап өткен жөн. КО-да осы есептерді шешу үшін жарық оптикасынан алынған теориялық әдістер қолданылады; атап айтқанда, алдымен сызықтық есептің шешімі немесе параксиалды жуықтау, содан кейін абerrация теориясы дамиды. Сонымен қатар, абerrациялық теория дәстүрлі түрде иондық сәулені сипаттайтын шағын параметрлер бойынша асимптотикалық қатарлардың көмегімен құрылады. Абerrациялық коэффициенттерді табу үшін қолданылатын дәйекті жуықтау әдісі әсіресе жоғары ретті абerrациялық коэффициенттер үшін өте көлемді өрнектерге әкеледі. Сонымен қатар, абerrациялық теорияның шеңберінде сәулені сипаттайтын шағын параметрлердің қандай мәндерінде таңдалған жуықтау өте жақсы жұмыс істейтінін анықтау мүмкін емес.

Корпускулалық оптикалық жүйелердің (КОЖ) физикалық қасиеттерін есептеу үшін КО-да қолданылатын тағы бір әдіс - "Орталық бөлшек әдісі" немесе басқаша "осьтік траектория әдісі". Мұнда алдымен "орталық бөлшек" қозғалатын осьтік траектория есептеледі, ал иондық сәуленің қалған бөлшектерінің траекториялары олардың осьтік траекториядан ауытқуымен сипатталады. Бұл әдіс диссертацияның екінші тарауында егжей-тегжейлі сипатталған. Екінші тарауда Ньютонның өлшемсіз теңдеулерін және КОЖ электр және магнит өрістерін сипаттайтын потенциалдар үшін аналитикалық өрнектерді қолдануға негізделген, диссертацияда ұсынылған КОЖ есептеудің жаңа әдісі келтірілген.

Тәжірибе көрсеткендей, КО-дағы ең жемісті идеялар бастапқы теориялық жұмыстардан басталды. Мұнда, мысалы, призмалық жарық - оптикалық құрылғыларға ұқсас массалық анализаторлар мен энергия анализаторларын құруға әкелетін масса және энергия талдауындағы болжамды бағытты атап өткен жөн. Сонымен қатар, біз зарядталған бөлшектердің сәулелерін энергия бойынша бөлуге арналған тамаша фокустық жүйелерді құруға қатысты басқа зерттеулерді, сондай-ақ Orbitrap масс-анализаторының негізін құрайтын аналитикалық жұмыстарды атап өтеміз.

Диссертациялық жұмыстың мақсаты статикалық және уақытаралық масс-спектрометрлеріндегі зарядталған бөлшектердің шоғының динамикасын модельдеу әдістерін әзірлеу және олардың физикалық және аспаптық сипаттамаларын оңтайландыру болып табылады.

Мақсатқа жету үшін келесі **негізгі міндеттер** тұжырымдалды:

1. Ньютонның өлшемсіз теңдеулерін және КОЖ-нің электрлік және магниттік өрістерін сипаттайтын потенциалдар үшін аналитикалық өрнектерді қолдануға негізделген зарядталған бөлшектер шоғырларының динамикасын есептеу әдісін жасау.

2. Конустық призмалық жүйелердің электр және магнит өрістерін сипаттайтын потенциалдар үшін аналитикалық өрнектерді, сондай-ақ КАФТ әдістерін қолдана отырып, трансаксиалды және оссимметриялық КОЖ-нің потенциалдарын алу.

3. Монте-Карло әдісін қолдана отырып, иондық көзден түзілген зарядталған бөлшектер шоғырларының динамикасын модельдеу.

4. КАП және трансаксиалды коллиматорлық және фокустық линзалары бар статикалық призмалық масс-анализатордың физикалық және аспаптық сипаттамаларын есептеу және оңтайландыру.

5. Трансаксиалды және электростатикалық өрістердің потенциалдары үшін өлшемсіз Ньютон теңдеулері мен аналитикалық өрнектерді қолдануға негізделген уақытаралық масс-анализаторлардың физикалық және аспаптық сипаттамаларын есептеу және олардың сипаттамаларын оңтайландыру.

6. "FOCUS" компьютерлік қосымшасын пайдалана отырып, микрофокустық түтіктің электрондық-оптикалық схемасын есептеуді жүргізу.

Зерттеу нысаны - статикалық және уақытаралық масс-спектрометрлеріндегі зарядталған бөлшектер шоғының динамикасы.

Зерттеудің мәні - статикалық және уақытаралық масс-спектрометрлердің физикалық және аспаптық сипаттамалары.

Зерттеу әдістері.

Зарядталған бөлшектер шоғының динамикасын модельдеу үшін КАФТ әдістерімен алынған статикалық және уақытаралық масс-спектрометрлердің электр және магнит өрістерін сипаттайтын потенциалдар үшін өлшемсіз Ньютон теңдеулері мен аналитикалық өрнектер қолданылды. Зарядталған бөлшектер шоғының динамикасын модельдеу кезінде дифференциалдық теңдеулер жүйесін сандық интеграциялау VBA тіліндегі компьютерлік бағдарламаның көмегімен жүзеге асырылды, ол Адамстың төрт нүктелі әдісін интеграциялау қадамын автоматты түрде таңдаумен жүзеге асырылды. Адамс әдісіне арналған үдеткіш нүктелер Крыловтың дәйекті жақындасу әдісін қолданды. Ион көзінен ұшатын зарядталған бөлшектердің бастапқы шарттары Монте-Карло әдісін қолдану арқылы болды. Микрофокус түтігінің ЭОС сандық есебі "FOCUS" компьютерлік қосымшасының көмегімен жүргізілді.

Бұл жұмыстағы **ғылыми жаңалық** бірінші рет:

1. Өлшемсіз скалярлық потенциалдармен сипатталатын электр және магнит өрістеріндегі зарядталған бөлшек үшін өлшемсіз Ньютон теңдеулерінің сандық интеграциясына негізделген зарядталған бөлшектер шоғыры динамикасының математикалық және компьютерлік моделі жасалды.

2. Конустық призмалық жүйелердің электр және магнит өрістерін сипаттайтын потенциалдар үшін аналитикалық өрнектер, сондай-ақ КАФТ әдістерін қолдана отырып, трансаксиалды және оссимметриялық өрімдердің потенциалдары үшін аналитикалық өрнектер алынды.

3. Күрделі айнымалы функциялар теориясының (КАФТ) әдістерін қолдана отырып, Лаплас теңдеуі үшін электростатиканың шекаралық есептерін шешу әдістері сыналды. Алынған аналитикалық өрнектердің әлеуетке сәйкестігі қолданылатын математикалық әдістердің дұрыстығымен қамтамасыз етіледі.

4. Анаморфот режимінде үш электродты трансаксиалды линза есептелген, ол КАП-қа кірер алдында коллиматорлық линза ретінде пайдаланылатын ион шоғырының энергиясын азайтады.

5. КАП-тың хроматикалық аберрациялары, сондай-ақ осьтік симметриялы және трансаксиалды электростатикалық айналар зерттелді және уақытаралық масса анализаторларының аспаптық сипаттамаларын оңтайландыру жолдары анықталды.

6. Электрондық ағынның үдеуін және оның эмиссия аймағынан қима радиусының 10 есе қысылуымен фокус нүктесіне тасымалдануын қамтамасыз ететін микрофокустық түтіктің электронды-оптикалық схемасы әзірленді және сандық түрде зерттелді.

Нәтижелердің теориялық және практикалық маңыздылығы. Диссертация нәтижелері негізінен теориялық сипатта болады. Жұмыстың ғылыми маңыздылығы зарядталған бөлшектер шоғының динамикасын модельдеу арқылы екі өлшемді, конустық, сондай-ақ осьтік симметриялы және трансаксиалды электростатикалық жүйелерге негізделген статикалық және уақытаралық масса анализаторларының физикалық және аспаптық сипаттамаларын есептеу мен оңтайландырудың аналитикалық және компьютерлік әдістерін әзірлеу болып табылады.

Қорғауға шығарылатын ережелер:

1. Электрлік және магниттік өрістердегі зарядталған бөлшектердің қозғалысының нақты өлшемсіз дифференциалдық теңдеулерінің сандық шешімдері, олардың потенциалдары үшін аналитикалық өрнектер жұмыста табылған, көздегі иондардың шығу координаттары мен бұрыштары бойынша, сондай-ақ энергиялар мен массалар бойынша таралуын ескеруге мүмкіндік береді және аберрацияға түзетулер енгізеді.

2. Конус тәрізді ахроматикалық призмасы және трансаксиалды линзалары бар статикалық призмалық масс-спектрометрде $\gamma=0$ және $\gamma=1/20000$ массалық дуплетті модельдеу 20000 массалық ажыратымдылыққа және 40000 шыңдарының жартылай биіктігінде қол жеткізілетінін көрсетті, бұл аспаптың өлшемдері мен иондық параметрлері бірдей болған кезде Matsuda масс-спектрометрінің ажыратымдылығымен салыстырғанда 8 есе көп екенін көрсетті. көзі.

3. Үш электродтық трансаксиалды айнаның ортаңғы жазықтығында орналасқан нүктелік көзден ұшатын зарядталған бөлшектердің шағылысуы нәтижесінде иондық сәуленің энергетикалық және кеңістіктік уақытаралық фокусына қол жеткізіледі, ал массаның салыстырмалы айырмашылығы $\gamma=1/4000$ болатын массалық дуплет үшін осимметриялық цилиндрлік айна негізінде уақытаралық масс-спектрометрінде 4000 ажыратымдылыққа шыңдар биіктігінің 50% деңгейінде қол жеткізіледі.

Диссертациялық жұмыста тұжырымдалған ғылыми ережелердің, нәтижелер мен тұжырымдардың **дұрыстығы мен негізділігі сыналған физикалық теориялар мен әдістерді қолдану және** алынған нәтижелердің корпускулалық оптиканың іргелі ережелерімен абсолютті сәйкестігімен расталады, сондай-ақ пайдаланылған аналитикалық және сандық математикалық әдістердің дұрыстығымен және сыналған физикалық теориялар мен әдістерді қолданумен, сондай-ақ кейбір сынақ мысалдары үшін сандық модельдеу нәтижелерімен салыстырумен және басқа авторлар алған нәтижелермен келісумен қамтамасыз етіледі.

Диссертация тақырыбының ғылыми жұмыс жоспарларымен байланысы. Диссертациялық жұмыстың нәтижелері ҚР БҒМ гранттық қаржыландыруымен "Зарядталған бөлшектердің торсыз энергия және масс - анализаторларын жобалау және есептеу кезінде шеткі өрістердің әсерін модельдеу" жаратылыстану ғылымдары саласындағы іргелі зерттеулердің жобалық құжаттарын дайындау кезінде пайдаланылды (№AP09258546, 2021-2023 жж.).

Автордың жеке үлесі - автор Монте-Карло әдісін қолдана отырып жасалған алгоритмдер мен қолданбалы бағдарламалар пакеттерін қолдана отырып, екі өлшемді, конустық, трансаксиалды және осьтік-симметриялы электростатикалық жүйелер негізінде статикалық және уақытаралық масса анализаторларының физикалық және аспаптық сипаттамаларының сандық есептеулерін жасауға және жүргізуге қатысқан. Ғылыми консультанттар алынған нәтижелерді талқылауды міндетіне алады.

Жұмысты апробациялау. Жұмыстың негізгі нәтижелері келесі конференциялар мен семинарларда баяндалды және талқыланды:

- "Талдаудың, дифференциалдық теңдеулер мен алгебраның өзекті мәселелері" Халықаралық ғылыми-практикалық конференциясы (Астана, 16-19 қазан 2019 ж.);
- БМСҚ тоғызыншы съезі, "Масс-спектрометрия және оның қолданбалы мәселелері" Халықаралық қатысуымен 8-ші Бүкілресейлік конференция (Мәскеу, 14-18 қазан 2019 ж.);
- "Жастар, ғылым және инновациялар" XV халықаралық ғылыми-практикалық конференциясы (Ақтөбе, 12 сәуір 2019 ж.);
- "Ядролық ғылым және технологиялар" III Халықаралық ғылыми форумы, (Алматы, 2021 ж.20-24 қыркүйек).

Жарияланымдар. Диссертациялық жұмыста баяндалған зерттеулердің нәтижелері бойынша 12 ғылыми жұмыс жарияланды, оның ішінде Web of Science және Scopus дерекқорында индекстелетін рейтингтік ғылыми журналдарда 4 мақала; ҚР ҒЖБМ Білім және ғылым саласындағы сапаны қамтамасыз ету Комитеті ұсынған журналда 1 мақала; 7 жарияланым басқа ғылыми журналдар мен халықаралық конференциялар материалдарында.

Диссертацияның құрылымы мен көлемі. Зерттеудің белгілі бір мақсаты мен міндеттеріне сәйкес диссертациялық жұмыс кіріспеден, бес бөлімнен, қорытындыдан, пайдаланылған дереккөздер тізімінен тұрады.

Формулалардың нөмірленуі екі таңбалы: бірінші сан бөлім нөмірін, екіншісі- формуланың меншікті нөмірін, графиктерді, суреттерді, кестелерді, кіші бөлім ішіндегі формулаларды білдіреді. Диссертацияның жалпы көлемі - 111 бет, 5 кесте, 46 сурет және 115 атаудан тұратын библиография.