

МОНГОЛ УЛСЫН ИХ СУРГУУЛЬ ШИНЖЛЭХ УХААНЫ СУРГУУЛЬ

МУИС-ийн Эрдэм Шинжилгээний Бичиг



ФИЗИК

№ 20 (438)



МУИС ПРЕСС ХЭВЛЭЛИЙН ГАЗАР

Эрдэм Шинжилгээний Бичгийн Редакцийн зөвлөл

Дарга: Др. Ж.Даваасамбуу

Нарийн бичгийн дарга: Др. Н.Цогбадрах

Гишүүд:

ШУ-ны др., проф. Ц.Ганцог

ШУ-ны др., проф. П.Зузаан

Др., проф. С.Даваа

Др., проф. [Л.Дэмбэрэл]

Др., проф. Г.Батсүх

Др., проф. С.Лодойсамба

Др., проф. Л.Энхтөр

Др., дэд проф. Д.Улам-Оргих

Магистр М.Ганбат

Сэтгүүлийн хаяг:

МУИС-ийн Физик тэнхим

Их сургуулийн гудамж-1, Улаанбаатар-210646, Монгол Улс

Утас: +976-11-329993

Факс: +976-11-329993

Электрон шуудан: Tsogbadrakh@num.edu.mn

Дугаарыг эрхлэн гаргасан:

Др. П.Мөнхбаатар

Д.Болортуяа

О.Сүх

Editorial board

Chairman: PhD. J.Davaasambuu

Secretary: PhD. N.Tgogbadrakh

Members:

ScD., Prof. Ts.Gantsog

ScD., Prof. P.Zuzaan

PhD., Prof. S.Davaa

PhD., Prof. [L.Demberel]

PhD., Prof. G.Batsukh

PhD., Prof. S.Lodoisamba

PhD., Prof. L.Enkhtur

PhD., Ass.prof. D.Ulam-Orgikh

MSc., M.Ganbat

Editorial address:

Department of Physics

National University of Mongolia

University Street-1, Ulaanbaatar-210646, Mongolia

Tel: +976-11-329993

Fax: +976-11-329993

E-mail: Tsogbadrakh@num.edu.mn

Managing Editors:

PhD., P.Munkhbaatar

D.Bolortuya

O.Sukh

ISSN 2311-1097

УЛААНБААТАР

2015

Цөмийн Физикийн Судалгааны Төв 50 Жилд

С. Даваа, П. Зузаан

Монгол Улсын Их Сургууль, Цөмийн Физикийн Судалгааны Төв

Атомын цөм хэмээх микро ертөнцийг судлахад асар их оюуны хүч болоод аварга хүчин чадалтай хурдасгагч зэрэг нарийн багаж төхөөрөмж хэрэглэгддэг. Иймээс цөмийн физикийн шинжлэх ухааныг өндөр түвшинд хөгжүүлэхэд нэг улсын оюуны болоод техник технологи, санхүүгийн хүчин чадал хүрэлцэхгүй. Тийм ч учраас европын орнууд атомын энергийг энх тайвны зорилгоор ашиглах салбарт хүчээ нэгтгэхээр 1954 онд Швейцарт ЦЕРН хэмээн алдаршсан Европын цөмийн судалгааны төв, 1956 онд ОХУ-ын Дубнад Цөмийн шинжилгээний нэгдсэн институт (ЦШНИ) байгуулагдсан түүхтэй. Бусад улс оронд байгаа цөмийн физикийн төвүүд хэдийгээр олон улсын гэж нэрлэгддэггүй ч үйл ажиллагаа нь олон улсын хамтын ажиллагаа байдаг.

Монгол улсад цөмийн физикийн шинжлэх ухаан хөгжих гадаад нөхцөл Дубнагийн ЦШНИ-ийг хамтран байгуулалцсан үеэс бүрэлдэж, улмаар МУИС-ийн ректорын 1965 оны 5 дугаар сарын 11-ний өдрийн 170 тоот тушаалаар Цөмийн физикийн шинжилгээний групп байгуулсан нь Цөмийн физикийн судалгааны төвийн үндэс суурь болсон юм. 1967 онд МУИС-ийн ректорын тушаалаар Цөмийн шинжилгээний лаборатори (ЦШЛ)-ийг ректорын шууд харъяанд байгуулсан, 1997 онд Засгийн газрын 31 дүгээр тогтоолоор Цөмийн физикийн судалгааны төв (ЦФСТ) болон өргөжсөн. Ийнхүү манай Цөмийн физикийн судалгааны төвийн 50 жилийн ой энэ онд тохиож байна.

ЦФСТ байгуулагдсан үеэсээ Монгол улсад цөмийн физикийг хөгжүүлэх, энэ чиглэлийн мэргэжилтэн бэлтгэх, цөмийн физикийн ололтыг шинжлэх ухаан, үйлдвэрлэлийн практикт нэвтрүүлэх явдлыг гол чиглэл зорилгоо гэж үзэж эрдэм шинжилгээ-сургалт-үйлдвэрлэлийн нэгдлийг хангах зарчим баримталж ирлээ. Манай Цөмийн физикийн судалгааны төвийн эрхэм зорилго бол цөмийн физик, технологи, инженерчлэлийн чиглэлээр шинэ мэдээлэл, мэдлэг, үр дүн гарган авах; шинэ арга зүй, дэвшилтэт технологи боловсруулах, нэвтрүүлэх; багаж төхөөрөмж зохион бүтээх судалгаа хийж, сургалт явуулдаг үндэсний тэргүүлэх байгууллага байхад орших явдал мөн.

Энэхүү эрхэм зорилгоо хэрэгжүүлэх талаар манай хамт олон идэвх чармайлттай ажиллаж тодорхой үр дүнд хүрснийг арав арван жилээр багцлан авч үзье.

Эхний 10 жил буюу 1965-1975 онд:

Манай анхны суурь төхөөрөмж болох нейтроны генераторыг Дубнагийн ЦШНИ-ээс тусламжаар авч МУИС-д суурилуулах ажил 1965 онд эхэлж, уг генераторыг ашиглан цөмийн физикийн шинжилгээ, судалгаа явуулахад шаардлагатай лабораторийн хэмжих төхөөрөмжийг бүрдүүлэх ажил гүйцэтгэхээр Ш.Гэрбиш, Т.Жалдан нар ЦШНИ-д анх томилогдож, сцинтилляцийн детектор бүхий 256 сувагт гамма спектрометр бүтээх, нейтроны генераторийн импульст ажиллагааг удирдахад хэрэгтэй багаж зохион бүтээх ажлыг Ж.Сэрээтэр ахлан, энергийн өндөр ялгах чадвар бүхий хагас дамжуулагч литийт герман детектортой 4096 сувагт анализатор бүхий гамма-спектрометр болон электрон-позитроны хос бүртгэх соронзон бета спектрометр, зарим эд ангиудыг бүтээн угсарч, тохируулга хийх ажлыг Л.Тогтохбаяр, П.Зузаан, Г.Хүүхэнхүү, Ж.Ганзориг, И.Чадраабал, Л.Дашзэвэг нар ЦШНИ-д тус тус гүйцэтгэн, МУИС-д авчирч суурилуулан ашиглалтанд оруулсан нь лабораторийн эрдэм шинжилгээ, сургалтын баазыг өргөтгөхөд ихээхэн чухал эхлэл болсон юм. Манай мэргэжилтнүүд Дубнагийн эрдэмтэдтэй хамтран 1970 онд нейтроны НГ-200 генераторыг микро ба миллисекундийн импульсийн горимд ажилладаг болгон цөмийн физикийн суурь болон хавсрага судалгаанд өргөн ашиглаж байв. Тухайлбал, индий ба цагаан тугалганы ялгасан изотопуудыг 14.7 МэВ энергитэй хурдан нейтроноор үечлэн шарахад явагдах (n,p) ба $(n,2n)$ урвалаар үүсэх $^{112-118}\text{In}$ изотопуудын үндсэн ба изомер төлвүүдийн задралыг цөмийн спектроскопийн аргаар судлах суурь судалгааны цуврал ажлууд хийгдсэн юм. Энэ судалгааны дүнд ^{112}In -ийн 10 гаруй шинэ ү-шилжилт болон ^{114m}In -ийн 43 миллисекунд настай изомер төлвийг ажигласан бөгөөд эдгээр шинэ үр дүнгүүд олон улсын цөмийн мэдээллийн санд бүртгэгдсэн. Үүний зэрэгцээ $(n,2n)$; (n,p) урвалаар явагдах нейтрон идэвхжилийн шинжилгээ явуулж эхэлсэн.

Энэ жилүүдэд мэргэжилтэн бэлтгэхэд ихээхэн анхаарч мэргэжлийн сургалтын лаборатори бий болгосны үндсэн дээр 1968 онд физикийн ангиас цөөн оюутан сонгон Цөмийн физикээр мэргэшүүлэх сургалт эхлүүлсэн.

2-дох 10 жил буюу 1975-1985 онд:

Тус лаборатори Олон улсын атомын энергийн агентлаг (ОУАЭА) -ийн техникийн хамтын ажиллагааны тусламжийн анхны төсөл хэрэгжүүлж, хагас дамжуулагч детектор, цацраг идэвхт изотоп үүсгүүр бүхий энергиэр ялгах рентген-флуоресценцийн спектрометр авч суурилуулан ашиглалтанд оруулж шинжилгээ, судалгааны ажилд ашиглаж эхлэв. Энэ ажлыг академич Н.Содномын удирдлагаар Б.Далхсүрэн, Ш.Гэрбиш, П.Зузаан, С.Даваа нар гүйцэтгэж, анхны аргазүйн туршилтуудыг хийжээ. 1976 оноос эхлэн энергиэр ялгах рентгенфлуоресценцийн шинжилгээ (ЭЯРФШ) хийхэд зайлшгүй шаардлагатай физик параметруудийг тодотгох, РФШ-ний гадаад/дотоод стандартын, стандарт-фоны, регрессийн тэгшитгэлийн, суурь параметрийн аргазүйн талаар олон шинэ санаа дэвшүүлэн, эдгээрийг боловсронгуй болгон сайжруулах, эх орныхоо эрдэс баялаг, түүхий эдэд химийн элементийн агуулгыг тодорхойлох рентген-флуоресценцийн шинжилгээний өвөрмөц аргууд боловсруулах чиглэлээр өргөн судалгаа явуулж амжилттай хэрэглэсэн. Жишээлбэл, ванадийгаас молибден хүртэлх элементийг нэгэн зэрэг тодорхойлох дотоод стандартын аргын шинэ хувилбар, зэсийн баяжмалд мөнгө тодорхойлох арга, геологийн дээжинд ниобий, вольфрам, цагаан тугалга тодорхойлох арга, өнгөт ба холимог металлын орд газрын дээжинд үндсэн болон дагалдах элемент тодорхойлох арга зэрэг олон арга боловсруулсан байна.

ЦФСТ-д боловсруулсан арга зүйг ашиглан 1980 онд Н.Содном, Ш.Гэрбиш нар Монгол-Оросын хамтарсан уулын баяжуулах “Эрдэнэт” үйлдвэрийн зэсийн баяжмал дахь мөнгөний агуулгын хэмжээг анх тогтоож өгснөөр жил бүр 5,5 сая төгрөгийн нэмэгдэл ашиг төсөвт оруулах тооцоог тэр үеийн гадаад худалдааны яам хийсэн байдаг.

Унгар улсаас нейтроны NA-4 генератор, ТРА/i компьютер бүхий нейтрон идэвхжилийн төхөөрөмж авч, энэхүү төхөөрөмжийг үр ашигтай ашиглах зорилгоор эхний үед Дубнагийн ЦШНИ-д тавьж ажиллуулан зүгшрүүлэх ажлыг С.Лодойсамба, Д.Шагжжамба, Н.Ганбаатар, Ю.Намсрай, Б.Отгоолой нар гүйцэтгэн МУИС-д авчирч суурилуулан ашиглалтанд оруулж, мөн энэ үед

нейтроны изотопон үүсгүүр Pu-Be, Cf-252 авч нейтроны генератор, нейтроны изотопон үүсгүүр бүхий идэвхжилийн шинжилгээний лабораториуд байгуулж, туршилт судалгааны ажилд хэрэглэсэн. Цөмийн физикийн туршлагыг автоматжуулахад ТРА/i миникомпьютер, PDP-11/05 микрокомпьютер суурилуулсан нь үсрэлт болсон юм. Эдгээр нь манай улсад суурилуулсан анхны мини-, микро- компьютерууд юм. Тэр цагт физикийн туршлагыг автоматжуулахад зориулсан КАМАК систем ихэд тархаж энэ системээр хийсэн цөмийн электроникийн олон багаж төхөөрөмж зохион бүтээж үйлдвэрлэж байсан учир ТРА/i компьютерийг КАМАК системтэй холбох ажлыг С.Лодойсамба нар амжилттай хийж гүйцэтгэн КАМАК системийн хэмжих багажуудаас мэдээлэл хүлээн авч боловсруулах бололцоотой болсон юм.

Эдгээр төхөөрөмжийг геологийн эрдэс түүхий эдийн найрлагын судалгаанд ашиглаж зэс, молибденийн баяжмалын үндсэн болон дагалдах элементүүдийг цөмийн идэвхжилийн аргаар судлан зэсийн баяжмалд алт 1-5 г/т, молибденийн баяжмалд рений 550-600 г/т байгааг тогтоосон байна.

Эрчим багатай нейтроны үүсгүүрүүд ашиглан үечлэн шарж, хэмжих аргаар авах мэдээллийг сайжруулан хайлуур жоншны фтор, хүнсний бүтээгдэхүүнд азот тодорхойлох төхөөрөмж хийж үйлдвэрт нэвтрүүлсэн. Тухайлбал, цөмийн арга технологийг үйлдвэрлэлийн практикт нэвтрүүлэх талаар багаж төхөөрөмж өөрсдөө зохион бүтээсэн үе 1981 оноос эхэлсэн байдаг. Анхны бүтээл Флюорит-1 гэдэг нэртэй хүдэр, баяжмал дахь хайлуур жоншны агуулгыг цөмийн үечилсэн идэвхжилийн аргаар нейтроны “плутоний-берилли” изотопон үүсгүүр ашиглан хурдан тодорхойлох автомат ажиллагаатай лабораторийн шуурхай шинжилгээний төхөөрөмжийг профессор Д.Чүлтэмийн удирдлагаар Ж.Ганзориг, Д.Баатархүү нар зохион бүтээж, Бэрхийн уурхайн хими цехэд тавьж ашигласнаар экспортод гаргаж байгаа хүдрийн чанарт бүрэн шинжилгээ хийж, жилд хийх шинжилгээний тоог 10-20 дахин нэмэгдүүлж, орон тоо хэмнэж, үйлдвэрийн ашигт ажиллагааг нэмэгдүүлсэн байдаг. Уг төхөөрөмжийг улам боловсронгуй болгож, автомашин дээр ачсан хайлуур жоншны хүдрийг шинжлэх нейтрон идэвхжилийн төхөөрөмжийг Ж.Сэрээтэр, С.Лодойсамба, Б.Отгоолой, П.Улаанхүү, Д.Шагжжамба нар зохион бүтээж туршаад, Бор-Өндөрийн уулын баяжуулах үйлдвэрт тавьж ажиллуулсан нь жилд 25000 ам долларын ашиг өгч байв.

Цацрагийн хамгаалалт, дозиметрийн чиглэлээр ОУАЭА-ийн техникийн хамтын ажиллагааны хэд хэдэн төсөл хэрэгжүүлсэн нь манай улсын цацрагийн хамгаалалтын дэд бүтцийг бий болгон хөгжүүлэх, үндэсний мэрэгжилтэй боловсон хүчнийг бэлтгэхэд ихээхэн үнэтэй хувь нэмэр оруулсан юм. Эдгээр төслийн хүрээнд термо-люминесценцийн дозиметрийн систем, хоёрдогч стандартын дозиметр, цөмийн цацрагийн альфа, бета тоолуурууд, өндөр ялгах чадвар бүхий спектрометр, бага фонтой дээж шилжүүлэгч автомат төхөөрөмж, агаарын дээж авах төхөөрөмж зэргийг авч ашигласнаар хүрээлэн байгаа орчны дээжний альфа, бета цацраг идэвхийн судалгааг орчин үеийн түвшинд явуулах бололцоотой болсон юм. Эдгээр багаж төхөөрөмжүүдийг ашиглан Н.Норов, Б.Эрдэв, Д.Шагжамба нар Улаанбаатар хотын агаар, аэрозолийн тундасны ерөнхий бета цацраг идэвхийг судлан түүний хэмжээ, сар улирлын өөрчлөлтийн динамикийг тогтоох; цай хүнсний зарим бүтээгдэхүүн, гадаад орчны зарим дээжний цацраг идэвхийг судлах; агаар, усны радон, түүний хүн амын эрүүл мэндэд үзүүлэх нөлөөг судлан тогтоох болон хөрс, нүүрс зэрэг төрөл бүрийн дээжний байгалийн ба үүсмэл цацраг идэвхийг судлах зэрэг эрдэм шинжилгээний ажлууд гүйцэтгэжээ. Эдгээр төслүүдийг хэрэгжүүлсэний үр дүнд ионжуулагч цацрагтай ажиллагчдын хувийн тун хэмжих, цацраг туяа эмнэлгийн эмчилгээний төхөөрөмжүүдэд хоёрдогч стандартын дозиметрийн хяналт тавих зэрэг цацрагийн хамгаалалт ба дозиметрийн хяналтын ажлыг өөрийн оронд хийдэг болсон.

3-дахь 10 жил буюу 1985-1995 онд:

ОУАЭА-ийн техникийн тусламжаар 8 битийн Apple компьютер 10, IBM PC хоёр компьютер суурилуулсан нь мөн манай улсад орж ирсэн анхны персонал компьютер байлаа. Эдгээр компьютерыг судалгааны ажилд ашиглах болсноор физикийн туршлагыг автоматжуулах дараагийн үе эхэлсэн билээ. Персонал компьютерууд нь өөртөө цөмийн спектрометрийн аналог-тоон хувиргуур бүхий карттай байсан учир компьютер болгонд спектрометрийн хэмжилт хийж мэдээлэл цуглуулан боловсруулах бололцоотой болсон бөгөөд уян диск болон хатуу дискэнд мэдээлэл хадгалан бусад компьютеруудад дамжуулан боловсруулах сайхан бололцоотой болсон юм.

Тус лабораторийн хамт олон “Мушгиа худгийн ховор шорооны хүдрийн судалгаа” сэдэвт гэрээт эрдэм шинжилгээний ажлыг

П.Зузааны удирдлагаар гүйцэтгэж, 5000 гаруй дээжид элементийн шинжилгээ хийж, үр дүнг хэрэглэгчид шилжүүлснээр МУИС-д их хэмжээний мөнгөн ашиг оруулсан. Энэ ажлыг гүйцэтгэх явцад ховор шорооны элементийн нийлбэрийг өмнө нь зөвхөн сонгодог химийн аргаар тодорхойлдог байсныг РФШ-ний аргаар тодорхойлж болохыг харуулснаас гадна дээрх ховор шорооны элементүүд хоорондоо шугаман хамааралтайг тогтоосон нь аль нэг элементийн хэмжээг мэдсэнээр бусдыг олж болохыг үзүүлснээрээ цөөн стандарт загвар хэрэглэх боломжийг олгосон практик ач холбогдолтой болсон байна.

Одоо манай төвийн суурь төхөөрөмжийн болох электроны хурдасгагч МТ-22 микротроныг тухайн үед ШУА-ийн Физик технологийн хүрээлэнгийн бүрэлдэхүүнд байсан Цөмийн хавсрага судалгааны секторт ЦШНИ ба ОУАЭА-ийн тусламжтайгаар авч суурилуулан хэмжих багаж төхөөрөмжийн хамт ашиглалтанд оруулснаар электрон, нейтрон, гамма-цацрагийн хүчтэй үүсгүүртэй болсон. Энэхүү хурдасгуур болон хэмжих төхөөрөмжийн ажиллагааг эзэмшүүлэх, холбогдох зарим эд ангийг хийх, хурдасгуур дээр явуулах судалгаа аргазүйд сургах ажлаар Д.Баатархүү, Б.Сэргэлэн, Ш.Гэрбишийг нарыг ЦШНИ-д томилон ажиллуулсан байна.

Судалгааны баазыг бэхжүүлэх, цөмийн аналитик аргыг цаашид хөгжүүлэхээр ОУАЭА-ийн техник хамтын ажиллагааны тусламжийн төсөл хэрэгжүүлэн ажилласны үр дүнд МУИС-ийн цөмийн судалгааны төв цэвэр германан детектортай, РС компьютер бүхий гамма спектрометрийн орчин үеийн тоног төхөөрөмж ашиглан шинжлэх ухаан, технологийн өндөр түвшинд цөмийн цацрагийн болон нейтрон идэвхжилийн судалгаа хийж байна.

Бүрэн ойлтын рентген шинжилгээний спектрометр авч ашигласнаар хүрээлэн буй орчны бохирдол болон хүнсний аюулгүй байдлыг хангахтай холбогдсон судалгааг өргөн явуулж практикт нэвтрүүлэх боломж бий болсон. Хүнсний бүтээгдэхүүний хүнд металл, химийн зарим хортой элементүүд тодорхойлох аргазүй боловсруулан манай орны эрүүл ахуйн хяналтын байгууллагуудтай хамтран ажилласны үр дүнд олон төрлийн чанарын доголдолтой импортын хүнсний бүтээгдэхүүнийг манай зах зээлээс зайлуулахад нөлөөлсөн бөгөөд хүрээлэн байгаа орчин - хөрс, ус, агаар болон хүнсний бүтээгдэхүүнд хүнд металл, химийн зарим элементийн агуулгыг тодорхойлох цөмийн физикийн аргазүй боловсруулан улсын стандарт загвараар баталгаажуулж Туул, Сэлэнгэ мөрний

сав газрын голуудын болон ундны усны эрдэс найрлагыг Ш.Гэрбиш, Ц.Амартайван, Ж.Баярмаа нар судалсан байна.

Мөн ОУАЭА-ийн техникийн хамтын ажиллагааны төслөөр Атомын шингээлтийн спектрометр, Радиохимийн лаборатори зэрэг лабораториуд байгуулж, хэмжин тооцоолох техникийн хүчин чадал ихээхэн нэмэгдсэн.

4-дэх 10 жил 1995-2005 онд.

Цөмийн шинжилгээний лаборатори нь 1997 онд Засгийн газрын шийдвэрээр ШУА-ийн Физик технологийн хүрээлэнгийн Цөмийн аналитик аргын сектортой нэгдэн Цөмийн физикийн судалгааны төв болон өргөжиж үндэсний статустай болж үйл ажиллагааны цар хүрээ өргөжсөн юм.

Нүүрсний үнслэгийг хурдан шуурхай, өндөр нарийвчлалтай тодорхойлох рентгенфлуоресценцийн анализаторыг ОУАЭА-ийн техникийн тусламжийн төслөөр Польш улсын мэргэжилтнүүдтэй хамтран С.Лодойсамба нар зохион бүтээж, уг багажаар үнслэг тодорхойлох рентгенфлуоресценцийн арга болон олсон үнслэгийн утгыг ашиглан нүүрсний илчлэг тодорхойлох тооцооны аргазүйг Д.Болортуяа нарын хамтлаг боловсруулжээ. Эдгээр боловсруулсан аргазүйгээ Монгол улсын үндэсний стандартаар батлуулсан бөгөөд нүүрсний үнслэг тодорхойлох анализаторыг аргазүйн хамт Дулааны 4 дүгээр цахилгаан станцад туршин нэвтрүүлсэн. Мөн уг төхөөрөмж болон нүүрсний үнслэг, илчлэг тодорхойлох аргуудыг сургалтын ажилд тогтмол ашиглаж байна. Нүүрсний үнслэг тодорхойлох төхөөрөмж, аргуудыг ОУАЭА-ийн Ази-номхон далайн бүсийн 2007 онд БНСУ-ын Дэйжон хотод болсон зөвлөлгөөний төгсгөлийн баримт бичигт сайшаан, цаашид хөгжиж буй бусад оронд авч хэрэглэхийг зөвлөмж болгож байсан нь уг судалгааны ажлын түвшинг харуулна.

1998-2000 онд Монгол-Оросын хамтарсан Уулын баяжуулах "Эрдэнэт" үйлдвэрийн технологийн процессын явцыг хянах зориулалттай рентген спектрийн шинжилгээний төхөөрөмжүүд ашиглан хийх шинжилгээний арга зүйг шинэчлэх, боловсронгуй болгох, үйлдвэрлэлийн процессийг хянах диспетчерийн цогц программ хангамж боловсруулах судалгааны ажлыг Н.Гансүх, С.Даваа, З.Дамдинсүрэн нарын хамтлаг хийж гүйцэтгэсэн. Энэ ажлаар Уулын баяжуулах "Эрдэнэт" үйлдвэрийн технологийн процессыг шуурхай хянадаг рентген спектрийн лабораторийн нунтаг ба шингэн дээжид

шинжилгээ хийх төхөөрөмжүүд дээр зэс-молибдены хүдэр, түүний баяжуулалтын бүтээгдэхүүнд үндсэн элементүүд ба нягт тодорхойлох аргууд болон эдгээр төхөөрөмжийг удирдах математик, программ хангамжийг тус тус боловсруулан хийж нэвтрүүлсэн.

Манай төв 2000 оноос улсын болон олон улсын хэмжээний эрдэм шинжилгээний хурал зохион байгуулан хийж эхлэсэн юм. Тухайлбал, Монгол-ЦШНИ-ийн олон улсын сургууль-семинар (2000) хийж эхэлсэн ба эхэн үедээ "Цөмийн физикийн хэрэглээний асуудлууд", "Микротроныг тулгуур болон хавсрага судалгаанд хэрэглэх нь" гэх мэт сэдэвтэй байснаа "Орчин үеийн физикийн асуудлууд" нэртэй олон улсын эрдэм шинжилгээний цуврал хурал болж өргөжсөн. Ээлжит 6-р хурлыг ирэх 2016 онд ЦШНИ байгуулагдсаны 60 жилийн ойд зориулан зохион байгуулахаар бэлтгэж байна. Мөн "Монголд атомын цахилгаан станц байгуулах үндэслэл" улсын хэмжээний эрдэм шинжилгээний хурал (2001) зохион байгуулж, "Уул уурхайн үйлдвэрт технологийн шинэчлэл ба автоматжуулалтын чиглэлээр хийсэн ажлууд (Эрдэнэт УБҮ-ийн жишээн дээр)" хурлыг (2004) М-Си-Эс Электроникс ХХК-тай хамтран зохион байгуулсан зэргийг нэрлэж болно.

1997 онд Цөмийн технологийн мэргэжлийн бие даасан анги нээж, дагнасан хөтөлбөрөөр мэргэжилтэн бэлтгэж эхэлсэн.

Сүүлийн 10 жил 2005-2015 он

Сүүлийн 10 жил бол цөмийн салбарын хувьд онцлог үе байлаа. "Монгол улсын төрөөс цацраг идэвхт ашигт малтмал болон цөмийн энергийн талаар баримтлах бодлого" гаргасан. Цөмийн энергийн тухай хууль гарсан. Монгол улсын Засгийн газар "цөмийн эрчим хүч, цацраг идэвхт ашигт малтмал ашиглах асуудлаар хамтран ажиллах" талаар харилцан ойлголцлын санамж бичиг, гэрээг 8 улстай байгуулсан. Энэ нөхцөл байдлын улмаас манай сургалт, судалгааны чиглэл өргөжсөн. Цөмийн энергийг ашиглахтай холбоотой дэд бүтцийг бий болгоход чиглэлсэн судалгаа, эрчим хүчний болон судалгааны реактор, цацрагийн экологийн асуудал манай нэг үндсэн чиглэл болсон.

Дээр дурдсан цөмийн технологи өндөр хөгжсөн улс орнуудтай байгуулсан санамж бичиг, гэрээ бидэнд шинэ зам нээж өгсөн. Манай залуучууд эдгээр улсын цөмийн судалгааны төвүүдэд ЦЭК-ын шугамаар урт богино хугацааны сургалт, семинарт оролцох; мөн холбогдох судалгааны байгууллагатай шууд хамтран ажиллах боломж буй болсон. Бид энэ боломжийг боловсон хүчнээ бэлтгэх, хамтын

судалгааны төсөл хэрэгжүүлэх хоёр чиглэлээр ашиглаж байна. Жишээ нь:

- Япон улсын Токиогийн технологийн институтийн Цөмийн эрчим хүчний дэвшилтэт системийн судалгааны төв (CRINES) – тэй цөмийн эрчим хүчний технологийн чиглэлээр 5 доктор суралцсан,
- Японы Хоккайдо ИС-ийн Байгалийн ухааны факультеттай гэрээ байгуулан цөмийн өгөгдөлзүйн чиглэлээр хамтарсан судалгааны ажил хийж, 2 доктор бэлтгэн, докторын дараах судалгааны ажлаар нарийн мэргэшүүлсэн.
- ОХУ-ын атомын энергийн “Росатом” төрийн өмчийн корпорацийн харъяа Энерготехникийн эрдэм шинжилгээ, зохион бүтээх хүрээлэн (НИКИЭТ) хэмээх хувьцаат нийгэмлэгтэй судалгааны реакторын асуудлаар хамтын ажиллагаа идэвхтэй эхэлж байна.

Тус төв цөмийн болон рентген-флуоресценцийн гурван аргаар сорилт гүйцэтгэх чадавхитай болохыг Стандартчилал, хэмжил зүйн газраас итгэмжлэв.

Профессор П.Зузааны санаачлагаар эхэлсэн “Рентген шинжилгээ” нэртэй олон улсын эрдэм шинжилгээний хурлыг 4 удаа зохион байгууллаа.

Сүүлийн 10 жилд гаргасан томоохон амжилт бол Профессор Г.Хүүхэхүүгийн ахалсан цөмийн өгөгдөлзүйн судалгааны баг хурдан нейтроноор явагдах урвалын онолын судалгааны аргуудыг хөгжүүлж, статистик ба экситон загварууд, хавтгай долгионы дөхөлтийн хүрээнд шинэ томьёонуудыг гарган авч, тэдгээрийн тусламжтайгаар (n, α) ба (n, p) урвалын огтлолын талаар дэлхий даяар гарч буй өгөгдлүүдийг эмхэтгэн системлэж, анализ хийснээр, сонирхолтой шинэ үр дүн, зүй тогтлыг гарган авахын зэрэгцээ Дубна хот дахь ЦШНИ, Бээжин их сургууль ба МУИС-ийн Цөмийн судалгааны төвийн орчин үеийн өндөр үзүүлэлттэй багаж төхөөрөмж ашиглан туршилт явуулж цөмийн урвалын огтлол, гаралт, үүссэн бөөмийн спектр, өнцгөн түгэлт зэргийг хэмжин тодорхойлж шинэ өгөгдлүүд гарган авч, нейтрон болон гамма-квантаар явагдах урвалын талаар дэлхий дахинаа гарч буй мэдээллүүдийг эмхэтгэн системлэж, үндэсний сан бүрдүүлэх, системчилсэн анализ хийж, шинэ зүй тогтол хайх талаарх судалгааг өндөр түвшинд гүйцэтгэж байна.

Мөн энэ 10 жилд манай төвд амжилттай хийгдэж буй судалгааны нэг бол агаарын тоосонцорын судалгаа юм. Энэ чиглэлээр

профессор С.Лодойсамба, Д.Шагжамба нар ОУАЭА-ийн техникийн хамтын ажиллагааны төсөл хэрэгжүүлэн агаарын тоосонцрын дээж авах, жигнэх болон түүнд шинжилгээ хийх рентген-флуоресценцийн спектрометр тусламжаар авч, агаарын мониторингийн лаборатори байгуулсан нь төвийн судалгааны чадавхийг нэмэгдүүлэхэд чухал түлхэц болов. Улаанбаатар хотын агаарын тоосонцрын бохирдлыг судлах судалгаагаар агаарын тоосонцрыг аэродинамик диаметрээр нь ялган PM2.5 ба PM10-2.5 хоёр фракцын дээжийг авч, РФШ-гээр 20 гаруй элемент тодорхойлж, уг элементийн шинжилгээний дүнг ашиглан факторын шинжилгээний аргаар хотын агаарын бохирдлын эх үүсвэрийг тогтоон тэдгээрийн бохирдолд өгөх хувь хэмжээг тодорхойлж байна.

Манай хамт олон өнгөрсөн 50 жилд шинжилгээ, судалгааны ажлын маериалаг баазаа үе шаттай сайжруулж, олон арван эрдэм шинжилгээний бүтээл туурвиж, судалгааны ажлын үр дүнгээ дэлхийд өндөр зэрэглэлтэд тооцогддог Олон улсын олон төрлийн сэтгүүлүүдэд хэвлүүлсэн нь олонтаа эшлэгдэж, олон улсын мэдээллийн санд орж нийтийн хүртээл болж байна. Энэ хугацаанд төвд хийсэн судалгааны ажлаар 15 докторын, 1 шинжлэх ухааны докторын, 40 гаруй магистрын зэрэг хамгаалж, шинэ бүтээл оюуны эрхийн хамгаалалт 18, Монгол улсын стандарт загвар 15 гарч, цөмийн физик, цөмийн технологи мэргэжлээр 450 орчим оюутан мэргэшүүлэн төгсгөсөн байна.

Өнгөрсөн 50 жилийн хугацаанд Цөмийн физикийн судалгааны төвийн гадаад харилцаа нь хүний нөөцийг чадавхижуулах, лабораторийн хүчин чадлыг сайжруулах, мэдээллийн эх сурвалж олох зэргээр судалгаа шинжилгээний ажлын орчин нөхцлийг бүрдүүлэх чухал зүйл болж ирсэн юм. Тус төв Олон улсын байгууллагын хамтын ажиллагаанд Цөмийн энергийн комиссоор дамжин оролцож ирсэн. Үүнд: ОУАЭА, Ази Номхон далайн Бүсийн хэлэлцээр, ОХУ-ын Дубна хот дахь ЦШНИ, Итали улсын Триест хот дахь Олон Улсын Онолын Физикийн Төв, Япон улсын засгийн газрын санхүүжилтээр үйл ажиллагаа явуулдаг Азийн цөмийн хамтын ажиллагааны форум зэрэг болно. Түүнээс гадна МУИС-ийн хамтын ажиллагаатай гадаадын их сургууль, эрдэм шинжилгээний байгууллагууд, мөн шууд хамтын ажиллагаатай Японы Хоккайдо их сургуулийн Байгалийн ухааны факультет, Японы ТТИС-ийн Цөмийн эрчим хүчний дэвшилтэт системийн судалгааны төв, ОХУ-ын

ШУА-ийн Сибирийн салбарын Эрхүү хот дахь Дэлхийн царцдас судлалын хүрээлэн, Азийн цөмийн урвалын өгөгдөлзүйн сүлжээ зэрэг гадаадын болон ШУА-ийн Физик технологийн хүрээлэн, Хими, химитехнологийн хүрээлэн, Ус цаг уурын хүрээлэн, Геологийн төв лаборатори, Эрдэнэтийн уулын баяжуулах үйлдвэр зэрэг дотоодын судалгаа шинжилгээний байгууллагуудтай хамтран ажиллаж байна.

Өнөөдөр манай төв 25 эрдэм шинжилгээ, инженер техникийн ажилтан, багш нарын бүрэлдэхүүнтэйгээр тогтвортой үйл ажиллагаа явуулж байгаагийн зэрэгцээ манай хамт олны дотроос арав гаруй залуу боловсон хүчин Япон, ОХУ, БНСУ, АНУ, Канад, Швед, Турк, Австри зэрэг цөмийн физик, технологи өндөр хөгжсөн улс орнуудад магистр, докторын сургалтанд суралцаж, зарим нь докторын дараах

судалгаагаа үргэлжлүүлж, түрүүчээсээ буцаж ирээд идэвх санаачлагатай ажиллаж байна. Эндээс манай төв цаашид хөгжин дэвжих өөдрөг ирээдүй харагдана.

Эцэст нь Цөмийн физикийн судалгааны төвийн 50 жилийн ойг тохиолдуулан тус төвийг өдий зэрэгт хүргэхэд бодит хувь нэмэр оруулсан үе үеийн ахмадууд, бидний бахархал болсон цөмийн физикээр мэргэшин суралцсан удаа дараагийн төгсөгчид, оюутнууд, тус төвд ажиллаж байсан багш, ажилтнууд, манай төвтэй хамтран ажилладаг бүх байгууллага, хүмүүст болон МУИС-ийн эрдмийн хамт олондоо хамт олныхоо нэрийн өмнөөс ойн баярын мэнд хүргэхийн ялдамд Та бүхэнд эрүүл энх, аз жаргал, ажлын амжилт хүсч бидний цаашдын хамтын ажиллагаа улам бэхжин хөгжихийн ерөөл өргөн дэвшүүлье.

Монгол Улсад Рентген-Флуоресценцийн Судалгаа Үүсч Хөгжсөн нь

П. Зузаан, Ц. Амартайван, С. Даваа

Монгол Улсын Их Сургууль, Цөмийн Физикийн Судалгааны Төв

Монгол улсад рентген-флуоресценцийн судалгаа, шинжилгээ үүсч хөгжсөнийг багаж төхөөрөмжийн сонголт, суурилуулалт; онол, аргазүйн боловсруулалт; хэрэглээ ба үр дүн; хүний нөөцийн хөгжил гэсэн чиглэлээр энэхүү тоймд ерөнхийлэн авч үзсэн болно.

I. УДИРТГАЛ

Цөмийн физикийн судалгааны төв 50 жилийн хөгжлийн явцдаа цөмийн физикийн шинжлэх ухааны хэд хэдэн чиглэлийг эх орондоо үүсгэн хөгжүүлсний нэг нь рентген-флуоресценцийн судалгааны чиглэл юм.

МУИС-ийн Цөмийн шинжилгээний лаборатори (ЦШЛ) 1975 онд Олон улсын атомын энергийн агентлаг (ОУАЭА)-ийн техникийн хамтын ажиллагааны тусламжийн анхны төслөөр цацраг идэвхт изотопон үүсгүүр, хагас дамжуулагч литийт цахиур Si(Li), литийт германи Ge(Li) детектор бүхий ОРТЕК фирмийн энергиэр ялгах рентген-флуоресценцийн спектрометр (ЭЯРФС) авснаар манай улсад рентген-флуоресценцийн судалгааны чиглэл хөгжих эхлэл тавигдсан юм [1]. Ийнхүү рентген-флуоресценцийн шинжилгээ (РФС), судалгаа Монгол улсад үүсч хөгжсөний 40 жилийн ой энэ онд тохиож байна.

Энэхүү судалгааны чиглэлийг дараах байдлаар авч үзэж болно:

- A. Багаж төхөөрөмжийн сонголт, суурилуулалт
- B. Онол, аргазүйн боловсруулалт
- C. Хэрэглээ ба үр дүн
- D. Хүний нөөцийн хөгжил

Монгол улсад рентген-флуоресценцийн судалгаа, шинжилгээ хийх, хөгжүүлэх санаачлагыг академич Н.Содном гаргасан бөгөөд ОУАЭА-ийн анхны техникийн тусламжийн төслийг Б.Далхсүрэн, Ш.Гэрбиш, П.Зузаан, С.Даваа нар амжилттай хэрэгжүүлж, рентген-флуоресценцийн шинжилгээг Монгол улсад анхлан хийсэн байна.

A. Багаж төхөөрөмжийн сонголт, суурилуулалт

МУИС-ийн ЦШЛ анх цацраг идэвхт изотопон цэгэн үүсгүүр (^{55}Fe , ^{109}Cd , ^{241}Am), 1024 сувгийн Камберра анализатор, шингэн азотоор хөргөдөг Si(Li) ба Ge(Li) детектор бүхий ОРТЕК фирмийн энергиэр ялгах рентген-флуоресценцийн төхөөрөмж авч суурилуулан дээж болон үүсгүүр баригч, шахмал дээж бэлтгэх хэв зэрэг холбогдох зүйлсийг зохион

бүтээж судалгаа, шинжилгээ хийх лаборатори байгуулсан. Тус лаборатори 1976 оноос төрөл бүрийн аналитик асуудлыг шийдэхэд литийт цахиур ба литийт герман детектор бүхий рентген- флуоресценцийн спектрометр (РФС)-ийг хэрэглэх судалгааны ажлыг эхлэсэн [2,3]. Хагас дамжуулагч детектор, цацраг идэвхт изотопон үүсгүүр бүхий рентген спектрометрээр тоон шинжилгээ хийх аргазүй боловсруулах, түүнийг практикийн чухал ач холбогдол бүхий асуудал шийдэхэд хэрэглэх талаар 1976-1982 онд хийсэн судалгааны талаар [4] ажилд тоймлон, мөн Ge(Li) ба Si(Li) детекторуудаар бүртгэсэн хэмжилтийн үр дүнг автоматжуулах, on-line боловсруулах талаар [5] ажилд өгүүлжээ.

Улмаар 1985 онд РФШ-д рентген хоолойг өдөөгч болгон ашигласнаар аргын мэдрэх чадвар сайжирч, тодорхойлох элементийн тоо нэмэгдэж, уг аргыг хүрээлэн байгаа орчны судалгаанд хэрэглэх боломжтой болсноор хөрс, ургамал, ус, агаарын дээжид биологийн идэвхт ба зарим хортой, хүнд элемент тодорхойлох судалгааны ажил хийжээ.

Рентген-флуоресценцийн шинжилгээний аргын мэдрэх чадварыг сайжруулах, хэрэглэгдэх хүрээг өргөтгөх зорилгоор 1993 онд ОУАЭА-ийн техникийн хамтын үйл ажиллагааны тусламжаар шингэн дээжинд шинжилгээ хийх бүрэн ойлтын рентген-флуоресценцийн спектрометр авч ашиглалтанд оруулан, хүнсний бүтээгдэхүүнд хүнд металл, химийн зарим хортой элементүүд тодорхойлох аргазүй боловсруулан манай орны эрүүл ахуйн хяналтын судалгаанд амжилттай ашиглаж иржээ.

2002-2005 онд манай судлаачид нүүрсний үнслэг тодорхойлох зорилгоор кадми-109 цацраг идэвхт үүсгүүртэй, пропорционал тоолуур бүхий рентген анализатор зохион бүтээж, түүгээр үнслэг тодорхойлох аргазүй боловсруулсны зэрэгцээ хэмжиж олсон үнслэгийн утгыг ашиглан илчлэгийг тооцоолон тодорхойлох арга боловсруулсан нь практикийн чухал ач холбогдолтой ажил болжээ. Уг ажлыг Дулааны 4-р цахилгаан станцад шилжүүлсэн байна.

Монгол улсад ЦФСТ-өөс гадна Монгол-Оросын хамтарсан “Эрдэнэт” Уулын баяжуулах

үйлдвэр, Геологийн төв лаборатори, ШУА-ийн Физик-технологийн хүрээлэн, ШУТИС, Шүүхийн шинжилгээний төв лаборатори зэрэг эрдэм шинжилгээ, сургалт, үйлдвэрлэлийн олон газрууд РФШ-ний орчин үеийн багаж төхөөрөмжүүдийг авч ажиллуулж байна [6]. Эдгээр газруудад өөрсдийн ажлын онцлогт тохирсон голдуу аргазүйн асуудлыг авч үзсэн байдаг.

Тухайлбал, “Эрдэнэт” Уулын баяжуулах үйлдвэр үйлдвэрлэлийн технологийн процессыг хянахад ОХУ-д үйлдвэрлэсэн долгионы уртаар ялгах СРМ-25, АР-31 төрлийн спектрометрүүдийг 1977 оноос ашиглаж байгаад 2001 онд Амдел фирмийн ЭЯРФС (цацраг идэвхт изотоп үүсгүүртэй, Si(Li) детектор бүхий 7 спектрометр), X-MET920 рентген анализатор, бага чадлын рентген хоолой бүхий үүсгүүртэй GuanX спектрометр авч багаж төхөөрөмжөө боловсронгуй болгон сайжруулж ирсэн байна [7].

Геологийн төв лаборатори 1980-аад онд пропорционал тоолууртай, изотопон үүсгүүртэй рентген-флуоресценцийн авсаархан төхөөрөмж өөрсдөө угсарч ажиллуулан геологийн дээжинд шинжилгээ хийж эхлэсэн бөгөөд 1990 онд ЖАЙКА-гийн төслийн шугамаар Японы Shamadzu SXF-100 долгионы уртаар ялгах РФС, 1991 онд ОУАЭА-ийн шугамаар АНУ-ын Spetrace-5000 энергизр ялгах РФС, 2006 онд Финляндын PANAlytical фирмийн долгионы уртаар ялгах Axios спектрометр авч рентген-флуоресценцийн шинжилгээний орчин үеийн төхөөрөмжөөр тоноглогдож, геологийн төрөл бүрийн дээжинд шинжилгээ хийх арга зүйгээ боловсронгуй болгон сайжруулсаар байна[8,9]. Тухайлбал, олон элемент (20-45) нэгэн зэрэг тодорхойлох аргачлал боловсруулж, геологийн судалгаа шинжилгээний ажилд нэвтрүүлсэн нь Геологийн төв лабораторийн шинжилгээний ажилд гарсан том дэвшил байв.

В. Онол, аргазүйн боловсруулалт

Рентген-флуоресценцийн судалгааны онол, аргазүйн талаар хийсэн манай судлаачдын судалгааны үр дүнгээс товч дурдъя.

Онолын хувьд: Энергизр ялгах рентген-флуоресценцийн шинжилгээ хийхэд зайлшгүй шаардлагатай физик параметруудийг тодотгох, үүсгүүрээс гарсан цацраг судалгааны дээж, бүртгэх тоолуур-детектор, спектрометрийн эд ангиудтай харилцан үйлчлэх процессыг нарийвчлан тайлбарлах математик загваруудыг боловсруулан, тэдгээрийн хамаарлыг илэрхийлсэн онолын томъёонууд гаргах, рентген спектрийн бага энергийн мужид фон

үүсэх физик зүй тогтлыг илрүүлж тайлбарлах чиглэлээр судалгааны гүйцэтгэсэн байна[10-16].

Рентген-флуоресценцийн шинжилгээний олон асуудлыг шийдэхэд рентген бүл шугамуудын эрчмийн харьцааг мэдэх явдал чухал байдаг бөгөөд [10] ажилд хэд хэдэн элементийн флуоресценцийн спектрийн К-, L-бүлийн аналитик шугамуудын харьцангуй эрчмийн туршлагын болон тооцооны утгыг жишиж, 3-12 кэВ энергийн мужид харьцуулж буй шугамын энерги ойролцоо үед К-шугамын эрчим L-шугамынхаас 3-5дахин их байгааг тогтоож, рентген спектрийн L- бүлийн шугамуудын хувьд флуоресценцийн эрчмийг тооцоолохдоо Костер-Кронигийн шилжилтийг тооцох засвар боловсруулан дэвшүүлж хэрэглэснээр онол, туршлагын үр дүнгүүдийн тохироцыг сайжруулж, химийн нийлмэл найрлага бүхий дээжинд тооцоо хийхэд хүрэлцэхүйц нарийвчлалд хүрч байгааг харуулжээ.

Өдөөгч цацраг нь дээжээс гадна спектрометрийн эд ангиудтай үйлчлэлцсэний улмаас нэмэлт фон үүсгэх бөгөөд ялангуяа цацраг идэвхт үүсгүүр (^{241}Am , ^{109}Cd) хэрэглэх үед рентген спектрийн бага энергийн мужид ихээхэн фон үүсдэг нь тэр хэсэгт орших рентген шугам бүхий элементүүдийг тодорхойлоход бэрхшээл учруулдаг. РФШ-нд фоныг тооцоолох нь аналитик дохионы ялгацыг хамгийн сайн байлгах, ажлын тохиромжтой горим сонгох, улмаар дээж дэх элементүүдийн хувьд мэдрэцийг дээшлүүлэхэд зайлшгүй шаардлагатай. Энэ чухал асуудлын талаар олон [11-14] бүтээл хэвлэгджээ.

П.Зузаан, А.Ю.Портной, Б.Эрдэмчимэг нар [11,12] рентген спектрийн бага энергийн мужид үүсч буй фон дээж дотор үүссэн тийрэгдсэн электроны тоормосын цацрагтай холбоотойг онолын үүднээс тайлбарлаж, Комптоны сарнилд өртсөн электроны тоормослох үеийн спектрийн түгэлт флуоресценц үүсгэгч материалын элементийн найрлагаас хамаарах хамаарлын онолын илэрхийлэл гаргаж, ^{241}Am , ^{109}Cd цацраг идэвхт үүсгүүрүүдийн монохроматик цацрагийн хувьд авч үзжээ. Тухайлбал, 59.6 кэВ энергитэй (^{241}Am -үүсгүүр) фотон чөлөөт электрон дээрээс комптон сарнихад тийрэгдсэн электроны энерги нь 11.5 кэВ хүрэх бөгөөд түүний тоормосын цацраг нь $Z \leq 32$ дугаартай элементүүдийн К-шугамын мужид үүсч байжээ.

Цацраг идэвхт ^{241}Am үүсгүүрийн цацрагаар флуоресценци үүсгэх үед рентген спектрийн харьцангуй урт долгионы мужид фон үүсэх шалтгааныг [13] авч үзсэн бөгөөд өдөөгч цацраг

хагас дамжуулагч Si(Li) детектор болон дээжийн бодистой харилцан үйлчлэх процессын математик загварыг дэвшүүлжээ. Энергийн тухайн муж дахь аналитик фоныг тооцоолох болон тайлбарлахад Si(Li) детектор дотор явагдаж байгаа процессыг тооцохын зайлшгүйг үзүүлсэн бөгөөд тооцооны дүн туршлагын дүнтэй тохирсон байна.

Детектор дотор явагдах электрон зөөлт, дээж ба детекторт болох радиацийн шилжилтийн процессыг задлан шинжлэхэд үндэслэсэн энергийг ялгах рентген-флуоресценцийн спектрометрийн математик загварыг [14] ажилд авч үзсэн. Дохио-фоны харьцаанд детекторын зузаан болон анхдагч цацралын үүсгүүрийн параметруудын нөлөөг тооцоолсноор сигнал-фоны харьцаа детекторын зузаан ба анхдагч цацрагийн үүсгүүрийн төрлөөс хамаарч бараг эрэмбээр өөрчлөгддөгийг тогтоожээ.

О.Болормаагийн [15] ажилд шүүлтүүрийн цаасан дээр түрхсэн уусмалын химийн найрлагаас рентген фон хамаарах үзэгдлийг рентген цацралын 0.06-0.15 нм долгионы мужид судалж, энэ мужид фоны үндсэн бүрдүүлэгч нь рентген хоолойн тоормосын цацраг дээжээс сарних болон дээжийн элементүүдийн характеристик цацрагийн диффузийн сарнил гэдгийг баталжээ. Бүрэн ойлтын рентген-флуоресценцийн спектрометр ашиглан ханаагүй уусмалыг шинжлэхэд рентген спектрийн өдөөгдөх онцлог ба үүсч буй цацрагаас хамааруулан элементүүдийн хоорондох нөлөөллийг тооцсон флуоресценцийн эрчмийн илэрхийллийг боловсронгуй болгожээ [16].

Ц.Амартайван нарын [17,18] ажилд 70 МэВ энергитэй нүүрстөрөгчийн ион ашигласан рентген цацаргалтын (PIXE) анализын онцлог болон энэ анализын үед гэдрэг сарнисан протоныг хэрхэн ашиглах талаар судалгааг хийсэн байна.

Аргазүйн хувьд: 1976 оноос эхлэн эдүгэ эх орныхоо эрдэс баялаг, түүхий эдэд химийн элементийн агуулгыг тодорхойлох рентген-флуоресценцийн шинжилгээний өвөрмөц олон аргыг боловсруулан амжилттай хэрэглэж иржээ.

Тухайлбал, Н.Содном нарын [3,19] тодорхойлох элементүүдийн хувийн харьцангуй эрчмийг ашиглахад үндэслэсэн ванадийгаас молибден хүртэлх элементийг нэгэн зэрэг тодорхойлох дотоод стандартын аргын нэгэн шинэ хувилбар; П.Зузаан нарын [20] өдөөх үүсгүүрийн цацраг судалгааны объекттой үйлчлэхэд үүссэн когерент ба когерент бус сарнисан цацрагийн эрчмээр засвар хийхэд үндэслэсэн стандарт-фоны аргын нэгэн

хувилбар; Н.Гансүх нарын [21] сарнилын шугамыг ашигласан тулгуур параметрын арга; П.Зузаан нарын [21,23] рентген шугамын давхцал, элемент хоорондын нөлөөг тооцсон, фоныг загварчилсан, америци болон кадми изотопон үүсгүүр ашигласан ховор шорооны элементүүд болон тэдгээрийн нийлбэр хэмжээг тодорхойлох арга; Ш.Гэрбиш нарын [24] зэсийн баяжмалд мөнгө тодорхойлох арга; П.Зузаан нарын [25,26] геологийн дээжинд ниобий болон олон элемент нэгэн зэрэг тодорхойлох стандарт-фоны аргын нэг хувилбар; А.Карибай [27] холимог металл, уран, цагаан тугалгын хүдэрт үндсэн болон дагалдах элементүүдийг тодорхойлох рентген-флуоресценцийн хурдавчилсан арга; Б.Эрдэнэбаяр нарын [28,29] геологийн дээжид үндсэн ба дагалдах элемент тодорхойлох долгионы уртаар ялгах РФА-ын арга; мөн долгионы уртаар ялгах спектрометрээр хүдэрт силикат шинжилгээ хийх иж бүрэн арга; Д.Болортуяа [30,31] нарын нүүрсний үнслэг, илчлэг мөн геологийн дээжид уран тодорхойлох шугаман тэгшитгэлийн аргууд; Б.Далхсүрэн [32] нарын агаарт зарим элементийг тодорхойлох РФА; Ш.Гэрбиш [33] нарын хүнсний бүтээгдэхүүнд нэмж байгаа химийн зарим элементүүдийг тодорхойлох цөмийн физикийн аргууд зэрэг олон арга боловсруулсан байна.

Ийнхүү РФА-ын дээжийн химийн найрлагын нөлөөг тооцох сонгодог арга болох гадаад/дотоод стандартын, стандарт-фоны, регрессийн тэгшитгэлийн, суурь параметрийн зэрэг аргын талаар олон шинэ санаа дэвшүүлэн, эдгээрийг боловсронгуй болгон сайжруулах болон хэрэглэх хязгаарыг үнэлэхэд ихээхэн анхаарч тодорхой хувь нэмэр оруулжээ.

С. Хэрэглээ ба үр дүн

Энергийг ялгах рентген-флуоресценцийн шинжилгээний боловсруулсан арга болон судалгааны тухайн объектод тохирсон өвөрмөц аргазүйг практикт хэрэглэхэд чиглэсэн туршилт, судалгааны маш олон тооны ажил хийгдсэн байна [3,34-106]. Эдгээрийг дараах хэдэн чиглэлд ангилан авч үзэв.

Уулын чулуулаг, хүдрийн судалгаа (Геологи, уул уурхай)

РФШ нь геологийн дээжийн шинжилгээнд хэрэглэгддэг уламжлалт аргуудын нэг билээ. Монголын судлаачид геологийн судалгааны энэ аналитик зорилтыг шийдвэрлэхэд чухал хувь нэмэр оруулсаар ирсэн, оруулж байна. Энэ нь хэрэглэгдэж байгаа шинжилгээний аргуудын тодорхой хувилбарууд ба хэрэглээг [34-64] ажлуудад тусгагдсан байна.

Энергиэр болон долгионы уртаар ялгах РФШ-ний аргаар уулын чулууллаг, хүдрийн дээжинд олон элемент нэгэн зэрэг тодорхойлох боломжийг [3,34-39] ажилд авч үзсэн бөгөөд Эрдэнэтийн овооны зэс-молибдены орд газрын уулын чулууллаг, хүдэр болон баяжмалд үндсэн ба зарим дагалдах 10 гаруй элемент [40-42,53], Мушгиа худгийн ховор шорооны хүдэрт зарим үндсэн болон дагалдах элемент [22,49,56], Жанчивлангийн цагаан тугалга, Модот, Баянмод зэрэг гянтболдын [43] олон орд газрын дээжид үндсэн элементүүдийг тодорхойлон, үр дүнг зохих газруудад шилжүүлсэн нь уг орд газрын үүсэл, зүй тогтлыг тайлбарлах, нөөцийг тогтоох, тэсэлгээний ашигтай горимыг сонгоход ашиглагдаж, тухайн судалгааны эрдэм шинжилгээний бүтээл, тайлангуудад тусгагдсан байна [43,111,112]. А.Каривай нар [49] ховор шорооны элементийн нийлбэр агуулга ба цацраг идэвхт торийн хооронд шугаман хамаарал байгааг тогтоож, цацраг идэвхт торийн тусламжтай ХШЭ-ийн орд газрыг илрүүлэх боломжтойг харуулсан, Н.Гансүх нарын [22] ажилд ХШЭ-ийн хүдрийн олон мянган дээжид хийсэн шинжилгээний дүнгээр лантан, цери, неодим, прозедиум зэрэг ХШЭ-ийн хооронд корреляци байгааг илрүүлж, аль нэг элементийн хэмжээг мэдсэнээр нөлөөг нь олж болохыг үзүүлснээр цөөн эталон хэрэглэх боломжтойг харуулсан зэрэг практик ач холбогдолтой болжээ.

Нүүрсний дээжид элементийн шинжилгээ хийх хэмжилтийн зохимжтой нөхцлийг сонгож, Шивээ-Овоо, Багануурын нүүрсний уурхайн дээжид кальци, төмөр, рубиди, стронци зэрэг элементийн шинжилгээ хийж, эдгээр уурхайн нүүрсний үнслэгийг рентген-флуоресценцийн аргаар тодорхойлж, нүүрсний чанарын үзүүлэлтүүдийн хамаарлыг нарийвчлан судалсан талаар [44-46,50] ажлуудад, харин БОРФС-ний аргыг нүүрсний судалгаанд хэрэглэх, нүүрсний "мөр" төдий элементийг атом-цөмийн аналитик аргаар тодорхойлох аргазүйг [61,62] ажилд авч үзжээ.

Уулын баяжуулах "Эрдэнэт" үйлдвэрийн технологийн процессын явцыг хянах зориулалттай рентген спектрийн шинжилгээний төхөөрөмжүүд ашиглан хийх шинжилгээний аргазүйг шинэчлэх, боловсронгуй болгон сайжруулах асуудлыг [47] ажилд авч үзсэн бөгөөд судалгааны дээжид агуулагдаж буй элемент хоорондын харилцан нөлөө ба нунтаглалтын хэмжээ зэрэг шинжилгээний дүнд нөлөөлж болох үзүүлэлтүүдийг нарийн судалсны эцэст бүтээгдэхүүн бүрт тохирсон зэс, молибден, төмөр ба нягт тодорхойлох

регрессийн тэгшитгэлийн арга болон спектрометрүүдийг удирдах программ хангамж боловсруулан үйлдвэрлэлд нэвтрүүлсэн талаар [48,51] ажилд өгүүлжээ.

Хөрс, ургамал.

Б.Батжаргал, П.Зузаан нарын [65-68] ажилд Хөвсгөл нуур орчмын тундрын, ойн, ойт талын, нугын хөрсний дээж дэх элементүүдийн агуулгыг энергиэр ялгах рентген-флуоресценцийн шинжилгээгээр тодорхойлсон үр дүнг үзүүлсэн бөгөөд хөрсний дээжийг шинжилгээнд бэлтгэх нийтлэг арга зүйн үнэлгээг Хөвсгөл нуураас зүүн хойд зүгт орших Чулуут голын баруун эргээс авсан хөрсний дээжинд хийсэн шинжилгээний жишээгээр харуулжээ [66]. Хөрс, уулын чулуулгын энергиэр ялгах рентген-флуоресценцийн аргын хэмжилзүйн үзүүлэлтийн үнэлгээг [68] ажилд хийж, хагас дамжуулагч детектортой, изотопон үүсгүүр бүхий рентген спектрометрээр боловсруулсан дотоод стандартын аргын нэгэн хувилбарыг ашиглан практикийн олон асуудал шийдэж болохыг үзүүлжээ. Б.Далхсүрэн нар [70,71] Баян-Өлгий, Говь-Алтай, Увс аймгийн 20 орчим сумын, Улаанбаатар хотын авто замын дагуух хөрсний элементийн судалгаа хийж, хөрсний дээжид хортой, хүнд 10 гаруй элемент тодорхойлжээ.

[72-75] ажилд ургамлын дээж дэх атомын дугаар $Z > 12$ -оос их элементүүдийн агуулгыг тодорхойлоход РФШ-ний арга хэрэглэх, дээжийг шинжилгээнд бэлтгэх туршилт явуулж, Хөвсгөл орчмын шилмүүс, хар модны холтос ба мөчир, үетнүүд, буурцаг болон алаг өвс шинжлэхэд хэрэглэсэн талаар, мөн Хөвсгөл нуурын алгана, зэвэг, улаан нүдэн, хадар загасны маханд элементийн шинжилгээ хийсэн тухай [76] ажилд гарна. Ийм объектийн шинжилгээний онцлог нь маш бага агуулагатай хэсэг элементийг ихэнх тохиолдолд эталон хэрэглэхгүйгээр тодорхойлох шаардлагатай байдаг явдал юм. Энэ нь дотоод стандартын ба стандарт-фоны аргуудын хувилбарыг хэрэглэх үндэс болсон бөгөөд уг аргуудаар Хөвсгөл орчмын төрөл бүрийн 500 гаруй ургамалын үнсэнд, хэдэн зуун хөрсний дээжид элементийн шинжилгээ хийжээ [4].

Ус, хүнсний бүтээгдэхүүн

Цацраг идэвхт изотопон үүсгүүр бүхий өдөөгчтэй энергиэр ялгах рентген-флуоресценцийн аргаар байгалийн усанд ион солилцолын давирхай ашиглан урьдчилан баяжуулах замаар төмөр, зэс, цайр, стронци зэрэг элемент тодорхойлох боломжийн талаар [78] ажилд авч үзсэн байна. Баруун бүсийн

зарим аймгуудын болон Хар ус нуурын усны хүнд металл, зарим микроэлементийн хэмжээг БОРФШ-ний аргаар тодорхойлон судалж хэвийн гэсэн дүгнэлт хийжээ [79,81].

Сэлэнгэ голын сав газрын байгалийн усан дахь хүнд элементийн тархалтыг 4 бүс болгон БОРФШ-ний аргаар судалсан бөгөөд эталон дээжтэй харьцуулахад төмөр ба хар тугалаганы бүлгийн элементийн дундаж агуулга зарим бүсэд ихэссэнийг тогтоожээ [80]. Ундны усны чанарын зарим үзүүлэлтийн талаар [82] ажилд тодорхой авч үзсэн бөгөөд [83-87] ажлуудад протоноор өдөөгдсөн рентген цацаргалтын аргаар (PIXE) голын усан дахь хүнд металлын түвшин тодорхойлох, PIXE арга дээр суурилан усны бохирдлын мониторинг хийх систем зохион бүтээх болон протон болон хүнд ионоор өдөөгдсөн рентген цацаргалтын аргаар дээж дэх элементүүдийн химийн нэгдлийг тодорхойлох боломжийг судалжээ. Үүнээс гадна БОРФШ-ний аргаар хортой хүнд металл тодорхойлох стандартуудыг боловсруулан батлуулжээ [88,89].

Агаар орчны судалгаа

Байгаль орчны бохирдолтыг судлахад ЭЯРФ-ийн болон БОРФШ-ний аргыг хэрэглэх боломжийг [90,91,95], янз бүрийн объектийн судалгаанд ашигласан тухай [92-102] ажлуудад авч үзжээ.

Тухайлбал, Эрдэнэтийн овооны тэсэлгээний тоосонцорын тархалтыг УБҮ-ийн орчимд тогтвортой цасан бүрхүүл тогтсоны дараа ил уурхайгаас бүх чиглэлд 5 км зайтайгаар 50 км хүртэл зайнд дээж авч хийсэн ЭЯРФШ-ний дүн салхины зонхилох чиглэлд тоосонцор 100 км хүртэл хол тархаж буйг тогтоожээ [92]. [93]-т Туул гол, Хөвсөл нуурын усанд БОРФШ-ний аргаар хортой, хүнд металл тодорхойлоход хэвийн байгааг үзүүлжээ.

Улаанбаатар хотын агаарын тоосонцрын бохирдлын судалгаагаар С.Лодойсамба, Д.Шагжамба нарын [95-102]-д агаарын тоосонцрыг аэродинамик диаметрээр нь ялган PM_{2.5} ба PM_{10-2.5} хоёр фракцын дээжийг авч, РФШ-гээр 20 гаруй элемент тодорхойлж, уг элементийн шинжилгээний дүнг ашиглан факторын шинжилгээний аргаар хотын агаарын бохирдлын эх үүсвэрийг тогтоон тэдгээрийн бохирдолд өгөх хувь хэмжээг тодорхойлж байгаа талаар тодорхой авч үзсэн байна.

Биологи, эмнэлэг

Эмнэлэг ба биологийн зарим асуудлыг шийдэхэд РФА хэрэглэх тухай мэдээлэл [103-107] ажилд гарчээ. Энэ хугацаанд хүний үс, цус ба цусны ийлдэс, бөөр ба цөсний чулуунд гол

микроэлемент тодорхойлох судалгааны үр дүнгүүд хэвлэгджээ. Биологийн дээжийн материалын төрлөөс хамааран судалгааны аргыг тусгайлан боловсруулдаг болохыг тэмдэглэсэн байна. Манай судлаачдын ажилд биологийн материалыг судлахад БОРФС, долгионы уртаар ялгах РФС, солигддог байтай рентген хоолой бүхий өдөөгчтэй энергиэр ялгах РФС, түүнчлэн бөөмөөр өдөөгдөх РФА ашиглажээ.

Хүний толгойн үсэнд агуулагдах микроэлементийг тодорхойлох нь практик чухал ач холбогдолтой. Тухайлбал, толгойн үсний кальцийн агуулга хүний бодисын солилцооны өөрчлөлтийг үзүүлдэг. Иймээс толгойн үс нь хүний кальцийн солилцоотой холбоотой үйл ажиллагааны хяналтанд чухал үүрэг гүйцэтгэж болох юм. Энэ талаар манай судлаачид багагүй ажил хийжээ [103-106].

[106] ажилд ЭЯРФА-аар 600 гаруй монгол хүний үсний кальцийн агуулгыг тодорхойлоход кальцийн агуулгын ердийн логарифм түгэлт нь нэг төвтэй гарчээ. Түгэлтээс толгойн үсний кальцийн хэмжээ нь зүрхний шигдээс мэтийн кальцийн солилцооны өөрчлөлттэй шууд холбоотой өвчнөөс урьдчилан сэргийлэх арга хэмжээний нэг үзүүлэлт болох талтайг харуулжээ.

О.Болормаа [104] нар хүний толгойн үсэнд цайр тодорхойлох рентген-флуоресценцийн хурдавчилсан ба химийн урьдчилсан боловсруулалттай аргачлалууд боловсруулж сүрьеэ өвчтэй хүүхдүүдийн үсэнд шинжилгээ хийж, хэмжилзүйн үнэлгээ өгч, эмнэлэгийн практикт нэвтрүүлжээ. Мөн БОРФА-ын аргаар хүний үсэнд олон элементийн шинжилгээ хийх аргачлал боловсруулж, зүрх судасны өвчтэй хүмүүсийн үсэнд элементийн шинжилгээ хийж өвчлөлийн шатлалыг тогтоох талаар [105,110] ажилд авч үзсэн байна.

Тодорхой багаж төхөөрөмж ашиглан боловсруулсан тухайн аргазүйн үнэмшлийг шалган баталгаажуулахад харьцуулах шинжилгээ чухал байдаг. Монгол улс, ЗХУ болон ЭЗХТЗ-ийн орнуудад боловсруулсан хөрс, уулын чулууллаг, зэс-молибдены баяжмал, хүдэр зэрэг хэдэн арван стандарт загварын аттестатчилах шинжилгээ хийсэн дүнгүүд манай судлаачдын боловсруулсан аргын хэр үнэмшилтэй болсныг харуулна. Нэгэн жишээ дурдахад боржингийн дээжийг Монгол улсын стандарт загвар болгоход химийн зарим элемент тодорхойлон аттестачлах шинжилгээнд оролцсон дүнг [77] ажилд үзүүлсэн байна.

Д. Хүний нөөцийн хөгжил

Рентген-флуоресценцийн шинжилгээний шинэ тоног төхөөрөмж, аргазүйг Монголд улсад нэвтрүүлэн хэрэглэх явцад энэ чиглэлийн мэргэжлийн хүний нөөц бэлтгэгдсэн нь чухал үр дүн юм. Судалгааны үр дүнгээр 6 докторын, 20-иод магистрын зэрэг хамгаалж 50 орчим оюутан дипломын ажил бичжээ.

РФШ-ний чиглэлээр ОУАЭА-ийн болон бусад хамтын ажиллагааны шугамаар Ш.Гэрбиш, Н.Гансүх, С.Лодойсамба, Д.Жаргалсайхан, Ц.Амартайван, Ж.Баярмаа, Д.Болортуяа, А.Каривай, Б.Эрдэнэбаяр, Г.Гэрэлмаа нарын хориод хүн гадаадын лабораторид мэргэжил дээшлүүлсэн байна.

Рентген-флуоресценцийн аргазүйн асуудал нь МУИС-ийн цөмийн технологийн сургалтын хөтөлбөрт судлах хичээл болон заагдаж байгаагаас гадна РФШ-ний аргыг ашигладаг үйлдвэр аж ахуйн мэргэжилтнүүдэд зориулсан мэргэжил дээшлүүлэх сургалтын үндсэн агуулга болдог юм. Жишээлбэл, олон арван оюутан суралцагчид курсын болон дипломын ажил, магистр, докторын диссертаци бичиж, мэргэшин Геологийн төв лаборатори, “Эрдэнэт” уулын баяжуулах үйлдвэр, Оюу-Толгой, ШУА-ийн Физик-технологийн хүрээлэн, МУИС, Австрали зэрэг дотоод, гадаадын ижил төстэй багаж төхөөрөмж ашигладаг судалгаа, шинжилгээний болон үйлдвэрлэлийн газруудад амжилттай ажиллаж байгаагаас гадна Эрдэнэт уулын баяжуулах үйлдвэрийн 50-аад ажилтан (давхардсан тоогоор) энэ чиглэлийн сургалтад хамрагдсан байна.

Рентген-флуоресценцийн шинжилгээний шинэ тоног төхөөрөмжийг ашиглалтанд оруулах, аргазүй эзэмших, боловсруулан хэрэглэхэд ОУАЭА-ийн шинжээчид, ОХУ-ын ялангуяа Эрхүүгийн их сургуулийн мэргэжилтнүүд үнэтэй хувь нэмэр оруулсныг тэмдэглэж байна. Энэ хугацаанд ЦФСТ-д ОУАЭА-ийн шугамаар Я.Ухрин (1976, Унгар), З.Худкова (1982, Чехословак.), П.Кумп (1985, Югослав), Ё.Бачо (1987, Унгар), П.Вображек (1994, Польш), П.Крегсамер (1995, Австри), Чарбусински (2002, Австрали), П.Урбанский

(2002, 2003, Польш), хамтын ажиллагааны шугамаар ОХУ-аас А.Г.Ревенко, А.Н.Смагунова, Л.А.Берковиц, Г.В.Павлинский нарын олон мэргэжилтэн ирж ажиллан мэргэжлийн туслалцаа үзүүлж, хамтран ажилласныг тэмдэглэж байна.

МУИС-ийн ЦФСТ-өөс санаачлан 2006, 2009, 2012 онуудад Улаанбаатар хотод зохион байгуулсан “X-Ray Analysis” олон улсын эрдэм шинжилгээний хуралд ЦШНИ, Япон, Бельги, ОХУ-ын их дээд сургууль, эрдэм шинжилгээний байгууллагын 20 гаруй, манай орны 30-аад эрдэмтэн судлаачид оролцож бүтээлээ хэлэлцүүлж, 3 удаагийн хурлын материал хэвлэгдэж нийтийн хүртээл болсон юм [108,113-115]. Тус хуралд олон улсын “X-Ray Spectrometry” сэтгүүлийн ерөнхий редактор бөгөөд дарга Бельгийн их сургуулийн профессор R. Van Grieken, редакцийн зөвлөлийн орлогч дарга Японы Киотогийн их сургуулийн профессор J.Kawai, редакцийн зөвлөлийн гишүүн ОХУ-ын эрдэмтэн, МУИС-ийн хүндэт профессор А.Г.Ревенко, Эрхүүгийн их сургуулийн профессор Г.В.Павлинский нарын зэрэг нэртэй эрдэмтэд оролцсон юм. Энэ 2015 онд манай улсад рентген-флуоресценцийн судалгааны чиглэл үүсч хөгжсөний 40 жил, ЦФСТ байгуулагдсаны 50 жилийн ойг тохиолдуулан “X-Ray Analysis” олон улсын эрдэм шинжилгээний хурлыг 4 дэх удаагаа зохион байгуулан хийв [109]. Энэ хуралд ОХУ, Япон, Энэтхэг, Австрали улс болон Дубнагийн олон улсын Цөмийн шинжилгээний нэгдсэн институт зэрэг гадаадын эрдэм шинжилгээний байгуулга, их сургуулиудын хориод эрдэмтэн судлаачид хүрэлцэн ирж судалгааны ажлын үр дүнгээ танилцуулж, харилцан мэдээлэл солилцов.

II. ДҮГНЭЛТ

Монгол улсад рентген-флуоресценцийн судалгааны онол, аргазүй амжилттай хөгжиж, судалгаа шинжилгээ, үйлдвэрлэлийн практикт тууштай нэвтэрч, хүний нөөц бэлтгэгдэж, аргазүй, багаж төхөөрөмж улам боловсронгуй болон сайжирсаар байна.

- [1] П.Зузаан. Рентген-флуоресценцийн шинжилгээ Монголд хөгжсөн нь //”Рентген спектрийн шинжилгээ” эрдэм шинжилгээний хурлын илтгэлийн эмхэтгэл, 2006, УБ, х.7-15.
- [2] Н.Содном, Б.Далхсүрэн, А.Г.Ревенко, Ш.Гэрбиш, П.Зузаан, С.Даваа. Об одном варианте внутреннего стандарта

определения содержания многоэлементных руд рентгено-флуоресцентным анализом// В кн: Тез. докл., “IY Всесоюзное совещание по активационному анализу”. 1-3 июня 1977 г. Тбилиси

- [3] Н.Содном, Б.Далхсүрэн, А.Г.Ревенко, Ш.Гэрбиш, П.Зузаан, С.Даваа. Рентгено-флуоресцентный экспрессный метод

- определения содержаний
многоэлементных руд //В кн: Труды
Монголо-Советской Керуленской
геологической экспедиции “Вопросы
геологии и металлогении восточной
Монголии”, г.Улан-Батор, 1979, с.33-47
- [4] П.Зузаан, Б.Далхсүрэн, Н.Содном,
А.Г.Ревенко. Применение
полупроводниковых детекторов в РФА //
МУИС, ЭШБ, №1,2; 1982, с.103-117
- [5] Ш.Гэрбиш, П.Зузаан,Н.Содном,
Ж.Сэрээтэр, С.Лодойсамба. Цөмийн
физикийн аргуудыг элементийн анализд
хэрэглэсэн нь //МУИС, ЭШБ, №4(84),
1983, с.15-31
- [6] Sh.Gerbish, J.Bayarmaa. Some development
and improvement of ED-XRF techniques in
Mongolia//МУИС, Эрдэм Шинжилгээний
Бичиг, № 167, (9), 2002, хх.59-61
- [7] Sh.Gerbish, J.Bayarmaa, T.Rinchinjugder.
In-Situ applications of XRF techniques in
Erdenet mining corporation //“Эрдэс
баялгийн цогцолбор шинжлэх ухаан
технологийн дэвшил-2002” pp.126-129
- [8] B.Erdenebayar, A.Karivai. Application of X-
ray Fluorescence Spectrometry to the
Elemental Analysis of Geological Samples in
the Central Geological Laboratory
//Mongolian Geoscientist .№6, p. 8-11,
January, 1998, Ulaanbaatar, Mongolia
- [9] B.Erdenebayar, A.Karivai, Sh.Batkhuu.
Application of Wavelength Dispersive X-ray
Fluorescence Spectrometry to the Elemental
Analysis of Geological Samples in the
Central Geological Laboratory. //Mongolian
Geoscientist, No. 17, p.13-15, December,
2002, UB, Mongolia
- [10] А.Г.Ревенко, П.Зузаан, С.М.Паздников.
Сопоставление интенсивностей
рентгеновской флуоресценции для линий
K и L серий. //Журнал “Заводская
лаборатория” 1985, т.51, вып.12, с.16-20
- [11] А.Ю.Портной, П.Зузаан, Г.В.Павлинский,
А.Ю.Духанин, Б.Эрдэмчимэг. Расчет
тормозного спектра электронов отдачи,
возникающего при возбуждении
рентгеновской флуоресценции
излучением радиоизотопных источников.
//Журнал “Аналитика и контроль” Россия,
т.6, №4, 2002, с.390-394
- [12] Б.Эрдэмчимэг, П.Зузаан, А.Ю.Портной,
Г.В.Павлинский. Изотопон үүсгүүртэй
рентген-флуоресценцийн анализын үед
бага энергийн мужид үүсэх тийрэгдсэн
электроны тормозын спектрын тооцоо
//МУИС, ЭШБ. №167(9), Улаанбаатар,
2002, х.29-38
- [13] А.Ю.Портной, Г.В.Павлинский, А.Ю.
Духанин, П.Зузаан, Б.Эрдэмчимэг.
Формирование аналитического сигнала и
фона в EDXRF при возбуждении
рентгеновской флуоресценции
излучением радиоизотопного источника
 ^{241}Am и использовании Si(Li) детектора.
//Журнал аналитической химии, том 59,
№11, с.1171-1180, 2004
- [14] А.Ю.Портной, Г.В.Павлинский,
М.С.Горбунов, Е.О.Баранов, П.Зузаан. Об
оптимизации соотношения аналитической
сигнал/фон в энергодисперсионном
рентгено-флуоресцентном анализе при
использовании Si(Li) детектора //Журнал
аналитической химии, том 64, №5, с.511-
520, 2009
- [15] О.Болормаа Автореф. дис. ...канд.хим.
наук. Иркутск: ИГУ,2001.21 с.
- [16] Smagunova.A.N., Bolormaa.O.,
Panikov.S.D. Determination of Optimum
Conditions for X-ray Fluorescence Analysis
Using Coupling Equations //Journal of
Analytical Sciences, Methods and
Instrumentation, JASMI, Vol.14 No 2, 2012,
pp.81-86
- [17] Ts.Amartaivan, K.Ishii, H.Yamazaki,
S.Matsuyama, A.Suzuki, T.Yamaguchi,
S.Abe, K.Inomata, Y.Watanabe. PIXE
analysis using 70 MeV carbon ions.
//International Journal of PIXE, 16(2005) 52-
58
- [18] T.Satoh, K.Ishii, S.Matsuyama, H.Yamazaki,
Ts. Amartaivan, A.Tanaka, S.Sugihara,
Y.Komori, K.Katoh T.Kamiya, T.Sakai and
K.Arakawa. Investigations on the Influence
of Back-Scattered Protons in PIXE Spectrum.
//International Journal of PIXE, 11 (2001) 49-
55
- [19] В.Я.Выропаев, А.Г.Белов, Н.Содном,
Б.Далхсүрэн, Ш.Гэрбиш, П.Зузаан,
С.Даваа. Рентген-флуоресцентное
определение малых содержаний
элементов от ванадия до молибдена с
применением нового варианта
эталонирования на спектрометре с
полупроводниковым детектором.
//Препринт ОИЯИ 18-2279, Дубна. 1979,
Атомная энергия 1980, Том.49, вып.2,
с.90-94
- [20] П.Зузаан. Автореферат диссертации, УБ,
1985, 22с.
- [21] Н.Гансүх, П.Зузаан, Б.Далхсүрэн.
Сарнилын пикийг ашигласан тулгуур

- параметрийн арга //МУИС, ЭШБ, №3(132), 1997, УБ, х.159-169
- [22] P.Zuzaan, D.Bolortuya, N.Gansukh. Radionuclide induced energy dispersive X-ray fluorescence for the determination of La, Ce, Pr and Nd and their content sums in the rare-earth ores //X-Ray spectrometry Nov. 3,2010, p. 52-56,
- [23] P.Zuzaan, Z.Damdinsuren, D.Bolortuya, V.Enkhtsetseg, B.Erdenebayar. X-ray Fluorescence Technique for Determination of Some Rare Earth Elements //Proc. Intern. School on Contemp. Phys. ISCP-III, p.249-252, 2005, UB, Mongolia
- [24] Ш.Гэрбиш, С.Энхбат, М.Энхтуяа. Экспрессная методика определения содержания серебра в концентратах меди // МУИС, ЭШБ, №4/57/1982, с.155-158
- [25] П.Зузаан, Н.Содном. Олон элементийг энергиэр ялгах РФА арга //Оновчтой санал, №9888, 1985
- [26] П.Зузаан, Ш.Гэрбиш, Н.Содном, А.Г.Ревенко, Б.Далхсүрэн. Определение содержания ниобия в геологических образцах с помощью рентгенофлуоресцентного спектрометра с ППД //МУИС, ЭШБ, №4 1982, с.135-141
- [27] А. Каривай, Ш. Батхүү, Б. Даваасүрэн, А. Жаргалсайхан, Б. Эрдэнэбаяр. Холимог металл, уран, цагаан тугалгын хүдэрт үндсэн болон дагалдах элементүүдийг тодорхойлох рентген- флуоресценцийн хурдавчилсан арга // Геологи, эрдэсийн түүхий эдийн шинжилгээ судалгаа сэдэвт эрдэм шинжилгээний хурлын илтгэлүүдийн түүвэр, УБ, 1997,
- [28] B.Erdenebayar, P.Zuzaan. Wavelength Dispersive X-ray Fluorescence Method for Determination of Major and Minor Elements in Geological Samples //Физик Технологийн Хүрээлэнгийн Бүтээл №38, 2012, УБ,
- [29] B.Erdenebayar, P.Zuzaan. Calibration and Regression of the Complete Analytical Method of Silicate Rocks by Wavelength Dispersive X-ray Fluorescence Spectrometry //Proc. Intern. Conf. on Contemp. Phys.ICCP-IV, p. 90-93, 2007, UB, Mongolia
- [30] D.Bolortuya, Z.Damdinsuren, S.Lodoysamba, P.Zuzaan. X-Ray Fluorescence Technique for Coal Ash Determination //Proceedings of the“ Conference on X-Ray Analysis”, 2006, p.79-88
- [31] Д.Болортуяа, П.Зузаан. Уран тодорхойлох рентген-флуоресценцийн шинжилгээний арга. //“Монгол улсад цөмийн энергийг ашиглах нь” ЭШХ-ийн эмхтгэл, УБ, 2010, х.98-104
- [32] Б.Далхсүрэн, П.Зузаан, Б.Эрдэв. Рентген-офлуоресцентный метод определения некоторых элементов в атмосферном воздухе //МУИС, ЭШБ, №5(103), 1990, х.172-174
- [33] Ш.Гэрбиш, Ж.Баярмаа, Н.Балжинням нар. Хүнсний бүтээгдэхүүнд нэмж байгаа химийн зарим элементүүдийг тодорхойлох цөмийн физикийн аргууд //МУИС ЭШБ №179(10), 2003. х.242-246
- [34] П.Зузаан, Н.Содном, Б.Далхсүрэн, Ш.Гэрбиш, Ж.Ганзориг, Б.Эрдэв. Рентген-флуоресценцийн анализын аргыг задлан шинжлэх практикт хэрэглэх // ШУА-ийн мэдээ, №4, 1984, х.22-33
- [35] А. Каривай, Е. П. Вязников, Л. А. Самсонов, Применение ядерно-физических методов анализа при изучении геологических проб., //ГТЛ-ийн 30- ийн ойд зориулсан элс-ний хурлын илтгэлийн түүвэр., 1987, Улаанбаатар.
- [36] Каривай, Б. Эрдэнэбаяр, Рентген флуоресценцийн шинжилгээний аргыг чулуулаг, хүдрийн элементийн найралгын шинжилгээнд хэрэглэх нь. //Геологи сэтгүүл No 2,3, х. 376-383 , УБ хот, 2001
- [37] B.Erdenebayar, A.Karivai, P.Zuzaan. Application of Wavelength Dispersive X-ray Fluorescence Spectrometry for Elemental Analysis of Geological Samples //Proc. Intern. School on Contemporary Physics ISCP-III, p.291-296, 2005, UB, Mongolia
- [38] Н.Содном, Б.Далхсүрэн, А.Г.Ревенко, Ш.Гэрбиш, П.Зузаан, С.Даваа. Применение рентгено-флуоресцентного спектрометра с полипроводниковым детектором для определения содержания элементов в рудах //В кн: Тез. докл. первой научной междунар. конф. “Геология и ползные ископаемые восточной Монголии и сопредельно территории” Уланбатор, 1977, с.11-13.
- [39] Ш.Гэрбиш, П.Зузаан, Н.Содном, Ж.Сэрээтэр, С.Лодойсамба. Исследование по разработке ядерно-физических методов анализа в Лаборатории ядерныхисследований МонГУ //В кн: Труды IV совещания “Применение новых ядернофизических методов анализа в науке, технике и народном хозяйстве” Дубна ОИЯИ, p18-82-117, 1982, с.267-269.

- [40] Ш.Гэрбиш, Н.Содном. Зэс-молибдены хүдрийн үндсэн ба дагалдах элементийг РФА-ын аргаар тодорхойлох аргазүйн судалгаа //МУИС, Эрдэм шинжилгээний сонгол мэдээ №1/54/, УБ, 1978, 24х.
- [41] Б.Ишмэнд, П.Зузаан, Г.Хүүхэнхүү, Ш.Ганчимэг, Некоторые вопросы разрушения взрывом медно-молибденовых руд //В сб: докл. научно-практической конф. "Проблемы ускорения научно-технического прогресса в горной промышленности МНР", 1985, УБ, х.26- 28
- [42] Ш.Гэрбиш и др. Ядерно-физические методы определения основных и сопутствующих элементов медно-молибденовых руд и концентратов //МУИС, ЭШБ, №3/132/, УБ, 1997, х.301-311.
- [43] С.Дандар, С.Дашдаваа, В.И.Сизых, П.Зузаан, Б.Далхсүрэн. Некоторые особенности состава вольфрамитов модотинского рудного узла // В кн: Тез. докл. III научной международ. конф. "Вопросы геологии и полезных ископаемых центральной и восточной Монголии", г.Уланбатор, 1982, с.31-32
- [44] П.Зузаан, Д.Болортуяа, З.Дамдинсүрэн. Рор Тор детектортой спектрометрийн хэмжилтийн оптималь нөхцлийг сонгох //МУИС, ЭШ-ний сэтгүүл ФИЗИК, №225(12), 2005, УБ, х.50-54
- [45] П.Зузаан, З.Дамдинсүрэн, Д.Болортуяа, С.Лодойсамба. Шивээ-Овоо, Багануурын уурхайн нүүрсний элементийн найрлагыг РФА-аар тодорхойлсон нь. //МУИС, Эрдэм шинжилгээний сэтгүүл, ФИЗИК, ¹ 225 (12), 2005, х.55-57
- [46] P.Zuzaan, S.Lodoysamba, Z.Damdinsuren, D.Bolortuya, D.Ichinkhorloo. Some results of study to determine coal quality and elemental content //Proc. of the 3-nd Intern. School "In contemp.physics ISCP-III", 2005, p.100-103
- [47] П.Зузаан, Н.Гансүх, С.Даваа, З.Дамдинсүрэн, Б.Батжаргал, Л.Дэлгэрбат, Т.Ринчинжүгдэр. Уулын баяжуулах "Эрдэнэт" үйлдвэрийн технологийн процессыг хянадаг рентген спектр анализын аргыг боловсронгуй болгох асуудалд // МУИС, Эрдэм шинжилгээний бичиг, ¹ 7 (159), 2000, х.168-176
- [48] П.Зузаан, Н.Гансүх, Л.Батаа, С.Даваа, З.Дамдинсүрэн. РФА пульпообразных продуктов ГОК "Эрдэнэт" //Proc. of the Conf. on "X-Ray Analysis", 2006, p.158-163
- [49] А.Каривай, П.Зузаан, М.В.Густова. Метод рентгенофлуоресцентного определения некоторых редкоземельных элементов и их корреляция с торием. //журнал "Письма ЭЧАЯ" 2011, т.8, №6(169), с.959-967
- [50] D.Bolortuya, P.Zuzaan, M.V.Gustova, O.D.Maslov. Study of the correlation between the coal calorific value and coal ash content using x-ray fluorescence analysis //JINR Preprint№E12-2013-33, "Письмо в ЭЧАЯ", 2013, Т.10, №7(184), с.1184-1189
- [51] П.Зузаан, Н.Гансүх, С.Даваа и др. Разрабаотка и внедрение методико-математического обеспечения для контроля технологических продуктов ГОК "Эрдэнэт" на порошковых анализаторах СРМ-25. //Үйлдвэрт шилжсэн ажлын тайлан, 1999 он, Эрдэнэт, 28х.
- [52] P.Zuzaan, D.Bolortuya, S.Davaa, A.G.Revenko. Estimation of Applicability of Scattered Radiation for XRF //Журнал"Аналитика и контроль", 2013, Том 17, №4, Россия, с.376-381
- [53] Ж.Ганзориг, Ш.Ганчимэг, П.Зузаан, Б.Ишмэнд, Н.Содном, Г.Хүүхэнхүү. Изыскание эффективных методов разрушения взрывом с целью улучшения рудоподготовки медно-молибденовых руд //ПДС-ийн ЭШБ, №1, 1987, с.110-118
- [54] А.Каривай, П.Зузаан Возможность поиска месторождений РЗЭ и нерадиоактивных элементов с помощью радиоактивных элементов // Радиоастивность и радиоактив-ные элементы в среде обитания человека, материалы 3-ой международной конференции, стр 712-714, г. Томск, 2009
- [55] Д.Пүрэвхайдав, Ж.Галбаатар. Геометрия измерения для радиоизотопного РФА с использованием тонкого ППД // Научные труды ИФТ АН МНР, 1977, № 15, с.109-118
- [56] Р.Байгалмаа, Г.Бурмаа, А.Каривай. Синхизитийн исэлдсэн хүдрээс химийн боловсруулалтаар гаргаж авсан дээжүүдийн шинжилгээний дүн. //Хими,хими-технологийн хүрээлэнгийн эрдэм шинжилгээний бүтээл(5), ¹31, хх.101-106,УБ, 2004.
- [57] P.Baigalmaa, G.Burmaa, A.Karivai, B.Erdene-bayar, B.Davaasuren. Results of Technological Experiments on separation of Cerium, and Yttrium Group Elements from Synchisite Concentrate. //ШУА. Хими, хими-технологийн хүрээлэнгийн эрдэм

- шинжилгээний бүтээл 4(30), хх.84-88, УБ, 2003
- [58] Ts.Amartaivan. The study of possibility of chemical analysis for Cr and Pb compounds using heavy ion PIXE //2005, PhD thesis, Sendai, Japan (in Japanese)
- [59] Каривай, Ө.Доржханд, Т.Ариунаа, Д.Балжид., Газрын ховор элементийг нэг бүрчилэн тодорхойлох атом-эмиссийн спектр, рентген-флуоресценцийн тоон шинжилгээний аргын үр дүнгийн харьцуулалт, //ГТЛ-ийн 40 жилийн ойд зориулсан “Геологи, эрдэсийн түүхий эдийн шинжилгээ судалгаа” ЭШ-ний бага хурлын бүтээлийн эмхэтгэл, УБ, 1997
- [60] А.Каривай, Р.Байгалмаа, Б.Эрдэнэбаяр, Г.Бурмаа. Рентгено-флуоресцентный анализ химический обработанных проб полученных из окисленных руд синхезита //Proc. of the Intern.l School on Contemp. Phys. ISCP-III, p.297-300, 2005, Ulaanbaatar, Mongolia
- [61] Ts.Amartaivan, E.D.Greaves, G.Bernasconi, P.Wobraschek. Total reflection X-Ray fluorescence analysis of Mongolian coals// J.Radioanal. Nucl. Chem. 220 2 (1997) 249-254
- [62] Ts.Amartaivan, R.Erdenechimeg, Sh.Gerbish, “Determination of trace elements in coal using nuclear analytical techniques”// Mongolian Geoscientist, 10 (1998) 56-59
- [63] R.Erdenechimeg, Ts.Amartaivan, Toxic elements in coals of Eastern Mongolian province.// Mongolian Geoscientist, 10 (1998) 58-62
- [64] Ts.Amartaivan, Kh.Orkhon. In-situ analysis for geological samples //Эрдэс баялаг-найрлагын стандартчилсан загвар, олон улсын эрдэм шинжилгээний хурал, Улаанбаатар, Монгол улс, 2007 оны 12 сарын 10-11,
- [65] Б.Батжаргал, П.Зузаан, Ш.Гэрбиш, В.П.Мартынов, А.С.Мартынова, А.Г.Ревенко. Геохимия некоторых элементов в тундровых почвах прихубсугуля //В кн: Тезисы докладов, Международной конференции, “Природные условия и ресурсов некоторых районов МНР” г.Улан-Батор,1980, с.54-55
- [66] П.Зузаан, Н.Содном, Б.Батжаргал. К вопросу о подготовке почвенных образцов для валового анализа //В кн: Тез. докл. XIII междунар. конф. по результатам работы Монголо-Советской комплексной Хубсугульской экспедиции, 1984, УБ, с.93
- [67] Б.Батжаргал, В.П.Мартынов, П.Зузаан, Н.Содном. Некоторые почвенно-геохимические характеристики элементарных почвенных ареалов в северном Прихубсугулье //там же 1984, УБ, с.94
- [68] П.Зузаан, А.Г.Ревенко, Н.Содном. Хөрс, уулын чулуулгын энерго-дисперсийн рентген-флуоресценцийн аргын хэмжил зүйн үзүүлэлтийн үнэлгээ //МУИС ЭШБ №5(103) 1990 х.129-143
- [69] Б.Батжаргал, Ц.Жамсран, П.Зузаан, Г.М.Шпейзер, В.А.Родиопова. К вопросу исследования антропогенеза ландшафта промышленного района Эрдэнэт. //В кн: Тезисы докладов XI международный научной конференции по результатам работы МСКХ экспедиции, УБ, с.62-64
- [70] Б.Далхсүрэн, Ш.Гэрбиш, П.Зузаан, С.Билал, Б.Эрдэмчимэг, Ц.Цэрэнгомбо. Хөрсний элементийн агуулгыг РФА-ийн аргаар судалсан дүнгээс //“Бүс нутгийн тогтвортой хөгжил, мэдээллийн технологи-2002” эрдэм шинжилгээ, онол практикийн бага хурал, х.74-77
- [71] Б.Далхсүрэн, Ш.Гэрбиш, Ц.Намчинсүрэн, О.Отгонсүрэн, Б.Эрдэмчимэг. Улаанбаатар хотын авто замын дагуух хөрсний элементийн судалгаа //“МУИС, Эрдэм Шинжилгээний Бичиг” № 167 (9), 2000,
- [72] А.Г.Ревенко, А.А.Батраева, П.Зузаан, Б.Далхсүрэн. Рентгеноспектральное определение содержания элементов в растениях Прихубсугуля. //В кн: Природные условия и ресурсов некоторых районов МНР (тез. докл.Междунар. конф. по результатам работы Монголо-Советской комплексной Хубсугульской экспедиции), 1978, с.34-36
- [73] А.А.Батраева, В.И.Ивельская, Г.П.Петрова, А.Г.Ревенко, П.Зузаан. Химический состав растений некоторых видов в прихубсугулье //В кн: Тез. докл. XIII междунар. конф. по результатам работы Монголо-Советской комплексной Хубсугульской экспедиции, г.Иркутск, 1979, с.38-40
- [74] А.А.Батраева, В.А.Барицкая, Ц.Жамсран, П.Зузаан. Некоторые сведения о содержания тяжелых металлов в золе растений Прихубсугуля. //В кн: Природные условия и ресурсов некоторых районов МНР (тез. докл.международный

- конференции по результатам работы Монголо-Советской комплексной Хубсугульской экспедиции), 1986, с.58-59
- [75] А.Г.Ревенко, П.Зузаан, Ш.Гэрбиш. Разработка методик анализа природных материалов для рентгеновского спектрометра с ППД. //В кн: Тез. докл., II всесоюз.конф. по автоматизации анализа химического состава вещества, г.Москва, 1980, с.30.
- [76] П.Зузаан, Г.П.Петрова, Б.Далхсүрэн, Е.А.Грачева, Ш.Гэрбиш. Применение рентгено-спектрального метода для химического анализа состава природных материалов Прихубсугуля //В кн: Природные условия и ресурсов некоторых районов МНР (тез. докл. IXмеждународ. конф., посвященная 10 летию Монголо-Советской комплексной Хубсугульской экспедиции), 1980, с.63-64
- [77] Ц.Цэрэндулам, П.Зузаан. Рентген-флуоресценцийн анализаар найрлагын стандарт загварт хийсэн шинжилгээний дүн //”Хүрэл тогоотын семинар 2008” эрдэм шинжилгээний бага хурлын материал, 2008, х.131-133
- [78] П.Зузаан, Б.Далхсүрэн, Ш.Гэрбиш, А.Мөнгөнцэцэг, А.Г.Ревенко, Г.Содномдорж. Определение некоторых элементов в природной воде с помощью радиоизотопного РФА. //В кн: Тез. докл.междунар. конф. “Природное условия и ресурсы некоторых районов в МНР” г. Иркутск, 1981 с.56-57
- [79] Б.Далхсүрэн, Ш.Гэрбиш, Б.Эрдэв, Ц.Цэрэнгомбо, Ж.Баярмаа. Хар ус нуурын усны зарим микроэлементийг судалсан дүнгээс //“XXI зуун, бүс нутгийн тогтвортой хөгжил-мэдээллийн технологи” сэдэвт эрдэм шинжилгээ, онол практикийн бага хурал, Увс, Хархираа 2001, хх.105-108
- [80] Г.Ганболд, .Ганчимэг, Ш.Гэрбиш, Б.Далхсүрэн, Ж.Баярмаа, О.Д.Маслов, Д.В.Севастьянов, Исследование распределения элементов в природных водах бассейна реки Селенги //Препринт18-2001-141,ОИЯИ, Дубна, 2001, 8с.
- [81] Ж.Баярмаа, Б.Далхсүрэн, Ц.Цэрэнгомбо. Баруун бүсийн зарим аймгуудын усны хүнд металлыг БОРФШ-ний аргаар судалсан нь //МУИС ЭШБ №167(9), 2002. х.45
- [82] Ш.Гэрбиш, Г.Ганчимэг, Ж.Баярмаа, Н.Сайжаа. Ундны усны чанарын зарим үзүүлэлтүүд //“Урьдчилан сэргийлэх анагаах ухааны асуудал” онол практикийн бага хурлын илтгэлийн хураангуй, Улаанбаатар, 1998, х.19
- [83] H.Yamazaki, K.Ishii, Y.Takahashi, S.Matsuyama, Ts.Amartaivan, S.Abe, K.Inomata, Y.Watanabe, A.Ishizaki. Quantitative Analysis for Cr(III) and Cr(VI) Ions in Environmental Water Samples by using PIXE // International Journal of PIXE 15 (1&2) (2005)73-83
- [84] Ts.Amartaivan, K.Ishii, H.Yamazaki, Y.Takahashi, S.Matsuyama, T.Satoh, S.Sugihara K.Katoh Y.Komori and H.Orihara. PIXE analysis of trace heavy metals in river and tap waters using an ion-exchange cellulose filter paper //Intern. Journ of PIXE, 12 (2002) 217-223
- [85] H.Yamazaki, K.Ishii, Y.Takahashi, Ts.Amartaivan, S.Matsuyama, T.Sato, S.Sugihara, K.Sera and G.C.Jon. PIXE elemental analysis of drinking water supplies // Intern. Journal of PIXE, 12 (2002) 209-215
- [86] H.Yamazaki, K.Ishii, Ts.Amartaivan, Y.Takahashi, S.Matsuyama, T. Sato, S.Sugihara, H.Orihara and C.G.Jon. PIXE Analysis of Trace Heavy Metals in River Waters Using an Ion-Exchange Cellulose Filter Paper //International Journal of PIXE, 11 (2001) 79-86
- [87] H.Yamazaki, K.Ishii, Y.Takahashi, S.Matsuyama, Y.Kikuchi, Ts. Amartaivan, T.Yamaguchi, G.Momose, S.Abe, K.Inomata, Y.Watanabe, A.Ishizaki. Identification of Oxidation States of Trace-Level Arsenic in Environmental Water Samples Using PIXE // International Journal of PIXE 15 (3&4) (2005) 241-248
- [88] Ж.Баярмаа, Х.Жамбалмаа, Ч.Чимэддулам. Импортын хүнсний бүтээгдэхүүний хүнд металлын бохирдолтын эрүүл ахуйн үнэлгээ //“Хүн ба хүнс” сэтгүүл №4, Улаанбаатар, 1998, х.25-28
- [89] Ж.Баярмаа, Ш.Гэрбиш. Хүнсний бүтээгдэхүүнд цацраг идэвхт элемент, хортой хүнд металл тодорхойлох //Бүс нутгийн хөгжил, мэдээллийн технологи-2000, Илтгэлийн хураангуй, Завхан, 2000, х.148-161
- [90] Н.Содном, Х.Сиражет, Ж.Ганзориг, П.Зузаан нар. Байгаль орчны бохирдолтыг судлахад цөмийн физикийн арга хэрэглэх нь //ШУА-ийн мэдээ, №4, 1984, х.14-21
- [91] Ш.Гэрбиш, А.Н.Смагунова, Д.Дорж, О.Болормаа. Использование спектрометра с полным внешним отражением при РФА

- объектов окружающей среды //В кн: Тез. докл.У конф. Аналитика Сибири и дальнего востока, 1996 г. Новосибирск, с.174.
- [92] П.Зузаан, Н.Содном, Ш.Ганчимэг, Д.Цогтбаяр. Эрдэнэтийн уурхайн тоосны тархалтыг судалсан дүн //МУИС, ЭШБ, №5(103), 1990, х.79-84
- [93] Ш.Гэрбиш, Б.Далхсүрэн, П.Зузаан, Б.Эрдэв. Цөмийн физикийн аргаар Улаанбаатар хотын агаарын дээжинд хийсэн шинжилгээний дүн //“Улаанбаатар хотын агаарын бохирдол” номонд, 1998, х.100-108
- [94] S.Gerbish, G.Ganchimeg, J.Bayarmaa and B.Dalkhsuren. Determination of radionuclides, toxic heavy metals and trace elements in environmental samples //“Radionuclides and Heavy Metals in Environment” IV Earth and Environmental Sciences-Vol.5 pp.273-282
- [95] С.Лодойсамба, Д.Шагжжамба. Цөмийн физикийн аргыг Агаарын бохирдлын судалгаанд хэрэглэх //Цөмийн энергийн комисс 50 жил эмхэтгэл. Улаанбаатар. 2013.Хуудас 116-119
- [96] П.Зузаан, С.Лодойсамба, Д.Шагжжамба. Применение РФА для определения источников загрязнения PM2.5 в атмосфере г.Улаанбаатора Монголии. //Тез. докл. конф. VIII Всеросс.конф. по рентгеноспектрально-ному Анализу. 2014, Иркутск. с.81. 2014.
- [97] Amgalan N. Shagjjamba D. Assessmens of elemental concentrations of particle matter in Ulaanbaatar, Mongolia //Best:International journals of management, Information technology and engineering (Best Umite) ISSN(print):2348-0513; ISSN(Online): 2454-471X; Vol. 3, Issue 10, Oct 2015, 15-24
- [98] S.Lodoysamba, D.Shagjjamba, G.Gerelmaa. Determination of PM2.5 and PM10-2.5 concentration and air pollution source apportionment Ulaanbaatar city, using PIXE analysis. //Proc. 2nd Intern. Conf. on X-Ray analysis (2009), pp 109-122.
- [99] S.Lodoysamba, D.Shagjjamba, C.A.Hasenkopf, G.Gerelmaa, B.Bulgansaikhan. Results of source apportionment by receptor modelling of APM in Ulaanbaatar city //Physics Science Journal, National University of Mongolia, N 397(18)(2014), pp. 121-125.
- [100] G.Gerelmaa, S.Lodoysamba, D.Shagjjamba, Ts.Amartaivan, Perry K. Davy, Andreas Markwitz, William J.Trompetter. Air particulate matter pollution in Ulaanbaatar city Mongolia. //International Journal of PIXE22, 165 (2012). DOI: 10.1142/S0129083512400062
- [101] Perry K. Davy, Gerelmaa Gunchin, Andreas Markwitz, William J. Trompetter, Bernard J. Barry, Dagva Shagjjamba, Sereeter Lodoysamba. Air particulate matter pollution in Ulaanbaatar, Mongolia: determination of composition, source contributions and source locations. //Atmospheric Pollution Research 2 (2011), pp.126-137.
- [102] S.Lodoysamba, D.Shagjjamba, G.Gerelmaa. Characterization PM2.5-0 and PM10-2.5 Air Pollution of Ulaanbaatar City. //Physics Science Journal, National University of Mongolia, N 309(15)(2009), pp. 1-4.
- [103] О.Болормаа, О.М.Карпукова, А.Н.Смагунова, Д.Дорж, Ш.Гэрбиш. Разработка методики РФА-а волос с помощью спектрометра с полным внешним отражением первичного излучения. //Аналитика и контроль, 1999, №3 с.27-31
- [104] Bolormaa O., Karpukova O.M., Rozova O.F. et.al. Determination of zinc in Hair by X- Ray spectrometry //J.Anal. Chem, 1998.vol.53, No7, pp.772- 775.
- [105] Pavlinskii G.V., Smagunova A.N., Karpukova O.M., Bolormaa O., Dorj D. “Sources of Error in Total Reflection X – ray Fluorescence Analysis and Error Correction Using the Internal Standard Method //J.Anal. Chem. 2002, vol.57, No3, pp.231- 239
- [106] П.Зузаан нар. РФА-ын аргаар хүний үсэнд кальци тодорхойлох. ЦШЛ-ийн Эрдэм шинжилгээний тайлан. 1986-1990, х. 491-493
- [107] Ts.Javzandolgor, Ch.Buyantogtokh, Ts.Amartaivan. Results of analysis in blood serum and tissue of goats in the vicinity of mining // Mongolian Journal of Agricultural Sciences, 2013, 56-59
- [108] A.G. Revenko, Z.Puzaan, S.Davaa. Report on the Third International Conference on X-Ray analysis, 20-24 August 2012, Ulaanbaatar, Mongolia //X-Ray Spectrometry, 2013, 42, 409-411
- [109] Д.Болортуяа. “Рентген шинжилгээ – IV” олон улсын эрдэм шинжилгээний хурал //Физикийн боловсрол сэтгүүл, № 203, 2015, х.57-59
- [110] O.Bolormaa, S.Narantsetseg, B.Burmaa, P.Oyukhuu, Ts.Amartaivan. Human hair elemental analysis of patients with viral hepatitis and liver cirrhosis by XRF method

- //Вестник Бурятского государственного университета, 2012. 3, 98-101
<http://cyberleninka.ru/article/n/human-hair-elemental-analysis-of-patients-with-viral-hepatitis-and-liver-cirrhosis-by-x-ray-fluorescence-method>
- [111] Ж.Ганзориг, Ш.Ганчимэг, П.Зузаан, Б.Ишмэнд Н.Содном Г.Хүүхэнхүү. Изыскание эффективных методов разрушения взрывом с целью улучшения рудоподготовки медно-молибденовых руд. //ПДС-ийн ЭШБ, №1, 1987, с.110-118
- [112] Б.Ишмэнд, П.Зузаан, Г.Хүүхэнхүү и др. Совершенствование разработки “Эрдэнэтийн овоо”. //Научный отчёт, Улан-Батор, 1988
- [113] Proceedings of Conference on X-ray Analysis, September 29-30, Ulaanbaatar, 2006, 209 pages, Edited by S.Davaa, P.Zuzaan
- [114] Proceedings of the 2nd International Conference on X-ray Analysis, September 23-26, Ulaanbaatar, Mongolia, 2009, 232 pages, Edited by P.Zuzaan, S.Lodoysamba
- [115] Proceedings of the 3rd International Conference on X-ray Analysis, September 20-24, Ulaanbaatar, 2012, 199 pages, Compiled by D.Bolortuya, G.Damdinsuren

Ion Beam Excitation of TXRF Yield

V.K. Egorov^{1*}, E.V. Egorov¹, M.S. Afanas'ev²

¹ IMT RAS, Chernogolovka, Moscow district, Russia

² IRE RAS, Fryazino, Moscow district, Russia

The work presents short discussion of TXRF and PIXE methods peculiarities. Taking into account of these peculiarities we realized the experimental scheme for TXRF measurements at ion beam excitation of characteristic fluorescence. The scheme is built on base of the planar X-ray waveguide-resonator with specific design. Features of the new experimental method and parameters of ion beam analytical complex Sokol-3 used for the method realization are discussed.

PACS numbers: 78.70.En

I. INTRODUCTION

X-ray fluorescence analysis of materials in conditions of the total external reflection of the exciting radiation flux on the studied surface (TXRF) has today conventional status as the more effective method for quantitative element diagnostics of material objects on base of X-ray fluorescence [1]. Main feature of the method is the fact of its implementation in the total external reflection conditions. These conditions provide excitation of a thin surface layer with thickness 3-5 nm, and X-ray fluorescence yield characterizes atoms filling this layer. In the result, TXRF spectrometry is characterized by very low magnitude of the background deposit and absence of the matrix effects [2]. In comparison with XRF conventional analytical data TXRF application allows to decrease of pollutions detection limits and to simplify the experimental results treatment. At the same time, TXRF analysis as well as conventional X-ray fluorescence spectrometry at the fluorescence yield excitation by X-ray, gamma radiation and electron beams has some difficulties at the light elements diagnostics in materials. It is illustrated by Fig. 1, which presents $K\alpha$ and $L\alpha$ characteristic fluorescence excitation cross-sections for different elements in conditions of $MoK\alpha$ radiation flux application. Comparison of $YK\alpha$ and $AlK\alpha$ cross-sections shows that efficiency of the yttrium fluorescence excitation is higher as aluminum one on four orders. X-ray fluorescence difficulties of light elements diagnostics in materials can be compensate by use of the fluorescence analysis in conditions of ion beam excitation (by PIXE method) [3]. The fluorescence excitation mechanism in PIXE spectrometry differs from ones featured to other excitation methods. PIXE bears some similarity to electron excitation of the fluorescence yield but it characterized by small value of the bremsstrahlung photon intensity. In the result, PIXE measurements distinguish by low levels of the background. But the principle factor of

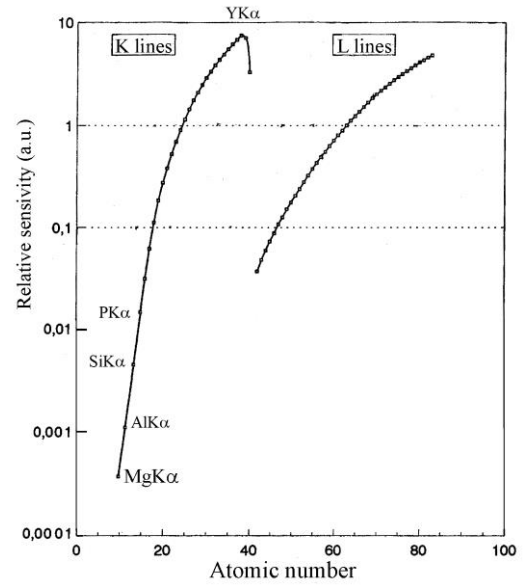


Figure 1: Cross-sections of $K\alpha$ and $L\beta$ different elements lines excitation in conditions of $MoK\alpha$ radiation flux as the exciting agent [1].

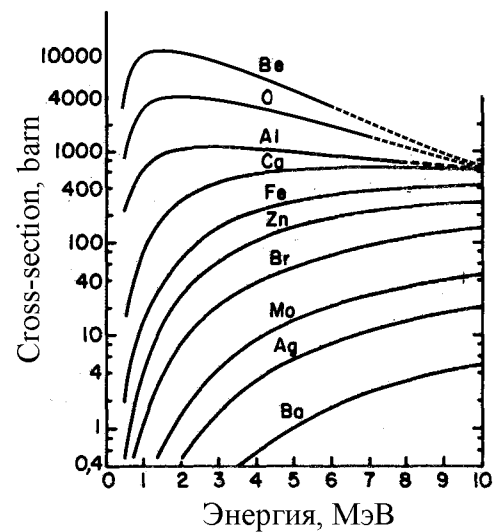


Figure 2: Cross-sections energy dependences of $K\alpha$ different elements lines excitation at application of H^+ ion beam as the exciting agent [4].

*Electronic address: egorov@iptm.ru

the PIXE spectrometry is high cross-section of X-ray fluorescence excitation for light elements. It is illustrated by Fig. 2 [4]. For example, the cross-section of X-ray fluorescence excitation for $\text{AlK}\alpha$ and $\text{YK}\alpha$ lines in conditions of proton ($E_0=1$ MeV)

beam application is higher for aluminum fluorescence yield in comparison with $\text{YK}\alpha$ one on three orders. So, PIXE is the most preferable method for light element diagnostics in materials.

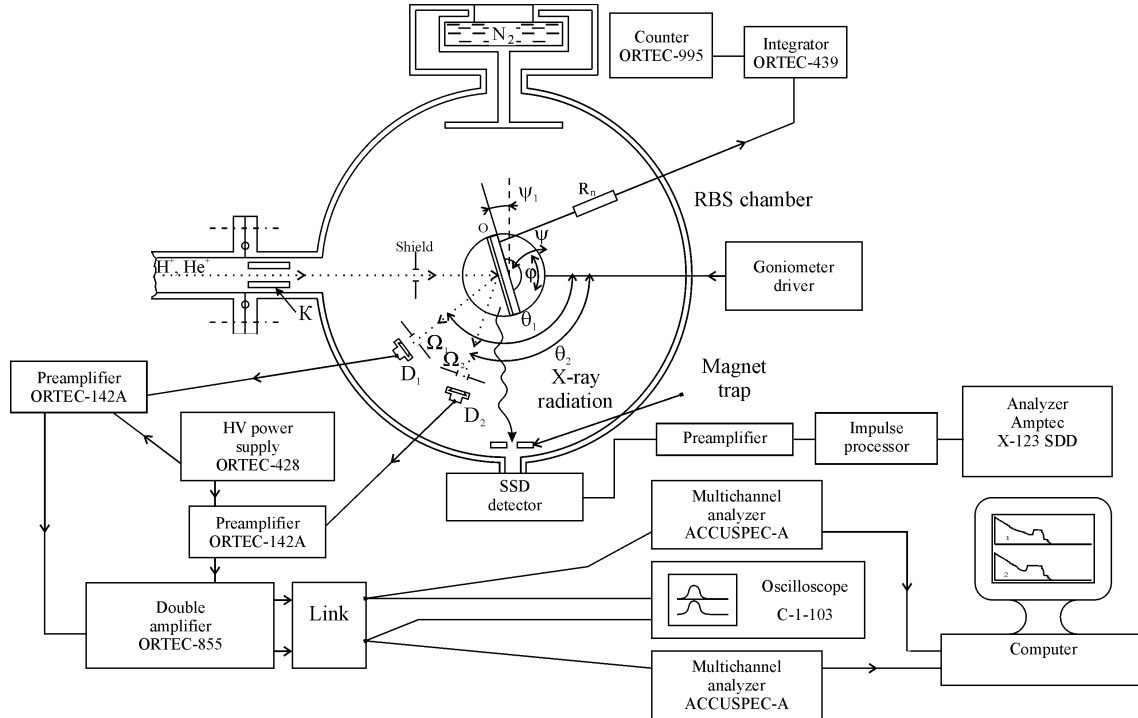


Figure 3: Experimental chamber of Sokol-3 ion beam analytical complex and systems for the product registration of ion beam interaction with studied target.

II. ION BEAM EXPERIMENTAL FACILITY

Experimental investigations were executed by use of measuring resources of Sokol-3 ion beam analytical complex [5]. Central object of these resources is the vacuum chamber for Rutherford backscattering and X-ray fluorescence diagnostics at ion beam excitation. Figure 3 shows detection equipment disposition in the chamber and set of

external apparatus used for effects registration of ion beam interaction with target. The chamber equipped by digital goniometer with target holder and double detectors systems for registration of scattering ions and nuclear reaction products (D_1 and D_2 on different angles around of initial ion beam propagation direction). The chamber provides with special vacuum flange (Fig. 4) equipped by X-ray detector holder. The flange strengthening in the chamber defines angle between direction of the ion beam propagation and the detector axis. For exception of scattering ions hit into X-ray detector its holder equipped by collimator with strong Nd-Fe magnets.

Hearts of the Sokol-3 ion beam analytical complex is ESU-2 van de Graaff accelerator working in the energy range 0.05-2.0 MeV with energy stability 0.05%. It allows to generate He^+ and H^+ ion beams in the current range 0.001-50 μA . Diameter of ion beam spot on the target can be varied from 0.1 to 2 mm. Vacuum in the experimental chamber is near $1 \cdot 10^{-6}$ torr ($8 \cdot 10^{-3}$ Pa).

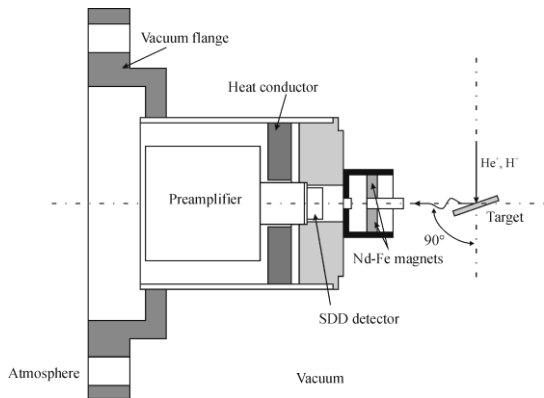


Figure 4: Vacuum flange of Sokol-3 experimental chamber with holder for SDD of Amptec X-123 spectrometer. Holder contains

III. IMPLEMENTATION SCHEME OF TXRF AT ION BEAM EXCITATION (TXRF-PE)

Analysis of material element composition by PIXE method is the effective diagnostical procedure but it has specific feature. Ion beam excites a characteristic fluorescence in surface material layer with thickness corresponding to ion track

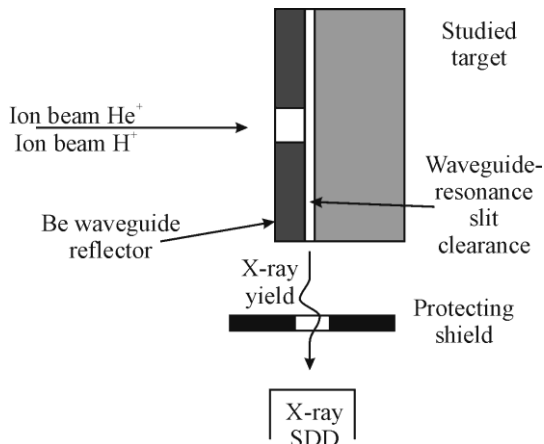


Figure 5: Scheme of TXRF-PE method realization in conditions of application of planar waveguide-resonator with specific design.

length in the material. But the characteristic fluorescence yield intensity registered by X-ray detector will be defined by own mass absorption coefficient. In the result, every X-ray line will correlate to element concentration (without taking into account matrix effects) in the material surface layer with thickness defined by its energy. This effect hampers the quantitative element concentration analysis executing by PIXE method. Neutralization of the matrix effect is very difficult problem. At the same time, the dependence of thickness fluorescence yield can be suppression by application of specific registration scheme including the planar X-ray waveguide-resonator (PXWR) [6]. Figure 5 presents this scheme. High energy ion beam falls on the target through a hole in the Be plate (polished reflection). Distance between target and Be plate surfaces is defined by thickness of Ti strips deposited on Be plate surface $t=1500$ nm. Be and target surfaces create the waveguide-resonance slit clearance. Ion beam excites X-ray fluorescence yield in wide angular range. At the same time, the waveguide-resonance slit clearance can allow to propagate the fluorescence radiation, which hits into the clearance under angles of total external reflection. Flux of this radiation will correspond to thin surface layer with thickness 3-5 nanometers as similar as in conditions of standard TXRF method. But owing to ion beam excitation of the characteristic fluorescence the XRF spectrum registered by detector will be contain high intensity

lines of light elements. So, it is possible to say that we suggest new effective procedure for effective light element diagnostics in the thin surface target layer.

IV. EXPERIMENTAL RESULTS

For the experimental study the multielemental target was chosen. Its composition was defined by method of Rutherford backscattering of H^+ ion beam. Figure 6 presents RBS spectrum of the target. It contained set of light elements ($Na_2Zr_{1.3}Si_{1.9}Al_{0.1}P_1O_{12}C_2$).

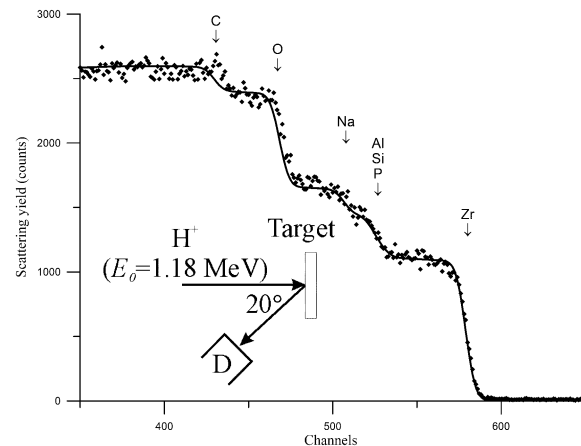


Figure 6: Theoretical and experimental spectra RBS H^+ ions ($E_0=1.18$ MeV) for $Na_3Zr_{1.3}Si_{1.9}Al_{0.1}P_1O_{12}C_2$ target collected for scattering angle 160° . Arrows show energy corresponding to scattering on the surface. Energy step 1.9 keV/channel.

At the same time, the accurate spectrum approximation is not possible without information about relationship among Al, Si and P atomic concentration in the target structure. Similar information can be obtained by application of TXRF-PE. Spectrum of X-ray fluorescence yield in conditions of ion beam excitation and planar waveguide-resonator application is presented on Figure 7. The spectrum demonstrates $NaK\alpha$, $AlK\alpha$ and $SiK\alpha$ beautiful lines, $PK\alpha$ and $ZrL\alpha$ intensive doublet and $OK\alpha$ small line. X-ray detector is equipped by Be window with thickness $8\ \mu m$. The window does not allow to see carbon line. Quality data about $AlK\alpha$, $SiK\alpha$ and $PK\alpha$ peaks intensity obtaining on base of the spectrum allows to get the quantity element composition of the target from the RBS spectrum. TXRF-PE spectrum describes element composition of thin surface layer of the target with thickness near 5 nm. But it carries influence of matrix effects and lines intensities can not use directly for quantitative evaluation of the material element concentration [7].

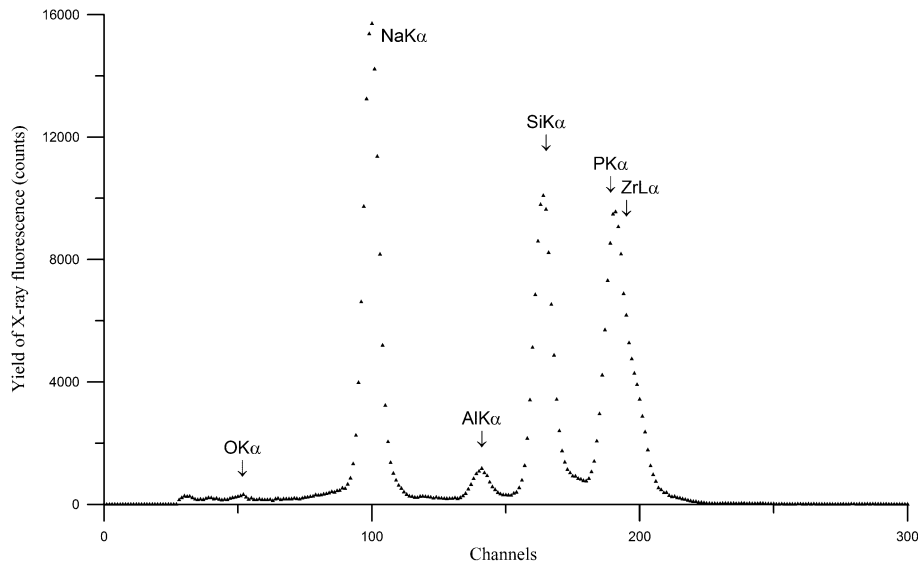


Figure 7: TXRF-PE spectrum of $\text{Na}_3\text{Zr}_{1.3}\text{Si}_{1.9}\text{Al}_{0.1}\text{P}_1\text{O}_{12}\text{C}_2$ collected at H^+ ($E_0=1.18$ MeV) ion beam excitation in conditions of PXWR with slit clearance $0.15\text{ }\mu\text{m}$ application. Energy step 10.2 eV .

V. CONCLUSION

The work presents short description of TXRF-PE experimental method for material element diagnostics with PXWR use and first experimental data obtained by its application. PXWR including into X-ray optical scheme of TXRF-PE spectrometer does not remove matrix effects but

increases fluorescence yield featured to thin surface layer of studied material.

ACKNOWLEDGEMENTS

This work was partially supported by Russian Foundation for Basic Research (project #13-07-00782 and #15-08-02618).

- [1] R. Klockenkamper, Total reflection X-ray fluorescence analysis, 2nd Edition, Wiley, New York (2014) 528 p.
- [2] Handbook of X-ray spectrometry, 2nd Edition / Eds. By R. Van Grieken, A.A. Markowicz, Dekker, New York (2002) 817 p.
- [3] S.A.E. Johanson, J.L. Campbell, K.G. Malquist, Particle induced X-ray emission spectrometry (PIXE), Wiley, New York (1995) 451 p.
- [4] T.A. Cahill, Annu. Rev. Nucl. Part. Sci. **30**, 751 (1980).
- [5] V.K. Egorov, E.V. Egorov, M.S. Afanas'ev, Surface Investigations, X-ray, Synch, Neutr. Techniques. **7(4)**, 640 (2013).
- [6] V.K. Egorov, E.V. Egorov, Trends in App. Spectr. **8**, 67 (2010).
- [7] X-ray spectrometry: recent technological advances / Eds. by K. Tsuji, J. Injuk, R. Van Grieken, Wiley, Chichester (2004) 603 p.

Some Review for Identification of Air Pollution Sources of Ulaanbaatar City Using ED-XRF Analysis

D. Shagjjamba¹, S. Lodoysamba², G. Gerelmaa¹, P. Zuzaan¹

¹Nuclear Research Center, National University of Mongolia, Ulaanbaatar, Mongolia

²School of Applied Science and Engineering of the National University of Mongolia, Ulaanbaatar, Mongolia.

The conventional XRF analysis is wide used and suitable analytical method for various fields, especially environmental studies. Air pollution associated with atmospheric particulate matter (PM) is a serious problem in Ulaanbaatar city, the capital of Mongolia. According to World Bank estimation Ulaanbaatar is one of most polluted city. In this paper, we have done XRF analysis on Air Particulate Matters for determining to identification sources and its contributions which was the first time in Mongolia. Main pollution sources for PM_{2.5} particles of Ulaanbaatar by the result of XRF analysis are soil, combustion and vehicles.

Уламжлалт Рентген-флюоресценцийн шинжилгээ нь төрөл бүрийн салбарт ялангуяа хүрээлэн байгаа орчны судалгаанд өргөн хэрэглэгддэг, тохиромжтой аналитик арга юм. Атмосферийн тоосонцороос (PM) үүдэлтэй агаарын бохирдол бол Монгол улсын нийслэл Улаанбаатар хотын хувьд онцгой асуудал юм. Дэлхийн банкны үнэлгээгээр Улаанбаатар нь дэлхийн хамгийн их бохирдолтой хотын нэг болж байна. Агаарын тоосонцорт хийсэн Рентген-флюоресценцийн шинжилгээний дүнг бохирдлын үүсгүүрүүдийг тогтоож тэдний хувь хэмжээг тодорхойлох Монголд анх удаа хийгдэж буй ажлыг бидний энэхүү өгүүлэлд тусгав. Рентген-флюоресценцийн шинжилгээний дүнгээр хөрс, түлшний шаталт болон тээврийн хэрэгслэл нь Улаанбаатарын PM_{2.5} тоосонцрын үндсэн үүсгүүрүүд болж байна.

PACS numbers: 78.70.En

I. INTRODUCTION

The conventional XRF analysis is wide used and suitable analytical method for various fields, especially environmental studies. In this paper, we have done XRF analysis on Air Particulate Matters for determining to identification sources and its contributions which was the first time in Mongolia. Air pollution associated with atmospheric particulate matter (PM) is a serious problem in Ulaanbaatar city, the capital of Mongolia. According to World Bank estimation [2], Ulaanbaatar is one of most polluted city and 90 percent of PM_{2.5} pollution has anthropogenic origin [3]. In this paper presenting the PM_{2.5} pollution source identification based on ED-XRF elemental analysis and study carried out at Nuclear Research Center (NRC) National University of Mongolia (NUM). The five main factors were identified using dataset of contents of 18 elements determined by XRF analysis.

II. EXPERIMENTAL

GENT sampler was used to collect sample of PM in the air, where particles are collected on two filters in series, the top filter (Nuclepore filter, pore size 8 μm) collects the coarse (PM_{10-2.5}) particle fraction and the bottom one (Nuclepore filter, pore size 0.4 μm) collects the fine (PM_{2.5}) particle fraction. The samples were collected for 24 hours,

but in some days particularly in the winter it was not possible to collect the sample over the entire 24 hours because the high particulate matter concentrations lead to filter clogging. Thus, the sampler was operated alternating time on and time off (e.g., 1 h on followed by 1 h off) over the course of the 24 hours period to provide a representative sample for that day. PM_{2.5} and PM_{10-2.5} samples were collected on two day in a week (Monday and Thursday) from 2009 to 2014 at the National University of Mongolia air quality monitoring site 4 kilometers east of the center of Ulaanbaatar (latitude 47° 55', longitude 106° 55', 1300 m above sea level). Samples were analyzed by the SPECTRO XEPOS ED-XRF Analytical Instruments GmbH (Germany) equipped with a Pd anode X-ray tube operated at maximal values of 50 kV and 2 mA, the target changer with up to 8 polarization and secondary targets, Si-Drift Detector (SDD) spectral resolution (FWHM) at Mn Ka $\leq$ 150 eV with Peltier cooling and automatic system for changing samples. Software package for quantitative and qualitative analysis was used X-LabPro.

Minimum Detection Limit (MDL) has been calculated as following formula and results were shown in Table 1.

$$LOD = \frac{3 * \sqrt{Background * C_i}}{N_i}$$

Where, C_i is concentration of sample (near.LOD),
 N_i is net pulse count.

Table 1. Minimum Detection Limits for elemental concentration of both $PM_{2.5}$ and $PM_{10-2.5}$ sample

Elements	$PM_{2.5}$, ng/ m ³	$PM_{10-2.5}$, ng/ m ³
Na	497.0	260.0
Mg	290.1	138.9
Al	26.4	50.1
Si	4.0	14.7
P	32.8	27.8
S	5.5	6.0
Cl	7.9	6.9
K	106.5	38.5
Ca	6.2	16.0
Ti	75.5	5.2
V	5.0	1.1
Cr	5.1	19.2
Mn	1.5	63.3
Fe	5.8	10.7
Co	17.1	5.0
Ni	1.9	1.1
Cu	3.6	0.5
Zn	6.5	4.2
Br	5.0	5.0
Pb	9.5	4.7
BC	719.6	401.3
As	2.0	0.6
Ta	91.0	11.5

MDL for the SPECTRO XEPOSED-XRF spectrometer were experimentally found using results of elemental analysis.

Black carbon (BC) concentrations on filters were determined by light reflection using a M43D Digital Smoke Stain Reflectometer. For atmospheric

particles, BC is the most highly absorbing component in the visible light spectrum and with small absorption coming from soils, sulfates and nitrate [7,8]. Hence, to the first order it is assumed for the purposes of this study that all the absorption by particles on filters is due to BC. Output from elemental analysis, Factorization method (PMF), identifies a number of “factors” which are defined by their specific and separate element composition, or profile. From this elemental profile, it is often possible to allocate the “factor” to a certain pollution source, based upon knowledge of tracer elements or the elemental composition of the emissions from the source type.

III. RESULTS AND DISCUSSION

Identification of pollution sources and its apportionment was done at the NRC, NUM. A total of 391 pairs of $PM_{2.5}$ and $PM_{10-2.5}$ samples were collected and analyzed. More than 20 elements contents from Na to U such as Na, Mg, Al, Si, P, S, Cl, K, Ca, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Ni, Cu, Zn, Rb, Sr, Mo, Pb, Th and U were determined in the air particulate samples by the ED-XRF analyses. Analyses of the fine samples are almost the same contents of elements except V and Cr was not identified in the fine particles. In the Table 2 statistical average maximum, minimum, and median contents of elements of 391 $PM_{2.5}$ samples were shown.

Elemental analysis of the air filters were based on the use of MICROMATTER-XRF Calibration Standards. However contents of Th and U are not verified due to unavailability of standards. Higher contents of those elements into the air samples are fitting with results of other studies as high content of U in the soil surrounded Ulaanbaatar area [1], and higher specific activity of Uranium was noted in the studies of coal and coal ash used for Thermal Power Plants and households of Ulaanbaatar city by Gamma-spectrometry measurements [6].

Soil elements as Al, Si, Ca, Ti and Fe are main contribution of both fine and coarse particles samples. For the coarse particles are main contributions of the soil. But for fine particles, main component is Volatile Organic

Table 2. Results of XRF analysis for $PM_{2.5}$ samples and summary statistics at the site NRC of NUM. (ng/m³). 2009-2014

Species	Average	Max	Min	Median	StdDev	Cnts.
$PM_{2.5}$	79399	699654	2721	58730	71065	389
BC	5957	30503	1003	3827	5067	391
Na	2079	8481	111	1656	1437	391
Mg	930	4794	221	819	580	386

Al	270	2051	27	205	224	391
Si	656	5582	30	502	575	391
P	278	3196	87	191	220	391
S	2908	23801	46	1071	3850	391
Cl	218	1454	30	179	171	391
K	402	3294	30	322	308	391
Ca	717	6886	28	567	622	391
Ti	166	1622	50	140	113	391
Mn	63	589	11	52	42	391
Fe	538	4748	71	435	421	391
Ni	44	367	6	36	34	344
Cu	14	133	5	10	14	296
Zn	46	281	8	33	37	391
Pb	46	558	11	34	54	147

Components but cannot be determined by XRF. Those elements Al, Si, Ca, Ti and Fe not exactly can be soil origin but it can be anthropogenic origin for the PM_{2.5}. Elements V, Cr in the coarse particles can be considered as origin of soil. Content of Na is roughly 3 times high in the coarse particles compared with content of fine particles and it does not depend on the season. Existence of Ni, Cu, Zn, Pb in all samples was observed and presence of Ni, Cu, Zn into most of samples. Those are mainly origin of vehicles engine, breaks, and tires but they could be from the soil and from waste combustion also.

Receptor modeling is used for identification of pollution sources, at the receptor site and apportionment of the pollution sources was used Positive Matrix Factorization (PMF). PMF analysis is carried out using the PMF2 program [4,5]. The main five factors were identified in the result of dataset of contents of 18 elements determined by XRF analysis. Following pollution sources were identified by the each factor profiles Figure 1. In the Table 3 shows mass contributions of pollution sources of PM_{2.5}.

Table 3. Contributions of sources identified by PMF to mass of fine and coarse aerosol particles (%).

	Sources	PM _{2.5}	
		Mass	error
1	Soil-2	6.52	2.17
2	Soil-1	28.44	3.87
3	Combustion-1	22.71	2.30
4	Combustion-2	32.33	5.72
5	Vehicles	10.01	2.60

Soil-2(factor1): This factor is fugitive dust increasing in last years but is probably more construction and waste origin as it has higher content of Al, Si and Al/Si ratio is not typical as soil. The Al/Si ratio was obtained 0.64.

Soil-1(factor2): This factor contains key elements of Al, Si, Ca, Ti and Fe commonly associated with natural mineral soil fugitive dust of surrounding of the city. It increases spring and autumn and has low concentration in summer and winter. Summer soil has more moisture and covered by grasses resulting less fugitive dust and winter less fugitive dust because of snow cover. The Al/Si ratio was obtained as 0.32.

Combustion: Factor 3 and Factor 4 are combustion origin increasing in winter and have different profiles, namely, combustion -1(Factor-3) has much BC and some soil elements, that volatiles from the short chimney are condensed on the particles from the soil. Combustion-2(Factor-4) is mainly from the high temperature combustion, high content of Sulfur and also low content of soil elements.

Vehicle (Factor 5): This is from auto vehicles, has more BC and trace elements as Cu, Ni, Fe, Zn associated with vehicle combustion, breaks and fugitive dust by vehicles.

This is made by only XRF analysis and it should note that pollution source apportionment result can be different as we do not analyze Volatile organic components and ions.

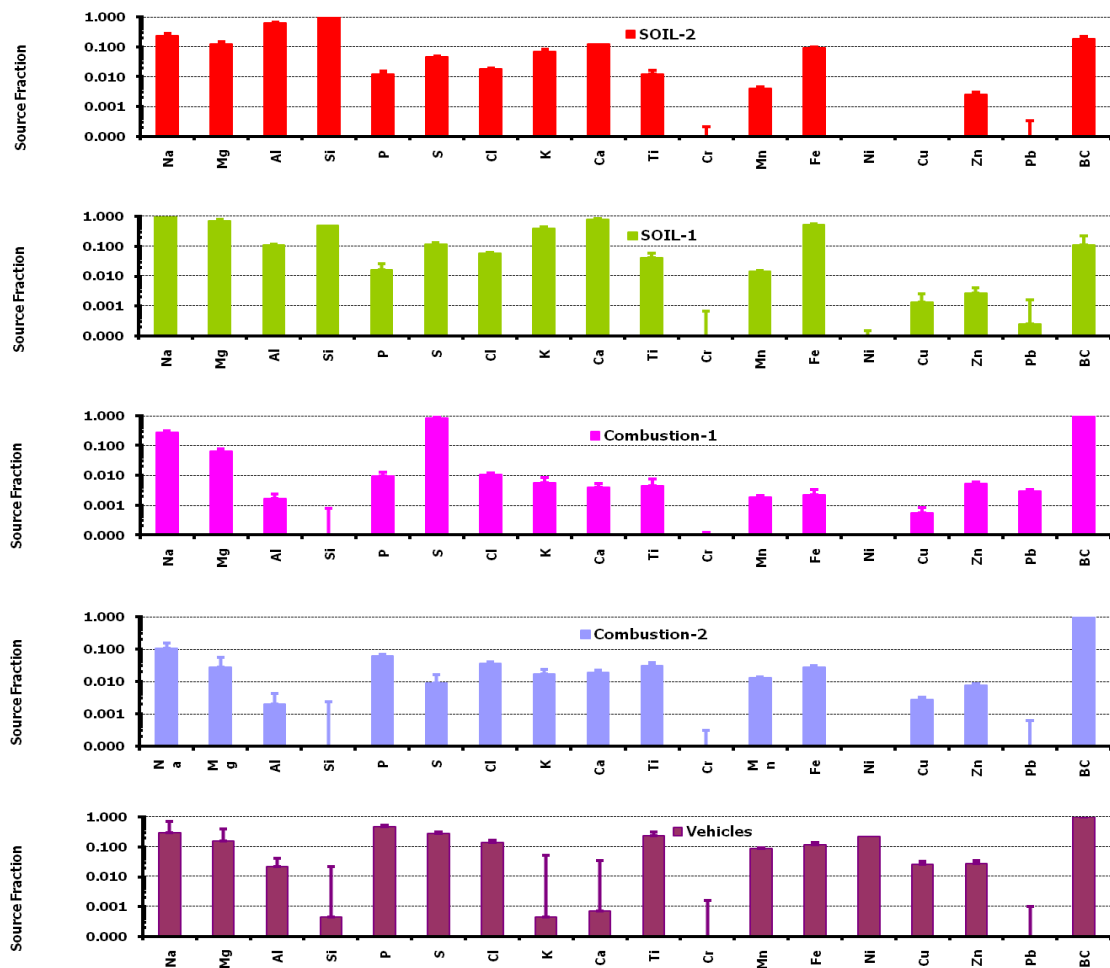


Figure 1: Factor profiles for the resolved factors of fine fraction by PMF

IV. CONCLUSIONS

Main pollution sources for PM_{2.5} particles of Ulaanbaatar by the result of XRF analysis are soil, combustion and vehicles. But detailed pollution source apportionment of Ulaanbaatar city should be combined with organics, ion and other analysis, rather than XRF analysis only.

ACKNOWLEDGEMENT

Authors wish to acknowledge National Science and Technology Fund of Mongolia for financial support.

- [1] Markwitz A., B. Barry, D. Shagjjamba. PIXE Analysis of Sand and Soil from Ulaanbaatar and Karakurum, Mongolia. Nucl.Inst. and Meth. in Phys.(B) Vol.266. Issue18, Sep. 2008 pp. 4010-4019 (2008)
- [2] Air Quality Analysis of Ulaanbaatar: Improving Air Quality to Reduce Health Impact. Sustainable Development Series, Discussion Paper, East Asia and Pacific Region, World Bank, December 2011. Ulaanbaatar, Mongolia.
- [3] Sarath K. Guttikunda, Sereeter Lodoysamba, Baldorj Bulgansaikhan, Batdorj Dashdondog, Particulate air pollution in Ulaanbaatar, Mongolia, Air Quality, Atmosphere and Health, May 2013, DOI 10.1007/s11869-013-0198-7
- [4] Paatero P., Users Guide for Positive Matrix Factorization programs EPA PMF2 and EPA PMF3, Parts 1 and 2 2003
- [5] David Cohen. PMF2-DOS Instructions for Fine Particle Analysis ANSTO, NSW, 2230, Australia. (2012)
- [6] M. Altangerel, N. Norov, D. Altangerel. "Study of Natural Radioactivity in Coal Samples of Baganuur Coal Mine", Nuclear physics and applications. American Institute of Physics, AIP CONFERENCE PROCEEDING, VOLUME 1109, New York, Melville, 2009, pp.135-139.

- [7] Horvath, H. (1993). "Atmospheric Light Absorption - A Review." *Atmos. Environ.*, 27A: 293-317.
- [8] Horvath, H. (1997). "Experimental calibration for aerosol light absorption measurements using the integrating plate method - Summary of the data." *Aerosol Science* 28: 2885-2887.

X-Ray Fluorescence Analysis as a Tool of Monitoring Soil Pollution Around The Central Geological Laboratory

Ts. Dagii*, B. Davaasuren, N. Baljinnyam, Ts. Nadmid

Central Geological Laboratory of Mongolia

Heavy metal contamination of soil is a major concern from an ecological point of view. This study aims to characterize soil samples from different sites in the Central Geological Laboratory (CGL)'s area and to study heavy metal contamination in the environment. In this work Wavelength dispersive X-ray fluorescence spectrometry has been used to evaluate the heavy metals and some toxic elements pollution in the CGL area.

PACS numbers: 78.70.En.

I. INTRODUCTION

Increasing human activities provide negative effects on the prevailing environment. Heavy metal contamination is considered as one of these negative effects.

Heavy metals have been associated with the contamination and potential toxicity, receive increasing attention due to the better understanding of their toxicological importance in ecosystems and human health.

An understanding of heavy metal sources, their accumulation in the soil and the effect of their presence in soil seem to be particularly important issues of present day research on risk assessments [1]. Elevated concentrations of heavy metals are universal in urban environments as result of a range of anthropogenic activities including industrial, agricultural, residential, and traffic-related emissions [2].

Monitoring of the soil elemental concentrations in the CGL area is important for reporting pollution inventory and importantly assessing health risk to population.

The objective of this study is to determine the concentrations of a wide range of elements including heavy metals and trace elements at the selected sites with the possible sources of the pollutants and to compare with the elemental distributions in the earth upper crust [4] and other literature values.

We have determined concentration of 44 elements including heavy metals and some toxic elements as uranium and thorium. The soil samples were collected at different depths from 20 to 40 cm deep in order to define the possibility of heavy metal migration from the waste cell into the deeper layers.

We used WDXRF spectrometry model of Axios and AxiosMAX. The Axios and AxiosMAX incorporates the SST-MAX X-ray tube, a unique

industry innovation that virtually eliminates instrument drift due to the X-ray source. That spectrometer has five diffraction crystals and three types of detector configuration. WDXRF allowed for elemental analysis from Sodium(Na) to Uranium(U) in wide range of concentration. Capable of analyzing elements from beryllium to uranium, at ppm to wt % levels, with excellent precision, the Axios and AxiosMAX can handle the toughest job.

The WDXRF analyzer uses a X-ray source to excite a sample. X-rays that have wavelengths that are characteristic to the elements within the sample are emitted and they along with scattered source X-rays go in all directions. A crystal or other diffraction device is placed in the way of the X-rays coming off the sample. A X-ray detector is position where it can detector the x-rays that are diffracted and scattered off the crystal. Depending on the spacing between the atoms of the crystal lattice (diffractive device) and its angle in relation to the sample and detector, specific wavelengths directed at the detector can be controlled. The angle can be changed in order to measure elements sequentially, or multiple crystals and detectors may be arrayed around a sample for simultaneous analysis.

II. EXPERIMENTAL

A. Sampling

Sampling points of this study lie within the CGL area (chosen from CGL's Southwest, Southeast, Near Radioactive material laboratory (RML), Underground waste container (UWC) sectors) and other two points were chosen far from the site (Bayanhoshuu-, Zuun ail-). Sampling was carried out in April 2013 and 2015, when a daily ambient mean temperature was around 15°C. Ten surface soils were taken from a depth 0-20 cm and four subsurface samples were collected at a depth of 20-40 cm.

*Electronic address: Dagii@cengeolab.com

Year	The number of samples	
	Surface	Subsurface
2013	4	0
2015	6	4

Sample preparation in accordance with Mongolian standards MNS 3298:1991. Each sample was mixture of subsamples collected from 5 holes, which are located in 1 square meter area as shown in the figure 1.



Figure 1

B. Analysis

WDXRF analysis main part is sample preparation and samples measuring. WDXRF analysis sample preparation is 4 steps.

1. Sample grinding: Using jaw crusher and standard ring mill. As a result of the sample can be $<0.075\text{mm}$.
2. Sample drying: Using SANYO drying oven, The time is 90 minutes at 1050°C .
3. Ignition: Calculation of the loss on ignition (L.O.I) and preliminary oxidation of the samples.
4. Preparation glass beads: Using automatic phoenix fusion machine to incinerated samples(1g sample with 5g flux) convert to glass beads. Melting temperature is 11000°C and total converting time is 16 minutes.

Samples were measured by Axios and AxiosMAX spectrometry by 45min and 25minutes.

III. RESULTS

Concentration of 44 macro and micro elements and compounds, including heavy metals and some toxic elements were determined in soil samples. That following 14 elements were determined by concentration of which were above the detection limits: As, Ba, Co, Cr, Cu, Ga, Ni, Pb, Rb, Sr, V, Y, Zr, Zn. The following elements were not determined that were below the detection limits: Cs, Hf, Mo, Nb, Sc, Sn, Ta, W, U, Th.

The concentrations of heavy metals in soils from different sites in area the Central geological

laboratory(CGL) in 2013 are presented in Table 1, The concentrations of heavy metals in soils from different sites in area the Central geological laboratory and far from CGL in 2015 are presented in Table 2 in comparison to the Upper Continental Crust values [3] and Maximum Permissible Concentrations (MPC) for Mongolia of the heavy metals in soil.

TABLE 1. Concentration of some heavy metal in soils in 2013 $\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}$

Elements	Earth upper crust	MPC for Mongolia	Concentration $\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}$			
			South	South	RML	UWC
As	5	6	15	14	30	11
Cr	69	150	114	54	71	80
Co	17	50	16	11	9	<5
Cu	-	100	30	8	66	10
Ni	55	150	19	13	16	6
Zn	67	300	161	72	143	47
Sr	350	800	320	288	322	298
Zr	170	-	189	222	190	210
Ba	570	-	659	603	709	717
Pb	-	100	62	26	36	20
V	140	150	69	55	57	45
Ga	175		17	18	16	16
Rb	110		91	98	91	98
Y	21		24	25	22	16

TABLE 2. Concentration of some toxic and heavy metal in soils in 2015 $\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}$

Elements	Earth upper crust	MPC for Mongolia	Concentration $\text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}$					
			South west	South east	RML	UWC	Zuun ail	Bayan hoshuu
As	5.0	6	11	8	16	12	9	17
Cr	69	150	95	68	69	75	45	63
Co	17	50	<5	9	8	8	<5	13
Cu	-	100	22	21	43	58	37	26
Ni	55	150	43	25	33	36	14	21
Zn	67	300	104	97	194	101	85	74
Sr	350	800	300	257	292	291	310	495
Zr	170	-	329	185	208	202	170	187
Ba	570	-	657	639	650	663	646	524
Pb	-	100	25	29	35	42	144	8
V	140	150	63	51	57	63	60	76
Ga	175		15	12	18	15	13	13
Rb	110		95	105	96	101	93	67
Y	21		22	18	18	18	17	24

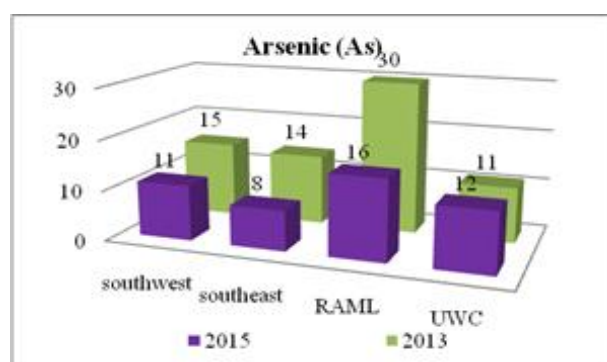
The observed concentrations of all heavy metals lie within the limiting values of world natural soil value which is in agreement with the report by [4]. Only the highest values of arsenic are observed in all samples. The lowest and highest concentrations

of As are 8.0 and 30 mg kg⁻¹ respectively. The collected the samples outside of system of the ventilator has a remarkably high concentration of As due to the availability of the tail of chemical in soil, the artificial pollution sources originated from anthropogenic activities. Comparison of the As results in 2013 and 2015 are presented in graphic 1.

From the data processing, As concentration is higher than the accepted value. To determine if it's really caused by laboratory environment, I compare the other scientist result [5] with heavy metals and some toxic elements concentration of Ulaanbaatar city used by XRF analysis. Concentration of As in soils are presented Table 3

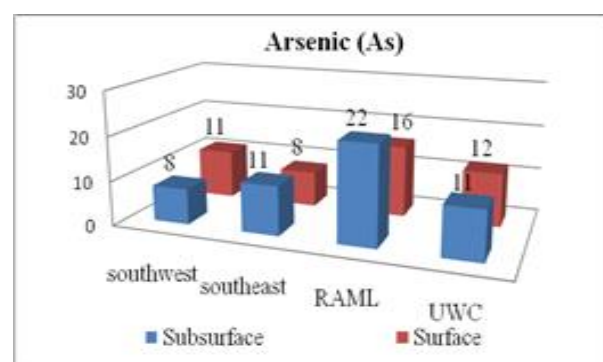
TABLE 3. Concentration of As in soils

Depth of sample	Concentration of As, mg·kg ⁻¹							
	CGL sites				Other sites in UB[5]			
Surface	11	8	16	12	11.1	9.99	9.36	11
Subsurface	8	11	17	11	11.4	13.5	15	11.7



Graphic 1: Comparison of the As results in 2013 and 2015

The concentrations of heavy metals in surface and subsurface soils from different sites in area the Central geological laboratory (CGL) in 2015 are presented in Table 4.



Graphic 2: Comparison of As results in Surface and Subsurface soil

Comparison of As results in Surface and Subsurface soils are presented Graphic 2.

TABLE 4. Comparison of results in Surface and Subsurface soil

Elements	Earth upper crust	MPC for Mongolia	Concentration mg·kg ⁻¹							
			Southwest		Southeast		RML		UWC	
As	5.0	6	11	8	8	11	16	17	12	11
Cr	69	150	95	45	68	49	69	63	75	70
Co	17	50	<5	<5	9	7	8	13	8	<5
Cu	-	100	22	24	21	22	43	26	58	34
Ni	55	150	43	16	25	17	33	21	36	19
Zn	67	300	104	80	97	109	194	74	101	84
Sr	350	800	300	318	257	289	292	495	291	304
Zr	170	-	329	198	185	175	208	215	202	221
Ba	570	-	657	645	639	594	650	621	663	633
Pb	-	100	25	24	29	20	35	8	42	27
V	140	150	63	46	51	48	57	76	63	64
Ga	17.5	-	15	15	12	13	18	16	15	17
Rb	110	-	95	94	105	103	96	95	101	97
Y	21	-	22	20	18	17	18	24	18	22

IV. CONCLUSION

1. Results of multi-elemental analysis of soil samples show that it is a valuable tool for monitoring the environmental quality and ecosystem of the CGL in accordance with environmental regulations.

2. The observed concentrations of all heavy metals lie within the limiting values of world natural soil. Only the highest values of arsenic are observed in all samples. The lowest and highest concentrations of As are 8.0 mg kg^{-1} and 30 mg kg^{-1} respectively.

3. The highest concentration of As was 30 mg kg^{-1} from RAML site in 2013. There are two reasons which related to the high concentration of As.

First reason is sample location. The collected the samples outside of system of the ventilator has a remarkably high concentration of As due to the availability of the tail of chemical in soil, the artificial pollution sources originated from anthropogenic activities.

Second, Number of the testing mineral in 2013 was more than in 2015.

4. It is required to increase frequency of sampling and number of samples in order to improve the evaluation of soil pollution.

5. In future, it is necessary to compare soils contamination between another industrial area and countryside (soil unaffected by human activities) to make comprehensive research.

-
- | | |
|--|--|
| <p>[1] R. K. Sharma, M. Agrawal and F. M. Marshall, "Effects of Waste Water Irrigation on Heavy Metal Accumulation in Soil and Plants," Paper presented at a National Seminar, Bangalore University, Bangalore, (2004), No. 7, p. 8.</p> <p>[2] Thornton, I. Soil contamination in urban areas. <i>Global and Planetary Change</i>, (1990), Vol. 82:121–40.</p> <p>[3] Condie K.C. Chemical composition and evolution of the upper continental crust: contrasting results from surface samples and shale's, <i>Chem, Geol.</i> (1993), Vol .0-4, P1.</p> | <p>[4] Alloway, B. J., 1994. <i>Heavy Metals in Soils</i>. 2nd Edn., Springer, New York (1994).</p> <p>[5] Tserenpil, Sh., Maslov, O.D., Norov, N., Liu, C-Q., Fillipov, M.F., Theng, B.K.G., Belov, A.G. (2013). Chemical and mineralogical composition of the Mongolian rural soils and their uranium sorption behavior. <i>Journal of Environmental Radioactivity</i>, 118 (2013) 105-1</p> |
|--|--|

Цөмийн Аналитик Аргаар Туул Гол Орчмын Хөрс, Лаг Шаврын Дээжид Хүнд, Хортой Элемент Тодорхойлсон нь

Г. Дамдинсүрэн*, П. Зузаан, Д. Болортуяа, Н. Отгонпүрэв, О. Сүх

Монгол Улсын Их Сургууль, Цөмийн Физикийн Судалгааны Төв

Улаанбаатар хотын дундуур урсах Туул голын хүнд, хортой элементийн бохирдыг судлахын тулд голын дагуух Баянзүрхийн, Туулын /Зайсан/, Яармагийн, Сонсголонгийн, Биокомбинатын гүүрнүүдийн орчмоос голын лаг шавар, эрэг орчмын хөрсний дээж цуглуулж, тэдгээрт рентген-флуоресценцийн, нейтрон болон гамма идэвхжилийн шинжилгээний аргаар 29 элементийн агуулга тодорхойлж, Монгол улсын стандартын зөвшөөрөгдөх утгатай харьцуулан үзүүлэв.

PACS numbers: 78.70.En, 61.05.fm

I. ОРШИЛ

Сүүлийн жилүүдэд дэлхийн цэвэр усны нөөц хомсдож, ялангуяа томоохон хот суурин газрын ойролцоо орших гол мөрөн ихээхэн бохирдох болсон нь байгаль орчин, хүмүүсийн эрүүл мэндэд сөргөөр нөлөөлөх болсон. Манай улсын хувьд хүн амын дийлэнх хэсэг оршин суудаг Улаанбаатар хотын дундуур урсах Туул голын бохирдол нь сүүлийн жилүүдэд хурдацтай нэмэгдэж байгаа нь ихээхэн санаа зовоосон асуудал юм. Энэ нь нэг талаараа Улаанбаатар хотын хүн амын нягтаршил, үйлдвэржилттэй шууд холбоотой боловч Нийслэл хотын төв цэвэрлэх байгууламжын үйл ажиллагаа гол бохирдуулагч эх үүсвэр болоод байна.

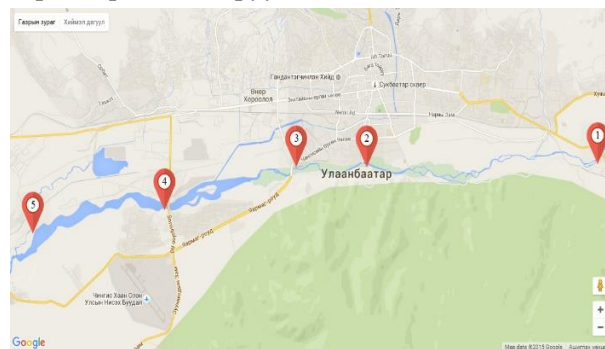
Гол мөрөн, далай тэнгэсийн усны бохирдлыг тодорхойлох нэг арга бол түүний лагийн дээжид элементийн шинжилгээ хийх, мөн усанд шинжилгээ хийх аргууд байдаг. Ялангуяа урсгал усны хувьд усанд хэмжилт хийх арга нь олон удаагийн давталт болон улирлын чанартай үечилсэн хэмжилтээр тодорхойлж бүрэн үр дүн гарах боломжтой байдаг. Харин лаг шавар нь тухайн голын бохирдлын мэдээллийг бүрэн хадгалах боломжтойгоос гадна олон жилийн мэдээллийг агуулсан байдаг.

Бид Туул голын лаг шавар, голын орчмын хөрсний дээжийг рентген-флуоресценцийн шинжилгээ болон нейтрон идэвхжилийн шинжилгээний аргыг хослуулан судлаж, хортой хүнд элемент болон дагалдах элементийн агуулгыг тодорхойлж, тухайн элементийн зөвшөөрөгдөх хэмжээтэй харьцуулан судлах зорилго тавьсан.

II. СУДАЛГААНЫ АРГА ЗҮЙ, ТҮРШИЛТ

Судалгааны дээжийг Туул голын дагуух гүүрний ойролцоо цэгүүдээс сонгож, голын лаг болон хөрсний дээжийг сонгосон цэг бүрээс тус тус 1кг орчим жинтэй авсан. Судалгааны дээжүүдийг 65мм ширхэглэгтэй болтол

бутлан тээрэмдэж, стандарт дээжүүдтэй адил нэгэн төрөл болгон хэмжилтэнд бэлтгэв. 1-р зурагт дээж авсан цэгүүд, 1-р хүснэгтэд дээжийн нэр, байршилыг харуулав.



Зураг 1: Туул голын лаг, хөрсний дээж авсан цэгийн байршил

Хүснэгт 1. Дээж авсан цэгүүдийн байршил, дээжийн дугаар

Д/д	Дээжийн нэр	Байршил	Тайлбар
1	Хөрс-1, Лаг-1	47°53'27.00"N 107° 3'41.00"E	Баянзүрхийн товчоо гүүр
2	Хөрс-2, Лаг-2	47°53'16.00"N 106° 55'17.00"E	Туулын гүүр /Зайсан/
3	Хөрс-3, Лаг-3	47°53'18.00"N 106° 51'54.00"E	Яармагийн гүүр
4	Хөрс-4, Лаг-4	47°52'25.00"N 106° 46'56.00"E	Сонсголонгийн гүүр
5	Хөрс-5, Лаг-5	47°50'60.00"N 106° 40'45.00"E	Биокомбинатын гүүр

А. Рентген флуоресценцийн арга

Энэхүү судалгаанд МУИС-ийн Цөмийн физикийн судалгааны төвийн өндөр мэдрэх чадвартай, энергиэр ялгах SPECTRO XEPUS рентген-флуоресценцийн спектрометрийг ашигласан. Төхөөрөмж нь цахилгаан хөргөлттэй бөгөөд Pd анодтой рентген хоолой, 8 ширхэг хоёрдогч болон туйлшруулагч бай, Mn K_α шугамын хувьд 155В-ийн энергийн ялгах чадвартай SDD хагас дамжуулагч детектор, спектрийг тооцоолж үр дүнг боловсруулах

*Electronic address: g.damdinsuren@num.edu.mn

програм хангамж бүхий компьютер зэргээс бүрддэг.

Судлах болон стандарт (ССК-1, ССК-2, Soil-5, СГ-2) дээжүүдийг 32 мм голчтой майлар ёроолтой полимер саванд жигд дарж нягтруулан хэмжилтэд бэлтгэсэн. Хэмжилтийн хугацаа 300 секунд. Спектрийг SPECTRO XEPOS спектрометрийн X-LabPro болон рентген спектр боловсруулалтын ерөнхий программ AXIL, тооцооны MS Excel зэрэг программуудыг ашиглан боловсруулалт хийж, гадаад стандартын аргаар [1] үр дүнг тооцоолж гаргав.

В. Идэвхжилийн шинжилгээний арга

Идэвхжилийн шинжилгээний арга нь дээжийг хагас дамжуулагч германи детектор бүхий гамма спектрометр дээр тодорхой хугацаагаар хэмжиж, үүссэн цацраг идэвхт изотопуудын гамма квантын бүрэн шингээлтийн шугамын талбайгаар дээж дэх тухайн элементийг тодорхойлно. Шарсан дээж дэх элементийн тоон хэмжээг ижил нөхцөлд хэмжсэн дээжийн болон стандарт дээжийн масс, гамма шугамын эрчимийг харьцуулах замаар агуулгыг тодорхойлдог.

$$C_{\text{дээж}} = C_{\text{стандарт}} \frac{S_{\text{дээж}} M_{\text{стандарт}}}{S_{\text{стандарт}} M_{\text{дээж}}}$$

$C_{\text{стандарт}}$ – стандарт дээжийн агуулга

$S_{\text{дээж}}$, $S_{\text{стандарт}}$ – стандарт болон дээжийн гамма шугамын эрчим

$M_{\text{стандарт}}$, $M_{\text{дээж}}$ – стандарт болон дээжийн масс.

Туул голын лаг, эрэг орчмын хөрсний дээжид хортой болон дагалдах элемент тодорхойлох туршилтыг Оросын Холбооны Улс (ОХУ)–ын Дубна хот дахь Цөмийн Шинжилгээний Нэгдсэн Институт (ЦШНИ) – ийн микротрон МТ-25 дээр хийж гүйцэтгэв. Электроны энерги 25 МэВ, гүйдэл 14 мкА, дулааны нейтроны урсгалын нягт ~108нейт/см²сек байв. Дулааны нейтроны урсгалаар 4 цаг шарсан дээжийг 5, 30 минут ба 1 цагийн хугацаагаар хэмжилт хийв. Стандарт болон тодорхойлох дээжийн жин 10 грамм. Дулааны нейтроны урсгалын нягтын өөрчлөлтийг 5мкг масстай алтан мониторуудыг ашиглан 2.69 өдрийн хагас задралын үетэй ¹⁹⁷Au(n,γ)¹⁹⁸Au урвалын 411.8(95.5) кэВ энергитэй гамма шугамын тусламжтай тодорхойлсон. Туршилтанд СЧТ-1 хөрсний, мөн IAEA-SL-3 нуурын лаг (Sediment) стандарт дээжүүдийг ашигласан.

III. ҮР ДҮН БА ХЭЛЭЛЦҮҮЛЭГ

Хүснэгт 2. Туул гол орчмын хөрсөнд элементийн шинжилгээ хийсэн дүн, г/т (±15%)

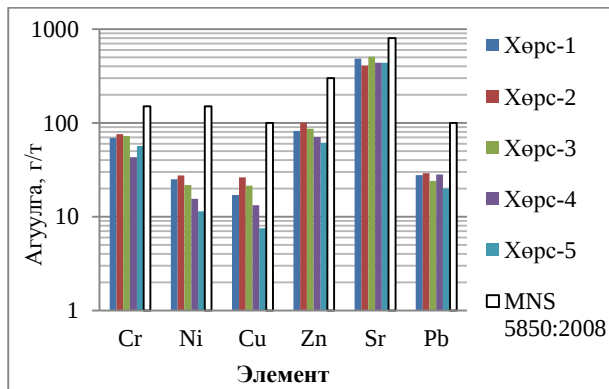
Д/д	Элемент	Хөрс 1	Хөрс 2	Хөрс 3	Хөрс 4	Хөрс 5	Арга зүй
1	Na, %	2.56	2.33	2.47	2.55	2.10	НИА
2	Al	7.66	7.56	7.02	6.85	8.30	РФА
3	Si	28.29	25.52	26.42	27.86	28.41	РФА
4	P	0.16	0.11	0.07	0.08	0.11	РФА
5	S	0.06	0.09	0.08	0.11	0.17	РФА
6	K	2.14	2.31	2.61	2.53	1.99	НИА РФА
7	Ca	1.52	1.29	1.57	1.14	1.07	РФА
8	Ti	0.48	0.47	0.43	0.36	0.44	РФА
9	Fe	2.97	3.18	2.97	2.11	1.89	РФА
10	Sc, г/тн	11	10	9	6	8	НИА
11	Cr	69	76	73	43	57	НИА РФА
12	Mn	724	661	709	430	719	РФА
13	Ni	25	27	22	15	11	РФА
14	Cu	17	26	21	13	7	РФА
15	Zn	82	101	87	71	61	РФА
16	Ga	11	15	18	16	9	НИА
17	Br					8	НИА
18	Rb	119	106	109	117	121	РФА
19	Sr	484	407	509	439	438	РФА
20	Y	40	33	27	14	28	РФА
21	Zr	352	349	293	358	597	РФА
22	Sb	1.0	1.2	1.2	1.0	1.2	НИА
23	Ba	685	626	665	729	825	РФА
24	La	44	34	43	22	22	НИА
25	Ce	75	55	80	51	12	НИА
26	Eu	1.0	1.8	1.7	1.0	1.0	НИА
27	Pb	28	29	24	28	20	РФА
28	Th	17	11	12	7	8	НИА
29	U	11	3	11	4	5	НИА

Хүснэгт 3. Туул голын лагт элементийн шинжилгээ хийсэн дүн, г/т (±15%)

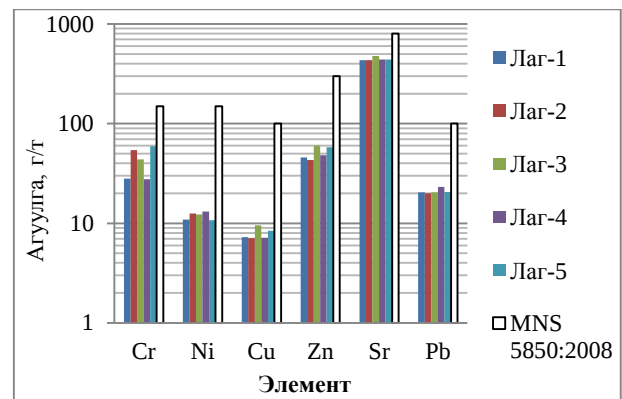
Д/д	Элемент	Лаг-1	Лаг-2	Лаг-3	Лаг-4	Лаг-5	Арга зүй
1	Na, %	2.76	2.17	2.50	2.57	2.59	НИА
2	Al	7.40	7.90	7.65	7.06	8.82	РФА
3	Si	31.08	31.40	31.60	28.85	30.89	РФА
4	P	0.12	0.12	0.12	0.10	0.12	РФА
5	S	0.06	0.05	0.07	0.04	0.19	РФА
6	K	2.68	2.59	2.55	2.49	2.83	НИА РФА
7	Ca	1.09	1.05	1.11	1.15	1.08	РФА
8	Ti	0.33	0.29	0.37	0.27	0.41	РФА
9	Fe	1.61	1.90	2.17	1.51	1.85	РФА
10	Sc, г/тн	5	3	6	4	6	НИА
11	Cr	28	54	44	28	59	НИА РФА
12	Mn	589	745	801	537	469	РФА
13	Ni	11	13	12	13	11	РФА
14	Cu	7	7	10	7	8	РФА

15	Zn	46	43	60	48	58	РФА
16	Ga	13	7	10	10	13	НИА
17	Br					13	НИА
18	Rb	157	133	124	120	123	РФА
19	Sr	433	435	477	440	440	РФА
20	Y	16	9	21	12	25	РФА
21	Zr	389	242	396	267	515	РФА
22	Sb	1	1.3	1.1		1.1	НИА
23	Ba	809	909	809	783	884	РФА
24	La	29	11	28	15	21	НИА
25	Ce	11	38	40	17	37	НИА
26	Eu	0.7	0.8	0.6	0.6	1	НИА
27	Pb	20	20	20	23	21	РФА
28	Th	9	7	5	5	4	НИА
29	U	3	1	4	2	4	НИА

Рентген-флуоресценцын болон нейтрон идэвхжилийн шинжилгээгээр Туул голын лаг, орчмын хөрс тус бүрт нийт 31 элементийн агуулгыг тодорхойлов. Энэхүү үр дүнгээс Cr, Ni, Cu, Zn, Sr, Pb зэрэг элементүүдийг MNS 5850:2008 Монгол Улсын Стандартад заасан утгатай харьцуулан 2, 3-р зурагт харуулав.



Зураг 2: Туул гол орчмын хөрсний дээж дэх зарим элементийн агуулалтын харьцуулалт



Зураг 3: Туул голын лагын дээж дэх зарим элементийн агуулалтын харьцуулалт

IV. ДҮГНЭЛТ

Улаанбаатар хотын Баянзүрхийн, Туулын /Зайсан/, Яармагийн, Сонсголонгийн, Биокомбинатын гүүрүүдийн ойролцоох Туул голын лаг шавар, эрэг орчмын хөрсний дээжид Na, Al, Si, P, S, K, Ca, Sc, Ti, Cr, Mn, Fe, Ni, Cu, Zn, Ga, Br, Rb, Sr, Y, Zr, Sb, Ba, La, Ce, Eu, Pb, Th, U зэрэг элементийн агуулгыг рентген-флуоресценцийн, нейтрон идэвхжилийн, гамма идэвхжилийн шинжилгээний аргуудаар тодорхойлов.

Хөрс болон лаг шаврын дээж дэх Cr, Ni, Cu, Zn, Sr, Pb зэрэг элементийг Монгол улсын стандарт MNS5850:2008-тай харьцуулахад зөвшөөрөгдөх хэмжээнд байв. Харин Биокомбинат орчмын лаг шавар, хөрсний дээжид Вг илрэв.

Энэхүү урьдчилсан судалгааны дүн нь Туул гол, түүний ойр орчмын хүнд, хортой элементийн агуулгыг илүү гүнзгийрүүлэн судлах шаардлагатайг харуулав.

- [1] П.Зузаан, С.Даваа, Д.Болортуяа “Рентгенфлуоресценцийн шинжилгээний онол, аргазүйн судалгаа” Улаанбаатар хот, 2012 он
- [2] И.В.Меднис. “Гамма-излучение радионуклидов, применяемых в нейтронно-активационном анализе” РИГА <ЗИНАТНЕ>, 1987

- [3] Handbook on Nuclear Activation Data №273 Vienna.1987
- [4] Microtron MT-25, Workshop on Application of Microtrons in Nuclear Physics, JINR, Dubna, 1993.
- [5] R.Baudo, J.Giesy, H.Muntau “Sediments: Chemistry and Toxicity of In-Place Pollutants” SETAC-EUROPE, 1990.

Ховор Шорооны Элементийн Хүдрийн Үндсэн Болон Дагалдах Элементийг Рентген Флуоресценцийн Болон Идэвхжлийн Шинжилгээний Аргаар Тодорхойлох Судалгаа

Д. Болортуяа, П. Зузаан, Д. Баатархүү, Г. Дамдинсүрэн, Р. Маахүү, О. Сүх

Монгол Улсын Их Сургууль, Цөмийн Физикийн Судалгааны Төв

Энэ ажилд ховор шорооны элементийн хүдэрт La, Ce, Pr, Nd, Y, Sm, Eu, Gd зэрэг үндсэн, Na, Si, K, Ca, Ti, Mn, Fe, Cu, Zn, As, Rb, Sr, Zr, Cs, Ba, Pb, Th зэрэг бусад элементийг рентгенфлуоресценцийн, гамма идэвхжлийн болон нейтрон идэвхжлийн шинжилгээний аргуудаар тодорхойлж, гарсан үр дүнг хооронд нь харьцуулсан судалгааны талаар өгүүлнэ. Судалгаанд МУИС-ийн ЦСТ-ийн туйлшруулагч бай бүхий рентгенфлуоресценцийн спектрометр, Дубна хот дахь ЦШНИ-ийн электроны цикл хурдасгуур микротрон МТ-25, цэвэр германи детектортой гамма спектрометр ашигласан.

PACS numbers: 78.70.En, 61.05.fm

I. ОРШИЛ

Манай оронд ховор шорооны элемент (ХШЭ) бүхий 5 муж, нийт 70 гаруй илрэлц байдгаас Өмнөговь аймгийн Мушгиа худаг, Дорноговь аймгийн Лугийн гол, Ховд аймгийн Халзан-Бүргэдтэй гэх томоохон орд газруудын нөөц тогтоогдоод байна. Урьдчилсан тооцоогоор Мушгиа худгийн ХШЭ-ийн нийлбэр исэл (TR2O3) карбонатитын хүдэрт 2-9%, апатитын хүдэрт 4-14% агуулгатай, 150 метрийн гүнд 6 сая тонн нөөцтэй гэж тодорхойлсон нь үйлдвэрлэлд ашиглах боломжтой хэмжээ юм [1].

АНУ-ын Геологийн шинжилгээний тайланд Монгол улсын ХШЭ-ийн геологийн нөөцийг 31 сая тонн ба хэмжээгээр дэлхийд хоёрдугаарт орж байгааг тэмдэглэжээ [2]. Энэ их нөөцийг нарийвчлан тогтоох, зөв зохистой ашиглах, тэдгээрийн хүдрийг баяжуулах технологийн горим сонгох, үйлдвэрлэлийн процессыг хянах зорилгоор хүдрийн найрлага дахь үндсэн болон дагалдах элементийн агуулгыг тодорхойлох системтэй судалгаа хийх, арга зүйг илүү боловсронгуй болгох шаардлагатай.

Ховор шорооны хүдрийн дээжид үндсэн болон дагалдах элементүүдийг тодорхойлоход гамма идэвхжлийн, нейтрон идэвхжлийн, рентгенфлуоресценцийн, атомын шингээлтийн, цацаргалтын зэрэг багажит техникийн олон аргыг олон улсад ашиглаж байна [3-5]. Атом, цөмийн физикийн аргууд нь хугацаа бага зарцуулдаг, химийн урвалж материал хэрэглэдэггүй, үр дүнг боловсруулахад хялбар зэрэг давуу талтай.

Эдгээрээс рентгенфлуоресценцийн анализын арга нь мэдрэмж өндөртэй, дээж бэлтгэх боловсруулах арга ажиллагаа хялбар, хурдан шуурхай зэрэг давуу талтай [6-13] бол нейтрон

идэвхжлийн шинжилгээний арга нь микро элементүүдийг өндөр нарийвчлалтай тодорхойлдог онцлогтой.

Энэ ажилд рентгенфлуоресценцийн болон идэвхжлийн шинжилгээний аргаар ховор шорооны хүдэрт үндсэн болон дагалдах зарим элемент тодорхойлох боломжийг судалсан талаар өгүүлнэ.

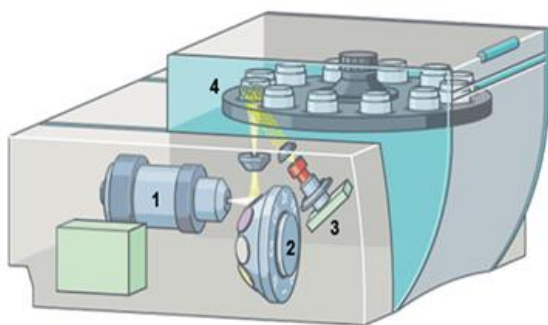
II. ХОВОР ШОРООНЫ ЭЛЕМЕНТ ТОДОРХОЙЛОХ АРГА ЗҮЙ

A. Рентген флуоресценцын арга

Судалгаанд МУИС-ийн Цөмийн физикийн судалгааны төвийн өндөр мэдрэх чадвартай, энергиэр ялгах SPECTRO XEPoS рентгенфлуоресценцийн спектрометр, ХШЭ-ийн хүдрийн TRM-2, TRLK, TRNB стандарт дээжүүдийг ашигласан.

Төхөөрөмж нь цахилгаан хөргөлттэй бөгөөд Pd анодтой рентген хоолой, 8 ширхэг хоёрдогч болон туйлшруулагч бай, Mn K_α шугамын хувьд 155 эВ-ийн энергийн ялгах чадвартай SDD хагас дамжуулагч детектор, спектрийг тооцоолж үр дүнг боловсруулах програм хангамж бүхий компьютер зэргээс бүрддэг (Зураг 1).

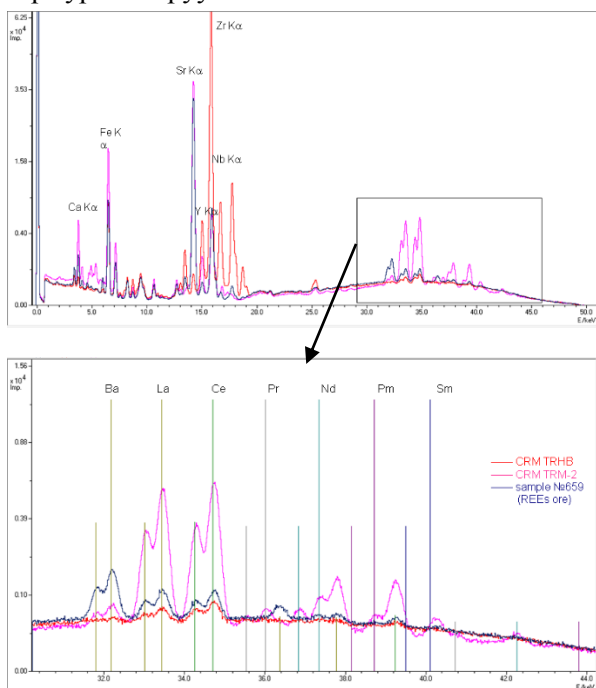
Судалгааны дээжүүдийг 65 мкм ширхэглэгтэй болтол бутлан тээрэмдэж, 32 мм голчтой майлар ёроолтой полимер саванд жигд дарж нягтруулан хэмжилтэд бэлтгэсэн. Хэмжилтийн хугацаа 300 секунд. Спектрийг SPECTRO XEPoS спектрометрийн X-LabPro болон рентген спектр боловсруулалтын ерөнхий программ AXIL, тооцооны MS Excel зэрэг программуудыг ашиглан боловсруулалт хийж, үр дүнг тооцоолж гаргасан.



Зураг 1: Энергизр ялгах SPECTRO XEPOS рентгенфлуоресценцийн спектрометрийн бүдүүвч.

1-Рентген хоолой, 2-Найман ширхэг туйлшруулагч болон хоёрдогч бай, 3-SDD детектор, 4-Дээжийн эргэлддэг тавиур

Рентген флуоресценцийн спектрометрээр хэмжсэн ХШЭ-ийн хүдрийн дээжийн спектрийг 2-р зурагт харуулав.

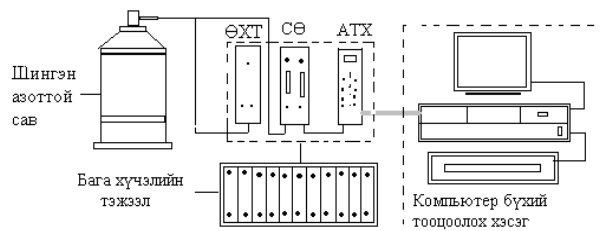


Зураг 2: Ховор шорооны хүдрийн рентген спектр

ХШЭ-ийн стандарт болон тодорхойлох хүдрийн дээжийн рентген спектрээс харахад Y, La, Ce, Pr, Nd, Pm, Sm зэрэг үндсэн элемент болон Sr, Zr, Fe, Nb, Ca болон бусад дагалдах элементийн шугам тод илэрсэн байна.

В. Идэвхжилийн шинжилгээний арга

Ховор шорооны хүдрийн дээжид зарим үндсэн ба дагалдах элементийг нейтрон ба гамма идэвхжилийн аргаар тодорхойлох судалгааны ажлыг Дубнагийн ЦШНИ-ийн микротрон МТ-25 дээр гүйцэтгэв. Идэвхжүүлсэн дээжүүдийг хагас дамжуулагч цэвэр германий Ge(HP) детектортой спектрометрээр хэмжиж (Зураг 3), үр дүнг Canberra S100 болон FitzPeaks Gamma Analysis, MS EXCEL програмуудаар боловсруулав.



Зураг 3: Цэвэр германий бүхий γ-спектрометрийн бүдүүвч схем. ӨХТ – өндөр хүчдэлийн тэжээл, СӨ-спектрометрийн өсгөгч, АТХ-аналог тоон хувиргагч

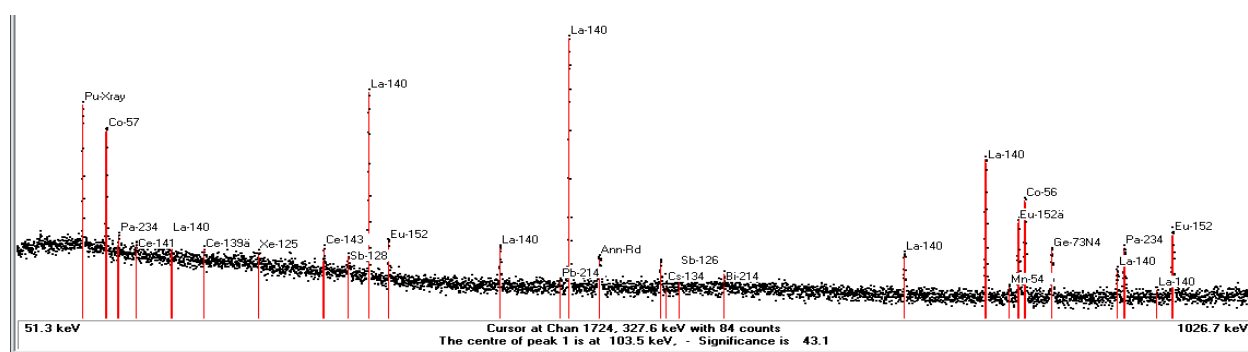
Ижил нөхцөлд хэмжсэн дээжийн болон стандартын идэвхжилийг харьцуулах замаар элементийн агуулгыг тодорхойлдог.

$$C_{\text{дээж}} = C_{\text{стандарт}} \frac{S_{\text{дээж}} M_{\text{стандарт}}}{S_{\text{стандарт}} M_{\text{дээж}}}$$

$C_{\text{стандарт}}$ – стандарт дээжийн концентраци; $S_{\text{дээж}}$, $S_{\text{стандарт}}$ – стандарт болон дээжийн гамма шугамын эрчим; $M_{\text{стандарт}}$, $M_{\text{дээж}}$ – стандарт болон дээжийн масс.

Мушгиа худгийн ховор шорооны ордын хүдрийн 5 дээжийг TRNB стандарт дээжийн хамт тус бүр дулааны нейтроны урсгалаар 2 цаг, гамма цацрагийн урсгалаар 4 цаг шарж идэвхжүүлэв. Дээжийн жин ~1.2 грамм. Шарсан дээжид 5, 30 минут ба 1 цагийн хугацаагаар хэмжилт хийв. Электроны энерги 25 МэВ, гүйдэл ~14 мкА байв.

Дулааны нейтроноор (n,γ) идэвхжүүлсэн ховор шорооны хүдрийн спектрийг 4-р зурагт үзүүлэв. Нейтрон идэвхжлээр La, Ce, Pr, Eu, Dy, Yb үндсэн Na, K, Mn, Ga, As, Rb, Sb, Hf, Ta, Th, U зэрэг дагалдах элемент, харин гамма идэвхжилээр Y, Ce, Nd, Gd, Dy үндсэн, Na, Ca, Mn, Ni, Zn, As, Rb, Zr, Sn, Sb, Cs гэсэн дагалдах элементүүдийн гамма шугам илэрсэн.

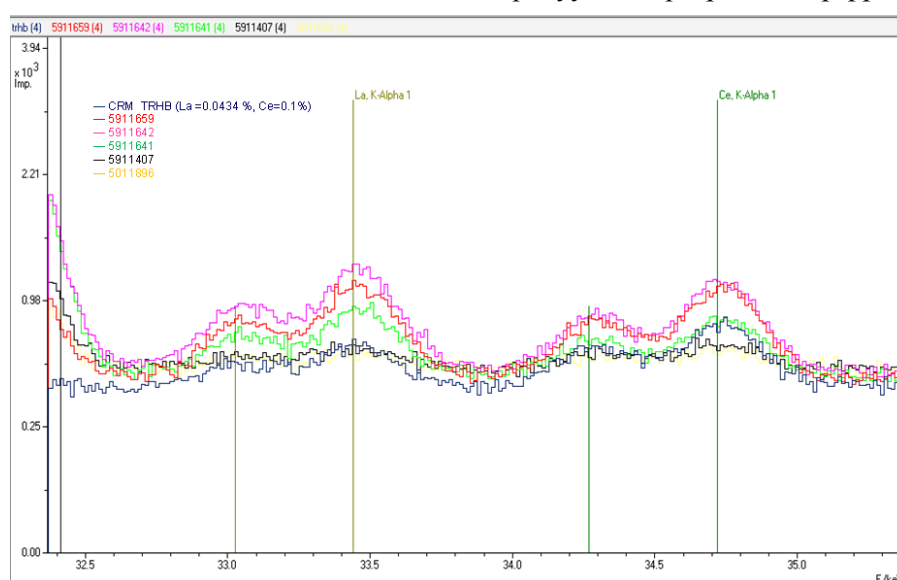


Зураг 4: Ховор шорооны хүдрийн гамма спектр (дээж №11 /5911642/, $t_{\text{хэм}} = 30$ минут)

III. ТУРШИЛТ БА ҮР ДҮН

ХШЭ-ийн хүдрийн 5911659, 5911642, 5911641, 5911407, 5011896 дээжүүдийг SPECTRO XEPOS спектрометрээр хэмжиж

рентген спектрүүдийг харьцуулан 5-р зурагт, тодорхойлсон үндсэн болон дагалдах элементийн агуулгыг Геологийн төв лабораторийн (ГТЛ) тодорхойлуулсан дүнтэй харьцуулан 1-р хүснэгтэд үзүүлэв.



Зураг 5: ХШЭ-ийн хүдрийн стандарт TRNB болон Мушгиа худгийн ХШЭ-ийн хүдрийн дээжийн рентген спектрийн харьцуулалт

Хүснэгт 1. ХШЭ-ийн хүдрийн дээжүүд дэх үндсэн болон дагалдах элементийн агуулгыг РФА-ын аргаар тодорхойлж, бусад газраар тодорхойлуулсан утгатай харьцуулсан дүн ($\pm 10\%$)

Элемент, %	5911659		5911642		5911641		5911407		5011896	
	РФА	ГТЛ	РФА	ГТЛ	РФА	ГТЛ	РФА	ГТЛ	РФА	ГТЛ
Si	26.49	26.0	23.0	23.7	24.1	23.5	28.0	27.4	31.1	30.3
K	5.60	5.54	7.64	7.46	8.22	8.50	4.62	4.78	2.54	2.48
Ca	5.48	5.22	6.77	7.01	5.42	5.81	3.72	3.73	1.00	1.16
Ti	0.314	0.301	0.281	0.237	0.355	0.327	0.317	0.358	0.373	0.334
Mn	0.248	0.245	0.211	0.237	0.206	0.237	0.150	0.158	0.027	0.031
Fe	2.85	2.74	2.36	2.22	3.09	3.18	3.24	3.21	2.58	2.22
Cu	0.0030	0.0033	0.0012	0.0014	0.0013	0.0019	0.0008	0.0008	0.0009	0.0012
Zn	0.0155	0.0149	0.0187	0.0190	0.0183	0.0197	0.0378	0.0411	0.0138	0.0129
As	0.0014	0.0011	0.0028	0.0029	0.0033	0.0036	0.0079	0.0080	0.0002	0.0005
Rb	0.018	0.0179	0.0226	0.0240	0.0228	0.0257	0.0135	0.0137	0.0071	0.0065
Sr	0.9581	0.9916	0.1255	0.1323	0.0924	0.0936	0.0388	0.0370	0.1695	0.1770
Y	0.0077	0.0072	0.0048	0.0059	0.0031	0.0040	0.0026	0.0030	0.0036	0.0031
Zr	0.0337	0.0541	0.0342	0.0386	0.0378	0.0440	0.0411	0.0421	0.0509	0.0500

Ba	0.1728	0.1750	0.4120	0.4564	0.3967	0.4476	0.1952	0.2276	0.1502	0.1335
La	0.1270	0.1236	0.1320	0.1303	0.0818	0.0769	0.0263	0.0190	0.0220	0.0171
Ce	0.1612	0.1666	0.1551	0.1509	0.0912	0.0889	0.0350	0.0335	0.0317	0.0287
Nd	0.0353	0.0342	0.0257	0.0290	0.0181	0.0211	0.0118	0.0117	0.0144	0.0135
Pb	0.0377	0.0384	0.0485	0.0514	0.0335	0.0358	0.0412	0.0466	0.0066	0.0058
Th	0.0033	0.0039	0.0030	0.0027	0.0017	0.0015	0.0025	0.0027	0.0024	0.0022

Спектрээс стандарт болон хүдрийн дээжүүд дэх лантани болон церийн шугамд харгалзах эрчимүүд илэрхий ялгаатай харагдаж байна. Хүснэгт 1-ээс харахад бидний рентген флуоресценцын аргаар тодорхойлсон элементүүдийн дүн итгэмжлэгдсэн лабораторийн шинжилгээий дүнтэй алдааны

мужид тохирч байна. Стандарт дээж ашиглан ховор шорооны хүдэрт нейтрон ба гамма идэвхжилээр зарим ховор шорооны элемент, мөн дагалдах элементүүдийг тодорхойлсон дүнг итгэмжлэгдсэн лабораторийн дүнтэй харьцуулан 2, 3-р хүснэгтэд үзүүлэв.

Хүснэгт 2. ХШЭ-ийн хүдрийн дээжүүд дэх үндсэн болон дагалдах элементийн агуулгыг нейтрон идэвхжилийн аргаар тодорхойлсон дүн

Элемент, ppm	5011896		5911641		5911407		5911642		5911659	
	НИА	ГТЛ	НИА	ГТЛ	НИА	ГТЛ	НИА	ГТЛ	НИА	ГТЛ
La	166±28	171	629±31	769	178±33	190	1237±30	1303	1075±32	1236
Eu	4.2±0.7		5.2±0.4		3.7±1.0		7.6±0.4		7.7±0.6	
Mn	336±27	310	2168±49	2370	1456±59	1580	2731±60	2370	2525±68	2450
As	DL>	5	31±5	36	59±3	80	28±2	29	9±4	11
Na	25440±350		4570±190		23840±400		4640±180		14690±300	
K	22720±360	24800	73980±440	85000	41700±500	47800	72510±340	74600	48380±430	55400
Sr	1680±10	1770	1245±20	936	360±15	370	1540±20	1323	8455±25	9916

Хүснэгт 3. ХШЭ-ийн хүдрийн дээжүүд дэх үндсэн болон дагалдах элементийн агуулгыг гамма идэвхжилийн аргаар тодорхойлсон дүн

Элемент	5011896		5911641		5911407		5911642		5911659	
	ГИА	ГТЛ	ГИА	ГТЛ	ГИА	ГТЛ	ГИА	ГТЛ	ГИА	ГТЛ
Y	25±11	31	40±13	40	22±10	30	46±11	59	67±14	72
Ce	460±20	287	980±25	889	350±20	335	1650±20	1509	1970±30	1666
Gd	8±4		7±2		5±2		9±3		18±5	
Yb	DL>		14±2		18±2		14±2		11±2	
Zn	89±8	129	187±12	197	356±15	411	206±12	190	115±10	149
Rb	62±15	65	312±33	257	123±20	137	244±25	240	192±21	179
Zr	450±95	500	515±80	440	430±70	421	360±70	386	530±80	541
Cs	5.5±0.2		3.3±0.1		3.0±0.1		3.3±0.1		4.0±0.2	

IV. ДҮГНЭЛТ

1. Ховор шорооны хүдэрт зарим үндсэн болон дагалдах элементийн агуулга тодорхойлох рентгенфлуоресценцийн анализын арга боловсруулав. Уг аргаар Мушгиа худгийн ховор шорооны хүдрийн дээжүүдэд La, Ce, Pr, Nd, Y зэрэг үндсэн элемент, Si, K, Ca, Ti, Mn, Fe, Cu, Zn, Rb, Sr, Ba, Pb, Th зэрэг дагалдах элементийн агуулга тодорхойлж, аргын хэрэглэгдэх хүрээг тогтоов.
2. Дубнагийн ЦШНИ-ийн микротрон МТ-25 ашиглан нейтроноор идэвхжүүлэх аргаар ховор шорооны хүдрийн дээжид ховор шорооны болон дагалдах элементүүдийг тодорхойлох боломжийг туршив. Ховор

- шорооны хүдэрт нейтрон идэвхжлээр La, Ce, Pr, Eu, Dy, Yb үндсэн Na, K, Mn, Ga, As, Rb, Sb, Hf, Ta, Th, U зэрэг дагалдах элемент, харин гамма идэвхжилээр Y, Ce, Nd, Gd, Dy үндсэн, Na, Ca, Mn, Ni, Zn, As, Rb, Zr, Sn, Sb, Cs гэсэн дагалдах элементүүдийг тодорхойлох боломжтойг харуулав.
3. Ховор шорооны хүдэрт La, Eu, Y, Ce, Gd, Yb зэрэг ховор шорооны элемент, мөн Mn, As, Na, K, Sr, Zn, Rb, Zr, Cs зэрэг дагалдах элементийн агуулгыг тодорхойлж, итгэмжлэгдсэн лабораторийн дүнтэй харьцуулан үр дүнг баталгаажуулав.
 4. Туршилтын дүнгээс харахад атом, цөмийн физикийн аргыг хоршин уул уурхайн экспортын бүтээгдэхүүнд нарийвчилсан

шинжилгээ хийж, дагалдах үнэт ховор
элементийн хэмжээг тогтоож,

бүтээгдэхүүний үнэд шингээн тооцох
боломжтой нь харагдаж байна.

- [1] П.Зузаан. Исследование и разработка методик рентгенофлуоресцентного анализа природных материалов // Дисс. на соискание ученой степени кандидата физ.-мат. наук, 1985, 186 с
- [2] U.S. Geological Survey, 2009
- [3] P.G. Jeffrey. Chemical Methods of Rock Analysis// Pergamon Press New York, 2 nd ed. 19
- [4] G.F.Kirkbright, M.Sargent. Atomic Absorption and Fluorescence Spectroscopy. // Academic Press, New York, 1974.
- [5] J.J.Labrecque, J.M.Bensen, R.E.Van Grieken. Determination of Ba, La, Ce and Nd in Lateritic materials by various energy dispersive X-ray Fluorescence techniques and Neutron Activation Analysis. // X-ray spectrometry. vol.15, 13-18, 1989.
- [6] J.J. Labrecque, W.C.Parker, D.Adames. Application of an americium-241 source for the determination of barium, lanthanum and cerium in lateritic material by X-ray fluorescence. // Journal of Radioanalytical Chemistry, vol. 59, N1, 1980, p.193-201.
- [7] P.Zuzaan, N.Gansukh, B.Dalhsuren, S.Davaa. Development and application EDXRF analysis REE in ore samples.//Тезисы докладов III Всероссийская и VI Сибирская конференция по спектральному анализу. Иркутск 6-9 октября 1998, с.
- [8] P. Zuzaan, N. Gansukh, D. Bolortuya. Radionuclide induced energy dispersive X-ray fluorescence for the determination of La, Ce, Pr and Nd and their content sums in the rare-earth ores // Scientific Journal of X-Ray Spectrometry, Volume 39 Issue 1 , Pages 52 – 56, (Jan/Feb 2010)
- [9] L.C.Chandola, P.P. Khanna. X-ray fluorescence analysis of thulium oxide for rare earth impurities // Journal of Radioanalytical and nuclear Chemistry, vol.121 N1. P.53-59, 1988.
- [10] Madan Lai, R.K.Choudhury, R.M.Agrawal Optimisation of geometry for X-ray analysis of rare earth materials. X-ray spectrometry, vol. 16. 23-26 (1987).
- [11] Д.Баатархүү бусад. Электрон цикл хурдасгуур микротрон МТ-22. ЭШБ ФЭС, 1998 он, №4(137),х.109-120
- [12] Handbook on Nuclear Activation Data, Technical reports series No.273. International Atomic Energy Agency.Vienna.1987
- [13] Идэрмөнх, Г.Дамдинсүрэн, П.Зузаан, Б.Отгоолой, “Нейтрон идэвхжилийн аргаар ховор шорооны зарим элемент тодорхойлох тохиромжтой нөхцлийг сонгох нь”, Хүрэл тогоот-2012 Эрдэм шинжилгээний бага хурал (Илтгэлүүдийн эмхэтгэл) Улаанбаатар хот, 2012 он, Хуудас: 207-215

Estimation of the Regression Equation Based on the Pulp Density by “AR-31-M” XRF Spectrometer

D. Altantsetseg, B. Batjargal, D. Otgonbaatar, G. Bolorchimeg

Erdenet Mining Corporation, Orkhon 61020

In 2014, a wavelength dispersive X-ray fluorescence spectrometer AR-31-M for industrial technological control was installed in the X-Ray laboratory, Erdenet Mining Corporation which is one of the biggest mining industries in Asia. In this work estimation of registration equation based on pulp density by the XRF spectrometer, is presented.

Азийн хамгийн том уул уурхайн үйлдвэрүүдийн нэг Эрдэнэт уулын баяжуулах үйлдвэрийн Рентген лабораторид 2014 онд үйлдвэрийн технологийн процессыг хянах долгионы уртаар ялгадаг рентген-флуоресценцийн AR-31-M спектрометрийг суурилуулсан. Энэ ажилд AR-31-M спектрометрээр зуурмагийн нягтад суурилсан регрессийн тэгшитгэлийг сонгосон талаар өгүүлнэ.

PACS numbers: 78.70.En

I. INTRODUCTION

Mongolian-Russian Erdenet Mining Corporation (EMC) processed 32 million tons of ore, produced 650.0 thousand tons of copper concentrate and 4.5 thousand tons of molybdenum concentrate per year.

A XRF spectrometer AR-31-M for industrial technological control was installed at the X-ray laboratory of the EMC in 2014. Fully automated analytical system (AR-31-M) with multi-purposes is designed to determine chemical composition in pulp by continuous X-ray fluorescence analysis. Mobile measuring head with fixed spectrometer channels (up to 8) and program-controlled processing of up to 15 flow cells per 30 minutes. Measurements of the intensity are performed in four channels - Cu Ka, Fe Ka, Mo Ka and incoherent scattered radiation line from anode Pd Ka.

Operation of the analyzer carried at following two basic modes:

- Cyclically mode - provides automatic measurement for all points with cyclically mode in accordance with a predetermined program

- Single command mode - provided one-time testing of user commands for the organization of the whole spectrometer.

The calibration process starts with collection of samples from the analysis point, and the total number of samples are taken at least 50 samples for each product. These samples are assayed by a chemical laboratory and then correlated with data from the analyser. Calibration equations based on this data are obtained and the analyser calculates future elemental concentrations based on the equations.

The main purpose of this study is to determine the optimal regression equation based on the density

of slurry stream (pulp). Regression results are then compared and the best calibration equation is chosen based on a comparison of the RMS error, significance, correlation coefficient and the number of terms used in the equation. General form of the regression equation is written as:

For chemical elements:

$$C_i = a_0 + \sum a_i I_i + I_i \sum a_{ij} I_j + I_p \sum a_{pj} I_j \quad (1)$$

For density:

$$C_d = a_0 + \frac{a_1}{I_p} + \frac{a_2}{I_p^2} + \frac{1}{I_p} \sum b_j I_j + I_p \sum a_{pj} I_j + \sum a_j I_j \quad (2)$$

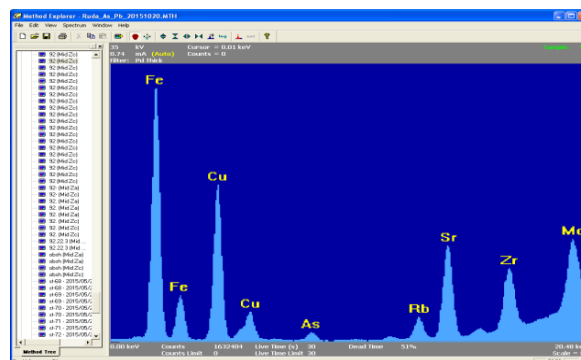


Figure 1: X-Ray spectrum of ore content of the mining plant. For grinding ore is used the steel balls

II. EXPERIMENTAL



Figure 2: AR-31-M Spectrometer



Figure 3: View of the control stand

Table 1. AP-31-M Spectrometer Technical Specifications

X-Ray tube	Pd
Detector	Scintillation counting
Correction	Intensity correction
Range defined chemical elements	From Ca (20) to U (92)
Determining a chemical element at same time	8
Total number of analysis point (sample)	15
Technique error, %	0.4
Detection limit, % by weight. in - solution:	$1.10^{-3} \dots 1.10^{-4}$
-slurries and suspensions:	$5.10^{-2} \dots 1.10^{-3}$
Total power consumption, kW, not more	5
Mean time analysis of each sample, sec	40
Weight, kg	1500
Volume of the transported samples, liter	6
Pressure compressed air, kPa	400-600
Power supply system, V	380

A. Sample preparation and calibration

The calibration process starts with collection of samples from the analysis stream pulp. Option to stream more than approximately 50 samples should be collected. Turn pump each sample. Adjustment depending on the capacity of the pump once used to turn liquid sample size is different. (In our case, 4-5 l) according to the following chart prepared calibration samples analyzed.

Table 2. Condition

1	Tube voltage	40kV	6	Product type	Ore feed, tail, copper concentrate, molybdenum concentrate, CuMo tail, copper bulk concentrate.
2	Tube current	30 mA			
3	Exposure	40 sec			
4	Energy line	K α			
5	Chemical element	Cu, Mo, Fe			

Table 4

SUMMARY OUTPUT										
Regression Statistics					ANOVA					
Multiple R	R Square	Adjusted R Square	Standard Error	Observations	Regression	df	SS	MS	F	Significance F
0.690515	0.47681	0.4558	1.5007	27	Residual	1	51.31	51.31	22.78	0.0044
					Total	25	56.30	2.25		

B. Method of study to choice the best regression equations

The calibration results were included in the database configuration file.

Table 3. Chemical elements in copper concentrate

№	Cu	Mo	Fe	Ag
1	22.82	0.079	27.24	23.25
2	24.8	0.23	26.56	23.67
3	24.13	0.105	27.18	22.76
4	24.12	0.34	27.16	22.72
5	22.86	0.1	27.2	22
6	25.05	0.12	27.13	25
7	24.32	0.37	27.07	24
8	21.27	0.18	27.38	23.29
9	23.83	0.15	27.25	23.03
10	20.15	0.17	27.29	20
11	22.61	0.25	27.12	23
12	20.74	0.069	27.5	20
13	20.2	0.076	26.24	20.36
14	24.02	0.077	27.45	23.96
15	21.1	0.059	27.5	22
16	21.89	0.052	27.15	21.5
17	26.84	0.049	24.86	27.01
18	27.81	0.04	25.51	28
19	25.08	0.099	27.42	24.9
20	19.58	0.12	27.3	19.94
21	24.2	0.084	27.35	25.86
22	23.35	0.081	27.1	23.1
23	25.53	0.092	27.36	17.5
24	23.44	0.07	27.4	23.01
25	24.8	0.13	27.19	24.41
26	24.4	0.15	27.21	24.29
27	25	0.27	27.21	25.01

Method 1: Choice the equation based on the following criteria F (Fisher) and P criteria. F criteria to allow for the impact of all the independent variables elements. If $F > F_{kr}$ (2.96) the equation is significant. P statistical assumptions used to verify the results of the sample function. If $P = < \alpha$ the regression equation is significant. The chemical elements in copper concentrate is shown in the following table. 4

						26	107.61			
	Coef- ficients	Standard Error	t Stat	P-value	Lower 95%	Upper 95%	Lower 95.0%	Upper 95.0%		
Intercept	9.28	2.08	3.11	0.004	3.13	15.43	3.13	15.43		
Ag	0.61	0.12	4.77	0.01	0.35	0.87	0.35	0.87		

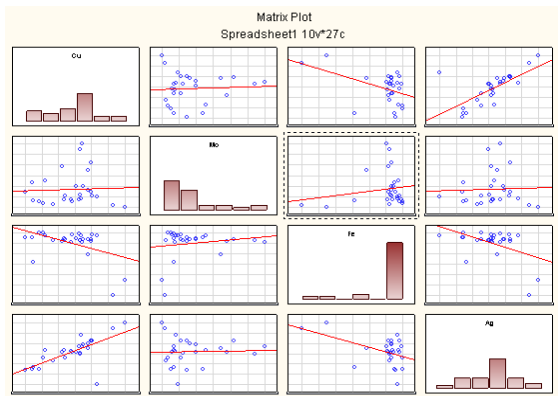


Figure 4: Matrix of the elements

It can be concluded that the copper content in the copper concentrate depends only on the density.

Method 2: Dependence Matrix Using program "Statistica" shows the matrix of the elements. (Figure. 4)

Matrix of the elements can be concluded that the copper content in the copper concentrate depends only on the density. According the methodology the regression equation for the copper concentrate is written as:

$$C_{Cu} = -5.88 + 24.14 * CUKA + 65.51 * CUKA * AGKA - 5.41 * AGKA \quad (3)$$

$$C_{Mo} = -0.06 + 2.86 * MOKA + 2.59 * MOKA * CUKA - 0.06 * AGKA \quad (4)$$

$$C_{Fe} = 6.49 + 13.96FEKA + 6.62FEKA * CUKA + 23.35AGKA \quad (5)$$

$$C_d = 3.55 + 1/2.71 * AGKA + 1/1.30 * AGKA * AGKA - 5.85 * AGKA * CUKA \quad (6)$$

Table 5. Chemical and laboratory assays for the calibration

№	Cu (chemical)	Cu (calculation)	Mo (chemical)	Mo (calculation)	Fe (chemical)	Fe (calculation)	Ag (chemical)	Ag (calculation)
1	22.82	23.11	0.079	0.077	27.24	26.95	25.25	23.63
2	24.8	25.2	0.23	0.24	26.56	26.50	23.67	23.31
3	24.13	23.72	0.105	0.109	27.18	27.13	22.76	22.67
4	24.12	23.91	0.34	0.345	27.16	26.93	22.72	23.63
5	22.86	23.09	0.1	0.10	27.2	26.58	16.01	15.64
6	25.05	24.42	0.12	0.13	27.13	26.70	15	15.45
7	24.32	23.92	0.37	0.356	27.07	26.53	14.91	15.08
8	21.27	21.41	0.18	0.18	27.38	27.03	23.29	23.74
9	23.83	23.23	0.15	0.15	27.25	26.93	23.03	23.42
10	20.15	19.82	0.17	0.15	27.29	27.09	27.06	26.60
11	20.74	20.27	0.069	0.067	27.5	26.89	24	23.63
12	20.2	21.01	0.076	0.074	26.24	27.62	35	34.91
13	24.02	23.32	0.077	0.086	27.45	26.32	16.78	17.69
14	21.1	20.83	0.059	0.062	27.5	26.89	32.5	32.38
15	21.89	22.77	0.052	0.058	27.15	27.80	34.73	34.91
16	27.81	28.37	0.04	0.038	25.51	25.90	29	28.66
17	19.58	20.21	0.12	0.12	27.3	27.03	14.94	14.48
18	23.35	22.94	0.081	0.067	27.1	27.31	23.1	23.09
19	25.53	24.35	0.092	0.070	27.36	27.22	17.5	17.63
20	23.44	23.41	0.07	0.065	27.4	27.10	19.08	18.35
21	24.8	24.67	0.13	0.12	27.19	27.13	12.41	14.15
22	25	25.21	0.27	0.27	27.21	27.46	15	15.13

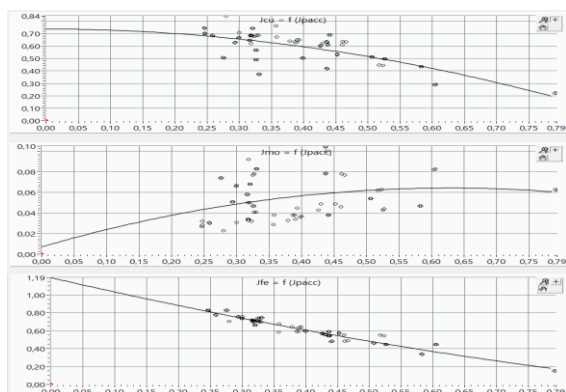


Figure 5: Dependence of the intensities of analyzed elements of the scattering intensity

Table 6. Results of the Cu in copper concentrate (01-15 April 2015)

Day		AP-31-M	Quant'X	Chemical	AP-31-Quant'X	AP-31-M-Chemical	Quant'X-Chemical
1	1 shift	22.72	22.7	22.63	0.02	0.09	0.07
	2 shift	22.94	22.9	22.67	0.04	0.27	0.23
	3 shift	23.48	23.3	23.29	0.18	0.19	0.01
2	1 shift	23.24	23.44	23.61	-0.2	-0.37	-0.17
	2 shift	23.73	23.94	24.15	-0.21	-0.42	-0.21
	3 shift	23.26	23.52	23.28	-0.26	-0.02	0.24
3	1 shift	23.52	23.35	23.34	0.17	0.18	0.01
	2 shift	22.86	23.01	22.63	-0.15	0.23	0.38
	3 shift	23.05	22.88	22.62	0.17	0.43	0.26
4	1 shift	23.51	23.11	23.15	0.4	0.36	-0.04
	2 shift	22.83	22.65	22.76	0.18	0.07	-0.11
	3 shift	22.61	22.63	22.64	-0.02	-0.03	-0.01
5	1 shift	22.9	22.72	22.57	0.18	0.33	0.15
	2 shift	22.94	22.84	22.88	0.1	0.06	-0.04
	3 shift	23.57	23.83	23.78	-0.26	-0.21	0.05
6	1 shift	22.93	23	22.85	-0.07	0.08	0.15
	2 shift	23.02	22.83	22.9	0.19	0.12	-0.07
	3 shift	23.67	23.6	23.76	0.07	-0.09	-0.16
7	1 shift	23.55	23.61	23.8	-0.06	-0.25	-0.19
	2 shift	23.06	23.18	23.28	-0.12	-0.22	-0.1
	3 shift	23.68	23.31	23.49	0.37	0.19	-0.18
8	1 shift	22.84	22.89	23.21	-0.05	-0.37	-0.32
	2 shift	22.8	22.74	22.75	0.06	0.05	-0.01
	3 shift	21.68	21.73	21.77	-0.05	-0.09	-0.04
9	1 shift	23.83	23.89	23.93	-0.06	-0.1	-0.04
	2 shift	23.6	23.8	23.82	-0.2	-0.22	-0.02
	3 shift	22.47	22.55	22.88	-0.08	-0.41	-0.33
10	1 shift	23.17	23.28	23.53	-0.11	-0.36	-0.25
	2 shift	23.24	23.14	23.53	0.1	-0.29	-0.39
	3 shift	22.31	22.4	22.11	-0.09	0.2	0.29
11	1 shift	23.24	23.38	23.43	-0.14	-0.19	-0.05
	2 shift	23.56	23.6	23.69	-0.04	-0.13	-0.09
	3 shift	23.46	23.48	23.57	-0.02	-0.11	-0.09

The function $J=f(J_{scatt})$ allows to evaluate the dependence of the intensities of the analyzed elements on the intensity of the scattered radiation.

III. RESULTS AND DISCUSSION

The results of the AR-31-M were compared with results of the chemical analysis and the Quant'X, can be seen in Table 6. The results of AR-31-M spectrometer were obtained by the regression equations are shown in the histogram (Figure 6-7).

12	1 shift	23.04	23.1	23.57	-0.06	-0.53	-0.47
	2 shift	22.5	22.81	22.72	-0.31	-0.22	0.09
	3 shift	22.3	22.34	22.13	-0.04	0.17	0.21
13	1 shift	23.58	23.53	23.78	0.05	-0.2	-0.25
	2 shift	24.14	24.21	24.19	-0.07	-0.05	0.02
	3 shift	23.05	23.34	22.9	-0.29	0.15	0.44
14	1 shift	23.34	23.18	23.07	0.16	0.27	0.11
	2 shift	22.86	22.8	22.61	0.06	0.25	0.19
	3 shift	23.31	23.03	22.97	0.28	0.34	0.06
15	1 shift	22.91	22.81	23.04	0.1	-0.13	-0.23
	2 shift	22.95	22.83	22.49	0.12	0.46	0.34
	3 shift	23.98	23.67	23.81	0.31	0.17	-0.14

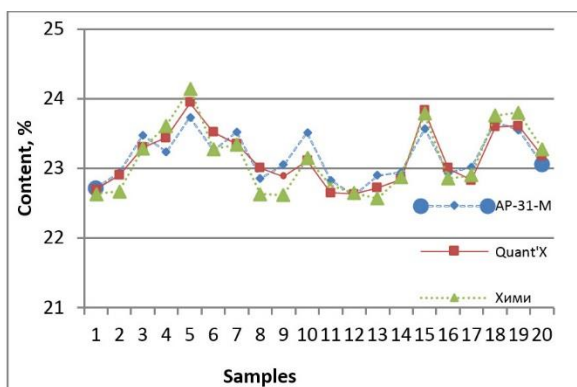


Figure.6 The molybdenum content in copper concentrate. Comparison results of the chemical, RSEL's and AP-31-M spectrometer

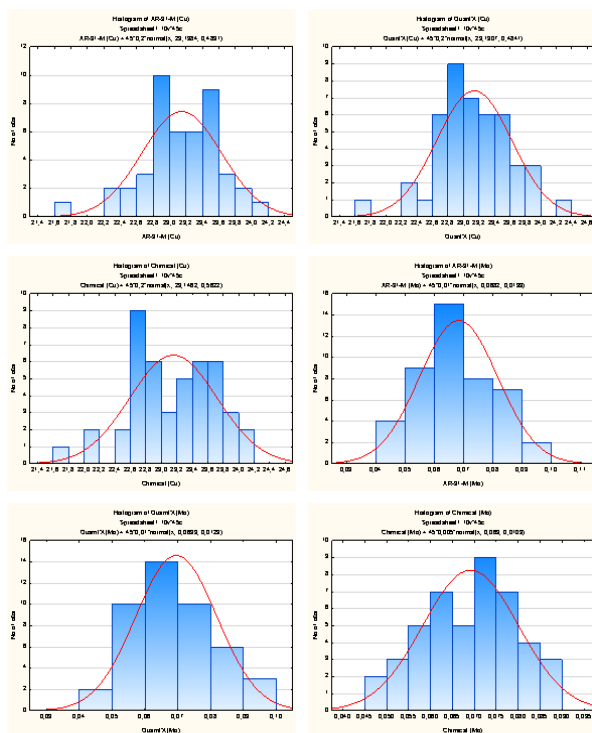


Figure. 7: Copper in copper concentrate, molybdenum histogram results

IV. CONCLUSION

WDXRF method allows determining Cu, Mo, Fe and density contents in the all samples from ore to concentrate. X-Ray laboratory performed quantitative elemental analysis on wide range of industry technology product.

The correlation coefficient, determination coefficient, standard error and significance were calculated using the software EVIEWS-8, Statistic, Excel- ANOVA and the optimal regression equation was estimated by this method.

From this study, we have concluded that determination of elements such Cu, Mo, Fe and density in a short-time is possible by the developed method.

- [1] Стандарт КОО “Предприятие Эрдэнэт” СТП-001-11 Комплексная система управления качеством продукции (КС УКП) стандарт рентгено-спектральной экспресс лаборатории (РСЭЛ)
- [2] Создание АСАК процессов обогащения руд. Бондаренко.А.В
- [3] Руководство по эксплуатации БКМФ 423316.041-01 34 01

Determination of Rare Earths and Other Trace Elements in Ore Samples of Mongolia by WDXRF and INAA

N. Baljinnyam¹, B. Davaasuren¹, N. Norov², M.V. Frontasyeva³, S.S. Pavlov³

¹Central Geological Laboratory, Ulaanbaatar, Mongolia

²Nuclear Research Center, NUM, Ulaanbaatar, Mongolia

³Frank Laboratory of Neutron Physics, JINR, Dubna, Russia

Wavelength dispersive X-ray fluorescence (WDXRF) and Instrumental Neutron Activation Analyses (INAA) were used to determine the REE and other trace elements in rare earth ore samples from province Dornogovi, Lugiin gol. Seven rare-earth elements (REE) namely La, Ce, Sm, Eu, Tb, Dy, and Yb, as well as other trace elements (Zn, As, Rb, Sr, Au, Ba, Br, Ta, Hf, Th and U) have been determined by WDXRF at Central Geological Laboratory of Mongolia, Ulaanbaatar. For comparison, the same elements were determined by INAA using by epithermal neutron activation analyses at the IBR-2 reactor, FLNP JINR, Dubna. It is demonstrated that the WDXRF have satisfactorily agreed with INAA results within the limits of the uncertainty. It is shown that the values of the relative discrepancies between the WDXRF and the INAA results are in the range of 1.5-30.0 %.

PACS numbers: 29.30.

I. INTRODUCTION

Nowadays we are witnessing an ever growing use of rare earth metals (REM) for industrial purposes. Apart from their classic utilization in the manufacturing of explosives, glass and ceramics, they have now become important in the electronics industry, the production of semi- and superconductors, microwave techniques and the fabrication of luminescent materials. Therefore, the demand for quick and accurate quantitative analysis methods is continuously growing.

Mongolia has about 17% of the world reserves of rare earths, with approximately 60 deposits situated in six provinces (Altay, Umnugobi, North Mongolian Hentii, Hangay, Southeast Mongolian, and South Mongolian) [1]. Four deposits are of particular importance, especially that of Mushgia Khudag in the province of Umnugobi, which reportedly has reserves comparable to those of Bayan-Obo in China's Inner Mongolia, or 200 million tons of rare earth oxide ore. The Lugiin-gol vein-carbonatite rare-earth deposit is located in Dorongovi Aimag. The deposit occurs within the endo-and exo-contact zones of the early Jurassic nepheline and pseudoleucitesyenite Lugiin-gol massif, which lie in on the eastern flank of the South-Gobi alkaline rock belt.

Many of the existing classical methods for the determination of REEs have been superseded by physical techniques, including spectroscopic techniques. Atomic absorption and plasma emission spectrometry have recently been used for the simultaneous determination of lanthanides at lower concentrations. In recent years nuclear analytical methods such as WDXRF and INAA have become

one of the most promising and attractive analytical methods. The methods have been widely applied to study geological, biological and environmental materials [2, 3].

However, apart from plasma spectrometry, these methods were not satisfactory. For concentrations greater than 1 mg.g⁻¹, X-ray fluorescence (XRF) spectrometry is probably still the most versatile technique.

In this work the concentrations of REE and other trace elements have been determined in the rare earth ore samples by WDXRF. For comparison, the same elements were determined by INAA using by epithermal neutron activation analyses at the IBR_2 reactor, FLNP JINR, Dubna.

II. MATERIALS AND METHODS

A. Sampling and sample preparation

We were collected ore samples from rare-earth deposit Lugiin-gol where located in province Dornogovi. Three rare earth ore samples (S1, S2, S3) carried out a setting for X-ray fluorescent analysis of Central Geological Laboratory of Mongolia. The samples we have pulverized test portion is mixed with proper flux and fused at high temperature, prepared glass beads.

B. X-ray analysis:

The XRF analysis determines the abundance of elements in a material, which has been used for the chemical analyses of rocks, minerals, sediments, soils, steels, and water. The characteristics and operating conditions of the equipment WDXRF are described in Table 1.

TABLE 1. X-Ray Fluorescence Spectrometer with Wave Dispersive (WDXRF) parameters

Model Number	PW4400
Brand	PANalytical
Detector	MCA Flow, Sealed Xe, MCA Scint
Conditions	Automatic analysis for Qualitative/Quantitative from Na to U.
Used Atmosphere	water
X-ray tube	Rh with 4kV and 160mA
Collimator (μm)	150, 300, 700

Low dilution fused glass bead for the analysis was prepared by the following manner: a sample powder (1.0 g) was mixed with a 5 flux ($\text{LiBO}_2 + \text{LiBO}_2$) and kept in a platinum crucible. The crucible was set in a high-frequency melting furnace (FUSION MASHINE POENIX 6000), and fused at 1100°C for 15 min.

Power voltage and current condition to the X-ray anode are 4kV and 160mA, respectively.

Glass bead samples we were measured for 45 min. and done processing of spectrum using the Super Q program equipped with the spectrometry.

C. INAA Analysis:

Ore samples were dried during 24 hours in oven 105°C . After drying samples were powdered in an agate mortar and homogenized. Samples of about 0.3 g were heat-sealed in polyethylene foil bags and packed in aluminum cups for short and long irradiation, respectively, and stored until irradiation at the IBR-2 reactor.

The concentration of elements in the ore samples was determined by a multi-elemental instrumental neutron activation analysis using fast, thermal and epithermal neutrons (ENAA) at the IBR-2 reactor, FLNP JINR, Dubna. Thermal NAA takes advantage of the high intensity of neutrons available from the thermalization of fission neutrons and the large thermal neutron cross sections for most isotopes. Epithermal NAA (ENAA) is a useful extension of INAA in that it changes the activation of a number of trace elements relative to the major matrix elements. Epithermal is taken to be neutrons with energies from the Cd «cut-off» of 0.55 eV up to approximately 1 MeV. In general, the activation cross sections of the matrix elements of environmental samples are inversely proportional to the neutron energy. The trace elements also follow

this general trend but many of them have large activation cross section at specific energies in the epithermal energy region [4].

Epithermal neutron activation analysis (ENAA) has certain advantages over conventional instrumental activation analysis for many trace elements in terms of improvement in precision and lowering of detection limits, reduction of high matrix activity.

The analytical procedures and the basic characteristics of the employed pneumatic system are described in detail elsewhere [5].

Two types of irradiation were carried out. One is a short irradiation for 3–5 min to determine short-lived isotopes (Al, Ca, Cl, I, Mg, Mn, and V). After a decay-period of 5–7 min the irradiated samples were measured twice, first for 3–5 min and then for 10–15 min. A long-irradiation of 4–5 days was used to analyze for long-lived radionuclides. After irradiation the samples were re-packed and measured twice: first after 4–5 days for 40–50 min to determine As, Br, K, La, Na, Mo, Sm, U, and W and after 20 days for 2,5–3 hours to determine Ba, Ce, Co, Cr, Cs, Fe, Hf, Ni, Rb, Sb, Sc, Sr, Ta, Tb, Th, Yb, and Zn. The gamma spectra of induced activity were measured with aHPGe detector with a resolution of 1.9 keV for the ^{60}Co 1332 keV line.

The processing of the data and determination of the concentrations of elements were performed using certified reference materials and flux comparators with the help of software developed in FLNP, JINR [6].

In order to measure the precision of measurement, the specific gamma-ray peaks of each interesting radionuclide have been chosen carefully. The half-lives and gamma ray energies of isotopes selected for counting are listed in Table 2.

TABLE 2. Nuclear properties of the rare earth nuclides

Stable isotopes	Abundance (%)	Activation product	Half life	Gamma energy, keV	Cross-section, barn
La-139	99.9	La-140	40.2 h	1596	8.9
Ce-140	88.5	Ce-141	32.5d	145	0.6
Pr-141	100	Pr-142	19.13 h	1575.3	-
Nd-146	17.2	Nd-147	11 h	531	2
Eu-151	47.8	Eu-152	13.3 y	1408	2800
Sm-152	26.7	Sm-153	47 h	103	210
Gd-158	24.8	Gd-159	18.5 h	363.5	<180
Dy-164	28.2	Dy-165	2.33 h	94.7	-
Ho-165	100	Ho-166	26.9 h	80.6	64
Tm-169	100	Tm-170	130 d	84.3	125
Yb-168	31.6	Yb-169	32 d	198	11
Tb-159	100	Tb-150	72.1 d	86.8	-
Lu-166	2.6	Lu-167	161 d	208	2100
Er-170	14.9	Er-171	7.5 h	308.3	9

III. RESULTS AND DISCUSSION

We have been determined five rare-earth elements (REE) namely La, Ce, Pr, Sm, and Y in some trace elements in three ore samples (S1, S2, S3) by WDXRF at Central Geological Laboratory of Mongolia, Ulaanbaatar and twelve rare-earth elements (REE) namely La, Ce, Nd, Sm, Eu, Gd, Tb,

Dy, Er, Tm, Yb and Lu in three ore samples (S1, S2, S3) by INAA at the IBR-2M reactor, FLNP, JINR, Dubna.

The results of study show that comparison of the WDXRF results have satisfactorily agreed with the INAA for REE elements. (Table 3).

TABLE 3. Comparison for REE analysis of the samples by WDXRF and INAA (ppm)

Element	Sample 1		Sample 2		Sample 3	
	WDXRF $\pm\Delta C$	INAA (%)	WDXRF $\pm\Delta C$	INAA (%)	WDXRF $\pm\Delta C$	INAA (%)
La	16300 $\pm$ 100	13100(5.0)	19900 $\pm$ 110	15500(5.0)	433 $\pm$ 30	312(5.0)
Ce	26000 $\pm$ 290	20300(30)	25800 $\pm$ 50	21300(5.5)	1000 $\pm$ 8	688(5.4)
Pr	2770 $\pm$ 28	-	2450 $\pm$ 30	-	120 $\pm$ 10	-
Sm	700 $\pm$ 10	630(2.2)	496 $\pm$ 62	395(3.3)	118 $\pm$ 5	76.7(3.3)
Nd	5140 $\pm$ 90	5430(30)	5980 $\pm$ 30	5570(30)	454 $\pm$ 23	496(30)
Gd	415 $\pm$ 78	545(30)	276 $\pm$ 10	287(30)	120 $\pm$ 20	225(30)
Eu	178 $\pm$ 15	102(31)	91.8 $\pm$ 8.5	46.5(31)	9.0 $\pm$ 1.5	76(31)
Tb	34.7 $\pm$ 53	28(30)	37 $\pm$ 8	13(30)	25.6 $\pm$ 5	25(30)
Dy	202 $\pm$ 30	201(40)	-	284(30)	175 $\pm$ 30	223(30)
Y	946 $\pm$ 35	-	159 $\pm$ 15	-	1106 $\pm$ 50	-
Yb	59.52 $\pm$ 5	68(30)	18.4 $\pm$ 2	18,6(30)	130 $\pm$ 25	131(30)
Hf	-	2.08(8.0)	-	1.24(10)	398 $\pm$ 30	326(5.9)

Value of bold italic – determined by ICP-MS

The content of trace elements such as Sr, Ba, Zn, and As measured by WDXRF were underestimated in comparison with the data obtained by INAA.

The results in Table 4 show that concentration of some trace elements in study samples by WDXRF and INAA.

TABLE 4. The concentration of some trace elements in study samples by WDXRF and INAA.

Element	Sample 1		Sample 2		Sample 3	
	WDXRF $\pm\Delta$ C	INAA (%)	WDXRF $\pm\Delta$ C	INAA (%)	WDXRF $\pm\Delta$ C	INAA (%)
Zn	600 $\pm$ 40	1050 (3.51)	380 $\pm$ 21	258(4.2)	434 $\pm$ 28	464(3.3)
As	155 $\pm$ 25	82,1(2.0)	212 $\pm$ 23	146 (2.0)	33.7 $\pm$ 3.7	25.5(2.2)
Sr	22400 $\pm$ 10	22900(6.7)	5102 $\pm$ 40	5420 (6.5)	128 $\pm$ 12	106(14)
Rb	43 $\pm$ 10	33.9 (17)	65.7 $\pm$ 65	63(17)	541 $\pm$ 50	528(17)
Mo	26.7 $\pm$ 15	37.1(30)	45.6 $\pm$ 35	50 (30)	9.8 $\pm$ 12	7.64(32)
Ba	870 $\pm$ 50	763(5.3)	290 $\pm$ 10	260(6.0)	93 $\pm$ 10	73(15)
W	-	4.43(30)	15.8 $\pm$ 18	9.15(30)	80 $\pm$ 13	1.97(30)
Th	217 $\pm$ 40	143(2.7)	687 $\pm$ 45	348(2.5)	200 $\pm$ 10	101(2.5)
U	-	134(3.3)	45.2 $\pm$ 50	29.5(3.4)	50 $\pm$ 10	37(3.5)

To investigate the behavior of REE in ore samples, their REE concentrations are normalized to chondrite value. The chondrite values used are recommended by HOSHIN et al [7]. The chondrite normalized 10 REE patterns for rare earth ores are given in Fig 1. It is shown that the REE patterns of all ore samples are similar. The results of the REE patterns are very useful for studying geological structure, the formation of REE in the earth's crust and environmental pollution.

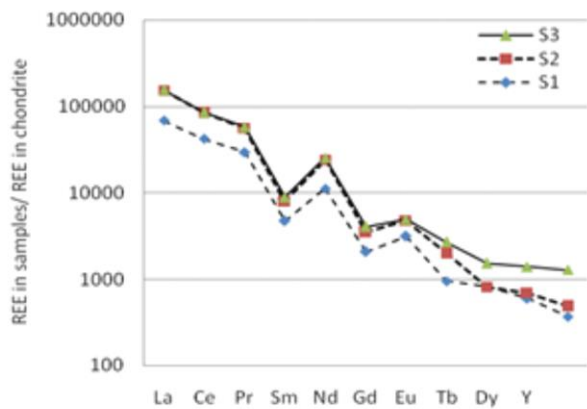


Fig 1. Chondrite normalized REE patterns for studied samples

IV. CONCLUSION

Comparing the results obtained for elemental analysis in rare earth ore, it can be noted that both methods present satisfactory results comparatively. According to the quantitative analysis of REEs in the rare earth ore samples there is an acceptable agreement between the WDXRF and INAA measured values.

In the analysis of rare earth ores with high content of trace elements needed to use standard samples, similar in elemental composition to the matrix of the studied objects.

To improve the results of the INAA techniques it is necessary the use of CRM for REE and the results can be considered very satisfactory, since relative deviation around 30% can be considered accurate when using CRM. Finally, for our further investigations we can use the WDXRF with ICP-MS method. In spite of the good comparability of the WDXRF results with INAA, this one is more suitable method than the INAA for the determination of the REE concentration in ore. INAA is a time consuming and expensive method, and requires a nuclear reactor and long cooling times prior to the concentration measurements.

- [1] John C.K. Daly, "Mongolia's Rare Earth Reserves Draw Foreign Investor Interest." Central Asia Economic Paper No 1, 2012.
- [2] J. C. 'Laul, et al., J. Radioanal. Nucl. Chem., 112, 461 (1987).
- [3] T. Honda, T. Oi et al., J. Radioanal. Nucl. Chem., 130, 81 (1989).
- [4] M.V. Frontasyeva, et al., Proc. Int. Symposium on Harmonization of Health Relate Environmental Measurements Using Nuclear and Isotopic Techniques (Hyderabad. India. 4-7 November, 1996). IAEA 1997. P. 301-311.
- [5] S.S. Pavlov, et al., Analytical investigation at the IBR-2 reactor in Dubna. JINR Preprint. E14-2000-177, 2000, Dubna.
- [6] A.Yu. Dmitriev, et al., J. Particles and Nuclei, Letters. 10(178), 58-64. (2013).
- [7] L. A. Haskin, M. A. Haskin, In Origin and Distribution of the Elements, H. Ahrens (Ed.), PeIgamon Press, 1968, p. 889

Төмрийн Хүдэр Дэх Төмөр, Цахиур, Хөнгөн Цагаан, Кальцийн Агуулга Тодорхойлох Энергизэр Ялгах Рентген-Флуоресценцийн Арга

С. Гүнжидмаа

Шинжлэх Ухааны Академи, Физик Технологийн Хүрээлэн

Энэ ажилд төмрийн хүдэр дэх төмөр, цахиур, хөнгөн цагаан, кальцийн агуулгыг тодорхойлох энергизэр ялгах рентген-флуоресценцийн арга боловсруулав. Жиших муруйг төмрийн 20-67 %, цахиурын 5-61 %, хөнгөн цагааны 1-3.6 %, кальцийн 0.1-2.8 % агууламжийн мужид байгуулсан.

PACS numbers: 78.70.En

I. УДИРТГАЛ

Рентген-флуоресценцийн шинжилгээний арга нь аливаа дээжийг рентген туяагаар өдөөж үүсэх флуоресценцийн цацрагийг бүртгэн авч, түүний энерги ба эрчмээр уг дээжинд байгаа химийн элемент, түүний агуулгыг тодорхойлох зарчимд үндэслэнэ. Хятад улсад үйлдвэрлэсэн “WISDOM 8200” багажийн үзүүлэлтэд тохируулан төмрийн хүдрийн дээжинд шинжилгээ хийх арга зүйг боловсруулав. Энэхүү арга нь төмрийн хүдрийн дээжинд Fe, Si, Al, Ca-ийн агуулгыг болон төмрийн хүдрийн найрлагатай төстэй дээжүүдэд төмрийн агуулгыг тодорхойлоход хэрэглэгдэнэ.

II. АРГАЗҮЙ

Рентген хоолойд өндөр хүчдэл өгөхөд анхдагч рентген цацраг үүсэх ба түүгээр дээжийг өдөөхөд элементүүдийн атомын дотоод бүрхүүлээс электрон сугаран гарч, суларсан орон зайд гадна давхаргаас их энергитэй электрон шилжин ирэхдээ илүүдэл энергиэ цацаргаснаар тодорхойлогч рентген цацраг үүсдэг. Үүссэн тодорхойлогч рентген цацрагийг детектор бүртгэн авч, өсгөгч, анализатор, тоон хувиргагчийн тусламжтайгаар тоон сигналд хувирган компьютерт очиж, мэдээллээ тооцоолон боловсруулахдаа тодорхойлогч рентген цацрагт харгалзах спектрийн шугамын энергийн утгаар нь тухайн элементийг, түүний эрчмээр нь элементийн агуулгыг тодорхойлдог. Анхан шатны хатаалт, нунтаглалт болон хуурай болгосны дараа дээжийг шинжилж үр дүнг гаргана. Жиших муруйг төмрийн 20-67 %, цахиурын 5-61 %, хөнгөн цагааны 1-3.6 %, кальцийн 0.1-2.8 % агуулгын мужид байгуулсан. Төмөр, цахиур, хөнгөн цагаан, кальцийн $K_{\alpha 1}$ пикийн эрчмүүдээр агуулгыг тодорхойлох тохируулгын муруйг тус тусад нь гаргаж авна.

A. Тоног төхөөрөмж

Судалгаанд Ag анодтай рентген хоолой, 5.9кэВ энергид 175эВ ялгах чадвартай, хагас дамжуулагч Si(Li) детектор, олон сувагт

анализатор бүхий энергизэр ялгах рентген-флуоресценцийн спектрометр ашиглана.

B. Дээж бэлтгэл

Рентген-флуоресценцийн аргын үнэмшил, давтац нь дээж бэлтгэлээс шууд хамааралтай байдаг. Бэлтгэсэн дээжийн ширхэглэлийн хэмжээ, түгэлт нь шинжилгээний дээжийн бүх эзэлхүүнд нэгэн төрлийн байх шаардлагатай.

Дээжийг хатаах зууханд 100°C-т 5 минут хатаагаад, нунтаглагчаар ширхэглэлийн хэмжээг 0.075-0.1 мм болтол сайтар нунтаглана. Бэлтгэсэн дээжнээс 5 г таслан авч, дээж хэвлэгчид жигд тараан хийж, 10 г борын хүчил (H_3BO_3)-ээр жигд бүрнэ. Дээжээ шахагч аппаратад байрлуулан, 60 секундын турш 20 мПа даралттай дарж нягтруулж, 40 мм диаметртэй шахмал дээж хэлбэрээр бэлтгэнэ. Шахсан дээжийн зузаан нь энергээр ялгах рентген-флуоресценцийн спектрометрийн рентген цацрагийг бүрэн шингээхүйц байх хэрэгтэй.

ТАЙЛБАР: Дээж бүрийн хувьд дээж бэлтгэл нь дараах хэсгээс бүрдэнэ: жижиглэх, холих, нунтаглах, шахах, бэлтгэгчийн нэр, бэлтгэсэн он сар хугацааг тэмдэглэх. Бэлтгэсэн дээжийг гаргаж, аяганы ард тэмдэглэгээ хийж, дээжийн нүүрийг гэмтээхгүй байхаар байрлуулна. Дээж хэвлэгчид үлдсэн үлдэгдлийг арчиж, чийгтэй алчуураар цэвэрлэнэ.

C. Багажийг хэмжилтэнд бэлтгэж, тохируулга хийх

Багаж үйлдвэрлэгчийн гарын авлагад заасан хугацааны турш рентген цацрагийн спектрометрийг асааж тогтворжуулна. Детектор хөргөх үүрэгтэй шингэн азотын савыг шингэн азотоор хангалттай хэмжээнд цэнэглэсэн байна.

III. ҮР ДҮН БА ДҮГНЭЛТ

$R=0.95$ үед хэмжилтийн үр дүнгийн абсолют хүлцэл нь хүснэгт 1-т байгаа утгаас хэтрэхгүй байна.

1-р хүснэгт. $P=0.95$ үед хэмжилтийн үр дүнгийн абсолют хүлцэл

Элемент	Элементийн агуулга %	Абсолют хүлцэл %
Хөнгөн цагаан	0.99-1.08	0.13
	1.68-2.27	0.29
	2.27-3.57	0.38
Кальц	0.14-0.52	0.04
	0.52-1.36	0.15
	1.36-2.84	0.05
Төмөр	20.17-49.50	0.66
	49.50-61.46	0.88
	61.46-66.87	1.07
Цахиур	5.05-8.07	0.85
	8.07-16.30	0.30
	16.30-60.86	0.93

Тохируулгын муруй нь элементийн агуулгыг тэдгээрийн эрчим дээр тулгуурлан тодорхойлдог. Энэ тохиолдолд элементийн агуулгыг багажийн програм хамгамжийн тусламжтайгаар тодорхойлсон. Төмрийн хүдрийн стандарт дээжүүдийг хэмжихэд дундаж абсолют алдаа нь Al-ний хувьд 0.3%, Ca-ийн хувьд 0.8%, Fe-ийн хувьд 0.9%, Si 0.9% байв. Энэ нь энергээр ялгах рентген-флуоресценцийн аргаар төмрийн хүдэр дэх зарим элементүүдийн агуулгыг тодорхойлох боломжтой болохыг харуулж байна.

-
- [1] А.Н.Смагунова, В.А.Козлов. “Примеры применения математической теории эксперимента в рентгенфлуоресцентном анализе”Изд-во ИГУ. 1990, х. 230
- [2] Н.Ф.Лосев. “Количественный рентгенспектральный флуоресцентный анализ” Изд-во Наука. 1969, х. 336
- [3] Wisdom 8200 EDXRF Analyzer, Operation manual, Shanghai Proficient Spectra Instrument LTD, 2008
- [4] Д.Отгонжаргал “Төмрийн хүдэрт энергийн дисперст рентгенфлуоресценцийн аргаар анализ хийх тохиромжтой нөхцлийг математик төлөвлөлтийн тусламжтайгаар сонгох” бакалаврын дипломын ажил, 2011, удирдагч багш С.Гүнжидмаа, О.Болормаа /МУИС/

Бага Дунд Чадалтай Реакторыг Монгол Улсад Ашиглах Асуудалд

С. Одмаа, Н. Норов

Монгол Улсын Их Сургууль, Цөмийн Физикийн Судалгааны Төв,

Монголын хүн амын нягтрал бага бөгөөд хүн ам төвлөрсөн аймгийн төв, хот суурин газрын эрчим хүчний хэрэглээний өсөлтийг авч үзвэл Монголд 10-100 МВт цахилгааны чадалтай, дэвшилтэт технологитой, аюулгүй байдлын идэвхгүй шинж чанартай бага дунд чадлын реактор сонгон ашиглах зохимжтой талаар энэхүү өгүүлэлд өгүүлэв.

I. ОРШИЛ

Монгол улсын эрчим хүчний хэрэглээний дийлэнх хэсгийг нүүрсээр ажилладаг хуучирсан цахилгаан дулааны станцууд хангаж байгаа бөгөөд сүүлийн жилүүдэд уул уурхайн үйлдвэрлэл, орон сууцны хөтөлбөр хэрэгжүүлэхтэй холбоотой эрчим хүчний хэрэглээ өсөн нэмэгдэж байна. Манай улсад цөмийн түлшний түүхий эд болох ураны 135 мянган тонн нөөц тогтоогдсон бөгөөд 3 ураны үйлдвэрийн техник, эдийн засгийн үндэслэл батлагдсан байна. Монгол улсын засгийн газраас эрчим хүчний эх үүсвэрийн боломжит нэгэн хувилбар нь цөмийн энерги байна гэж үзэж байгаа бөгөөд зохих хууль зүйн орчин бүрдэж, бодлого хөтөлбөр хэрэгжиж байна. Дэвшилтэт технологитой, аюулгүй байдлын идэвхгүй шинж чанартай бага, дунд чадалтай реактор (БДР)-ын дизайны судалгаа дэлхийн олон оронд хийгдэж байгаа бөгөөд эдгээрийн ихэнх нь 2020 оноос ашиглалтад орох төлөвтэй байна.

БДР-ыг дэлхийн олон оронд, ялангуяа цахилгаан сүлжээний багтаамж багатай эсвэл цахилгаан эрчим хүчний хэрэгцээ багатай хөгжиж буй орнууд сонирхож байгаа билээ. Мөн БДР-ыг далайн ус цэнгэгжүүлэх, байр орон сууцны халаалт, устөрөгч үйлдвэрлэл зэрэг эрчим хүчний бус дулааны эх үүсвэрт хэрэглэхэд тохиромжтой. Ерөнхийдөө дэлхий дахинд 300 МВт-аас бага эрчим хүч үйлдвэрлэх реакторыг бага чадалтай реактор, 300-700 МВт бол дунд чадалтай реактор гэж үзэж байна [1].

Ойрын хугацаанд шинээр баригдах ихэнх цөмийн цахилгаан станц нь техник, технологийн дэвшлийг тусгасан батлагдсан систем болох усаар хөргөдөг реакторын дизайнтай байх төлөвтэй байна. Одоогоор ийм реакторууд 1600 МВт хүртэл цахилгааны чадлын хэмжээтэй байгаа. Цаашдаа аюулгүй байдал, цөмийн зэвсгийг үл дэлгэрүүлэлт, хаягдлын менежмент, нөөц ашиглалт, эдийн засаг, эцсийн бүтээгдэхүүний зориулалт (жишээ нь, далайн усыг цэнгэгжүүлэх, дулааны боловсруулалт, устөрөгч үйлдвэрлэл), тохиромжтой байрлал, түлшний цикл гэх мэт асуудлыг шийдэхийн тулд

сайжруулалт, шинэлэг дизайн хийгдэх хандлагатай байна. Бага, дунд чадалтай реакторын хувьд реактивитийн хяналт, реакторыг унтраах, задралын дулааныг зайлуулах, голомтыг хөргөх зэрэгт байгалийн хуульд үндэслэсэн идэвхгүй системийг нэвтрүүлэх, мөн дэвшилтэт, өндөр температурын түлшний болон хийцийн материалыг хэрэглэснээр түлшний гэмтэх магадлалыг бууруулах зэргээр маш олон шинэлэг дизайнууд хийж байна. Зарим БДР-ын дизайнд “шатдаг” шингээгч материал эсвэл хувиргах харьцаа ихтэй голомтыг хэрэглэн голомтын амьдрах хугацааг уртасгах боломжийн талаар судалж байна. Ихэнх нь одоо ажиллаж байгаа том оврын цөмийн цахилгаан станц (ЦЦС)-аас өөр зах зээлд зориулагдсан, өөрөөр хэлбэл цахилгааны хэрэгцээний өсөлт ба нийлүүлэлтийн хоорондох дутууг нөхөх зориулалттай бөгөөд тэдгээрийг байрлуулахад илүү уян хатан байдаг.

II. БДР-ын ТУХАЙД

2012 оны байдлаар үндэстний болон олон улсын хамтарсан программаар дэлхийн олон орнуудын хөгжүүлсэн 50 гаруй БДР-ын ерөнхий зарчим, дизайныг хийж, судалсан байна [2-5]. Эдгээрээс 2012 оны байдлаар батлагдсан дизайнтай 9 БДР байгаа (хүснэгт 1) ба ихэнх нь даралтат хоолойт төрлийн хүнд усан хөргөлттэй реактор, зарим нь ердийн даралтат усан хөргөлттэй реактор болно. Мөн шинэлэг дизайнтай БДР-ыг зохион бүтээж байгаа ба ажиллаж байгаа реакторуудын зарчмыг уламжлалт бус реакторуудтай хослуулан хөгжүүлж байна.

БДР-ын дизайн хийхдээ том оврын реакторын үед хэрэглэдэгтэй адилаар ослын үед алдагдах цацрагаас хүн ам болон байгаль орчныг хамгаалахад ашигладаг аюулгүй байдлын стратегийг зарчим болгож байна. Ингэхдээ аюулгүй байдлын төрөлхийн ба идэвхгүй системийг идэвхтэй системтэй хослуулан аюулгүй байдлын түвшинг сайжруулж байна. Бага чадалтай реакторын зарим нийтлэг шинж чанар нь аюулгүй байдлын идэвхгүй шинжийг

өөртөө агуулсан байдаг, тухайлбал реакторын гадаргууг эзэлхүүнд харьцуулсан харьцаа их байх нь задралын дулааныг зайлуулах төрөлхийн чадвартай болгох ба голомтын чадлын нягтыг багасгадаг. Дизайны аюулгүй байдлын хамгийн эхний зорилго нь ихэнх ослын гол шалтгаан, үр дагаврыг аль болох байхгүй

болгох эсвэл багасгах юм. Ослын бусад шалгаан, үр дагаврыг аюулгүй байдлын идэвхтэй болон идэвхгүй системээр зохицуулдаг. БДР-ын дизайны гол зорилго нь аюулгүй ажиллагааны маш өндөр түвшинд ажилладаг хирнээ хамгийн энгийн хийцтэй байх мөн гэнэтийн аюулын үеийн шаардлагыг багасгах юм.

Хүснэгт 1. Батлагдсан дизайнтай БДР-ын үзүүлэлт (2012 оны 7 сарын байдлаар) [2,3]

Нэр, улс	Чадал, МВт-дул/МВт-цах	Реакторын төрөл	Ашиглах хугацаа, жил	Барих хугацаа, сар	Голомт гэмтэх магадлал	Цацраг идэвх алдагдах магадлал	Хүчин чадал ашиглалт
CANDU-6, Канад	2064/715	PHWR	40	60	-	-	88.8 %
EC-6, Канад	2250/740	PHWR	60	57	$>10^{-5}/\text{РЖ}$	$>10^{-6}/\text{РЖ}$	90 %
PHWR-220, Энэтхэг	862/220	PHWR	40	60	$>10^{-5}/\text{РЖ}$	$>10^{-6}/\text{РЖ}$	90 %
PHWR-540, Энэтхэг	1700/540	PHWR	40	-	$>10^{-5}/\text{РЖ}$	$>10^{-6}/\text{РЖ}$	90 %
PHWR-700, Энэтхэг	2200/700	PHWR	40	-	$>10^{-5}/\text{РЖ}$	$>10^{-6}/\text{РЖ}$	90 %
KLT-40S, ОХУ	2*150/2*35-2*40	PWR	40	48	$10^{-6}/\text{РЖ}$	$10^{-7}/\text{РЖ}$	$> 85 \%$
QPR-300, Хятад	1000/310-325	PWR	40	84	-	-	79 %
CNP-600, Хятад	1936/644	PWR	60	83	-	-	87 %
SMART, Солонгос	330/90	Интеграл PWR	60	36	$10^{-7}/\text{РЖ}$	$10^{-8}/\text{РЖ}$	$> 95 \%$
Тэмдэглэлгээ:							
МВт-дул		МВт цахилгааны чадал					
МВт-цах		МВт дулааны чадал					
РЖ		Реактор жил					

Зарим БДР-ын дизайнд реакторын даралтат цилиндр дотор уурын генератор болон даралт тохируулагчийг хамтад нь багтааж өгсөн байх ба реакторын даралтат цилиндр рүү том диаметртэй хоолойнуудыг холбох шаардлагагүй болж эдгээр хоолойн эвдрэлээс үүдэх LOCA (хоолойн эвдрэлээс болж хөргүүр их хэмжээгээр алдагдах осол) осол гарах шалтгаангүй болно. Мөн даралтат цилиндр дотор тохируулгын саваанууд хөдөлдөг байхаар хийж өгснөөр уг саваануудыг санамсаргүйгээр голомтоос гаргаснаар голомтын реактивити ихэсч осолд хүргэх боломжгүй болох ба реакторын даралтат цилиндр рүү орох хоолойн тоог цөөрүүлж өгдөг. Хөргүүр алдагдахаас сэргийлэх бас нэг арга нь реакторын бүрэлдэхүүн хэсгүүдийг хооронд нь аль болох богинохон хоолойгоор цөөн удаа холбож өгөх юм. Нөгөө талаас өндөр температурын хийн хөргүүртэй реактор (HTGR)-ууд гурван өөр бүтэцтэй изотроп давхрагатай бөмбөлөг (TRISO) түлшээр

ажилладаг бөгөөд эдгээр давхрага нь өндөр температурт ч хуваагдлын бүтээгдэхүүнүүдийг гадагш алдахгүй барих чадвартай юм. TRISO түлш нь хөнгөн усан реактортой харьцангуйгаар аюулгүй ажиллагаатай системийн дизайн хийхэд онцгой боломж олгодог. HTGR нь өөрөө задралын дулааныг идэвхгүйгээр зайлуулах чадвартай.

БДР-ын эдийн засгийн үзүүлэлтийг сайжруулахын тулд тэдний ихэнхийнх нь дизайн дараах шаардлагуудыг хангадаг байх хэрэгтэй. Үүнд:

- Станцын хийцийг хялбарчилж, дизайныг сайжруулснаар ослын шалтгаан, үр дагаврыг бууруулах;
- Реактор барих хугацаа, үнийг бууруулж, хөрөнгө оруулалтыг нөхөх хугацааг түргэвчлэх (реакторын хэмжээ тээвэрлэж болохуйц авсаархан байх, станцын нутаг дэвсгэрт тодорхой сайжруулалт хийхгүйгээр стандарт дизайнтай байх);

- Стандартчилагдсан станц буюу бүхэл систем, компонентийг бүрдүүлэх тоног төхөөрөмжийн модулийг хэд хэдэн сери байдлаар их хэмжээгээр үйлдвэрлэн үнийг бууруулах арга хэмжээ авах;
- Барих өртгөө хэмнэхийн тулд станцын чадлыг нэмэгдүүлэх сонголтоо “яг цагт нь” хийхээр төлөвлөх, ерөнхийдөө жижиг модуль хэмжээтэйгээр барих нь мөнгөний хүү болон хөрөнгө оруулалтын эрсдлийг багасгах зэрэгт ач холбогдолтой.

Цөмийн реактор бага юмуу дунд хэмжээтэй байх нь уг дизайны цөмийн зэвсэг үл дэлгэрүүлэх чадварыг нэмэгдүүлдэг. Цөмийн зэвсгийг дэлгэрүүлэхийг эсэргүүцэх чадвар нь техникийн үзүүлэлт, үйл ажиллагааны сонголтоос хамаардаг.

HTGR-д байх цөмийн зэвсэг дэлгэрүүлэхийг эсэргүүцэх нийтлэг үзүүлэлт нь түлшний шаталт өндөр (ингэснээр үлдэгдэл Pu-ийн хэмжээ бага, гэхдээ Pu²⁴⁰-ийн хэмжээ их болдог), дахин боловсруулахад төвөгтэй түлшний бүтэц, цөмийн цацраг суллагдаж гарах саад өндөр, хуваагдагч материалын хэмжээг түлшний блок/түлшний давхаргын материалын хэмжээнд харьцуулсан харьцаа бага зэрэг юм. TRISO түлшийг зарим дэвшилтэт усан хөргүүртэй, хайлмал давсан хөргүүртэй, Pb-Bi хөргүүртэй БДР-т ашиглахаар дизайн хийгдэж байна. Ингэснээр эдгээр реакторууд мөн цөмийн зэвсэг дэлгэрүүлэхийн эсрэг шинж чанартай болно.

Ихэнх БДР-ын хувьд станцын нутаг дэвсгэрт цөмийн түлшийг дахин цэнэглэдэггүй байхаар дизайн хийж байгаа нь цөмийн зэвсэг дэлгэрүүлэхийн эсрэг шинж чанарын нэг юм. Үйлдвэрт угсарч, түлшийг нь ачаалсан реакторыг хүрээлэн буй орчинд илүү цэвэр, энгийн, аюулгүй гэж үздэг, яагаад гэвэл энэ нь урт настай батерей л гэсэн үг бөгөөд маш сайн битүүмжлэгдсэн тул станцын нутаг дэвсгэрт ажиллах хугацаанд түлшний ямар нэгэн зохицуулалт шаардахгүй юм.

БДР нь том оврын цөмийн цахилгаан станцаас хувийн өртөг ихтэй байх ч тэдний үзүүлж чадахгүй байгаа дараах үйлчилгээг дэвшилтэт БДР-ууд зохих хэрэглэгчдэд үзүүлж байгаагаас эдийн засгийн ашиг нь олдоно:

- Бага юмуу дунд зэргийн цахилгааны хэрэглээтэй эсвэл цахилгааны хэрэглээний өсөлт нь хязгаарлагдмал байдаг улс орон мөн газар нутаг томтой ч хүн амын нягтаршил багатай улс орон;
- Төвлөрсөн эрчим хүчний системээс алслагдсан хот, тосгон, арлын орнууд,

энергийн их хэрэглээтэй үйлдвэрийн газрууд;

- Хязгаарлагдмал хөрөнгө оруулалттайгаар хөгжиж буй орны хотууд.

2006 оны байдлаар дэлхий дээр ажиллаж байсан 435 реакторын 23 нь жижиг, 109 нь дунд, 303 нь их чадлын реакторууд юм. Баригдаж байгаа 29 реакторын 4 нь жижиг, 5 нь дунд, 20 нь том реактор юм. Улс үндэстний эрчим хүчний бүтэцэд цөмийн эрчим хүчний хэрэглээ өсөх хандлага ажиглагдаж байгаа ба цөмийн үйлдвэрлэлийн хэрэглээний олон талын хэрэглэгчид өсч байна. Өсөн нэмэгдэж буй хэрэглэгчдийн хэрэгцээг одоо хөгжүүлж буй дэвшилтэт БДР-ын дизайн сайн хангаж чадна.

III. МОНГОЛ УЛСАД БДР АШИГЛАХ ШААРДЛАГА

2010 оны байдлаар манай улсын нийт хүн амын тоо 2.750.000 гаруй байсан бөгөөд энэ оныг суурь он болгон аваад хүн амын дундаж өсөлтийн 1,98% гэж үзэн 2035 он хүртэлх хүн амын тоог бүс нутгаар бүсчлэн 2-р хүснэгтэд үзүүлэв. Хүн амын өсөлттэй уялдуулж төвийн эрчим хүчний системд холбогдсон аймгуудын эрчим хүчний хэрэглээний өсөлтийг 3-р хүснэгтэд, нийт цахилгааны хэрэглээний таамаглалыг бүтцээр нь 1-р зурагт харуулав.

Адил чадалтай цөмийн болон нүүрсний станцын хүрээлэн буй орчны бохирдолд үзүүлэх нөлөөг харьцуулж үзүүлэв. Шивээ-Овоогийн нүүрс шатаах 100 МВт чадалтай цахилгаан станцад жилд шаардагдах түлшний хэмжээ, түүний шаталтаас үүсч агаар мандалд хаягдах хүлэмжийн хий болон тоосны хэмжээг тооцож үзье. Тус станцаас жилд үйлдвэрлэх цахилгаан эрчим хүч:

$$W_{\text{цах}} = N_{\text{цах}} \cdot \phi \cdot 10^3 = 100 \cdot 10^3 \cdot 5500 = 0.55 \cdot 10^9 \text{ кВт} \cdot \text{цаг}$$

болно.

Үүнд: $N_{\text{цах}}$ -суурилагдсан чадал, кВт,

ϕ -суурилагдсан чадлын ашиглалт, 5500 цаг/жил.

Нүүрсний жилийн хэрэглээ:

$$Q = W_{\text{цах}} \cdot m_{\text{хувь}} \cdot 10^{-3} = 0.55 \cdot 10^9 \cdot 0.778 \cdot 10^{-3} =$$

$$= 0.43 \cdot 10^6 \text{ тн/жил}$$

болно. Үүнд: $m_{\text{хувь}} = 0.778 \text{ кг/кВт} \cdot \text{цаг}$ Шивээ-Овоогийн нүүрсний хувийн зарцуулалт

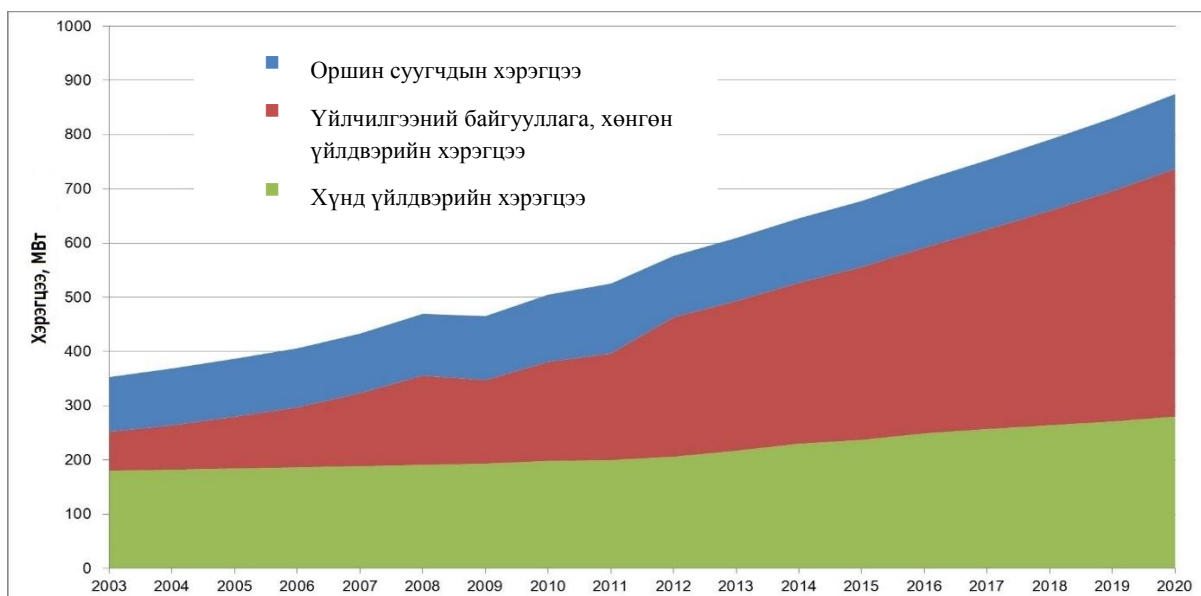
Шивээ-Овоогийн нүүрсний дулаан гаргах чадвар 2950 ккал/кг (12,6 МЖ/кг), үнслэг 17.5 %, хүхэр 0,8 %, азот 0,5 %, цахилгаан статик шүүлтүүрийн үнс барих чадвар 99.6% гэж үзэж,

агаар мандалд хаягдах SO₂, NO₂ болон үнсний хэмжээг тооцов. Шивээ-Овоогийн нүүрс шатаар

станцад жилд хэрэглэх нүүрс, түүнээс хаягдах хорт бодисын хэмжээг 4-р хүснэгтэд үзүүлэв

Хүснэгт 2. Хүн амын тоо (суурь он 2010), хүн амын дундаж өсөлт 1,98%

Аймаг/ Нийслэл	2010	2014	2015	2020	2025	2030	2035
Баруун бүс							
Баян-Өлгий	88056	95239.91	97125.66	107129.5	118163.7	130334.4	143758.7
Говь-Алтай	53590	57962.06	59109.71	65197.93	71913.24	79320.22	87490.11
Завхан	65481	70823.17	72225.46	79664.6	87869.96	96920.46	106903.1
Увс	73328	79310.35	80880.7	89211.31	98399.97	108535	119714
Ховд	76870	83141.32	84787.52	93520.53	103153	113777.7	125496.6
Хангайн бүс							
Архангай	84584	91484.65	93296.05	102905.4	113504.6	125195.4	138090.4
Баянхонгор	76085	82292.28	83921.66	92565.49	102099.6	112615.8	124215.1
Булган	53655	58032.36	59181.4	65277.01	72000.47	79416.43	87596.22
Орхон	90700	98099.62	100042	110346.2	121711.7	134247.9	148075.3
Өвөрхангай	101314	109579.5	111749.2	123259.3	135954.8	149958	165403.5
Хөвсгөл	114926	124302.1	126763.2	139819.7	154221	170105.5	187626.2
Төвийн бүс							
Говьсүмбэр	13240	14320.16	14603.7	16107.87	17766.96	19596.93	21615.39
Дархануул	94625	102344.8	104371.3	115121.4	126978.7	140057.4	154483.1
Дорноговь	58612	63393.77	64648.97	71307.73	78652.34	86753.44	95688.94
Дундговь	38821	41988.15	42819.52	47229.87	52094.5	57460.17	63378.49
Өмнөговь	61314	66316.21	67629.27	74595	82278.2	90752.75	100100.2
Сэлэнгэ	97584	105545.2	107635	118721.3	130949.5	144437.1	159314
Төв	85166	92114.14	93938	103613.5	114285.6	126056.8	139040.5
Зүүн бүс							
Дорнод	69552	75226.29	76715.77	84617.4	93332.9	102946.1	113549.4
Сүхбаатар	51334	55522	56621.34	62453.27	68885.88	75981.04	83807
Хэнтий	65811	71180.09	72589.45	80066.08	88312.79	97408.9	107441.9
Улаанбаатар							
Улаабаатар	1240037	1341203	1367759	1508637	1664025	1835417	2024463
Нийт	2754685	2979422	3038414	3351367	3696554	4077295	4497251



Зураг 1: ТЭХС-ийн цахилгааны хэрэглээний таамаглал-МВт (нийт)

Хүснэгт 3. ТЭХС дэх аймгуудын цахилгааны хэрэглээ, МВт

	2014	2015	2016	2017	2018	2019	2020
Архангай	15.41	16.41	17.67	18.97	20.41	21.99	23.43
Баянхонгор	24.82	26.5	28.27	30.25	32.33	34.51	36.89
Булган	4.59	4.68	4.98	5.17	5.36	5.65	5.85
Дархануул	27.22	28.87	30.53	32.43	34.44	36.58	38.84
Дорноговь	23.95	25.49	27.12	29.13	31.15	33.27	35.58
Дундговь	11.87	12.69	13.44	14.43	15.41	16.5	17.58
Говьсүмбэр	6.76	7.27	7.78	8.29	8.91	9.52	10.24
Хөвсгөл	63.3	67.64	72.46	77.54	83.01	89.02	95.42
Орхон	27.5	29.19	30.92	32.93	34.94	37.18	39.53
Сэлэнгэ	36.85	39.29	42.03	44.87	48.02	51.36	55.01
Төв	49.5	53.06	56.76	60.76	65.19	69.85	74.85
Өвөрхангай	8.31	8.63	9.17	9.76	10.31	10.9	11.66
Улаанбаатар	331.89	352.69	374.91	398.41	423.64	450.45	479.07
Нийт	631.97	672.41	716.04	762.94	813.12	866.78	923.95

Хүснэгт 4. Шивээ-Овоогийн нүүрс шатаах станцийн жилд хэрэглэх түлш, түүнээс хаягдах хорт бодисын хэмжээ

Түлш	Хаягдал (тн/жил)	Тайлбар
Түлшний зарцуулалт		
Нүүрс	$0.43 \cdot 10^6$	Шивээ-Овоогийн нүүрсний хувийн зарцуулалт 0,778 кг/кВт·цаг
Хаягдал (тн/жил)		
Нүүрсхүчлийн хий (CO_2)	698.000	Агаар мандалд хаягдана
Угаарын хий (CO)	2.354	Агаар мандалд хаягдана
Эквивалент CO_2	700.404	Агаар мандалд хаягдана
Хүхрийн давхар исэл (SO_2)	6.193	Агаар мандалд хаягдана
Азотын давхар исэл (NO_2)	365.0	Агаар мандалд хаягдана
Үнс	30	Агаар мандалд хаягдана
Уран	0,0017	Агаар мандалд хаягдана
Үнс	75.250	Үнсэн санд хадгална.

Гэтэл 100 МВт цахилгаан үйлдвэрлэх чадалтай реактор жилд 1 тн орчим уран хэрэглэх бөгөөд хүлэмжийн хий ялгаруулахгүй юм. Аймгуудын цахилгааны хэрэглээний таамналаас харахад (Хүснэгт 3) Улаанбаатар хотын хувьд 100 МВт-ын 3-4 реактор, аймгийн төвүүдийн хувьд 10-30 МВт-ын 2-5 реактор бүхий ЦЦС барихад хүлэмжийн хий ялгаруулахгүйгээр хэрэгцээгээ хангах боломжтой нь харагдана.

IV. ДҮГНЭЛТ

1. Дэлхий дахиныг хамарсан дулаарлаас шалтгаалж АНУ, БНХАУ зэрэг нүүрсний нөөц ихтэй улсууд нүүрс шууд шатаадаг цахилгаан станцууд барихаас татгалзаж эхлээд байна. Иймээс ихэнх хөгжиж байгаа

орнууд эрчим хүчний хэрэгцээгээ сэргээгдэх эрчим хүч болон цөмийн эрчим хүчээр хангахаар төлөвлөж байна. Манай улс ч гэсэн мөн ийм замыг сонгох нь чухал юм.

- Манай орны эрчим хүчний хэрэгцээг 10-100 МВт-ын нэгж хүчин чадал бүхий одоо зохион бүтээгдэж байгаа бага, дунд чадалтай эрчим хүчний реакторуудаас сонгон хангах нь экологийн болон эдийн засгийн хувьд давуу талтай юм. 100 МВт нэгж хүчин чадалтай реактор бүхий станц нь жилд 0,43 сая тонн нүүрс хэмнэж, 706 мянган тонн хүлэмжийн хий, 30 тонн үнс, 1,7 кг уран агаарт хаягдахаас сэргийлэх болно.
- Дэвшилтэт технологитой, аюулгүй байдлын идэвхгүй шинж чанартай БДР нь хүн амын

нягтрал багатай манай орны аймгийн төв, хот
суурин газрын цахилгаан эрчим хүчний

хэрэглээг хангах боломжтойг харуулав.

-
- | | |
|---|---|
| <p>[1] Nuclear technology review 2012. IAEA, Vienna, 2012</p> <p>[2] Status of small and medium sized reactor designs, Nuclear power technology development section, Division of nuclear power-Department of nuclear energy, IAEA, 2011</p> | <p>[3] IAEA. Advances in small modular reactor technology developments. A Supplements to IAEA advanced reactors information system (ARIS), IAEA, Vienna, 2014</p> <p>[4] Status of innovative fast reactor designs and concepts. A Supplements to IAEA advanced reactors information system (ARIS), IAEA, Vienna, 2013</p> <p>[5] Nuclear power technology development section. IAEA, Vienna, 2005.</p> |
|---|---|

Гамма Цацрагийн Үйлчлэлээр Усанболор (SiO₂)-т Үүсэх Эффектийн Судалгаа

Ч. Цэцэнжаргал¹, Т. Очирхуяг¹, Н. Төвжаргал¹, Д. Баатархүү², Л. Ням-Очир¹

¹ Монгол Улсын Их Сургууль, Шинжлэх Ухааны Сургууль, Физикийн тэнхим

² Монгол Улсын Их Сургууль, Цөмийн Физикийн Судалгааны Төв

Янз бүрийн үнэт чулууны өнгийг өөрчилж хүссэн өнгө хэлбэрт оруулах асуудал үргэлж судлаачдын сонирхлыг татаж байдаг. Бид энэ ажлаар байгалийн хагас үнэт чулуу болох усанболор (SiO₂)-ийн өнгийг гамма цацрагийн үйлчлэлээр өөрчилж, түүнд үүсэх эффектийг рентген дифракцын арга болон дулааны боловсруулалтаар микро-төвшинд тайлбарлав.

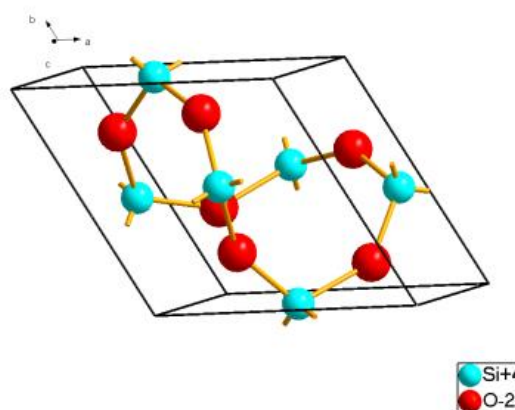
PACS numbers: 61.80.-x, 72.10.Fk

I. ОРШИЛ

Байгалийн үнэт болон хагас үнэт чулуулгуудыг гоёл чимэглэл, ахуйн зориулалтаар өргөн хэрэглэдэг. Эдгээр чулуулгуудыг гамма цацрагаар шарахад тэдгээр нь өнгөний хувиралд ордог. Энд үүсэж байгаа өнгөний хувирлын үүсэл шалтгааныг тайлбарлах нь чухал ач холбогдолтой. Гамма цацраг хатуу биетэй харилцан үйлчлэхэд тэнд гамма цацрагийн энергиас хамааран комптоны сарнил, фото-цахилгаан эффект, электрон позитроны хос үүсэх гэх мэт үзэгдэлүүд явагдах боломжтой. Түүнчлэн үнэт чулуулгийн өнгийг өөрчлөхдөө ихэвчлэн түүнийг янз бүрийн элемент, бодисоор хольцлох замаар янз бүрийн өнгө үзэмж чанар бүхий дээж гаргаж авдаг.

Тухайлбал усанболорыг Fe³⁺ ионоор хольцлоход үзмэн ягаан өнгөтэй болдог бол Be²⁺ ионоор хольцлоход ногоон өнгөтэй болдог. Болор нь байгаль дээр усанболор, утаат болор, сүүн болор гэж нэрлэгдэх хэлбэрүүдээр элбэг тохиолддог эдгээр нь бүтэц найрлагын хувьд ижил боловч кристалжилтаараа ялгаатай байдаг. Бид энэ ажлаар усанболор (SiO₂)-т гамма цацрагийн үйлчлэлээр үүсэх эффектийг рентген дифракцийн арга болон дулааны боловсруулалтаар судлаж түүнд үүсэж байгаа эффектийг микро-түвшинд тайлбарлах, түүний өнгийг гамма цацрагийн үйлчлэлээр хэрхэн өөрчлөж болох талаар судлах болно.

Бид дээжээ сонгохдоо байгальд өргөн тархацтай байдаг хагас үнэт чулуу болох усанболор (кварц)-ыг сонгож авсан. Энэ чулуу нь гоёл чимэглэлийн зориулалтаар манай орны хувьд өргөн хэрэглэгддэг. Зураг.1 болон хүснэгтэд усанболорын кристал бүтэц болон торын параметр зэргийг үзүүлэв.



Зураг 1: Усанболор (SiO₂) -ийн кристалл бүтэц

Усан болор (Кварц)-SiO₂

Симметр	P3221(154)
Торын параметр	a=b=4.913Å c=5.405Å α=β=90 γ=120
Эзэлхүүн	113.03Å ³

II. ТУРШИЛТ

Микротрон МТ-22: Бид эхлээд судлах дээж болох байгалийн цэвэр усанболороо тэнцүү 2 хэсэгт хуваагаад нэгийг нь МУИС-ийн ЦСТ-ийн Микротрон МТ-22 (Цацрагийн урсгалын нягт $\Phi_\gamma \approx (7,2 \cdot 10^{11} - 1,2 \cdot 10^{11}) \gamma/\text{см}^2 \cdot \text{с} \cdot \text{мкА}$, $E_e = 22 \text{ МэВ}$, $I_e = 9 \text{ мкА}$). цацраг идэвхт үүсгүүр дээр 22МэВ энергитэй гамма цацрагаар нэг цаг шарсан. Үлдсэн нэгийг нь шарсан дээжтэй харьцуулан судлах зорилгоор ашиглах болно.

Рентген цацрагийн дифрактометр: Гамма цацрагаар шарсны дараа дээжид явагдсан микро өөрчлөлтийг судалж бүтцийн өөрчлөлтийг атомын түвшинд тайлбарлах зорилгоор МУИС-ийн Рентген бүтцийн судалгааны лабораторийн PW1800 нунтаг дээжийн рентген дифрактометр (Cu ($K\alpha_1=1.5406\text{\AA}$, $K\alpha_2=1.54439\text{\AA}$) анод, Ni филтэртэй) дээр өмнө хоёр хэсэг болгон бэлдсэн гамма цацрагаар шарсан болон шараагүй хэмжилт хийж Jana2006 програмыг ашиглан Ритвельдийн аргаар[1] хэмжилтийн үр дүнг боловсруулсан.

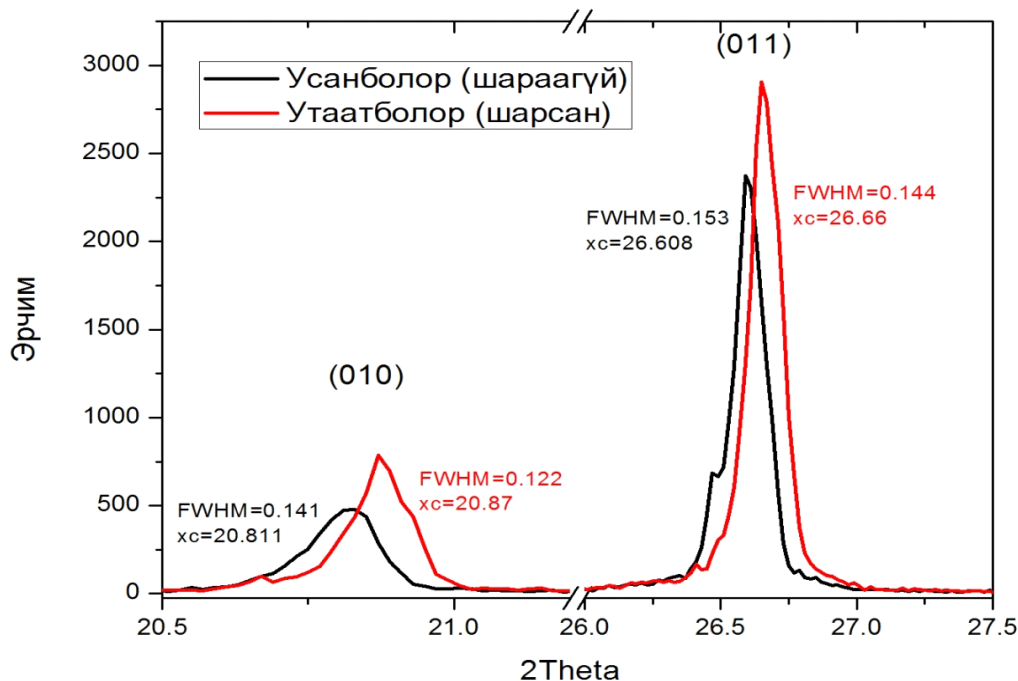
Дулааны боловсруулалт: Дээжид хийх дулааны боловсруулалтыг МУИС-ийн Орчны шинжилгээний лабораторын T6200 (Heraeus) хатаах шүүгээнд 100°C болон 200°C температурт хатааж туршсан.

III. ТУРШИЛТЫН ҮР ДҮН

Сонгож авсан усанболор (SiO_2)-ын дээжээ гамма цацрагаар шарсны дараа дээж гүн хар өнгөтэй болж утаат болор болсныг зураг.2-т үзүүлэв. Үүний дараа гамма цацрагаар шарсан дээж болон шараагүй дээж тус бүрийн кристалл бүтцийн өөрчлөлтийг нунтаг дээжийн рентген дифрактометрээр хэмжсэн хэмжилтийн харьцуулсан үр дүнг зураг.3-т үзүүлэв.



Зураг 2: Усан болорын гамма цацрагаар а) шараагүй болон б) шарсны дараах өнгөний хувирал.



Зураг 3: Гамма цацрагаар шарсан болон шараагүй усан болрын рентген дифракцын спектрийг кристаллографийн (010) болон (011) чиглэл дэх эрчмийн өөрчлөлт.

Зураг.3-аас үзэхэд энд рентген цацрагийн эрчмийн өөрчлөлтөөс гадна пикийн максимумын шилжилт ажиглагдаж байна.

Тэгш.(1) –ээс үзэхэд цацрагийн эрчим нь тухайн кристаллын бүтцийн фактортай шууд хамааралтай, бүтцийн фактор нь атомын

координат болон торын хавтгайтай шууд хамааралтай болох нь харагдаж байна. Иймээс

энэ торын хавтгай болон атомын координат өөрчлөгдөж байна гэж үзэж болох юм.

$$I \approx F^2; \quad F_{hkl} = \sum_{i=1}^n f_i T \exp[2\pi i (hx_i + ky_i + lz_i)] \quad (1)$$

Үүнийг бид Jana2006 программ ашиглан Ритвельдийн сайжруулалтын арга хэрэглэн торын параметруудийн өөрчлөлтийг тодорхойлсныг хүснэгт 2-т үзүүлэв.

Торын параметр	Усанболор	Утаат болор
a=b	4.9103Å	4.9097Å
c	5.4044Å	5.3997Å
V	112.8Å ³	112.7Å ³

Манай дээжээ шарсан Гамма цацраг 22МэВ энергитэй бөгөөд энэ тохиолдолд гамма цацраг бодистой харилцан үйлчлэхдээ knock-on буюу кинетик энергиэ шууд шилжүүлж атомуудыг шилжүүлэх процесс эсвэл radiolysis буюу электронуудыг өдөөх, холбоосыг таслах процесс явагдах боломжтой. Үүний дүнд нүх, интерстиционал болон валенс эффектүүд үүсэх боломжтой.

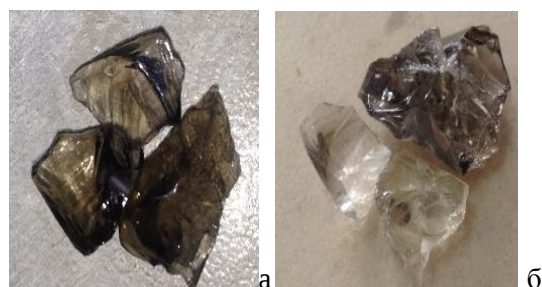
Ийм эффектүүдийг кристаллын F-center буюу өнгөний төв ч гэж нэрлэдэг. Өнгөний төвүүд их хэмжээгээр үүссэнээр тухайн кристаллын өнгө хувирах боломжтой. Өнгөний төвийн тоо нь доорх томьёоны дагуу идэвхжлийн энергиэс буюу өдөөж байгаа цацрагийн энергиэс хамаарна.

$$N_v = N \exp\left(\frac{Q_v}{kT}\right) \quad (2)$$

Хэрэв гамма цацрагийн үйлчлэлээр цэгэн болон шугаман дефект үүсэж байгаа бол дээжийг өндөр температурт тодорхой

хугацаагаар халааж дулааны боловсруулалтад оруулахад уг эффектүүд эдгэж дээж анхны өнгө, хэлбэртэй орох боломжтой.

Иймээс бид үүнийг шалгах зорилгоор шарсан дээжээ хатаах шүүгээнд 100°C –т 3 цаг, 200°C температурт 20 цаг халааж туршсан. Дээж халаалтын явцад өнгө нь аажмаар өөрчлөгдөж хагас тунгалаг болоод дараа нь тунгалаг болж анхны хэлбэртэй орж байгааг харуулав.



Зураг 4: Гамма цацрагаар шарж утаат болор болгосон дээж: а) Шарсны дараа 100°C-т 3 цаг халаасны дараа, б) Шарсны дараа 200°C-т 24 цаг халаасны дараа,

IV. ДҮГНЭЛТ

Усанболор (кварц)-ийг гамма цацрагаар үйлчлэхэд түүний өнгө өөрчлөгдөн утаатболор болон хувирч байна. Энэхүү өнгө хэмжилтийн үр дүн болон дулааны боловсруулалт зэргээс үзэхэд кристаллд цэгэн болон шугаман дефект үүсэж байгаатай холбоотой болохыг тогтоов. Усанболорын өнгийг тунгалгаас гүн хар хүртэл дулааны боловсруулалтын горимоор удирдаж болох нь харагдаж байна.

- [1] Л.Баяржаргал, Д.Сангаа, Д.Баатархүү, МУИС-ийн ЭШБ №179(10), 2003, 99-105
- [2] Б.Бумаа, А.Бадмаараг, Д.Баатархүү, Д.Сангаа, ШУА-ийн ФТХ-ийн ЭШБ №36
- [3] Rietveld H.M., Acta Cryst. 1967. V.22. P.151.
- [4] Jana2006 User's manual

Шингэний Дулаан Багтаамж Болон Зуурамтгайн Коэффициентийг Хольцийн Концентрацаас Хамааруулан Судлах нь

Б. Дөлгөөн, О. Бат-Оргил, Л. Энхсайхан, Н. Төвжаргал*

Монгол Улсын Их Сургууль, Шинжлэх Ухааны Сургууль, Физикийн тэнхим

Нарны энергийг шингээлт ашиглан дулааны энерги болгон хувиргах технологи болох нарны коллектор нь усан сан халаах, ахуйн хэрэглээний халуун ус гарган авах, байрны халаалтад ашиглах гэх зэргээр маш өргөн хэрэглэгддэг. Ийм нарны дулааны системийн нэг чухал бүрэлдэхүүн хэсэг болох дулаан дамжуулагч ажлын биеэр усыг ихэвчлэн ашигладаг боловч түүний зарим шинж чанарыг сайжруулах зорилгоор янз бүрийн нэмэлт уусгагч ашигладаг. Бид энэ ажлаар усны дулаан багтаамж болон зуурамтгайн коэффициентийг давс болон антифризийн концентрацаас хамааруулан судлав.

PACS numbers: 46.35.+z, 66.20.Ej, 65.20.Jk

I. ОРШИЛ

Орчин үед нарны энергийг дулааны коллекторт хуримтлуулан ахуйн хэрэглээний халуун ус болон байрны халаалт, усан сан халаах зэрэгт ашиглахаас гадна нарны дулааны цахилгаан станцад ашиглах туршилт судалгаа эрчимтэй хийгдэж байна. Энэ нь эдийн засгийн хувьд хэмнэлттэй, хүрээлэн буй орчинд хорт нөлөөгүй нөхөн сэргээгдэх эх үүсвэр бүхий энергийн үүсгүүр юм. Түүнчлэн өргөн уудам нутаг дэвсгэртэй, дэд бүтэц муу хөгжсөн манай орны хувьд энэ төрлийн энергийн үүсгүүр ашиглах судалгааг өргөнөөр хийж, нутагшуулах шаардлага гарч байна. Иймээс бид нарны дулааны системийн нэг чухал бүрэлдэхүүн хэсэг болох дулаан дамжуулагч ажлын бие болгон ашигладаг усны дулаан багтаамж болон зуурамтгайн коэффициентийг давс болон антифризийн концентрацаас хамааруулан судлав. Нарны энерги дулааны коллекторт тусахдаа олон хүчин зүйлээс шалтгаалан энергиэ алддаг бөгөөд үүнийг илэрхийлэх дулаан балансын тэгшитгэлийг дор үзүүлэв.

$$G_{\text{нийт}} = Q_{\text{гад}} + Q_{\text{ламх}} + Q_{\text{ойсон}} + Q_{\text{дамж}} + Q_{\text{гол}} \quad (1)$$

Энд:

- $G_{\text{нийт}}$ – нарнаас дулааны коллекторын гадаргууд ирж байгаа нийт энерги
- $Q_{\text{гад}}$ – гадаад орчинд алдаж буй энерги
- $Q_{\text{ламх}}$ – долгионы уртаас хамааран алдаж буй энерги
- $Q_{\text{ойсон}}$ – ойлтоор алдаж буй энерги
- $Q_{\text{дамж}}$ – дамжуулалтаар алдаж буй энерги
- $Q_{\text{гол}}$ – шингээлтээр дулаанд хувирах энерги

Нарны системийн ашигт үйлийн коэффициент η нь коллекторт шингээлтээр дулаан болох энерги болон нарнаас дулааны

коллекторын гадаргууд ирж байгаа нийт энергиэс хамаарна.

$$\eta = \frac{Q_{\text{гол}}}{G_{\text{нийт}}} 100\%. \quad (2)$$

Энд дулаанд хувиргах энерги $Q_{\text{гол}}$ нь системийн дулаан зөөгч орчин буюу ажлын биеийн дулаан багтаамж c_p , түүний масс m болон орж байгаа хүйтэн усны температур $\theta_{\text{оролт}}$, гарч байгаа халуун усны температур $\theta_{\text{гаралт}}$ – ээс дараах байдлаар хамаарна.

$$Q_{\text{гол}} = c_p m (\theta_{\text{гаралт}} - \theta_{\text{оролт}}) \quad (3)$$

Эндээс үзэхэд системийн дулаан зөөгч орчин буюу ажлын биеийн дулаан багтаамж c_p их байвал уг системийн ашигт үйлийн коэффициент өндөр байх нь харагдаж байна. Нарны дулааны системийн ажлын биед дараах үндсэн шаардлага тавигддаг. Үүнд:

- Өндөр дулаан багтаамжтай байх
- Зуурамтгай шинж чанар бага, урсах чадвар сайтай байх
- Ажиллах температурын хязгаар өргөн байх
- Дулаан дамжуулах шугамд зэврэлт үүсгэхгүй байх
- Шатамхай бус байх
- Химийн идэвхгүй, хоргүй байх зэрэг орно.

Ус хэдий эдгээр шаардлагуудыг хамгийн сайн хангадаг боловч түүний хөлдөх температур (0°C) бага байдаг нь эрс тэрс уур амьсгалтай манай орны хувьд шууд хэрэглэхэд тохиромжгүй байдаг. Энэ дутагдлыг арилгаж түүний ажиллах температурын хязгаарыг нэмэгдүүлэх зорилгоор усанд янз бүрийн хольц (давс, элсэн чихэр, антифриз, спирт г.м) нэмж өгдөг. Эдгэрийг тодорхой хэмжээгээр нэмж өгөхөд усны ажиллах температурын хязгаар нэмэгддэг боловч зуурамтгай шинж чанар нэмэгдэх, дулаан багтаамж нь багасах зэргээр өөрчлөгддөг. Иймээс хольцын найрлагын

*Electronic address: tuvjargal@gmail.com

зохистой харьцааг судалж тогтоох нь чухал ач холбогдолтой юм.

II. ТУРШИЛТ

Бид хольцын арга ашиглан тодорхой хэмжээтэй, хувийн дулаан багтаамж нь мэдэгдэж байгаа стандарт металл дээж (гууль, $m_p=120.8\text{г}$, $c = 0.387 \text{ Ж}/(\text{г} \cdot \text{К})$) ашиглан нарны дулааны системийн ажлын бие болох шингэний дулаан багтаамжийг тодорхойлох болно. Ингэхдээ металл дээжээ халуун усанд хийж халаагаад калориметрт ($C_k=(66\pm1)\text{Ж}/\text{К}$), байгаа тодорхой хэмжээтэй судлах шингэн дээр нэмж хийнэ. Шингэний дулаан багтаамж нь түүний температурын өөрчлөлтөөр тодорхойлогдоно.

Дулаан багтаамжийг тодорхойлохдоо дараах томъёог ашиглана.

$$C_w = \frac{C \cdot m_p (\theta_2 - \theta_m)}{m_w (\theta_m - \theta_1)} - \frac{C_k}{m_w} \quad (4)$$

Энд:

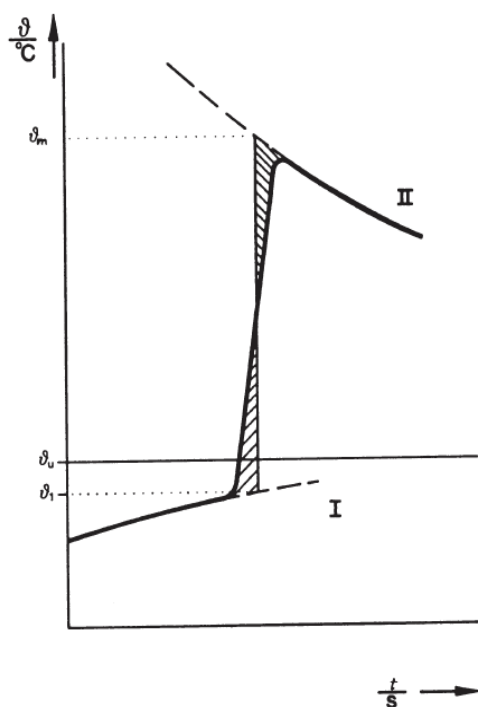
θ_1 – калориметр дэх шингэний анхны температур

θ_m – хольцын температур

θ_2 – металл дээжийг халаах усны температур

m_w – шингэний масс

C_k – калориметрийн дулаан багтаамж



Зураг 1: Хольцын туршилтын аргаар анхны температур θ_1 болон хольцын температур θ_m –ийг тодорхойлно. θ_u – орчны температур.

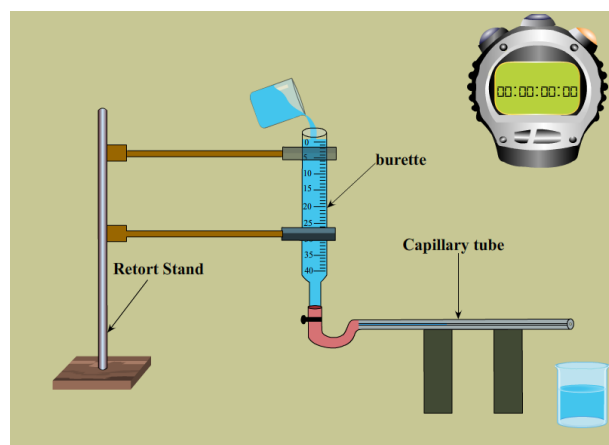
Хольцын туршилтын хэмжилтийн үр дүнгийн схемийг зураг.1 –т үзүүлэв. Эндээс бид шингэний анхны температур θ_1 болон хольцын

температур θ_m –ийг олоод шингэний дулаан багтаамж C_w –ийг тэгш.4 –ийг ашиглан тодорхойлох болно.

Шингэний зуурамтгайн коэффициентыг тодорхойлохын тулд капилляр хоолойгоор урсаж байгаа шингэний ламинар урсгалын Пуазейлийн томъёог ашиглан тодорхойлох болно.

$$V = \frac{\pi}{8} \frac{P_1 - P_2}{L} r^4 \frac{t}{\eta} \quad (5)$$

Энд V нь капилляр хоолойгоор t хугацаанд урсан өнгөрч байгаа шингэний эзлэхүүн, P_1, P_2 нь капилляр хоолойн хоёр төгсгөл дэх даралт, r нь хоолойн радиус, L нь хоолойн урт, η нь шингэний зуурамтгайн коэффициент болно. Туршилтын ажлын схемийг зураг.2–т үзүүлэв.



Зураг 2: Шингэний зуурамтгайн коэффициентыг тодорхойлох ажлын схем

Хэмжилтийн төхөөрөмжийг зураг.2 –ийн дагуу угсарч бэлдээд хуваарьтай шилэн шилэн цилиндр савыг зуурамтгайн коэффициентыг тодорхойлох шингэнээр дүүргэнэ. Крант нээхэд шингэний даралтын ялгаврын улмаас капилляр хоолойгоор ус дусалж эхэлнэ. Яг дусалж эхлэх агшин дахь усны түвшнийг тэмдэглэж аваад секундомерийг ажиллуулна. Тодорхой хугацааны дараа крантыг хааж урсгалыг зогсоогоод шингэний түвшинг дахиж хэмжиж авна. Эндээс хоолойн эхлэл төгсгөл дэх даралтын ялгавар болон t хугацаанд дуссан усны эзлэхүүнийг олоод дараах томъёог ашиглан шингэний зуурамтгайн коэффициентыг тодорхойлох болно.

$$\eta = \frac{\pi}{8} \frac{\rho g}{L} r^4 \frac{h t}{V}$$

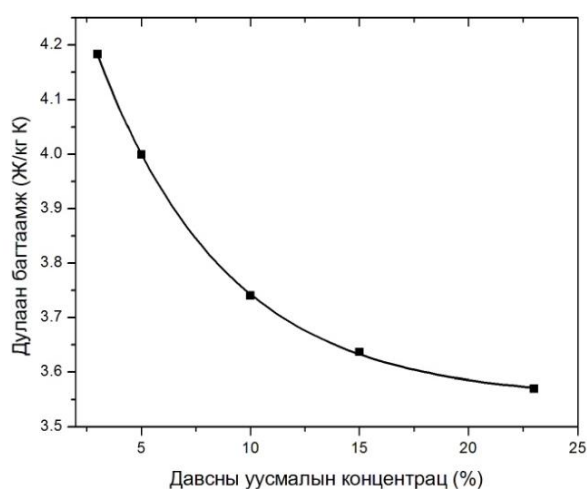
III. ТУРШИЛТЫН ҮР ДҮН

Бид эхлээд судалгаанд ашиглах крантны ус болон нэрмэл усны дулаан багтаамжийг тодорхойлсон үр дүнг хүснэгт.1 –т үзүүлэв.

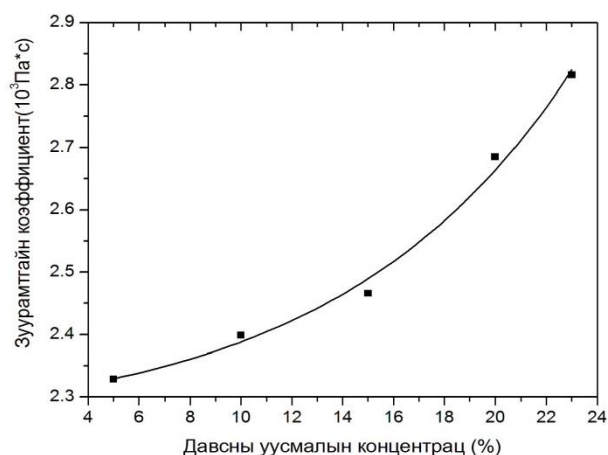
Хүснэгт.1

Параметр	θ_2 (°C)	θ_m (°C)	θ_1 (°C)	m_w (г)	C_w (Ж/(кг·К))
Крантны ус	99	19.1	13.3	301.8	4.44
Нэрмэл ус	93	27.7	23.6	302.7	4.67

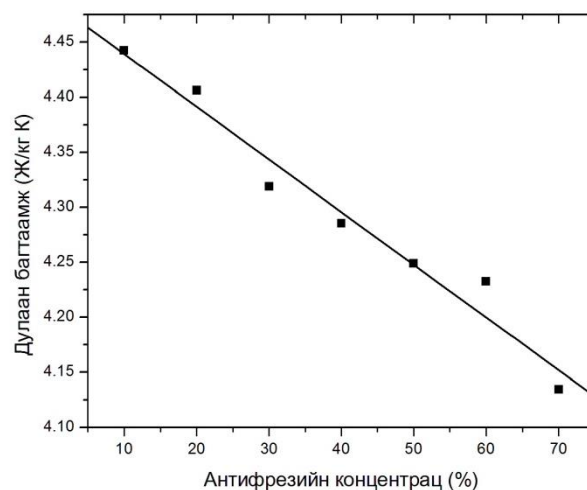
Ус болон давсны уусмалын хольцын дулаан багтаамжийг давсны концентрацаас хамааруулан судлав. Хоолны давс болох NaCl нь тасалгааны температурт 23% хүртэл усанд уусах боломжтой бөгөөд усны хөлдөх температурыг -21°C хүртэл буурах боломжтой. Усан дахь давсны концентарц, дулаан багтаамж болон зуурамтгайн коэффициентын хамаарлын графикийг зураг.3, 4 –д үзүүлэв.



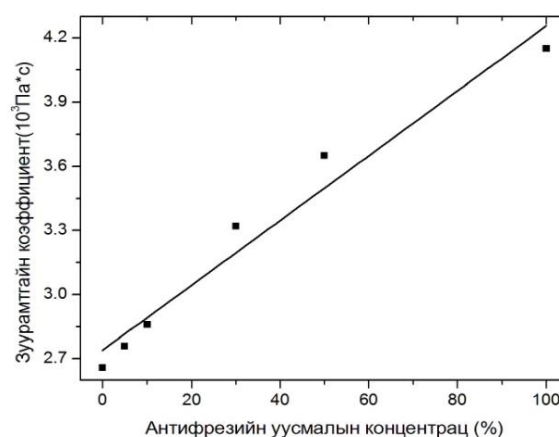
Зураг 3: Усан дахь давсны концентрац, дулаан багтаамжийн хамаарал



Зураг 4: Усан дахь давсны концентрац, зуурамтгайн коэффициентийн хамаарал



Зураг 5: Усан дахь антифризийн концентрац, дулаан багтаамжийн хамаарал



Зураг 6: Усан дахь антифриз концентрац, зуурамтгайн коэффициентийн хамаарал

Дараа нь ус болон антифризийн уусмалын хольцын дулаан багтаамжийг антифризийн концентрацаас хамааруулан судлав. Антифриз нь тасалгааны температурт 65% хүртэл усанд уусах боломжтой бөгөөд усны хөлдөх температурыг -50°C хүртэл буурах боломжтой. Усан дахь антифризийн концентрац, дулаан багтаамж болон зуурамтгайн коэффициентын хамаарлын графикийг зураг.5, 6 –д үзүүлэв.

IV. ДҮГНЭЛТ

Бид энэхүү ажлаар нарны дулааны системийн үндсэн хэсэг болох дулаан дамжуулагч орчны зарим шинж чанарыг сайжруулах ус болон давс, антифризийн уусмалын зуурамтгайн коэффициент болон дулаан багтаамжийг хольцын концентрацаас хамааруулан судаллаа. Усны зуурамтгайн коэффициент нь хольцын концентрацаас хамааран ихсэж, дулаан багтаамж нь буурч байгаа боловч түүний ажиллах температурын хязгаар нэмэгдэж байгаа нь чухал ач холбогдолтой. Энэхүү ажлыг цаашид мэргэжлийн хичээлийн сургалтанд ашиглах боломжтой.

- [1]. Материал судлалын лаборатори
“Металлын дулаан багтаамж
тодорхойлох” ажил
- [2]. Martin Kaltschmitt et al; “Renewable
Energy Technology” book, Springer-
Verlag Berlin Heidelberg 2007

Инертийн Хийн Атомуудын Үндсэн Төлөвийг Квант Шингэний Динамик Ойролцооллоор Тооцоолох нь

Д. Наранчимэг^{1*}, Л. Хэнмэдэх¹, Г.Мөнхсайхан¹, Н. Цогбадрах²

¹Шинжлэх Ухаан Технологийн Их Сургууль, Хэрэглээний Шинжлэх Ухааны Сургууль, Физикийн тэнхим

²Монгол Улсын Их Сургууль, Шинжлэх Ухааны Сургууль, Байгалийн Ухааны Салбар, Физикийн тэнхим.

Квант шингэний Шредингерийн шугаман бус тэгшитгэлийг ашиглан инертийн хийн атомуудын үндсэн төлөвийн нягт ба энергийг тооцоолсон. Үүнд хуурмаг хугацааны аргаар диффузын тэгшитгэлд хувиргаснаар, үндсэн төлөвийн долгионы функц рүү шилжиж шийд нь олдоно. Диффузын тэгшитгэлийг бөмбөлөг координаттай системд ерөнхий псевдоспектрийн аргаар бодсон. Энэ нь координатыг жигд биш тохиромжтойгоор дискретчилж, нарийвчлал сайтай шийдийг гаргаж авна. Тооцоог Математик 7.0 программ ашиглан хийсэн ба үр дүнг бусад ажлуудтай харьцуулсан.

PACS numbers: 31.15.eg, 31.15.ee, 31.15 E

I. ОРШИЛ

Нягтын функционалийн онол (НФО) нь хатуу бие, молекул, атомын электроны бүтцийн тооцоололыг хийдэг квант механикийн арга бөгөөд Хонберг-Кон[1], Кон-Шэмийн[2] ажлууд дээр үндэслэгддэг. Кон-Шэмийн тэгшитгэлүүд нь 3 хэмжээст огторгуйд Хартри-Фокийн тэгшитгэлүүдтэй ижил боловч олон биеийн харилцан үйлчлэл нь локаль солилцоо-корреляцийн потенциаллаар илэрхийлэгддэг. Олон биеийн системийн бодлогыг Томас-Фермийн хугацаанаас [3,4] хамаарсан загвар дээр Блох [5] анх бодсон. Томас-Фермийн энэ загвар нь квант шингэний динамик (КШД)-ын анхны загвар төдийгүй электроны системийг чөлөөт электроны хий гэж үзээд олон электронтой системийн электроны статик нягтыг нэг л тэгшитгэлээр боддог. КШД-ын үндсэн хоёр тэгшитгэл нь 3 хэмжээст Эйлерын тэгшитгэл ба урсгал тасралтгүйн тэгшитгэлүүд (электроны нягт $\rho(\vec{r}, t)$, гүйдлийн нягт $j(\vec{r}, t)$ гэсэн хоёр үл мэдэгдэхтэй) юм. Дээрх хоёр тэгшитгэлүүдээс гаргаж авсан тэгшитгэлээ нэг хэмжээст хугацаанаас хамаарсан ерөнхийлсөн шугаман бус Шредингерийн тэгшитгэл (ЕШБШТ) гэдэг. Энэ нь хэдийгээр ганц Шредингерийн тэгшитгэлийг бодох боловч нарийвчлал нь Хартри-Фокоос илүү байна. КШД-НФО-ЕШБШТ-ийн ойролцоололыг үндсэн төлөвийн тооцоо [6,7] ба динамик процесст[18-20] хэрэглэсэн байдаг. Олон электронт системийн электрон бүтцийн тооцооллыг квант шингэний динамик ойролцоололоор хийх нь илүү хялбар байдаг.

Энэ өгүүлэлд КШД-НФО тэгшитгэлийг бөмбөлөг координатын системд ерөнхий псевдоспектрийн аргыг (ЕПС)[12,13] хэрэглэн бодлоо. Энэ КШД-НФО ойролцоолол нь

электроны бүтцийн тооцоо хийхэд ашигтай талтай болохыг үзүүлэхийг зорилоо. Олон электронт системийн үндсэн төлөвийн шинж чанарыг тооцоолоход эхлээд хуурмаг хугацааны аргыг ашиглан ЕШБШТ-ийг дифференциал тэгшитгэлд шилжүүлсэн.

II. СУДАЛГААНЫ АРГА ЗҮЙ

Квант механикын КШД томъёололыг Маделунг [15], Де-Бройл [16], Бом [17] нар анх үндэслэсэн. КШД аргад шугаман бус тухайн уламжлалт дифференциал тэгшитгэлүүдийн системийг бодох шаардлага гардаг нь шугаман Шредингерийн тэгшитгэлийг бодохоос төвөгтэй. Гэвч КШД-т электроны үүлийг классик Кулоны хүч, бусад квант потенциалын үйлчлэлээр хөдлөх классик шингэн гэж авч үздэг. Олон электронт системийг 3 хэмжээст огторгуйд буй тасралтгүй классик шингэн гэж үздэг [21]. КШД-ын үндсэн хоёр тэгшитгэл нь электроны нягт $\rho(\vec{r}, t)$, гүйдлийн нягт $j(\vec{r}, t)$ хэмжигдэхүүнүүдээс хамаардаг.

Урсгал тасралтгүйн тэгшитгэл:

$$\frac{\partial \rho(\vec{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j}(\vec{r}, t) = 0 \quad (1)$$

Эйлерийн хэлбэрийн тэгшитгэл:

$$\frac{\partial \chi(\vec{r}, t)}{\partial t} + \frac{1}{2}(\nabla \chi)^2 + \frac{\delta G[\rho]}{\delta \rho} + \frac{\delta E_{ee}[\rho]}{\delta \rho} + v(\vec{r}, t) = 0 \quad (2)$$

Дээрх тэгшитгэлд $\vec{j}(\vec{r}, t) = \rho \nabla \chi(\vec{r}, t)$, $\chi(\vec{r}, t)$ – хурдны потенциал, E_{ee} –

*Electronic address: naranchimeg@must.edu.mn

электронуудын түлхэлцлийн энерги, $G[\rho]$ - нягтын универсаль функц, $v(\vec{r}, t)$ – электрон-цөмийн таталцлын болон гадны орны потенциалуудын нийлбэр.

$$G[\rho] = T_w[\rho] + T_{corr}[\rho] + E_{xc}[\rho] = \frac{1}{8} \int \frac{|\nabla \rho|^2}{\rho} d\vec{r} + T_{corr}[\rho] + E_{xc}[\rho] \quad (3)$$

(3) томъёонд $E_{xc}[\rho]$ – солилцоо ба корреляцийн энергийн функциональ, T_w – Вайцзеккерийн кинетик энерги [14]. Вайцзеккерийн кинетик энерги нь нэг ба хоёр электронтой Хартри-Фокийн системд маш сайн тохирдог тул T_{corr} - засварлагдсан кинетик энергийг гелийн атомд тэгтэй тэнцүү гэж авч үздэг харин бусад атомуудын хувьд ойролцоолон авч үздэг [8].

$$T_{exact} = T_w[\rho] + T_{corr}[\rho]$$

Комплекс, хугацаанаас хамаарсан гидродинамик долгионы функцийг

$$\Psi(\vec{r}, t) = \rho(\vec{r}, t)^{1/2} e^{i\chi(\vec{r}, t)} \quad (4)$$

гэж тодорхойлно.

(1) ба (2) тэгшитгэлүүдээс ашиглан $\chi(\vec{r}, t)$ -ийг зайлуулснаар хугацаанаас хамаарсан КШД-НФО-ын хөдөлгөөний тэгшитгэл буюу ЕШБШТ-ийг гаргаж авдаг.

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + v_{\phi}[\rho] \right] \Psi(\vec{r}, t) = i \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} \quad (5)$$

$\tau = -it$ хугацааг (1) ба (2) тэгшитгэлүүдэд орлуулбал диффузийн хэлбэрийн тэгшитгэл (6) гарна.

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + v_{\phi}[\rho] \right] R(\vec{r}, t) = -\frac{\partial R(\vec{r}, t)}{\partial t} \quad (6)$$

Диффузи нь $v_{\phi}[\rho]$ эффектив потенциалтай явагдана. $R(\vec{r}, t)$ диффузын функц нь гидродинамик $\Psi(\vec{r}, t)$ функц биш, $R(\vec{r}, t)$ нь хугацааны тухайн эгшинд нормчлогдоогүй ба $v_{\phi}[\rho]$ потенциалаар тодорхойлогдох атом, молекулын бодит системд харгалзахгүй. Гэвч

диффузийн функцийг хугацааны туршид нормчилсоны үр дүнд хамгийн бага энергитэй үндсэн төлөвт очно [6,7].

Энэ $v_{eff}([\rho]; \vec{r}, t)$ потенциал нь классик ба квант гишүүдээс бүрдэнэ.

$$v_{\phi}[\rho] = \frac{\delta E_{ee}}{\delta \rho} + \frac{\delta E_{nu}}{\delta \rho} + \frac{\delta E_{xc}}{\delta \rho} + \frac{\delta T_{corr}}{\delta \rho} + \frac{\delta E_{ext}}{\delta \rho} \quad (7)$$

Энд эхний 3 гишүүн электрон-электроны түлхэлцэл, цөм-электроны таталцал, солилцоо – корреляцийн потенциалууд, 4 дэх гишүүн нь засварлагдсан классик биш кинетик энергийн гишүүн, сүүлийн гишүүн гадны орны харилцан үйлчлэлийн потенциал юм. Гелийн атомын хувьд солилцооны энергийн яг тодорхой хэлбэрийг сонгож болдог ба харин бусад атомуудын хувьд энергийн функционалийн локаль хэлбэрүүдийг сонгож авдаг [8]. Энэ тооцоонд корреляцийн энергийн функционалийг Вигнерийн томъёогоор бодсон [22].

Диффузийн тэгшитгэлийн тоон шийд: (ЕПС арга)

(6) тэгшитгэлийг

$$\hat{L}R(\vec{r}, t) = -\frac{\partial R(\vec{r}, t)}{\partial t} = [\hat{H}_0(\vec{r}) + \hat{V}(\vec{r}, t)]R(\vec{r}, t) \quad (8)$$

гэж дахин бичнэ.

Энэ тэгшитгэл нь хуурмаг хугацаатай тэгшитгэл юм.

$$\hat{H}_0(\vec{r}) = -\frac{1}{2} \nabla^2 + v_{\phi}([\rho]; \vec{r}, 0) \quad (9)$$

$$\hat{V}(\vec{r}, t) = v_{\phi}([\rho]; \vec{r}, t) - v_{\phi}([\rho]; \vec{r}, 0) \quad (10)$$

Үүнд $\hat{H}_0$ анхны гамильтониан, $\hat{H}_0$ -д $t=0$ үеийн утга орсон. $\hat{V}(\vec{r}, t)$ хугацаанаас хамаарсан эффектив потенциал.

$R(\vec{r}, t + \Delta t)$ утгыг олохын тулд бөмбөлөг координаттай системд 2-р эрэмбийн операторын хуваалтын схемийг хэрэглэсэн.

$$R(\vec{r}, t + \Delta t) \cong e^{-\hat{H}_0 \Delta t / 2} e^{-\hat{V}(r, \theta, t + \Delta t / 2) \Delta t} e^{-\hat{H}_0 \Delta t / 2} R(\vec{r}, t) + O(\Delta t^3) \quad (11)$$

Диффузийн функцийг $R(\vec{r}, t)$ сфер координатын системд өргөтгөөд Лежандрын полиномын базаар $P_l \cos(\theta_j)$ задалбал:

$$R(r_i, \theta_j, t) = \sum_l g_l(r_i, t) P_l \cos(\theta_j) \quad (12)$$

Энд P_l -үүд нь нормчлогдсон Лежандрын полиномууд. $g_l(r_i, t)$ -г Гаусс-Лежандрын квадратураар тодорхойлно.

$$g_l(r_i, t) = \sum_{k=1}^{L+1} w_k P_l(\cos \theta_k) R(r_i, \theta_k, t) \quad (13)$$

Үүнд $\{\cos \theta_k\}$ нь $L + 1$ эрэмбийн Лежандрын полиномын шийд, w_k квадратурын жин болно. Хугацааны эхний алхам (14) илэрхийлэлээр хийгдэнэ.

$$e^{-\hat{H}_0 \Delta t / 2} R(r_i, \theta_j, t) = \sum_l e^{-\hat{H}_l^0 \Delta t / 2} g_l(r_i, t) P_l(\cos \theta_j) \quad (14)$$

$$\hat{H}_l^0 = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} + v_{eff}([\rho]; \vec{r}, 0) \quad (15)$$

(14) илэрхийлэлийн долгион функц нь g_l болгоны хувьд бие биенээсээ үл хамааран бодогдоно. Энэ тэгшитгэлийн r нь $[0, \infty]$ мужид байх ба шугаман бус [10] хувиргалтын тусламжтай $[-1, 1]$ мужид оруулна.

$$r = r(x) = L \frac{1+x}{1-x+\alpha} \quad (16)$$

Энэ нь координатын эхний орчим зангилаа цэгүүдийн тоог олшруулснаар нарийвчлал сайтай үр дүнг гарган авч байгаа нь жигд хуваалттай үед олон зангилаа цэг шаарддагаараа давуу юм. Симметр процессийг ашиглавал [10]:

$$\phi_l(r) = \sqrt{r'(x)} \cdot \chi_l(r(x)) \quad (17)$$

$\hat{H}_l^0(r)$ оператор нь (22) хэлбэрт орно.

$$\hat{H}_l^0(r) = -\frac{1}{2} \frac{1}{r'(x)} \frac{d^2}{dx^2} \frac{1}{r'(x)} + V_l(r(x)) \quad (18)$$

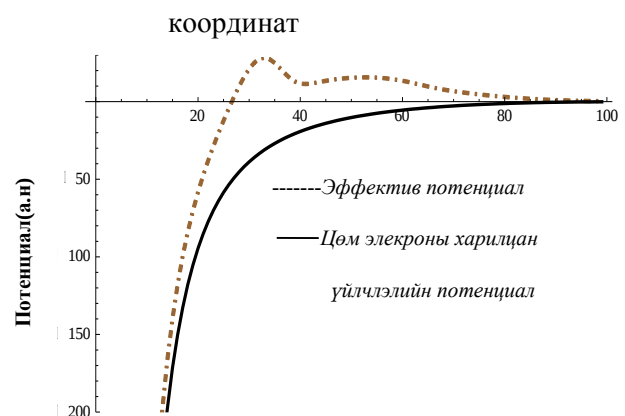
Энд:

$$V_l = \frac{l(l+1)}{2r^2} + v_{eff}([\rho]; \vec{r}, 0) \quad (19)$$

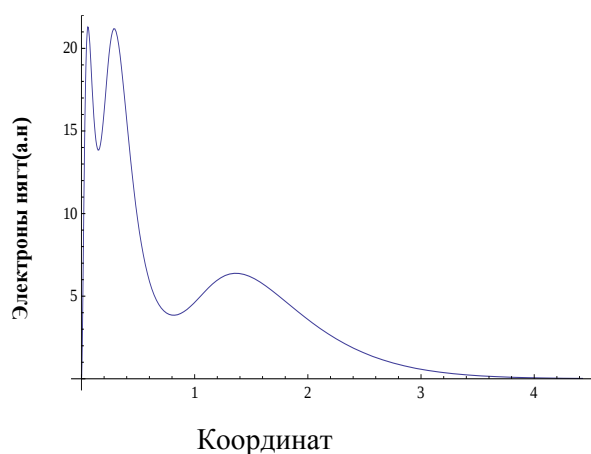
Диффузийн тэгшитгэлийг хугацаагаар бодоход $R(\vec{r}, t)$ функц нь нормчлогдоогүй байдаг тул хугацааны алхам бүрд нормчлох шаардлагатай.

III. ТООЦООНЫ ҮР ДҮН

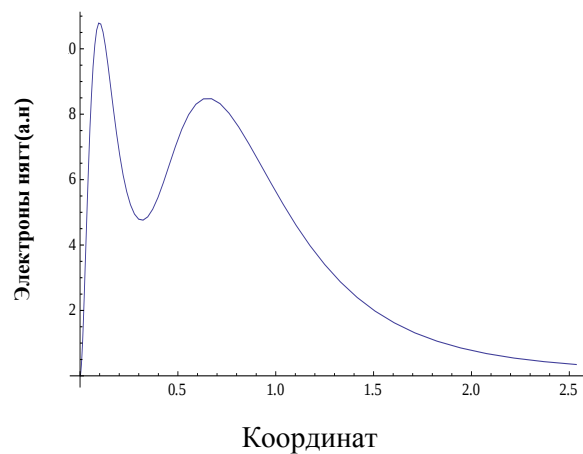
Тооцоололын үр дүнд неоны атомын эффектив ба цөм электроны харилцан үйлчлэлийн потенциалыг 1-р зурагт үзүүлэв. Аргон ба неоны атомуудын үндсэн төлөвийн нягтын графикийг 2.а, 2.б-р зурагт үзүүлсэн. Инертийн хийн атомуудын үндсэн төлөвийн энергийг бодож гаргасан үр дүнгээ Хартри-Фокийн [11] үр дүнтэй харьцуулж 1-р хүснэгтэнд харууллаа.



Зураг 1: Эффектив ба цөм электроны харилцан үйлчлэлийн потенциалын харьцуулалт



Зураг 2.а: Аргоны тооцооллын нягтын функцийн график



Зураг 2.б: Неоны тооцооллын нягтын функцийн график

Хүснэгт 1. Инертийн хийн атомуудын үндсэн төлөвийн энергийн тооцооны үр дүн (а.н. -ээр)

		He	Ne	Ar	Kr	Xe
$-E$	Манай үр дүн	2.8861	127.242	526.04	2834.74	7419.36
	Хартри-Фок	2.8617	128.547	527.54	2752.05	7232.13
$-Z/r$	Манай үр дүн	6.78056	319.675	1249.29	6718.05	17398.6
	Хартри-Фок	6.7492	311.133	1245.56	6582.54	17164.98
$\langle 1/r_{12} \rangle$	Манай үр дүн	2.086	64.3724	222.208	1126.34	2748.25
	Хартри-Фок	2.0516	65.7129	231.6093	1172.33	2880.03
$-E_x$	Манай үр дүн	1.0437	12.0089	29.628	91.834	174.664
	Ехаст	1.026	12.11	30.19	93.89	179.2
$-E_c$	Манай үр дүн	0.053	0.3514	0.7075	1.7523	2.829
	Бусад ажил	0.042	0.39	0.787	1.835	2.921
$\langle T \rangle$	Манай үр дүн	2.9037	126.765	528.45	2744.36	7408.47
	Хартри-Фок	2.8617	128.5468	526.81	2752.04	7232.04
T_w	Манай үр дүн	-	92.3346	324.012	1372.18	3410.9
	Хартри-Фок	-	90.614	308.42	1276.73	2932.05
T_{corr}	Манай үр дүн	-	34.43	207.022	1372.19	3997.57
	Хартри-Фок	-	37.3886	214.45	1465.24	4298.90

IV. ДҮГНЭЛТ

Энэ ажилд НФО - оор инертийн хийн атомуудын (He, Ne, Ar, Kr, Xe) эффектив потенциал, солилцоо ба корреляцийн болон үндсэн төлөвийн энергийг тооцоолж бусад ажлуудын үр дүнтэй харьцуулан дүн шинжилгээ хийсэн. Иймд энэ арга нь

нарийвчлал сайтай, хугацаа хэмнэсэн сайн арга болох нь харагдаж байна. Олон электронт системийн электрон бүтцийн тооцооллыг КШД ойролцооллоор хийх нь илүү хялбар байдаг. Цаашид инертийн хийн атомуудын энергийг дискрет хувьсагчийн аргаар тооцоолох зорилт тавьж байна.

- [1] P. Hohenberg and W. Kohn, Phys. Rev. B **136**, 864 (1964).
- [2] W. Kohn and L. J. Sham, Phys. Rev. A **140**, 1133 (1965).
- [3] L. H. Thomas, Proc. Camb. Phil. Soc. **23**, 542 (1927).
- [4] E. Fermi, Z. Phys. **48**, 73 (1928).
- [5] F. Bloch, Z. Phys. **81**, 263 (1928).
- [6] B. K. Dey and B. M. Deb, J. Chem. Phys. **110**, 6229 (1999).
- [7] A. K. Roy, B. K. Dey and B. M. Deb, Chem. Phys. Lett. **308**, 523 (1999).
- [8] S. K. Ghosh and B. M. Deb, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **27**, 381 (1994).
- [9] G. Brual and S. M. Rothstein, J. Chem. Phys. **69**, 1177 (1978).
- [10] G. Yao and S. I. Chu, Chem. Phys. Lett. **204**, 381 (1992).
- [11] E. Clementi and C. Roetti, At. Data Nucl. Data Tables, **14**, 174 (1974).
- [12] X. Chu and S. I. Chu, Phys. Rev. A **63**, 023411 (2001).
- [13] X. M. Tong and S. I. Chu, Chem. Phys. **217**, 119 (1997).
- [14] R. G. Parr and W. Yang, Density Functional Theory of Atoms and Molecules (New York: Oxford University Press) (1989).
- [15] E. Madelung, Z. Phys. **40**, 332 (1926).
- [16] L. de Broglie, C. R. Acad. Sci., Paris, **183**, 447 (1926).
- [17] D. Bohm, Phys. Rev. **85**, 166 (1952).
- [18] B. K. Dey and B. M. Deb, Int. J. Quantum Chem. **56**, 707 (1995), B. K. Dey and B. M. Deb, Int. J. Quantum Chem. **70**, 441 (1998).
- [19] B. K. Dey and B. M. Deb, Chem. Phys. Lett. **276**, 157 (1997).
- [20] A. K. Roy and B. M. Deb, Nonlinear Phenomena in Physical and Biological Sciences, edited by S. K. Malik, M. K. Chandrasekharan and N. Pradhan, (New Delhi: INSA) p. 947 (2000).
- [21] B.M. Deb, S.K. Ghosh, 1982 Quantum Chem. Phys. **77** 342
- [22] G. Brual and S. M. Rothstein, J. Chem. Phys. **69**, 1177 (1978).

Гелийн Атомаас Протонд Цэнэг Дамжуулах

Г. Зоригт^{1*}, Л. Хэнмэдэх¹, О. Лхагва²

¹Шинжлэх Ухаан Технологийн Их Сургууль, Хэрэглээний Шинжлэх Ухааны Сургууль, Физикийн тэнхим

²Монгол Улсын Их Сургууль, Шинжлэх Ухааны Сургууль, Байгалийн Ухааны Салбар, Физикийн тэнхим

Энэхүү ажилд их энергитэй протон гелийн атомаас электрон шүүрэн сарних дифференциал огтлолыг хүчтэй потенциалын Борны хоёрдугаар эрэмбийн төхөлтөнд тооцооллоо. Сарнилын далайцыг тооцоолоход цөмүүдийн харилцан үйлчлэлийг нэмж оруулсанаар сарнилын дифференциал огтлол хэрхэн өөрчлөгдөж байгааг туршлагтай зэрэгцүүлэн авч үзэв. Тооцоолол тусч буй ион болох протоны энерги 1.3, 2.5, 5.0, 7.5 ба 12.5МэВ үед хийсэн туршилтын үр дүнтэй харьцуулахад минимумын байрлал урагшилж, Томас пик (хоёр дахь максимум)-ээс хойш хурдан буурч туршлагын утгаруу ойртож байна.

PACS number : 34.70e, 34.80.i, 34.50s, 31.30i, 71.15Ap

I. ОРШИЛ

Хурдан ион атомыг мөргөж электроныг өөртөө шилжүүлэн авч сарних процесс нь фотосинтецийн болон химийн урвалд тохиолдоно. Химийн урвалын чухал үе шат болох цэнэг дамжуулах процессыг 100 гаруй жил судалж байгаа боловч зарим зүйл нь одоог хүртэл тодорхой бус хэвээр байна.

Орчин үед цэнэг дамжуулах процессын сарнилын дифференциал огтлол (СДО) -ыг хэмжсэн лабораторийн олон туршлагауд [1],[2] тавигдсан байна. Энэ ажилд протон гелийн атомтай мөргөлдөж цэнэг дамжуулах СДО-ыг хүчтэй потенциалын Борны II эрэмбийн ойролцоололд тооцооллоо. Цэнэг дамжуулах сарнилын далайцын тооцоололд протон электрон, цөм электроны харилцан үйлчлэл гол хандивыг өгөх боловч цөмүүдийн харилцан үйлчлэл нь тооцоолоход төвөгтэй ч сарнилын өнцөг ихсэхэд тодорхой хандив оруулдаг байна.

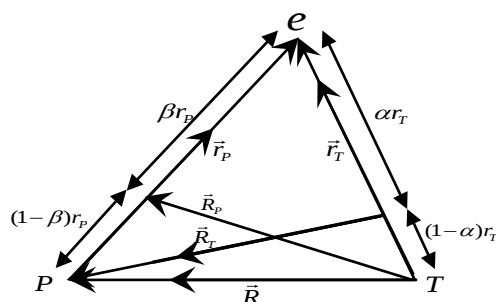
Өмнө хийгдсэн эрдэмтдийн тооцоололд хүчтэй потенциалын Борны ойролцоолол (ХПБО)-д бүрэн Гриний функцийг Кулоны Гриний функцээр авч тооцох нь сайн дөхөлт болох хэдий ч цөмүүдийн харилцан үйлчлэлийг Эйкнолын ойролцоололд бага гэж үзээд орхисон байна. Сум цөмийн цэнэг их үед К.Тоолберг, Р.О.Барачина, Ж.Масек [3] нар, бай цөмийн цэнэг их үед Ж.Масек, С.Алстон [4] нар тус тус сарнилын далайцын илэрхийллийг гаргасан байна. Эдгээр ажлуудад цөм цөмийн харилцан үйлчлэлийг тооцоогүй бөгөөд протон-устөрөгчийн хувьд адилхан үр дүнг өгч байна. Харин протон-гелийн хувьд бай цөмийн цэнэг их учир Ж.Масек, С.Алстоны сарнилын далайцын илэрхийллийг ашиглан тооцооллыг хийлээ. Тооцоололд цөмүүдийн харилцан үйлчлэлийг нэмж оруулсанаар СДО хэрхэн

өөрчлөгдөж байгааг тусч буй ион болох протоны энерги 1.3, 2.5, 5.0, 7.5 ба 12.5МэВ үед тооцоолон туршилтын үр дүнтэй харьцууллаа.

II. ОНОЛ

Ион атомын мөргөлдөөний бодлого нь цөөн биеийн бодлого боловч харилцан үйлчлэгч бөөмийн тоо нэмэгдэхэд координатын тоо ихсэж олон давхар интегралуудыг бодох шаардлагатай болдог. Энэ асуудал нь процессийг бүрэн тооцоолох боломжыг хязгаарлах учир ойролцоолон тооцоолох аргыг эрэлхийлэхэд хүргэдэг байна.

Энэ ажилд тусч буй ион болох протон –Р, Гелийн атомын нэг электрон-е, нэг электрон бүхий Гелийн ион буюу бай цөм-Т гэсэн гурван биеийн бодлогыг авч үзнэ (зураг 1).



Зураг 1: Цэнэг дамжуулах процессийн [3,5] схем болон тэмдэглэгээ

Эхний ба эцсийн төлвийн харилцан үйлчлэлийн потенциалууд нь дараах байдлаар илэрхийлэгдэнэ.

$$\begin{aligned} V_i &\equiv V_{Pe}(r_P) + V_{PT}(R) \equiv -Z_P e^2 / r_P + Z_P Z_T e^2 / R \\ V_f &\equiv V_{Te}(r_T) + V_{PT}(R) \equiv -Z_T e^2 / r_T + Z_P Z_T e^2 / R \end{aligned} \quad (1)$$

*Electronic address: g_zorigt@yahoo.com

Цэнэг дамжуулах сарнилын далайц нь

$$A = \langle \psi_f | V_i + V_f G^+ V_i | \psi_i \rangle \quad (2)$$

ψ_i, ψ_f нь анхны болон эцсийн төлвийн долгион функц

$$G^+ \equiv 1/(E - H + i\eta) \quad (3)$$

G^+ бүрэн грины оператор дахь Гамильтонианыг бичвэл

$$H = -\frac{1}{2\mu_i} \nabla_{R_i}^2 - \frac{1}{2m} \nabla_{r_i}^2 + V_{Te} + V_{Pe} + V_{PT} = H_0 + V_{Te} + V_{Pe} + V_{PT} \quad (4)$$

Энд μ_i нь P ба Te -ийн мөргөлдөөний өмнөх эмхэтгэсэн масс, m -электроны масс.

Сарнилын далайцад анхны ба эцсийн төлөвт харгалзах потенциалуудыг орлуулбал

$$A_f^{B2} = \langle \psi_f | V_i + V_f G^+ V_i | \psi_i \rangle \quad (5)$$

$$A_f^{B2} = \langle \psi_f | V_{Pe} | \psi_i \rangle + \langle \psi_f | V_{Te} G^+ V_{Pe} | \psi_i \rangle + \langle \psi_f | V_{PT} | \psi_i \rangle + \langle \psi_f | V_{Te} G^+ V_{PT} | \psi_i \rangle + \langle \psi_f | V_{PT} G^+ V_{Pe} | \psi_i \rangle + \langle \psi_f | V_{PT} G^+ V_{PT} | \psi_i \rangle \quad (6)$$

Дээрх илэрхийллээс харахад СДО нь Борны нэгдүгээр эрэмбийн 2, хоёрдугаар эрэмбийн 4 гишүүний нийлбэрээр тодорхойлогдож байна.

А. Хүчтэй потенциалын Борны II эрэмбийн ойролцоолол

Сарнилын далайцыг бодоход G^+ -грийн функцийг бүрэн хэлбэрээр нь тооцоолоход хялбар биш учир T, e -ны харилцан үйлчлэл их үед $V_{Te} \gg V_{Pe}$ буюу $Z_T \gg Z_P$ байх хүчтэй потенциалын Борны ойролцооллын аргыг 1982 онд Ж.Масек, С.Алстон нар [4] боловсруулж цэнэг дамжуулах процессийн сарнилын бүрэн огтлол бодоход ашигласан байна. Энэ ажилд V_{PT} харилцан үйлчлэлийн потенциалыг Эйконалын ойролцоололд [6] долгион функцийг фазд тооцоолж системийн Гамильтонианд орхиж тооцоолжээ. Энд үед G^+ гриний функцийг

$$G_c^+ \equiv 1/(E - H_0 - V_{Te} + i\eta) \quad (7)$$

болох V_{Te} харилцан үйлчлэлийг тооцсон Кулоны гриний функцийг ашиглан G^+ -г V_{Pe} потенциалаар Неиманы цуваанд задалж эхний гишүүнээр ойролцоолбол

$$G^+ \approx G_c^+ \quad (8)$$

Ж.Масек, С.Алстон [4] нарын ажилд (6) -ын V_{PT} харилцан үйлчлэл оролцоогүй эхний хоёр гишүүнийг тооцсон сарнилын далайцыг авч

$$A_{SPB} = \langle \psi_f | V_{Pe} + V_{Te} G_c^+ V_{Pe} | \psi_i \rangle = \langle \psi_f | (1 + V_{Te} G_c^+) V_{Pe} | \psi_i \rangle \quad (9)$$

Сарнилын далайцыг дараах байдлаар илэрхийлсэн байна.

$$A_{SPB} = -4\pi Z_p \int d^3 p \tilde{\phi}_f^*(\vec{p}) \frac{1}{|\vec{p}-\vec{K}|^2} \langle \psi_{\vec{p}+m\vec{v},e}^- (\vec{r}) | e^{i(\vec{p}-\vec{K})\vec{r}} | \phi_i(\vec{r}) \rangle \quad (10)$$

$\vec{K}$ нь сум ионд шилжүүлсэн импульс [5].

III. ТООЦООЛОЛ БА ҮР ДҮН

Сарнилын далайцын (6) илэрхийлэл дэх цөмүүдийн харилцан үйлчлэл болох V_{PT} потенциал орсон 2, 3-р нэмэгдэхүүнийг авбал.

$$A_{SPB}^{PT} = \langle \psi_f | V_{PT} + V_{Te} G_c^+ V_{PT} | \psi_i \rangle = \langle \psi_f | (1 + V_{Te} G_c^+) V_{PT} | \psi_i \rangle \quad (11)$$

Дээрх илэрхийлэлийг Ж.Масек, С.Алстон нар [4] -тай адилхан хувиргалт хийн тооцоолоход

$$A_{SPB}^{PT} = +4\pi Z_p Z_T \int d^3 p \tilde{\phi}_f^*(\vec{p}) \frac{1}{|\vec{p}-\vec{K}|^2} \langle \psi_{\vec{p}+m\vec{v},e}^- (\vec{r}) | e^{-i(\vec{p}-\vec{K})\frac{1-\alpha}{\alpha}\vec{r}} | \phi_i(\vec{r}) \rangle \quad (12)$$

болох ба энд $\alpha \approx 1$ гэж ойролцоолбол дараах илэрхийлэл гарна.

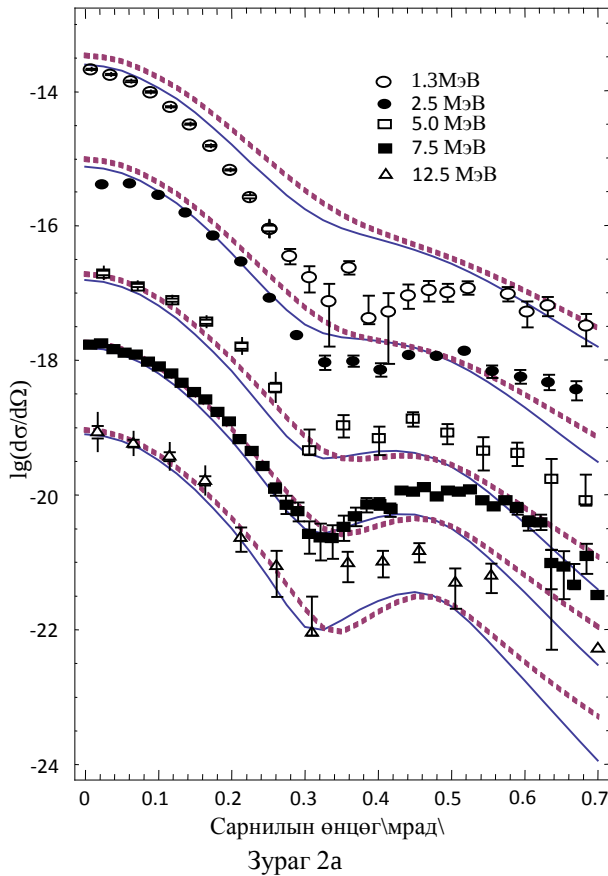
$$A_{SPB}^{PT} = +4\pi Z_p Z_T \int d^3 p \tilde{\phi}_f^*(\vec{p}) \frac{1}{|\vec{p}-\vec{K}|^2} \langle \psi_{\vec{p}+m\vec{v},e}^- (\vec{r}) | e^{0\vec{r}} | \phi_i(\vec{r}) \rangle \quad (13)$$

Сарнилын далайц (10), (13)-н координатын интегралыг нь А.Нордсекийн [9] интегралыг ашиглан аналитик шийдийг авч импульсээрх интегралыг тоон утгаар интегралчилан тооцооллоо. Гелийн атомаас протон электрон шилжүүлэн авах сарнилын далайц РТ харилцан үйлчлэл тооцоогүй (10) ба РТ харилцан үйлчлэл тооцсон далайцыг (10), (12)-н нийлбэрээр авч гелийн 1s төлвийн долгион функц ϕ_i -ийг нэг экспоненттой (зураг 2а), ϕ_i -ийг хоёр экспоненттой (зураг 2b) хэлбэрүүдэд тус тус тооцоолыг хийж [10] туршилтын үр дүнтэй харьцуулсан үр дүнг гаргалаа.

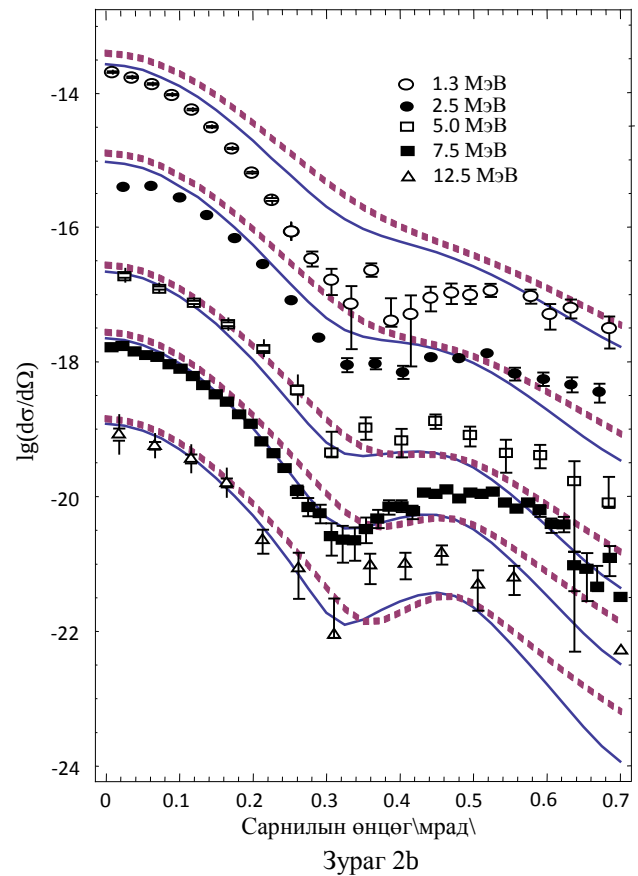
Зураг 2. Гелийн 1s төлвийн долгион функцийг а. нэг экспоненттой хэлбэрээр авахад б. хоёр экспоненттой хэлбэрээр авахад протоны энерги 1.3, 2.5, 5.0, 7.5, 12.5 МэВ байхад харгалзах графикууд дээрээс доошлох дарааллаар байрлаж байна. Гелийн үндсэн төлвөөс протон 1s төлөвт электрон шилжүүлэн авах СДО-г (атомын нэгжээр) сарнилын өнцгөөс хамааруулан үзүүлэв. Тэмдэгүүд нь туршлагын үр дүн ба алдааны хамт [10], тасархай шугам нь хүчтэй потенциалын Борны 2-р эрэмбийн дөхөлтөнд РТ харилцан үйлчлэл тооцоогүй үед, нарийн шугамаар дүрслэсэн муруй нь хүчтэй

потенциалын Борны 2-р эрэмбийн дөхөлтөнд РТ харилцан үйлчлэл тооцсон үр дүн.

Сарнилын дифференциал огтлол



Сарнилын дифференциал огтлол



IV. ДҮГНЭЛТ

Зурагаас харахад протоны энерги ихсэхэд тооцоолол туршлагын үр дүнтэй илүү ойролцоо болж байна. Тооцоололын утга кинематик максимумын (хамгийн их утга) орчим туршлагаас арай их утга өгч байгаа ч гелийн 1s төлвийн долгион функцийг нэг экспоненттой

хэлбэрээр авахад протоны энерги их үед илүү дөхжээ. Харин Гелийн 1s төлвийн долгион функцийг хоёр экспоненттой хэлбэрээр авахад хоёрдугаар максимумын (Томас пикийн) байрлал туршлагын утгуудад сайн дөхсөн байна. Тооцоололд РТ харилцан үйлчлэлийг нэмж тооцоолоход минимумын байрлал урагшилж, Томас пикээс хойш илүү хурдан буурч туршлагын утгаруу ойртож байна.

- [1] Eichler.J, Lectures on ion atom collisions 2005
- [2] E. Ghanbari Adivi, M. J. Brunger, M. A. Bolorizadeh,, and L. Campbell Physical review A 75, 022704 2007
- [3] K.Taulbjerg, R.O.Barrachina, J.Macek Physical review A, 1990
- [4] J.Macek, S.Alston Physical review, 1982
- [5] R.Shakeshaft, J.M.Wadehra, Physical review A, 1980
- [6] Bransden, McDowell Charge exchenge and theory of ion atom collisions(335)
- [7] McDowell M R C, Coleman J P. Introduction to the theory of ion-atom collisions,1970

- [8] Gulyas L, Igarashi A, Fainstein P D and Kirchner T 2008 J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 41 025202.
- [9] A.Nordsieck . Physical review vol 93 4 1954
- [10] Magnus Gudmundsson. Heavy particle Interference and diffraction in fast electron transfer collisions 2011

Атомыг Хүчтэй Лазерын Пульсээр Иончлох Магадлалыг Дискрет Хувьсагчийн Аргаар Тооцоолох

Ч. Алдармаа^{1*}, Л. Хэнмэдэх¹, Г. Зоригт¹, О. Лхагва²

¹Шинжлэх Ухаан Технологийн Их Сургууль, Хэрэглээний Шинжлэх Ухааны Сургууль, Физикийн тэнхим

²Монгол Улсын Их Сургууль, Шинжлэх Ухааны Сургууль, Байгалийн Ухааны Салбар, Физикийн тэнхим

Энэхүү ажилд нанометр урттай лазерын богино пульс, атомын харилцан үйлчлэлийг судлаж хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлээр илэрхийлж, Кулоны дискрет хувьсагчийн аргаар шийдсэн. Үндсэн төлөвт байгаа устөрөгчийн атом хүчтэй лазерын пульсийн үйлчлэлээр иончлох магадлалын хугацааны хамааралыг тооцоолж, дүн шинжилгээ хийлээ. Иончлолын магадлал нь пульсийн урт болон лазерын эрчмээс хамаарах бөгөөд лазерын эрчим өсөхөд магадлал ихсэж, эхний төлөвт үлдэх магадлал багасаж байгаа нь ажиглагдсан.

PACS number : 67.63.Gh, 67.80.Fh, 67.25.dt, 42.60.Rn, 34.50.Gb

I. ОРШИЛ

1960 иад оноос өмнө лазер нь шинэ бүтээл байсан бөгөөд атом ба молекулын гэрэлтэй харилцан үйлчлэх үйлчлэлийг хөндөх онолын нэгдүгээр эрэмбийн хүрээнд тооцоолдог байсан. Лазерын пульсын нээснээр шугаман бус физикт олон фотонор өдөөх ба иончлолын үйл явцыг судлах болсон. 1965 онд Келдыш туннелийн иончлолын [1] өгүүлэг хэвлүүлснээр хүчтэй орны иончлолыг шийдэх арга замууд нь 1980 он хүртэл анхаарал татаж байсан. Атомын өдөөлт, иончлол, болон химийн урвалын өрнөл хувирлын процессын шинж чанарыг лазерын богино пульсээр тандан судлах нь атом молекулын судалгааны шинэ чиглэлийг тодорхойлж байна [2,3]. Лазерын хүчтэй пульс нь атомын бүтцийг хөндсөнөөр шугаман бус үйл явц өрнөж, урьд өмнө ажиглах боломжгүй байсан олон фотонор атомыг өдөөх ба иончлох үзэгдэл, өндөр давтамжтай фотоныг үүсгэх үзэгдэл зэрэг онолын болон туршилтын судалгааны шинэ боломжийг ч нээж байгаа юм.

Лазерын пульсийн уртыг хэдхэн аттосекундын хэмжээнд хүртэл богиносгож чадвал молекул төдийгүй, атом дотор явагдах процессын дөрвөн хэмжээст дүрслэлийг гарган авах боломжтой болох юм. Хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлийг тоон аргаар шийдэх замаар лазер атомын харилцан үйлчлэлийг зүй тогтлыг илэрхийлэх нь онолын тулгуур арга юм. Хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлийг орчин үед гурван хэмжээст торын арга, суурь функцээр задлах аргаар бодож байна. Суурь функцийг сонгохдоо атомын хувийн долгион функц эсвэл Волковын [4] функц болон бусад [5,6] функцийг ашиглан

хугацаанаас хамаарсан хоёрдугаар эрэмбийн дифференциал тэгшитгэл гарган авч, уг систем тэгшитгэлийн шийдийг тооцооллын аргаар тодорхойлж байна. Торын аргаар бодохдоо төгсгөлөг ялгавар [7,8] тоон суурь функц [9], төгсгөлөг элемент [10], В-сплайныг [11] ашиглан тооцоог хийсэн байна.

Энэхүү ажилд лазерын богино пульсээр, устөрөгчийн атомыг иончлох процессыг хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлээр илэрхийлж, уг тэгшитгэлээ Кулоны дискрет хувьсагчийн аргаар шийдсэн.

II. ОНОЛ

Лазерын оронд байгаа атомын электроны хувьд Шредингерийн тэгшитгэлийг бичвэл [12]:

$$i \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = [\hat{H} + \hat{V}(\mathbf{r}, t)] \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (1)$$

$\Psi(\vec{r}, t)$ - атомын электроны долгион функц, $\hat{H}_0$ - атомын гамильтонион, $\hat{V}(\vec{r}, t)$ - лазер атомын харилцан үйлчлэл. Хүчтэй лазерын оронд лазер-атомын харилцан үйлчлэлийг диполийн ойролцоололд уртын тохируулгаар сонгон авбал [13]:

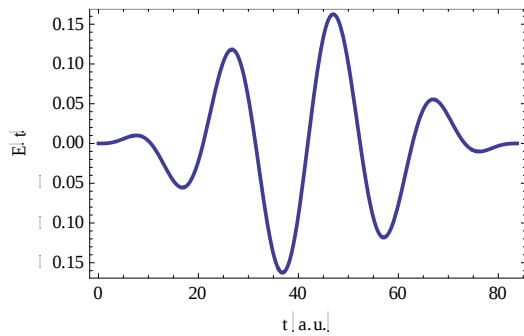
$$\hat{V}(\vec{r}, t) = -\vec{r} \cdot \vec{E}(t) \quad (2)$$

Лазерын цахилгаан орон:

$$E(t) = E_0 \cos(\omega \cdot t + \phi_0) \sin\left(\frac{\pi t}{\tau}\right)^2 \quad (3)$$

E_0 - лазерын цахилгаан орны далайц, τ - пульсийн үргэлжлэх хугацаа, ω - давтамж,

*Electronic address: aldaraa2004@yahoo.com



Зураг 1: Лазерын цахилгаан орны хугацааны хамаарал

$$(I = 10^{15} \text{ Bm} / \text{cm}^2, \omega = 0.3, \lambda = 152 \text{ nm}, N = 4)$$

хугацааны t эгшинд долгион функц мэдэгдэж байгаа тохиолдолд $t + \Delta t$ эгшин дэх долгион функцийг утгыг олбол [14]:

$$\Psi(r, t + \Delta t) = e^{-i(\hat{H}_0 + \hat{V})\Delta t} \Psi(r, t) \quad (4)$$

Энд хугацааг хуваах аргаар хугацаанаас хамаарсан ба хамаараагүй операторуудыг салган Странкийн аргаар долгион функцийг тодорхойлбол:

$$\begin{aligned} \Psi(r, t + \Delta t) \cong & \exp\left(-\frac{i\hat{H}_0\Delta t}{2}\right) \\ & \times \exp\left(-\frac{i\hat{V}(r, \theta, t + \Delta t / 2)\Delta t}{2}\right) \\ & \times \exp\left(-\frac{i\hat{H}_0\Delta t}{2}\right) \Psi(r, t). \end{aligned} \quad (5)$$

Долгион функцийг устөрөгчийн тасралтгүй Кулоны долгион функцийг нийлбэр байдлаар илэрхийлсэн [14].

$$\Psi(r_i, \theta_j, t) = \sum_{l=0}^{l_{\max}} g_l(r_i) P_l(\cos \theta_j). \quad (6)$$

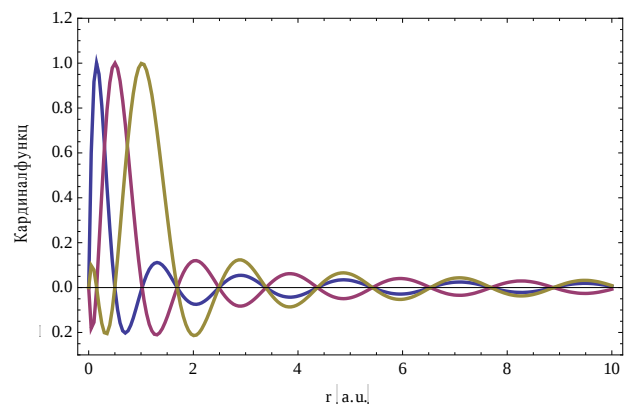
P_l -Лежандрын олон гишүүнт, $g_l(r_i)$ -кардинал функц:

$$g_l(r_i) = \frac{1}{F'(r_i)} \frac{F(r)}{(r - r_i)} \quad (7)$$

Кардинал функцийг хэлбэрийг зураг 2 харуулав.

Бөмбөлөг координатын системд атомын гамилтанионыг бичвэл:

$$\hat{H}_l^0 = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{r} + \frac{1}{2} \frac{l(l+1)}{r^2} \quad (8)$$



Зураг 2: Кардинал функц координатын хамаарал

Кулоны долгион функцийг язгууруудыг олж x координатыг дискретчилвэл атомын гамилтанионы H_l^0 нь дараах матриц хэлбэрт шилжинэ [15].

$$[H_l^0]_{ij} = (D_2)_{ij} + V_l(x_i) \delta_{ij} \quad (9)$$

$$(D_2)_{ij} = \frac{1}{3} \left(E_1 + \frac{Z_1}{x} \right), \quad i = j$$

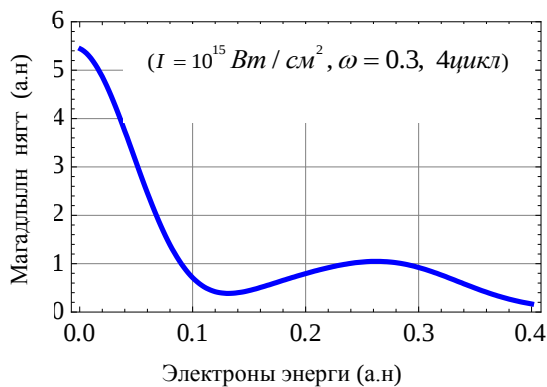
$$(D_2)_{ij} = \frac{1}{(x_i - x_j)^2}, \quad i \neq j \quad (10)$$

H_0 матрицын хувийн утга $E_k(l)$ хувийн векторыг $X_k(l)$ Математика 7.0 програмаар тооцоолов. Тодорхойлогдсон хувийн утгууд нь атомын спектртэй харьцуулахад шууд давхцахгүй боловч ойролцоо спектрийг үзүүлдэг. Үүнд холбоост төлөвөөс гадна тасралтгүй төлөвүүд ч бас дискрет спектртэй байна. Энэ нь хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлийн шийдийг хялбар илэрхийлэх боломжийг олгодог. Эдгээр спектрүүдийн хувийн векторууд нь бүрэн суурь функц болох учир хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлийн долгион функцийг тасралтгүй төлөвийн Кулоны суурь функц дээр задлан, хугацааг хуваах аргаар (5) тэгшитгэлийн шийдийг тооцоолно. Энэхүү ажилд атом нэгжийн системийг ашигласан.

III. ТООЦООЛОЛ БА ХАРЬЦУУЛАЛТ

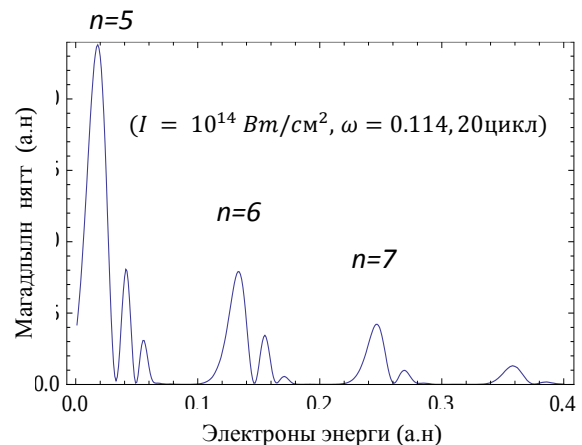
Үндсэн төлөвт байгаа устөрөгчийн атом хүчтэй лазерын пульстэй харилцан үйлчлэхэд атом иончлох магадлалын нягт электроны энергийн хамаарлыг тооцоолж бусад ажлуудтай үр дүнтэй харьцууллаа. Үндсэн төлөвтөө байгаа устөрөгчийн атом дээр 152 ба 390nm урттай харгалзан 10^{15} ба 10^{14} Вт/см² эрчимтэй лазерын пульсуудыг тусгаж иончлох магадлалын нягт энергийгс хамаарах хамаарлыг тодорхойллоо.

А. Хоёр фотоны шингээлт зонхилсон иончлолын процесс (Зураг 3)



Зураг 3. Устөрөгчийн атом үндсэн төлөвөөс иончлох магадлалын нягт электроны энергийн хамаарал

Б. Олон фотоны шингээлт зонхилсон иончлолын процесс (Зураг 4)



Зураг 4: Устөрөгчийн атом үндсэн төлөвөөс иончлох магадлалын нягт электроны энергийн хамаарал

IV. ДҮГНЭЛТ

Энэ судалгааны ажилд үндсэн төлөвт байгаа устөрөгчийн атомыг хүчтэй лазерын пульс үйлчлэхэд иончлох магадлалын нягт, электроны энергийн хамааралыг тооцоолов. Хоёр ба олон фотоноор явагдах процессыг харьцуулж лазерын пульсын эрчим болон пульсын урт нь

ялгаатай хэлбэр ижилхэн лазерын пульсээр үйлчлэхэд энерги хадгалагдах хууль биелэхээс гадна бидний шинээр эзэмшсэн Кулоны дискрет хувьсагчийн арга нь сайн үр дүнтэй болох нь ажиглагдлаа. Мөн босгоны иончлол болон бага энергитэй олон фотоноор явагдах иончлох үзэгдлүүд ажиглагдаж үр дүн нь Alexei N. Grum-Grzhimailo нарын ажилтай ижил үр дүн өглөө.

- | | |
|---|---|
| <p>[1] Keldysh L V 1964 Zh. Eksp.Teor. Fiz.47 1945</p> <p>[2] J.L.Hansen, L.Holmegaard, J.H.Nielsen, H.Stapelfeldt and L.B.Madsen, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 45, 015101 (2012).</p> <p>[3] C.D.Lin, T.Morishita, R.Lucchese, A-T. Le, Z.Chen, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 43, 122001(2010).</p> <p>[4] L.A.Collins, A.L.Merts, J.Opt.Soc.Am. B7, 647 (1990).</p> <p>[5] Xiaoxin Zhou and C.D.Lin, Phys.Rev.Lett.64, 862 (1990).</p> <p>[6] Q.Su, J.H.Eberly and J.Javanainen, Phys. Rev. Lett. 64, 862 (1990).</p> <p>[7] V.C.Reed, K.Burnett, Phys. Rev. A42, 3152 (1990).</p> <p>[8] J.H.Eberly, J.Javanainen and Q.Su, J. Opt. Soc. Am. B6, 1289 (1989).</p> | <p>[9] B.I.Schneider, Phys. Rev A 55, 3417 (1997).</p> <p>[10] M.Gavrila, J.Shertzer, Phys. Rev. A53, 3431 (1996).</p> <p>[11] Jian Zhang, Lambropoulos, Phys.Rev.Lett. 77, 2186 (1996).</p> <p>[12] Л.Д.Ландау, Е.М. Лифшиц, Физика III, Москва (1974).</p> <p>[13] Frank Grossman, "Theoretical Femtosecond Physics" (2008).</p> <p>[14] Xiao-Min, Tong Shih IChu, Chem. Phys. 217, 119 (1997).</p> <p>[15] Liang-You Peng, Anthony F.Starace The journal of chemical physics 125 154311 (2006)</p> <p>[16] Alexei N. Grum-Grzhimailo, Brant Abeln, Klaus Bartschat, and Daniel Weflen , Phys. Rev. A 81, 043408 (2010)</p> |
|---|---|

Study of Exfoliated Molybdenum Disulfide (MoS_2)

G. Munkhbayar, M. Otgonbaatar

*Department of Physics, School of Arts and Sciences, National University of Mongolia
Ikh surguuliin gudamj-1, 14201, Ulaanbaatar, Mongolia**

In this study, We demonstrate mono and few layers MoS_2 samples on the $SiO_2(270nm)/Si$ substrate from bulk MoS_2 crystal by micromechanical exfoliation technique. We also report that the Raman and PL intensity can be thermally modulated by annealing 1L, 2L and 7L MoS_2 in a vacuum or air. We have systematically studied Atomic Force Microscopy, Raman and PL properties of mono and few layer MoS_2 on the $SiO_2(270nm)/Si$ substrate. First, we find that the number of layer values dependent the Raman and PL emission. First, Raman intensity area ratio of the MoS_2 E_2^1g , A_1^1 and $2LA$ modes to that area of the Si substrate increased linear with increasing number of layers MoS_2 . Second, Normalized PL intensity area of the (A) peak decreased linear with increasing number of layers MoS_2 . The value of those graphs is a method to understand the number of layers the exfoliated MoS_2 . Third we found that some effects of the few layers MoS_2 after thermal annealed (vacuum and air $300^\circ C$ for 40 min).

PACS numbers: 78.55.Qr, 78.30.Am, 78.30.Fs

I. INTRODUCTION

In the last decade, single atomic layer of graphite[1], great interest has grown on two dimensional materials. Two dimensional materials are attractive for use in next-generation nanoelectronic devices because, compared to one-dimensional materials, it is relatively easy to fabricate complex structures from them. MoS_2 is one of two dimensional materials and MoS_2 layers are bound together by weak van der Waals interactions and laminated 0.7 nm one to another.

Differently from graphene, MoS_2 is semiconductor with an indirect band gap of 1.2 eV[2] in bulk to direct band gap 1.8 eV for a monolayer MoS_2 [3–7], make MoS_2 attractive for a variety of electronic and optoelectronic devices. MoS_2 layers are bound together by weak van der Waals interactions and stacked 0.7 nm one to another. This feature enables easy exfoliation of the bulk molybdenite, similar to graphite, and suggests the possibility to fabricate monolayer MoS_2 following similar methods to the ones performed to obtain graphene[1, 11]. Micromechanical exfoliation technique[4, 5, 9, 10] (like for graphene) is the simplest and cheapest way to obtain exfoliated molybdenite with planar dimensions of the order of μm . Atomically thin MoS_2 layers can be peeled from molybdenite bulk and, once deposited on a substrate, identified by optical microscopy. The possibility to estimate the numbers of layers of the exfoliated molybdenite on 270 nm SiO_2 substrate[8] has been demonstrated. As in the case of graphene, MoS_2 has a wide range of applications. Due to the MoS_2 flexibility, future appli-

cations will be focused on Two-dimensional MoS_2 may be used in sensors[10, 12, 13] and memory[14] and photovoltaic devices[15] and Monolayer MoS_2 has also been used to fabricate a solar cell (with TiO_2 nanoparticles and poly (3-hexylthiophene)) with photo conversion energy of 1.3% [16]. Direct band gap in monolayer MoS_2 makes this material attractive for optoelectronics[17–19] potential applications in short-channel transistors[9, 22–24] and gas sensing[20, 21].

II. EXPERIMENTS

A. Sample Fabrication and Optical Characterization Setup

Mono and few layer MoS_2 samples were prepared on the $SiO_2(270nm)/Si$ substrate from bulk MoS_2 crystal (SPI Supplies, CAS 1317-33-5) by micromechanical exfoliation technique. Heavily n-doped silicon substrate (resistivity $0.01 \Omega cm$) has been cleaned by the usual process with acetone, isopropyl alcohol, de-ionized water, in ultrasonic bath (15 minutes for each step). MoS_2 crystal has been exfoliated using a scotch tape, to fabricate mono and few layers MoS_2 flakes. The flakes have been deposited on the silicon substrate and, to remove glue and other contaminants, cleaned in acetone and isopropyl alcohol (10 minutes for each step). The quantitative optical characterization of the MoS_2 flakes is carried out with an Olympus BH-2 microscopy equipped with a LEICA EC3 3.1 Mpixel digital camera. Then height of one of these flakes have been analyzed by Atomic Force Microscopy (AFM Digital D5000, Veeco, conductive AFM tip, cantilever resistivity $0.01-0.025 \Omega cm$, antimony n-doped silicon, tip radius 10 nm, nominal resonant frequency 320 kHz, tapping mode

*Electronic address: munkhbayar@num.edu.mn

n layer numbers of the MoS_2	Height of the layers (nm)	Different Raman modes $\Delta\nu$ (cm^{-1})	Raman ratio of Intensity area ($E_{2g}^1 + A_{1g} + 2LA$) to Si	Normalized PL Intensity area (arb. units)
1L	0.87	20.77	0.2335	1.0778
2L	1.35	22.14	0.2865	0.8686
3L	2.0	22.99	0.3447	0.8327
4L	2.6	23.11	0.5526	0.7195
5L	3.2	23.36	0.7605	0.6503
7L	4.0	23.51	1.0282	0.3636
10L	5.7	23.79	1.4859	0.1820
bulk	51	26.25	7.5585	-

TABLE I: Atomic force microscopy (AFM), Raman and Photoluminescence spectroscopy data

microscopy).

B. Raman and Photoluminescence Spectroscopy Setup

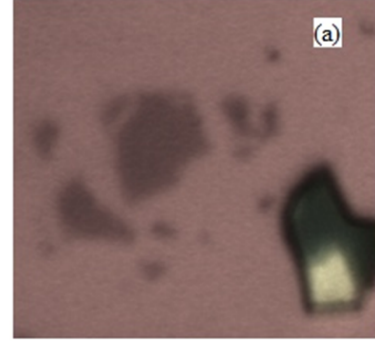
Raman and photoluminescence (PL) spectra are recorded simultaneously in a micro-Raman spectrometer (Renishaw in via) in backscattering configuration excited with an Ar laser ($\lambda = 632.8$ nm). The laser beam was focused on the MoS_2 sample by 100x objective. The scattered light was collected and collimated by the same lens. The scattered signal was dispersed by a spectrometer working at 1800 grooves/mm in the Raman and at 300 grooves/mm in the Photoluminescence and were detected by a thermoelectrically cooled CCD (charge-coupled device) detector at $60^\circ C$. Typical integration times are in the order of 240 s in the Raman and in the order of 10 s Photoluminescence. All of the Raman and Photoluminescence were recorded for the same integration time, laser power, and focus status. The size of focused beam was about $1 \mu m$ and only flakes larger than $2 \mu m$ were used.

C. Annealing Process

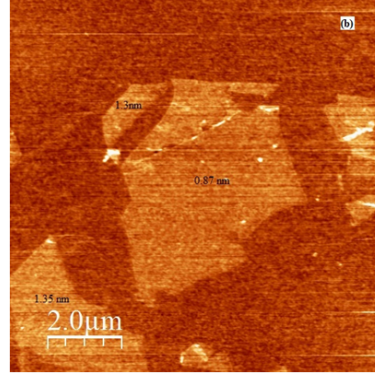
To modify the Raman and PL characteristics, some samples were annealed in the UHV chamber (pressure 10^{-9} torr) and in air at $300^\circ C$ for 40 min.

III. RESULTS AND DISCUSSION

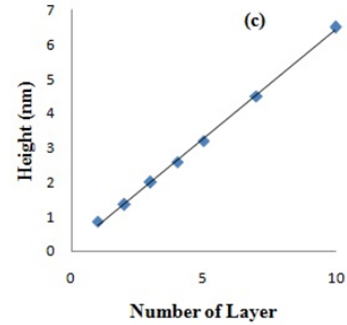
Figure 1a and 1b shows the optical and AFM images of the mono layer exfoliated MoS_2 flakes are



(a)



(b)



(c)

FIG. 1: (a) Optical image and (b) AFM image of the exfoliated Monolayer MoS_2 . (c) Measured height (H) number of layer. Squares are experimental data, and the line is linear fit.

reported. The lateral size and height distributions of the flakes determined by Optical microscopy and AFM analyses. This image shows that the heights of the flakes are about (1.2 – 1.8) nm (tapping mode microscopy) and (0.87 – 1.35) nm (contact mode microscopy) and lateral size of the image $5 \times 5 \mu m$. Mono layer height was 0.8 nm. AFM height of the flakes are depend tip and microscopy mode. Figure 1c measured height (H) number of layer. Figure 2a shows the Raman resonance of different layer MoS_2 flakes recorded using 632.8 nm laser line. Ra-

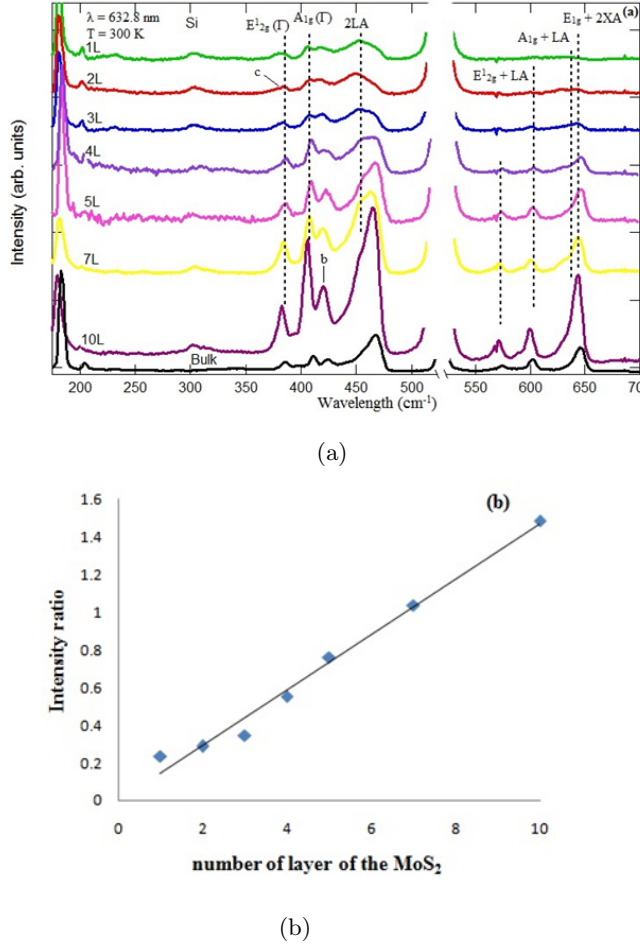


FIG. 2: (a) Resonant Raman spectra of different layers of MoS_2 using 632.8 nm laser line at the 300 K. (b) Calibration curve of the intensity area ratio of the MoS_2 E_{2g}^1 , A_g^1 and 2LA Raman modes to that area of the Si substrate. Squares are experimental data, and the line is linear fit.

man spectroscopy has already been established as a reliable tool to investigate the layer number of MoS_2 samples. We identified mono, bi, tri, four, five, or seven layer MoS_2 images. This result Raman E_{2g}^1 and A_g^1 modes each layer number different other results. We calculated number of layers MoS_2 dependence, Raman intensity area ratio figure 2b Calibration curve of the intensity area ratio of the MoS_2 E_{2g}^1 , A_g^1 and 2LA Raman modes to that area of the Si substrate. Squares are our experimental data, and the line is the linear fit. Figure 3a shows Photoluminescence spectra of different layers MoS_2 flakes. We have demonstrated mono, bi, tri, four, five, or seven layer MoS_2 images. We also calculated number of layers MoS_2 dependence, normalized PL intensity area figure 3b Calibration curve of the normalized PL intensity area I(A). Squares are our experimen-

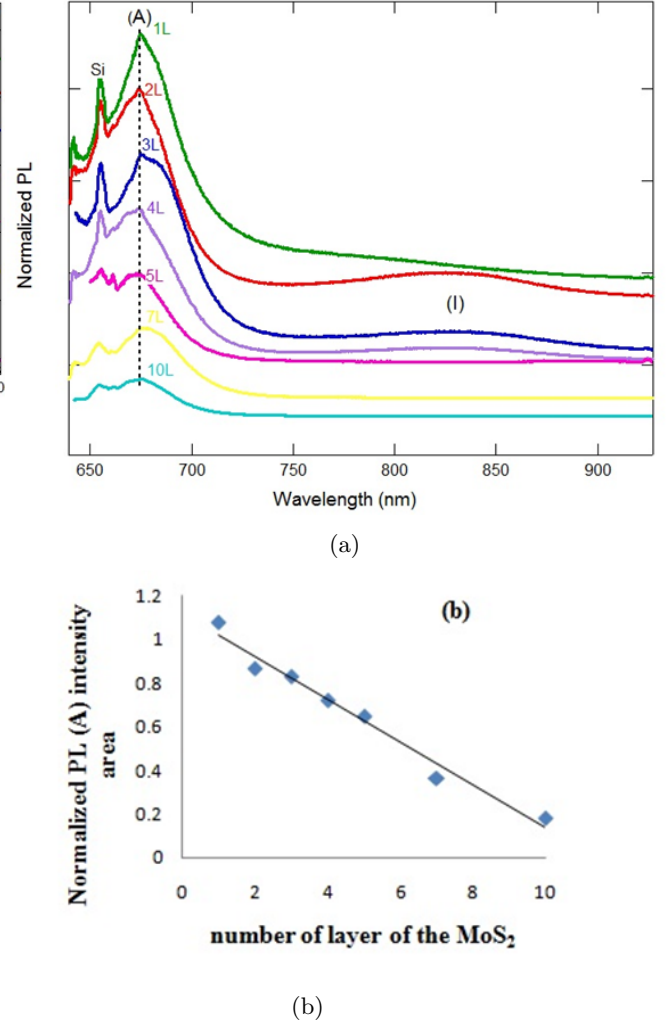


FIG. 3: (a) Normalized PL spectra of different layers of MoS_2 . (b) Calibration curve of the normalized PL intensity area I(A). Squares are experimental data, and the line is linear fit.

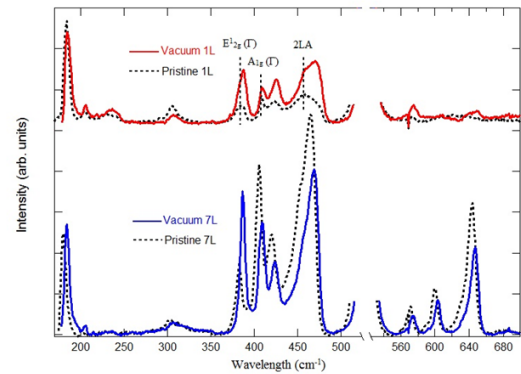


FIG. 4: The Raman spectra before and after annealing in a vacuum ($300^\circ C$ for 40 min).

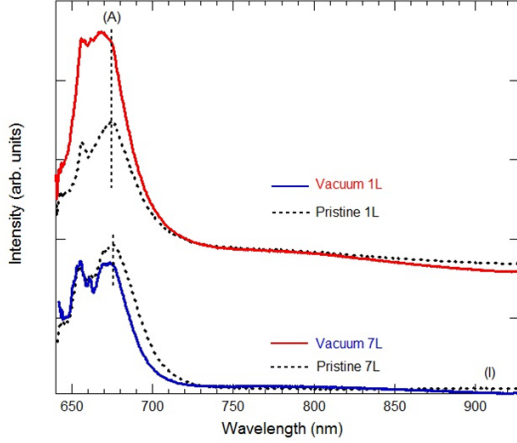


FIG. 5: PL spectra before and after annealing in a vacuum (300°C for 40 min).

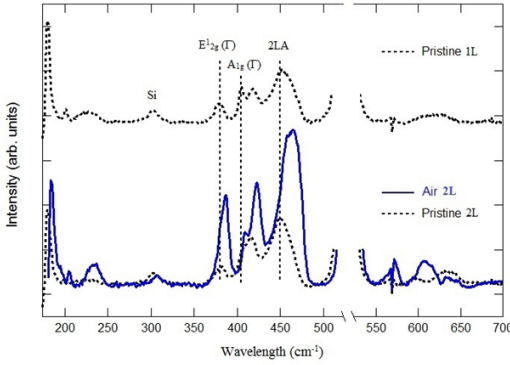


FIG. 6: The Raman spectra before and after annealing in the air (300°C for 40 min).

tal data, and the line is linear fit. Table I: Atomic force microscopy (AFM), Raman and Photoluminescence spectroscopy data Figure 4, 6 shows effects of the thermal treatment on Raman spectra of 1L and 7L MoS_2 , respectively for a vacuum and in air. We demonstrated that the Ultra-high vacuum and air annealing increased the Raman modes area. Figure 5, 7 Shows the PL spectra in vacuum annealing mono layer MoS_2 increased the PL intensity (IA) and peak energy (EA), respectively for 60% and 13.3 meV. (300°C for 40 min) We also surprising finding in this work, the indirect gap of the few layers MoS_2 were changed after thermal annealing (vacuum and

air).

IV. CONCLUSION

In conclusion, we have systematically studied the Raman and PL properties of mono and few layer

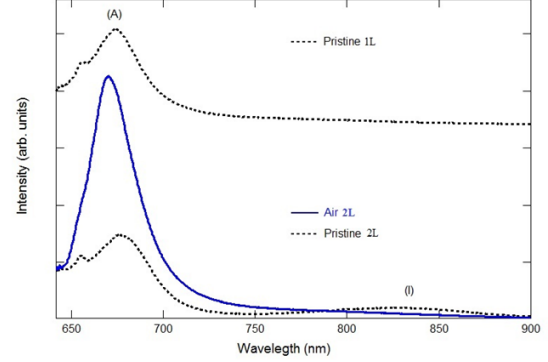


FIG. 7: PL spectra before and after annealing in the air (300°C for 40 min).

MoS_2 on the SiO_2 (270nm)/Si substrate. We calculated that the number of layer dependent quantitative the Raman and PL emission. First, Raman intensity area ratio of the MoS_2 E'_{2g} , A_g^1 and 2LA modes to that area of the Si substrate increased linear with increasing number of layers MoS_2 . Second, Normalized PL intensity area of the (A) peak decreased linear with increasing number of layers MoS_2 . The value of those graphs is a method to understand the number of layers the exfoliated MoS_2 . Third we found that some effects of the few layers MoS_2 after thermal annealed (vacuum and air 300°C for 40 min). Our results are combined characterization by quantitative optical microscopy, Atomic force microscopy (AFM), Raman and Photoluminescence spectroscopy are presented in Fig 1, 2, 3. Our results are compared with the available experimental results. Same results are presented in table I.

V. ACKNOWLEDGMENT

AKS acknowledges strong support from the University of L'Aquila, Italy and financial support through the ERASMUS MUNDUS gate II project.

- [1] K. S. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, T. J. Booth, V. V. Khotkevich, S. V. Morozov, A. K. Geim, Proc. Natl. Acad. Sci. USA 102 (30)(2005) 10451-10453.
- [2] K. K. Kam, B. A. Parkinson Detailed photocurrent

spectroscopy of the semiconducting group VIB transition metal dichalcogenides. J. Phys. Chem. 86 (4) (1982) 463-467.

- [3] S. Lebegue, O. Eriksson, Phys. Rev. B 79 (11) (2009)

- 115409.
- [4] A. Splendiani, L. Sun, Y. Zhang, T. Li, J. Kim, C.-Y. Chim, G. Galli, F. Wang, *Nano Lett.* 10 (4) (2010) 1271-1275.
 - [5] K. F. Mak, C. Lee, J. Hone, J. Shan, T. F. Heinz, Atomically thin MoS₂: a new direct-gap semiconductor. *Phys. Rev. Lett.* 105. 136805 (2010) 136805.
 - [6] A. Kuc, N. Zibouche, T. Heine, *Phys. Rev. B* 83 (24) (2011) 245213.
 - [7] S. W. Han, H. Kwon, S. K. Kim, S. Ryu, W. S. Yun, D. H. Kim, J. H. Hwang, J.-S. Kang, J. Baik, H. J. Shin, S. C. Hong, *Phys. Rev. B* 84 (4) (2011) 045409.
 - [8] H. Li, G. Lu, Z. Yin, Q. He, H. Li, Q. Zhang, H. Zhang, *small* 8 (5) (2012) 682-686.
 - [9] B. Radisavljevic, A. Radenovic, J. Brivio, V. Giacometti, A. Kis, *Nature Nanotechnol.* 2011, 6, 147-150.
 - [10] H. Li, J. Wu, Z. Yin, H. Zhang, *Acc. Chem. Rev.* 47(2014) 1067-1075.
 - [11] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, A. A. Firsov, *Science* 306 (2004) 66-669.
 - [12] H. Li, Z. Y. Yin, Q. Y. He, X. Huang, G. Lu, D. W. H. Fam, A. I. Y. Tok, Q. Zhang, H. Zhang, *small* 8 (2012) 63-67.
 - [13] C. Zhu, Z. Zeng, J. Li, F. Li, C. Fan, H. Zhang, *J. Am. Chem. Soc.* 135 (2013) 5998-6001.
 - [14] S. Bertolazzi, D. Krasnozhon, A. Kis, *ACS Nano* 7 (2013) 3246-3252
 - [15] E. Gourmelon, O. Lignier, H. Hadouda, G. Couturier, L. Bernede, J. Tedd, J. Pouzed, J. Salardenne, *Sol Energy Mater. Sol Cells* 46 (1997) 115-121.
 - [16] M. Shanmugam, T. Bansal, C. A. Durcan, B. Yu, *Appl. Phys. Lett.* 100 (153901) (2012).
 - [17] Z. Y. Yin, H. Li, H. Li, L. Jiang, Y. M. Shi, Y. H. Sun, G. Lu, Q. Zhang, X. D. Chen, H. Zhang, *ACS Nano* 6 (2013) 74-80.
 - [18] H. S. Lee, S. W. Min, Y. G. Chang, M. K. Park, T. Nam, H. Kim, J. H. Kim, S. Ryu, S. Im, *Nano Lett.* 12 (2012) 3695-3700.
 - [19] O. Lopez-Sanchez, D. Lembke, M. Kayci, S. Radenovic, A. Kis, *Nature Nanotechnology* 8 (2013) 497-501.
 - [20] Q. He, Z. Zeng, Z. Yin, H. Li, S. Wu, X. Huang, H. Zhang, *small* 8 (19) (2012) 2994-2999.
 - [21] H. Wang, L. Yu, Y.-H. Lee, Y. Shi, A. Hsu, M. L. Chin, L.-J. Li, M. Dubey, J. Kong, T. Palacios, *Nano Lett.* 12 (9) (2012) 4674-4680.
 - [22] D. Frank, Y. Taur, H.-S. Wong, Generalized Scale Length for Two-Dimensional Effects in MOSFETs. *IEEE Electron Device Lett.* 19 (1998) 385-387.
 - [23] L. Liu, S.B. Kumar, Y. Ouyang, J. Guo, Performance Limits of Monolayer Transition Metal Dichalcogenide Transistors. *IEEE Trans. Electron Devices.* 58 (2011) 3042-3047.
 - [24] Y. Yoon, K. Ganapathi, S. Salahuddin, How good Can Monolayer MoS₂ Transistors Be? *Nano Lett.* 11 (2011) 3768-3773.

ГАРЧИГ

1. **Цөмийн Физикийн Судалгааны Төв 50 Жилд**
С.Даваа, П.Зузаан.....1-6
2. **Монгол Улсад Рентген-Флуоресценцийн Судалгаа Үүсч Хөгжсөн нь**
П.Зузаан, Ц.Амартайван, С.Даваа.....7-20
3. **Ion Beam Excitation of TXRF Yield**
V.K. Egorov, E.V.Egorov, M.S.Afanas'ev.....21-24
4. **Some Review for Identification of Air Pollution Sources of Ulaanbaatar City Using ED-XRF Analysis**
D.Shagjjamba, S.Lodoysamba, G.Gerelmaa, P.Zuzaan.....25-30
5. **X-Ray Fluorescence Analysis as a Tool of Monitoring Soil Pollution Around The Central Geological Laboratory**
Ts.Dagii, B.Davaasuren, N.Baljinnyam, Ts.Nadmid.....31-34
6. **Цөмийн Аналитик Аргаар Туул Гол Орчмын Хөрс, Лаг Шаврын Дээжид Хүнд, Хортой Элемент Тодорхойлсон нь**
Г.Дамдинсүрэн, П.Зузаан, Д.Болортуяа, Н.Отгонпүрэв, О.Сүх.....35-38
7. **Ховор Шорооны Элементийн Хүдрийн Үндсэн Болон Дагалдах Элементийг Рентген Флуоресценцийн Болон Идэвхжлийн Шинжилгээний Аргаар Тодорхойлох Судалгаа**
Д.Болортуяа, П.Зузаан, Д.Баатархүү, Г.Дамдинсүрэн, Р.Маахүү, О.Сүх.....39-44
8. **Estimation of the Regression Equation Based on the Pulp Density by “AR-31-M” XRF Spectrometer**
D.Altantsetseg, B.Batjargal, D.Otgonbaatar, G.Bolorchimeg.....45-50
9. **Determination of Rare Earths and Other Trace Elements in Ore Samples of Mongolia by WDXRF and INAA**
N.Baljinnyam, B.Davaasuren, N.Norov, M.V.Frontasyeva, S.S.Pavlov..51-54
10. **Төмрийн Хүдэр Дэх Төмөр, Цахиур, Хөнгөн Цагаан, Кальцийн Агуулга Тодорхойлох Энергийг Ялгах Рентген-Флуоресценцийн Арга**
С.Гүнжидмаа.....55-56
11. **Бага Дунд Чадалтай Реакторыг Монгол Улсад Ашиглах Асуудалд**
С.Одмаа, Н.Норов.....57-62

12. **Гамма Цацрагийн Үйлчлэлээр Усанболор (SiO_2)-т Үүсэх Эффектийн Судалгаа**
Ч.Цэцэнжаргал, Т.Очирхуяг, Н.Төвжаргал, Д.Баатархүү,
Л.Ням-Очир.....63-66
13. **Шингэний Дулаан Багтаамж Болон Зуурамтгайн Коэффициентийг Хольцийн Концентрацаас Хамааруулан Судлах нь**
Б.Дөлгөөн, О.Бат-Оргил, Л.Энхсайхан, Н.Төвжаргал67-70
14. **Инертийн Хийн Атомуудын Үндсэн Төлөвийг Квант Шингэний Динамик Ойролцооллоор Тооцоолох нь**
Д. Наранчимэг, Л. Хэнмэдэх, Г.Мөнхсайхан, Н. Цогбадрах.....71-76
15. **Гелийн Атомаас Протонд Цэнэг Дамжуулах**
Г.Зоригт, Л.Хэнмэдэх, О.Лхагва.....77-80
16. **Атомыг Хүчтэй Лазерын Пульсээр Иончлох Магадлалыг Дискрет Хувьсагчийн Аргаар Тооцоолох**
Ч.Алдармаа, Л.Хэнмэдэх, Г.Зоригт, О.Лхагва81-84
17. **Study of Exfoliated Molybdenum Disulfide (MoS_2)**
G.Munkhbayar, M.Otgonbaatar85-89

МУИС-ийн Эрдэм Шинжилгээний ФИЗИК сэтгүүлд өгүүлэл бичих журам

1. *Бичиглэлийн хэлбэр*

Цаасны хэмжээ A4 байна. Бичиглэл дээд талаасаа 0.845inch (2.15cm), доод талаасаа 0.845inch (2.15cm), зүүн талаасаа 0.845inch (2.15cm), баруун талаасаа 0.845inch (2.15cm) буюу хэвлэгдсэн материалын нийт өндөр 10 inch (25.4cm), өргөн 6.27 inch (15.93cm), (хамгийн ихдээ өндөр 25.5cm, өргөн 16cm-ээс хэтрэхгүй) байна.

2. *Хэл*

Өгүүллийг Англи, Монгол, Орос хэлний аль нэгээр **Latex, MS Word, Word perfect** программ ашиглан **Times New Roman** фонт ашиглан бичсэн байна.

3. *Өгүүллийн бүтэц*

Сэтгүүлд өгөх эрдэм шинжилгээний өгүүллийг дараах бүтцийг баримтлан бичнэ.

- Гарчиг
- Зохиогчдын нэр, байгууллага, хаяг
- Товч утга /тавин үгнээс хэтрэхгүй/
- Мэргэшлийн индекс
- Түлхүүр үг (Заавал биш)
- Удиртгал
- Үндсэн хэсэг
- Онолын үндэс
- Хэмжилтийн арга зүй, хэмжилт гэх мэт
- Үр дүн, дүгнэлт
- Ишлэл буюу ном зүй
- Товч утгын орчуулга

4. *Бичиглэл хийхэд баримтлах зарчмууд*

4.1. Ишлэлийг дөрвөлжин хаалтанд [1], [7, 10-12.14] гэх мэт тэмдэглэнэ. American Physics Society (APS)-ийн Physics Review A (PRA) style хэрэглэнэ.

4.2. Тооны аравт, зуутын таслалыг цэгээр тэмдэглэнэ.

4.3. Томъёон дахь үсгийг заавал налуугаар бичнэ.

4.4. Нэгж болон тусгай функцуудын нэрийг (sin, tg, log, exp, det, тгэх мэт) босоогоор бичнэ.

4.5. Графикийг Enhanced PostScript (*.EPS) форматаар бэлтгэнэ. Графикт координатын тэнхлэг 1pt өргөнтэй байхаар бодож бусад шугамын өргөнийг сонгоно. Графикт тайлбарыг налуугаар (9pt) бичнэ.

5. *Бичиглэл хийх үсэгний хэв маяг*

5.1. Header (хуудасны толгой)-9pt, *italic*, тэгш талын зүүн үзүүрт нь хуудасны дугаар, 0.5inch зай аваад зохиогчийн нэр, цэг тавиад гарчиг бичнэ. (хоёроос дээш зохиогчтэй бол .. нар гэж товчилно, гарчиг нь нэг мөрөнд багтахгүй бол гол утгыг нь гарган хураангуйлж багтаана)

5.2. Гарчиг-14pt, Bold, Том үсгээр эхэлж жижиг үсгээр бичнэ

5.3. Зохиогч-11pt, Bold, Томоор эхэлж жижгээр бичнэ

5.4. Хаяг-9pt, *italic*.

5.5. Abstract (Товч утга)-9pt, Үндсэн хэсгийн баруун, зүүн талаас 1 inch (2.54cm) зайтай бичнэ.

5.6. Мэргэшлийн индекс- 11 pt (PACS number Physics and Astronomy Classification Scheme: <http://www.aip.org/pacs> хаягаас харна уу.

5.7. Үндсэн хэсэг- 11pt, Зөвхөн хоёр баганаар (хоорондын зай нь 0.25inch=6.35mm)

5.8. Бүлгийн (section) гарчиг- 11pt, ALL CAPITAL, Bold, дугаарлавал Ром тоо хэрэглэнэ.

5.9. Дэд бүлгийн (subsection) гарчиг- 11pt, Томоор эхэлж жижгээр бичнэ, Bold, дугаарлавал A,B,C,... гэнэ.

5.10. Ишлэл буюу ном зүй – 11pt.

6. *Өгүүллийг хүлээн авах:*

6.1. Өгүүллийн тод хэвлэсэн хоёр хувийг файлын хамт авна. Зургийн файлыг тусад нь авна.

6.2. Хэвлэсэн хувь дээр зохиогчид гарын үсэг зурсан байна.

6.3. Өгүүлэл хэвлүүлэхийг зөвшөөрсөн эрдэм шинжилгээний семинарын эрхлэгчийн гарын үсэг бүхий зөвшөөрөлтэй байна.

(Өгүүллийг бичихдээ олон улсад хүлээн зөвшөөрөгдсөн Америк физикийн нийгэмлэгийн сэтгүүлийн бичиглэл, тэмдэглэлийн журмыг ерөнхийд нь баримтална. <http://publish.aps.org/INFAUTH/msprep.html>)

Редакцийн зөвлөл