

## Отзыв

научного консультанта на диссертацию Шугаевой Тилектес Жалгасовны «Моделирование динамики пучков заряженных частиц в статических и времяпролетных масс-спектрометрах», представленной на соискание степени доктора философии (PhD) по специальности «6D060400 – Физика».

### **1. Актуальность темы исследования и ее связь с общенаучными и общегосударственными программами**

Масс-спектрометрия является универсальным и наиболее точным методом проведения элементного, химического и изотопного анализа состава вещества в произвольном агрегатном состоянии. В последнее время в связи с разработкой мягких методов ионизации образцов значительно расширилось применение масс-спектроскопии в области, так называемых, «наук о жизни» (life sciences): протеомика, геномика, биохимия, фармацевтика и медицина. Здесь особенно успешно используются времяпролетные масс-спектрометры, а также масс-спектрометры типа «Орбитреп». Несмотря на несомненные достижения в этих областях, нельзя не отметить тот факт, что все упомянутые приборы работают в импульсном режиме, позволяющем анализировать состав импульсных ионных пакетов.

В то же время существует ряд задач, в которых необходимо накапливать слабые сигналы в течение длительного времени. Это, прежде всего, изотопная масс-спектрометрия, где пока еще статические масс-спектрометры находятся вне конкуренции. Здесь можно отметить, в частности, изотопные исследования водородно-гелиевых смесей. Решение этих задач предъявляет высокие требования к чувствительности и разрешению линий масс-спектра на супернизких уровнях высоты пиков, обеспечить которые в настоящее время могут лишь статические масс-спектрометры. Таким образом, разработка методов расчета приборных характеристик статических и времяпролетных масс-спектрометров, основанных на использовании возросших возможностей вычислительной техники, несомненно, является актуальной задачей электронной оптики и научного приборостроения.

Разработка новых методов расчета ионно-оптических систем статических и времяпролетных масс-спектрометров, основанное на использовании возросших возможностей вычислительной техники и позволяющих проектировать и рассчитывать приборы с улучшенными аналитическими характеристиками, является актуальной задачей физической электроники и научного приборостроения.

## 2. Изотопная масс-спектрометрия

Изотопная масс-спектрометрия является надежным и эффективным средством решения задач ядерной физики, геохимии, космохимии, в атомной промышленности и космических исследованиях. При этом статические масс-анализаторы могут работать в режиме масс-спектрографа, регистрируя достаточно протяженные участки масс-спектра пространственно-протяженным позиционным детектором. В то же время огромные габариты электромагнита современных высокопрецизионных статических масс-спектрометров являются значительным их недостатком, ограничивающим область их применения. В настоящее время во всем мире имеется лишь несколько таких приборов с длиной ионной траектории порядка 10 м и с разрешением от нескольких сотен тысяч до миллиона. Такие приборы обеспечивают высокую точность определения амплитуды пика и массового числа с разрешающей способностью порядка  $\sim 10^5$  при изотопической чувствительности до  $10^9 : 1$ , то есть позволяют анализировать вещества, содержащие микропримеси до  $10^{-9}$  на соседней массе, и точности определения изотопных отношений элементов до  $10^{-3} \%$ . Поэтому актуальной задачей является снижение габаритов и веса приборов с сохранением требуемых аналитических характеристик, что соответствует современному тренду разработки мобильных переносных малогабаритных масс-спектрометров, способных работать в «полевых» условиях. Разработка новых методов расчета ионно-оптических систем статических масс-спектрометров, связанное со снижением их габаритов, и, в первую очередь, габаритов электромагнита, с сохранением и улучшением основных аналитических характеристик масс-спектрометра – разрешения и абсолютной чувствительности, является актуальной задачей физической электроники.

## 3. Историческое развитие

**Можно отметить следующие этапные оригинальные идеи, реализованные в масс-спектрометрии.** Первая идея принадлежит Астону, и связана с совместным использованием электрического и магнитного полей для осуществления фокусировки по энергии. Вторая идея Германа Вольника – это расширение ионного пучка перед входом в магнитное поле, увеличивающая параметр «качество» статического масс-спектрометра. Она была впервые реализована в настольном приборе Матсуда. Третья принадлежит В.М. Кельману и связана с использованием электронных призм по своему действию аналогичных светооптическим призмам. В призмном масс-спектрометре, снабженном коллиматорной и фокусирующей линзами, функции дисперсии и фокусировки выполняют различные ионно-оптические элементы, поэтому увеличить линейную дисперсию прибора можно не изменяя габариты магнита, а увеличивая фокусное расстояние фокусирующей линзы. И четвертая, также принадлежащая Кельману – это использование конических полей для реализации призмных КОС.

Все эти идеи были реализованы в конусовидной ахроматичной призме (КАП). Причем в КАП реализуются электрические и магнитные поля, подчиняющиеся одному общему закону, поэтому нет необходимости разделять поля отдельных элементов, как в случае двумерных призмных полей. Благодаря очень большому потоку магнитного поля, пронизывающего ионный пучок в КАП, что достигается путем эффективного использования электрического и магнитного полей, КАП обладает уникально большой угловой дисперсией по массе, равной примерно 51 рад. на 100% изменения массы.

Первоначально предполагалось использовать КАП в призмном масс-спектрометре, снабженном трансаксиальными коллиматорной и фокусирующей линзами. Однако ранее рассчитывались только свойства КАП, а весь призмный масс-спектрометр с линзами детально не рассчитывался. Такие расчеты призмного масс-спектрометра с КАП и трансаксиальными коллиматорной и фокусирующей линзами и выполнены в работе Тилектес Жалгасовны.

В выполнении исследований по положениям, представленным в диссертации к защите вклад Шугаевой Т.Ж. является определяющим. Ей получены аналитические выражения для потенциала, описывающего поле трансаксиальной линзы. Написана и отлажена компьютерная программа, позволившая анализировать динамику пучка заряженных частиц в трансаксиальной линзе путем численного интегрирования безразмерных уравнений Ньютона. Рассчитаны параметры тормозящей трансаксиальной линзы, работающей в режиме анаморфота. Шугаева Т.Ж. также участвовала в разработке и отладке программы и выполнении расчета приборных характеристик всего призмного масс-спектрометра с КАП и трансаксиальными линзами с использованием метода Монте-Карло. При этом начальные условия для заряженных частиц, вылетающих из ионного источника, моделировались в предположении нормального распределения частиц по энергии и углам вылета частиц из источника.

При решении задач динамики пучков заряженных частиц все большее место занимают численные методы расчета и компьютерное моделирование. Развитие вычислительной техники стимулирует создание отличных от традиционных новых вычислительных технологий, позволяющих рассчитывать поведение широких пучков заряженных частиц с большим разбросом в начальных данных. Однако использование только численных методов не позволяет выявить некоторые общие свойства используемых полевых структур. Диссертация Шугаевой Т.Ж. является примером теоретической работы, в которой эффективное сочетание адекватных аналитических методов и компьютерного моделирования позволило получить новые интересные результаты, которые воплотились в расчет конкретной схемы статического масс-спектрометра с КАП и трансаксиальными линзами, а также схемы времяпролетных масс-анализаторов на основе осесимметричных и времяпролетных зеркал.

### **Новые научные результаты.**

Основным объектом исследования в диссертации являются статические электростатические и магнитные поля КОС. Для исследования динамики пучков заряженных частиц в КОС используются безразмерные уравнения Ньютона для заряженной частицы и аналитические выражения для потенциалов, описывающие поля КОС. Проведено полное исследование общих свойств корпускулярно-оптических систем со средней плоскостью в параксиальном приближении. Получены аналитические выражения для потенциалов поля трансаксиальных и осесимметричных КОС, а также некоторых систем, сводимых к двумерным. На основе развитых аналитических методов Т.Ж. Шугаевой построены адекватные математическая и компьютерная модели, описывающие динамику пучков заряженных частиц в реальных масс-спектрометрических КОС, и проведены расчет и оптимизация их физических и приборных характеристик.

**Обоснованность и достоверность полученных результатов** достигается корректностью использованных математических методов, проведением численных расчетов различными способами и тщательным анализом погрешностей, совпадением расчетных и экспериментальных результатов, а также сравнением полученных в работе результатов с результатами других авторов в тех случаях, когда такое сравнение возможно.

**Общая оценка работы.** В целом диссертация Т.Ж. Шугаевой является законченным исследованием, перспективным в своем практическом применении в самых различных областях науки и техники. Она содержит новые хорошо обоснованные теоретические результаты, совокупность которых является крупным достижением в развитии динамики пучков заряженных частиц и масс-спектрометрического приборостроения.

Профессор  
кафедры физики  
АРУ им. К. Жубанова  
д. ф.-м. н.



И.Ф. Спивак-Лавров

