

АННОТАЦИЯ

диссертации на соискание степени доктора философии (PhD) по специальности 6D060400- «Физика»

Шугаевой Тилектес Жалгасовны

Моделирование динамики пучков заряженных частиц в статических и времяпролетных масс-спектрометрах

Актуальность исследования

Масс-спектрометрия является универсальным и наиболее точным методом определения элементного, химического и изотопного состава вещества в произвольном агрегатном состоянии. Благодаря своим широким возможностям она нашла применение в самых различных областях науки, техники и производства. В настоящее время развились также новые методы исследования такие как хромато-масс-спектрометрия, тандемная масс-спектрометрия и др., значительно расширившие возможности масс-спектрометрического анализа. Так, с помощью хромато-масс-спектрометров была решена проблема определения содержания диоксина, токсичного загрязнителя целлюлоидного производства в Великих канадских озерах. В последнее время в связи с разработкой мягких методов ионизации образцов масс-спектрометрия стала также незаменимым методом исследования в области, так называемых, «наук о жизни» (life sciences): протеомика, геномика, биохимия, фармацевтика и медицина. Здесь особенно успешно используются времяпролетные масс-спектрометры.

Таким образом разработка новых методов расчета и моделирования физических и приборных характеристик статических и времяпролетных масс-спектрометров, основанных на корректных физических и математических теориях и использующих возросшие возможности вычислительных технологий, которые позволяют проектировать и рассчитывать приборы с улучшенными аналитическими возможностями, является актуальной задачей корпускулярной оптики и научного приборостроения.

Методы, которые использовались при расчете физических и приборных характеристик статических масс-спектрометров: разрешающей способности, чувствительности и аббераций – это традиционные методы корпускулярной оптики. Корпускулярная оптика (КО), или, как ее еще называют – электронная или ионная оптика, возникла из аналогии между распространением света в прозрачных средах и движением заряженных частиц в электрических и магнитных полях. КО лежит в основе научного приборостроения, определяя уровень научно-технического развития многих экспериментальных методов исследования и базовые принципы, лежащие в основе создания большого числа всевозможных корпускулярно-оптических приборов и инструментов. Это такие приборы как: электронно-лучевые трубки, растровые и

эмиссионные электронные и ионные микроскопы, энерго- и масс-спектрометры, различные электронно-оптические преобразователи, ускорители и системы транспортировки заряженных частиц, ионно-оптические каналы транспортирующих комплексов для молекулярно-пучковой эпитаксии и т.д.

Теоретической основой КО является классическая электродинамика. В электродинамике движение заряженных частиц в электрическом и магнитном полях определяется действием силы Лоренца. Однако КО рассматривает не только движение отдельных заряженных частиц, а проблемы, связанные с формированием пучков заряженных частиц и управлением этими потоками. В первую очередь, здесь стоит отметить задачи разделения пучков заряженных частиц по массе и энергии, которые решаются в масс- и энерго-спектрокопии, а также проблемы формирования и фокусировки пучков, возникающие в электронной и ионной микроскопии. Для решения этих задач в КО используются теоретические методы, заимствованные из световой оптики; а именно, сначала, находится решение линейной задачи или параксиальное приближение, а затем развивается теория аббераций. Причем абберационная теория традиционно строится с помощью асимптотических рядов по малым параметрам, характеризующим ионный пучок. Метод последовательных приближений, применяемый для нахождения абберационных коэффициентов приводит к очень громоздким выражениям особенно для абберационных коэффициентов высокого порядка. При этом невозможно определить в рамках самой абберационной теории, при каких значениях малых параметров, характеризующих пучок, выбранное приближение достаточно хорошо работает.

Другим методом, который используется в КО для расчета физических свойств корпускулярно-оптических систем (КОС), является «метод центральной частицы» или иначе «метод осевой траектории». Здесь сначала рассчитывается осевая траектория, по которой движется «центральная частица», а траектории остальных частиц ионного пучка характеризуются их отклонением от осевой траектории. Этот метод подробно описан во второй главе диссертации. Во второй главе изложен также и новый метод расчета КОС, предложенный в диссертации, основанный на использовании безразмерных уравнений Ньютона и аналитических выражений для потенциалов, описывающих электрическое и магнитное поля КОС.

Опыт показывает, что обычно самые плодотворные идеи в КО начинались с оригинальных теоретических работ. Здесь, например, следует отметить признание направление в масс- и энерго-анализе, приведшее к созданию масс-анализаторов и энерго-анализаторов, аналогичных по своей схеме призмным светооптическим приборам. Кроме того, отметим другие исследования, связанные с созданием систем с идеальной фокусировкой для разделения пучков заряженных частиц по энергии, а также аналитические работы, которые легли в основу масс-анализатора Orbitrap.

Целью диссертационной работы является разработка методов моделирования динамики пучков заряженных частиц в статических и

времяпролетных масс-спектрометрах и оптимизация их физических и приборных характеристик.

Для достижения поставленной цели были сформулированы следующие **основные задачи:**

1. Разработать метод расчета динамики пучков заряженных частиц, основанный на использовании безразмерных уравнений Ньютона и аналитических выражений для потенциалов, описывающих электрические и магнитные поля КОС.

2. Получить аналитические выражения для потенциалов, описывающих электрические и магнитные поля конических призматических систем, а также потенциалов трансаксиальных и осесимметричных КОС с использованием методов ТФКП.

3. Моделирование динамики пучков заряженных частиц, формируемых ионным источником с применением метода Монте-Карло.

4. Выполнить расчет и оптимизацию физических и приборных характеристик статического призматического масс-анализатора с КАП и трансаксиальными коллиматорной и фокусирующей линзами.

5. Выполнить расчет физических и приборных характеристик времяпролетных масс-анализаторов, основанный на использовании безразмерных уравнений Ньютона и аналитических выражений для потенциалов трансаксиальных и электростатических полей и провести оптимизацию их характеристик.

6. Провести расчет электронно-оптической схемы микрофокусной трубки с использованием компьютерного приложения «FOCUS».

Объектом исследования является динамика пучков заряженных частиц в статических и времяпролетных масс-спектрометрах.

Предметом исследования являются физические и приборные характеристики статических и времяпролетных масс-спектрометров.

Методы исследования.

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. Численный расчет ЭОС микрофокусной трубки проводился с помощью компьютерного приложения «FOCUS».

Научная новизна заключается в том, что в работе впервые:

1. Создана математическая и компьютерная модель динамики пучков заряженных частиц, основанная на численном интегрировании безразмерных уравнений Ньютона для заряженной частицы в электрических и магнитных полях, описываемых безразмерными скалярными потенциалами.

2. Получены аналитические выражения для потенциалов, описывающих электрические и магнитные поля конических призматических систем, а также аналитические выражения для потенциалов трансаксиальных и осесимметричных КОС, полученные с использованием методов ТФКП.

3. Апробированы методы решения граничных задач электростатики для уравнения Лапласа с использованием методов теории функций комплексной переменной (ТФКП). Адекватность полученных аналитических выражений для потенциала обеспечивается корректностью используемых математических методов.

4. Рассчитана трехэлектродная трансаксиальная линза в режиме анаморфота, уменьшающая энергию пучка ионов, которая используется в качестве коллиматорной линзы перед входом в КАП.

5. Исследованы хроматические aberrации КАП, а также осесимметричных и трансаксиальных электростатических зеркал и определены пути оптимизации приборных характеристик времяпролетных масс-анализаторов.

6. Разработана и численно исследована электронно-оптическая схема микрофокусной трубки, обеспечивающей ускорение электронного потока и его транспортировку из области эмиссии в точку фокуса с 10-кратным сжатием радиуса сечения.

Теоретическая и практическая значимость результатов. Результаты диссертации носят, в основном, теоретический характер. Научная значимость работы заключается в разработке аналитических и компьютерных методов расчета и оптимизации физических и приборных характеристик статических и времяпролетных масс-анализаторов на основе двумерных, конических, а также осесимметричных и трансаксиальных электростатических систем путем моделирования динамики пучков заряженных частиц.

Положения, выносимые на защиту:

1. Численные решения точных безразмерных дифференциальных уравнений движения заряженных частиц в электрических и магнитных полях, исследуемых корпускулярно-оптических систем, аналитические выражения для потенциалов которых были найдены в работе, позволяют учитывать распределение ионов в источнике по координатам и углам вылета, а также по энергиям и массам и содержат в себе поправки на aberrации.

2. В статическом призматическом масс-спектрометре с конусовидной ахроматической призмой и трансаксиальными линзами моделирование массового дуплета с $\gamma=0$ и $\gamma=1/20000$ показало, что достигается разрешение по массе 20000, а на полувысоте пиков 40000, что больше в 8 раз в сравнении с разрешением масс-спектрометра Матсуда при почти одинаковых размерах прибора и параметрах ионного источника.

3. В результате отражения заряженных частиц, вылетающих из точечного источника, расположенного в средней плоскости трехэлектродного трансаксиального зеркала, достигается энергетическая и пространственная времяпролетная фокусировка ионного пучка, а в 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.

Достоверность и обоснованность научных положений, результатов и выводов, сформулированных в диссертационной работе, подтверждается использованием апробированных физических теорий и методов и абсолютной согласованностью полученных результатов с фундаментальными положениями корпускулярной оптики, а также обеспечивается корректностью использованных аналитических и численных математических методов, сравнением с результатами численного моделирования для некоторых тестовых примеров и согласием с результатами, полученными другими авторами.

Связь темы диссертации с планами научных работ. Результаты диссертационной работы были использованы при подготовке документов проекта с грантовым финансированием МНВО РК фундаментальных исследований в области естественных наук «Моделирование влияния краевых полей при проектировании и расчете бессеточных энерго- и масс-анализаторов заряженных частиц» (№АР09258546, 2021-2023 гг.).

Личный вклад автора заключается в том, что автор участвовал в разработке программ и проведении численных расчетов физических и приборных характеристик статических и времяпролетных масс-анализаторов на основе двумерных, конических, трансаксиальных и осесимметричных электростатических систем с использованием алгоритмов и пакета прикладных программ, созданных с применением метода Монте-Карло. Участие научных консультантов заключается в постановке задач и обсуждении полученных результатов.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались и обсуждались на следующих конференциях и семинарах:

–Международная научно-практическая конференция "Актуальные проблемы анализа, дифференциальных уравнений и алгебры" (Нур-Султан, 16-19 октября 2019 г.);

–Девятый съезд ВМСО, 8-ая Всероссийская конференция с международным участием «Масс-спектрометрия и ее прикладные проблемы» (Москва, 14-18 октября 2019 г.);

–XV Международная научно-практическая конференция «Молодежь, наука и инновации» (Актобе, 12 апрель 2019 г.);

–III Международный научный форум «Ядерная наука и технологии», (Алматы, 20-24 сентября 2021 г.).

Публикации. По результатам исследований, изложенных в диссертационной работе, опубликовано 12 научных работ, в том числе 4

статьи в рейтинговых научных журналах, индексируемых в базе данных Web of Science и Scopus; 1 статья в журнале, рекомендованном Комитетом по обеспечению качества в сфере высшего образования и науки МНВО РК; 7 публикаций в других научных журналах и материалах международных конференций.

Структура и объем диссертации. В соответствии с определенной целью и поставленными задачами исследования диссертационная работа состоит из введения, пяти разделов, заключения, списка использованных источников. Нумерация формул двухзначная: первое число означает номер раздела, второе – собственный номер формулы, графики, рисунки, таблицы, формулы внутри подраздела. Общий объем диссертации - 111 страниц, 5 таблиц, 46 рисунка и библиография, содержащая 115 наименований.