

ОТЗЫВ

**официального рецензента на диссертационную работу
Шугаевой Тилектес Жалгасовны на тему «Моделирование динамики пучков заряженных частиц в статических и
времяпролетных масс-спектрометрах», представленную на соискание ученой степени доктора философии (PhD)
по специальности «6D060400 – Физика».**

№п/п	Критерии	Соответствие критериям (необходимо отметить один из вариантов ответа)	Обоснование позиции официального рецензента
1.	Тема диссертации (на дату ее утверждения) соответствует направлениям развития науки и/или государственным программам	<p>1.1 Соответствие приоритетным направлениям развития науки или государственным программам:</p> <p>1) Диссертация выполнена в рамках проекта или целевой программы, финансируемого(ой) из государственного бюджета (указать название и номер проекта или программы)</p> <p>2) Диссертация выполнена в рамках другой государственной программы (указать название программы)</p> <p>3) Диссертация соответствует приоритетному направлению развития науки, утвержденному Высшей научно-технической комиссией при Правительстве Республики Казахстан (указать направление)</p>	<p>Диссертационная работа выполнялась в рамках проекта с грантовым финансированием Комитета науки Министерства образования и науки Республики Казахстан №АР09258546 «Моделирование влияния краевых полей при проектировании и расчете бессеточных энерго- и масс-анализаторов заряженных частиц» (2021-2023). Руководитель проекта д.ф.м.н., профессор Спивак-Лавров И.Ф.</p> <p>Диссертационное исследование соответствует приоритетному направлению развития науки «Научные исследования в области естественных наук», утвержденному Высшей научно-технической комиссией при Правительстве Республики Казахстан от 29 апреля 2020 года.</p>
2.	Важность для науки	Работа вносит /не вносит существенный вклад в науку, а ее важность хорошо раскрыта /не раскрыта	<p>Результаты диссертационной работы носят фундаментальный характер и вносят существенный вклад в теоретическую корпускулярную оптику, в том числе в масс-спектрометрию. В настоящее время масс-спектрометрия является незаменимым инструментом исследования во многих областях современной науки, техники и жизни человека. Трудно представить себе область человеческой деятельности, где им не нашлось</p>

			<p>бы места. Вот далеко не полный перечень практического использования масс-спектрометрии: биохимия, медицина и токсикология, микробиология и вирусология, общая и органическая химия, фармацевтика, пищевая промышленность, химический синтез, нефтехимия и нефтепереработка, контроль окружающей среды, производство полимеров и пластиков, криминалистика, допинговый контроль, контроль наркотических средств, геохимия, археология, ядерная промышленность, энергетика и металлургия.</p> <p>Научная значимость работы заключается в развитии аналитических и компьютерных методов расчета и оптимизации на их основе физических и приборных характеристик статических и времяпролетных масс-спектрометров путем моделирования динамики пучков заряженных частиц в электростатических системах с двумерной, конической, осесимметричной и трансаксиальной симметрий.</p>
3.	Принцип самостоятельности	<p>Уровень самостоятельности:</p> <p>1) Высокий;</p> <p>2) Средний;</p> <p>3) Низкий;</p> <p>4) Самостоятельности нет</p>	<p>Автором проявлен высокий уровень самостоятельности в разработке программ, реализующих аналитические и численные методы расчета потенциалов электрических и магнитных полей.</p> <p>Личный вклад автора особенно значителен в проведении численных расчетов электростатических систем двумерной, конической, осесимметричной и трансаксиальной симметрий с целью оптимизации физических и приборных характеристик статических и времяпролетных масс-спектрометров путем использования разработанных автором программ, реализующих метод Монте-Карло и использующих стандартную программу генератора случайных чисел Rnd() в MS Excel.</p>

4.	Принцип внутреннего единства	4.1 Обоснование актуальности диссертации: 1) Обоснована; 2) Частично обоснована; 3) Не обоснована.	Актуальность работы обоснована тем, что главной целью диссертационной работы является улучшение пространственных и времяпролетных характеристик статических и времяпролетных масс-спектрометров, востребованных, как указано выше, во многих областях современной науки, техники и жизни человека. В данной диссертационной работе разработан новый метод расчета корпускулярно-оптических систем, основанный на использовании безразмерных уравнений Ньютона и аналитических выражений для потенциалов, а также дифференциальных уравнений, определяющих отклонение частиц пучка от осевой траектории. Показано, что использование этих методов совместно с методом Монте-Карло позволяет моделировать поведение широких пучков заряженных частиц в корпускулярно-оптических системах без ограничений, накладываемых традиционным абберационным методом.
		4.2 Содержание диссертации отражает тему диссертации: 1) Отражает; 2) Частично отражает; 3) Не отражает	Содержание диссертации ясно отражает тему исследования. Все разделы диссертации расположены последовательно в соответствии с поставленными задачами.
		4.3. Цель и задачи соответствуют теме диссертации: 1) соответствуют; 2) частично соответствуют; 3) не соответствуют	Цели и задачи диссертационной работы соответствуют теме исследования и раскрывают основные аспекты диссертационной работы.
		4.4 Все разделы и положения диссертации логически взаимосвязаны: 1) полностью взаимосвязаны; 2) взаимосвязь частичная; 3) взаимосвязь отсутствует	Выполненное диссертационное исследование представляет собой структурированную, законченную, целостную работу с присущей ей внутренней логикой. Полученные результаты носят логичный, структурированный и полноценный характер.
		4.5 Предложенные автором новые решения	Предложенные автором новые методы и решения

		<p>(принципы, методы) аргументированы и оценены по сравнению с известными решениями:</p> <p>1) критический анализ есть;</p> <p>2) анализ частичный;</p> <p>3) анализ представляет собой не собственные мнения, а цитаты других авторов</p>	<p>аргументированы и оценены путем сравнения с известными решениями.</p> <p>Достоверность и обоснованность научных положений, результатов и выводов, сформулированных в диссертационной работе, подтверждается использованием апробированных физических теорий и методов, и согласованностью полученных результатов с фундаментальными положениями корпускулярной оптики, а также обеспечиваются корректностью использованных аналитических и численных математических методов, и сравнением с результатами численного моделирования для некоторых тестовых примеров и сравнением с результатами, полученными другими авторами.</p>
5.	Принцип научной новизны	<p>5.1 Научные результаты и положения являются новыми?</p> <p>1) полностью новые;</p> <p>2) частично новые (новыми являются 25-75%);</p> <p>3) не новые (новыми являются менее 25%)</p>	<p>Научные результаты и положения, выносимые на защиту, обладают научной новизной и заключаются в следующем: создана математическая и компьютерная модель динамики пучков заряженных частиц, основанная на численном интегрировании безразмерных уравнений Ньютона для заряженных частиц в электрических и магнитных полях, описываемых безразмерными скалярными потенциалами. Получены аналитические выражения для потенциалов, описывающих электрические и магнитные поля конических призматических систем, а также аналитические выражения для потенциалов трансаксиальных и осесимметричных КОС с использованием методов ТФКП. Апробированы методы решения граничных задач электростатики для уравнения Лапласа с использованием методов теории функций комплексной переменной (ТФКП). Адекватность полученных аналитических выражений для потенциалов обеспечивается корректностью используемых</p>

			<p>математических методов. Рассчитана трехэлектродная трансаксиальная линза в режиме анаморфота, уменьшающая энергию пучка ионов, которая используется в качестве коллиматорной линзы перед входом в КАП. Исследованы хроматические aberrации КАП, а также условия энергетической и времяпролетной фокусировки в осесимметричных и трансаксиальных электростатических зеркалах и определены пути оптимизации приборных характеристик времяпролетных масс-анализаторов.</p>
		<p>5.2 Выводы диссертации являются новыми? 1) полностью новые; 2) частично новые (новыми являются 25-75%); 3) не новые (новыми являются менее 25%)</p>	<p>Выводы диссертации являются новыми, подтвержденными полученными результатами моделирования пучков заряженных частиц в электромагнитных полях.</p>
6.	Обоснованность основных выводов	<p>Все основные выводы основаны/не основаны на весомых с научной точки зрения доказательствах либо достаточно хорошо обоснованы (для qualitative research и направлений подготовки по искусству и гуманитарным наукам)</p>	<p>Все основные выводы подтверждаются результатами численного интегрирования безразмерных уравнений Ньютона, также дифференциальных уравнений, определяющих отклонение частиц пучка от осевой траектории. Показано, что использование этих уравнений и метода Монте-Карло позволяет моделировать поведение пучков заряженных частиц в КОС.</p>
7.	Основные положения, выносимые на защиту	<p>Необходимо ответить на следующие вопросы по каждому положению в отдельности: 7.1 Доказано ли положение? 1) доказано; 2) скорее доказано; 3) скорее не доказано; 4) не доказано 7.2 Является ли тривиальным? 1) да; 2) нет 7.3 Является ли новым?</p>	<p>Положение №1. Численные решения точных безразмерных дифференциальных уравнений движения заряженных частиц в электрических и магнитных полях исследуемых корпускулярно-оптических систем, полученные с использованием аналитических выражений для потенциалов, позволяют моделировать динамику пучков заряженных частиц в статических и времяпролетных масс-спектрометрах, учитывая распределение ионов, вылетающих из источника по координатам и углам вылета, а также по энергиям и массам с учетом поправок на aberrации.</p>

		<p>1) да; 2) нет</p> <p>7.4 Уровень для применения: 1) узкий; 2) средний; 3) широкий</p> <p>7.5 Доказано ли в статье? 1) да; 2) нет</p>	<p>7.1 Доказано ли положение? 1) доказано</p> <p>7.2 Является ли тривиальным? 2) нет</p> <p>7.3 Является ли новым? 1) да;</p> <p>7.4 Уровень для применения: 3) широкий</p> <p>7.5 Доказано ли в статье? 1) да.</p> <p>Положение №2. В статическом призмном масс-спектрометре с конусовидной ахроматичной призмой и трансаксиальными линзами моделирование массового дуплета с относительной разнице в массах $\gamma=1/20000$ показало, что достигается разрешение по массе у основания пиков 20000, а на полуввысоте пиков 40000, что больше в 8 раз в сравнении с разрешением масс-спектрометра Матсуда при почти одинаковых размерах прибора и параметрах ионного источника.</p> <p>7.1 Доказано ли положение? 1) доказано</p> <p>7.2 Является ли тривиальным? 2) нет</p> <p>7.3 Является ли новым? 1) да;</p> <p>7.4 Уровень для применения: 3) широкий</p> <p>7.5 Доказано ли в статье? 1) да.</p> <p>Положение №3. В результате моделирования динамики заряженных частиц, вылетающих из точечного источника во времяпролетном масс-спектрометре на основе осесимметричного цилиндрического зеркала для массового дуплета с относительной разницей в массах $\gamma=1/4000$ достигается разрешение 4000 на уровне 50% от высоты пиков, а в случаи трехэлектродного</p>
--	--	---	--

			<p>трансаксиального зеркала также достигается энергетическая и пространственная времяпролетная фокусировка ионного пучка, что позволяет использовать эти зеркала для создания многоотражательных времяпролетных масс-анализаторов.</p> <p>7.1 Доказано ли положение? 1) доказано</p> <p>7.2 Является ли тривиальным? 2) нет</p> <p>7.3 Является ли новым? 1) да;</p> <p>7.4 Уровень для применения: 3) широкий</p> <p>7.5 Доказано ли в статье? 1) да.</p>
8.	Принцип достоверности Достоверность источников и предоставляемой информации	8.1 Выбор методологии - обоснован или методология достаточно подробно описана <u>1) да;</u> 2) нет	Выбор методологии- обоснован современными общепризнанными научными теориями корпускулярной оптики, электродинамики и использование корректных математических методов. Общей методологической основой диссертационной работы является комплексный подход, включающий анализ и обобщение фундаментальных исследований в области корпускулярной оптики, которая является теоретической основой для научного приборостроения.
		8.2 Результаты диссертационной работы получены с использованием современных методов научных исследований и методик обработки и интерпретации данных с применением компьютерных технологий: <u>1) да;</u> 2) нет	Все результаты диссертационной работы получены с использованием современных методов научных исследований и аналитических данных. Для моделирования динамики пучков заряженных частиц использовались безразмерные уравнения Ньютона и аналитические выражения для потенциалов описывающих электрические и магнитные поля статических и времяпролетных масс-спектрометров, полученные с помощью методов ТФКП. При моделировании динамики пучков заряженных частиц проводилось численное интегрирование системы

			дифференциальных уравнений с помощью компьютерной программы на языке VBA, реализующей четырехточечный метод Адамса с автоматическим выбором шага интегрирования. Разгонные точки для метода Адамса находились с использованием метода последовательных сближений Крылова. Начальные условия для заряженных частиц, вылетающих из источника ионов, находились с использованием метода Монте-Карло.
		8.3 Теоретические выводы, модели, выявленные взаимосвязи и закономерности доказаны и подтверждены экспериментальным исследованием (для направлений подготовки по педагогическим наукам результаты доказаны на основе педагогического эксперимента): 1) да; 2) нет	Теоретические выводы, модели, выявленные взаимосвязи и закономерности доказаны и подтверждены теоретическими исследованиями и сравнением с ранее полученными результатами.
		8.4 Важные утверждения подтверждены/частично подтверждены /не подтверждены ссылками на актуальную и достоверную научную литературу	Важные утверждения подтверждены ссылками на актуальную и достоверную научную литературу.
		8.5 Используемые источники литературы достаточны/не достаточны для литературного обзора	Список использованной литературы включает в себя 115 источников, в том числе 12 работ в которых докторант является соавтором, из них 5 статей, опубликованных в ведущих рецензируемых научных журналах и научных изданиях, рекомендованных КОКСНВО. Было использовано достаточное количество источников для литературного обзора.
9	Принцип практической ценности	9.1 Диссертация имеет теоретическое значение: 1) да; 2) нет	Диссертация имеет теоретическое значение. Данная работа посвящена моделированию динамики заряженных частиц в статических и времяпролетных масс-анализаторах.
		9.2 Диссертация имеет практическое значение и	Теоретические результаты, полученные в

		существует высокая вероятность применения полученных результатов на практике: 1) да; 2) нет	диссертационной работе могут быть использованы для создания статических и времяпролетных масс-анализаторов.
		9.3 Предложения для практики являются новыми? 1) полностью новые; 2) частично новые (новыми являются 25-75%); 3) не новые (новыми являются менее 25%)	Предложенные в диссертационной работе схемы статических и времяпролетных масс-анализаторов являются полностью новыми.
10.	Качество написания и оформления	Качество академического письма: 1) высокое; 2) среднее; 3) ниже среднего; 4) низкое.	Качество академического письма высокое, текст диссертации написан лаконично, все положения изложены современным научным языком.

В связи с вышеизложенным считаю, что диссертационная работа Шугаевой Тилектес Жалгасовны на тему «Моделирование динамики пучков заряженных частиц в статических и времяпролетных масс-спектрометрах» полностью соответствует всем требованиям, предъявляемым Комитетом по обеспечению качества в сфере науки и высшего образования к диссертациям на соискание степени доктора философии (PhD), а ее автор заслуживает присуждения ученой степени доктора философии (PhD) по специальности «6D060400 – Физика».

Официальный рецензент:
доктор физико-математических наук,
профессор кафедры IT инжиниринг
НАО «Алматинский университет энергетики и связи
имени Гумарбека Даукеева»

Ученый секретарь
НАО «Алматинский университет энергетики и связи
имени Гумарбека Даукеева»,
доктор философии (PhD)



Бимурзаев С.Б.

Бегимбетова А.С.