

МОНГОЛ УЛСЫН ИХ СУРГУУЛЬ ШИНЖЛЭХ УХААНЫ СУРГУУЛЬ

МУИС-ийн Эрдэм Шинжилгээний Бичиг

ФИЗИК

№ 19 (425)



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., дэд проф. П.Зузаан

Др., проф. С.Даваа

Др., проф. [Л.Дэмбэрэл]

Др., дэд проф. Г.Батсүх

Др., дэд проф. С.Лодойсамба

Др., дэд проф. Л.Энхтөр

Др., 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: Tsgobadrakh@num.edu.mn

Дугаарыг эрхлэн гаргасан:

Др. П.Мөнхбаатар

Др., проф. Ц.Баатарчулуун

Др., проф. Ж.Ванчинхүү

Editorial board

Chairman: PhD. J.Davaasambu

Secretary: PhD. N.Tgogbadrakh

Members:

ScD., Prof. Ts.Gantsog

ScD., Ass.prof. P.Zuzaan

PhD., Prof. S.Davaa

PhD., Prof. [L.Demberel]

PhD., Ass.prof. G.Batsukh

PhD., Ass.prof. S.Lodoisamba

PhD., Ass.prof. L.Enkhtur

PhD. 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: Tsgobadrakh@num.edu.mn

Managing Editors:

PhD., P.Munkhbaatar

PhD., Prof. Ts.Baatarchuluun

PhD., Prof. J.Vanchinkhuu

ISSN 2311-1097

УЛААНБААТАР

2015

ГАРЧИГ

1. **Pump-Probe Spectroscopy with Entangled Photons**
P. Munkhbaatar, K. Myung-Whun, D. Ulam-Orgikh.....1-8
2. **Time-and-Wavelength Resolved Pump Probe Spectroscopy & Calibration Measurement Using Semiconductors**
P. Munkhbaatar, D. Ulam-Orgikh, K. Myung-Whun, M. Byambatseren, Ts. Baatarchuluun.....9-12
3. **Wave Solutions of an a-cut Uniaxially Crystal**
B. Daariimaa, G. Ochirbat, J. Khatanbaatar, P. Munkhbaatar.....13-16
4. **Берлинитийн Харимхайн Тогтмол болон Пьезо-Электрик Коэффициентийн Онолын Тооцоолол**
Н. Төвжаргал, Ж. Даваасамбуу, П. Дашдэмбэрэл, Ш. Чадраабал.....17-20
5. **Metamorphism Trend in Some Mongolian Coals Revealed by Raman Spectroscopy**
S. Munkhtsetseg, R. Galbadrakh, L. Enkhtur.....21-24
6. **Цахилгаан Статик Шүүлтүүрийн Шүүх Чадварыг Түүний Хэлбэр Хэмжээтэй Уялдуулан Тооцоолох нь**
Ж. Ванчинхүү, Б. Бат-эрдэнэ.....25-30
7. **$\text{NaFe}(\text{W}_{0.75}\text{Mo}_{0.25}\text{O}_4)_2$ ба $\text{NaFe}(\text{W}_{0.5}\text{Mo}_{0.5}\text{O}_4)_2$ Нэгдлүүдийн Кристалл Бүтцийн Судалгаа**
Л. Ням-Очир, О. Гэрэлмаа, Н. Төвжаргал, Р. Галбадрах, Б. Энхсаруул.....31-34
8. **Альфа Төмрийн Уян Харимхайн Тогтмолуудыг Фононы Спектрээс Тооцоолох нь**
А.Дулмаа, Н.Цогбадрах, Р.Галбадрах.....35-38
9. **Атомыг Лазерын Пульсээр Өдөөх Магадлалыг Псевдоспектриал Аргаар Тооцоолох**
Ч. Алдармаа, Л. Хэнмэдэх, Г. Зоригт, О. Лхагва.....39-42
10. **Квант Шингэний Динамик Ойролцооллоор Гелийн Атомын Үндсэн Төлөвийг Тооцоолох нь**
Д. Наранчимэг, О. Сүх, Л. Хэнмэдэх, Н. Цогбадрах.....43-46
11. **Dependence of the g-Factor of Mineral Coals on a Metamorphism Level**
G. Shilagardy, P. Tuvshintur, S. V. Adashkevich, V. S. Kiranov, N. M. Lapchuk, I. V. Sedkova, V. F Stelmach. G. D. Frolkov, Ts. Nyamdulam, R. Khandmaa.....47-48

12. **Материалы: Свойства И Возможные Применения**
Э. М. Шпилевский, С. А. Филатов, Г. Шилагарди, П. Тувшинтур,
А. Т. Богорош, Ц. Хандмаа, Р. Нямдулам.....49-52
13. **Структурирование Полимеров Фуллеренами**
Э. М. Шпилевский, С. А. Филатов, Г. Шилагарди, П. Тувшинтур,
Ц. Хандмаа, А. Т. Богорош.....53-54
14. **Спектральное Проявление Плазмонного Резонанса в Металл-
Фуллереновых Наноструктурах**
Э. М. Шпилевский, А. Д. Замковец, М. Э. Шпилевский, С. А. Филатов,
Г. Шилагарди, П. Тувшинтур, Ц. Хандмаа, Р. Нямдулам.....55-58
15. **Улаанбаатар Хот Орчмын Агаар Мандлын Зарим Оптик
Параметруудийг Тодорхойлсон Дүн**
Л.Бадрах, Ц.Баатарчулуун, Б.Даариймаа, Б.Ганбат.....59-62
16. **Phase Change Properties in Chalcogenide Semiconductors**
М. Batpurev, J. Battogtokh.....63-68
17. **Улаанбаатар Хотын Зарим Сургууль, Цэцэрлэгийн Байрны Агаар
Дахь Радоны Судалгаа**
Б. Уранчимэг, Н. Норов.....69-72
18. **ТРИГА Төрлийн Судалгааны Реакторын Реактивитийн Анализ**
Б. Туул, Н. Норов, Бат. Мөнхбат.....73-80

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

Pump-Probe Spectroscopy with Entangled Photons

P. Munkhbaatar^{1,*}, K. Myung-Whun^{2,3}, and D. Ulam-Orgikh¹

¹*Department of Physics, School of Science, NUM, Ulaanbaatar 210646, Mongolia*

²*Department of Physics, CNU, 561-756 Jeon-ju, Korea*

³*Institute of Photonics and Information Technology, CNU, 561-756 Jeon-ju, Korea*

A pump-probe spectroscopy using polarization controlled entangled photons was proposed to improve the spectral resolution of optical signals in solids. Numerical simulation showed that stimulated Raman scattering response due to simple phonon and phonon coupled to orbital excitation can be discriminated in transmittance signal of a small cluster system mimicking LaMnO_3 , a Mott insulator with orbital ordering. The simulation showed that orthogonal polarizations of the pump and probe light field suppressed the simple phonon peaks, while it could not suppress the phonons coupled to orbital excitation.

PACS numbers: 42.25.Ja, 78.47.J-, 42.50.Ct

I. INTRODUCTION

Light-matter interactions can provoke optical excitations between the quantum states of the matter, which result into distinguishable features in infrared and Raman spectra. Analysis of the spectral features provides the information of the interactions in the many-body quantum states of the matter[1]. In some solid matters such as strongly correlated electron systems, however lattice, charge, spin and orbital degree of freedom compete each other on similar energy scales to form the complicated low energy states[2], so numerous possibilities are allowed for optical excitations of microscopically different origins at similar energy scales, which causes ambiguity in the interpretation of the spectral features[3–6].

The ambiguity can be reduced, if multiple light fields are employed as proposed in some non-linear optical techniques[7]. Amplitude of the optical signal is proportional to the expectation values of the dipole operator acted upon the energy eigen-states of the matter. When the multiple light fields are used, numerous combinations of the light field creation or annihilation operators are involved in the light-matter interaction process in the experiment. Combinations of light fields with different frequencies allow the optical processes for different excitation-decay paths, which makes the intensity signals of the processes to appear at different places in the multi-dimensional frequency space composed of those light field frequencies. More information of the light-matter interaction process thus can be obtained from the multi-dimensional spectra[8]. Furthermore if those multiple light fields are entangled by their frequencies, fine tuning of the interference between the entangled light fields can make signal intensities of different excitation-decay paths to be different, which provides

the chances to discriminate the light-matter interaction processes less ambiguously from the optical spectra[9].

Entangled-light-field spectroscopic methods therefore may have advantage to resolve the low energy quantum states of the strongly correlated electron solid matter systems. However, application of the methods to the strongly correlated systems has not been an issue of particular concern so far. It is probably because the optical signals in those systems have bandwidth usually comparable or broader than the minute energy differences between the sub-band peaks formed by the emission or absorption of phonon, magnon, or orbiton for the optical processes. The signal intensity differences provided by the entangled-light-field spectroscopic methods may not be significant enough to distinguish the smeared and overlapped neighboring peaks. In this paper, we suggest that optical pump-probe method using polarization controlled entangled-photon pairs can be used to distinguish optical excitations of which resonant energy is very similar but the microscopic light-matter interaction process is quite different in a model system. For the demonstration, we numerically simulated the polarization dependence of the entangled-photon pump-probe response of a Mott insulator of which geometrical symmetry of the valence orbitals was broken.

II. MODEL AND METHOD

A. Hamiltonian

We choose LaMnO_3 as a model material system. This material system is well known for the spin and orbital ordering[2]. LaMnO_3 has Mn^{3+} ions with electronic configuration $3d^4$ in high-spin state. Here one electron occupies one of the doubly degenerate valence orbitals. The orbitals show $3x^2 - r^2/3y^2 - r^2$ type ordering coupled to the JT lattice distortion

*Electronic address: p_munkhbaatar@yahoo.com

and the spins show A-type ordering in the ground state. To mimic one lattice layer of the orbital and spin ordered LaMnO₃ crystal, we built an ideal Mn-

cluster composed of four Mn³⁺ ions[10]. The Hamiltonian of the system was built based on a quasi-two-dimensional two-orbital Hubbard model as follows:

$$H = t(c_{1,3x^2-r^2}^\dagger c_{2,3x^2-r^2} + c_{4,3x^2-r^2}^\dagger c_{3,3x^2-r^2} + c_{1,3y^2-r^2}^\dagger c_{4,3y^2-r^2} + c_{2,3y^2-r^2}^\dagger c_{3,3y^2-r^2} + h.c) \\ + U \sum_i n_{i,3x^2-r^2} n_{i,3y^2-r^2} + \omega_{ph} b^\dagger b + q(b^\dagger + b) \sum_i (-1)^i T_i^x + Q_3 \sum_i T_i^z + \sum_{(i,j)} J_{ij} T_i^y \langle T_j^y \rangle. \quad (1)$$

Here the first term was kinetic energy of Mn ion e_g electron, t was the hopping integral between neighboring Mn sites. $c_{i\alpha}^\dagger$ ($c_{i\alpha}$) represented the electron creation (annihilation) operator with orbital α at site i . $3x^2 - r^2$ (and $3y^2 - r^2$) represented the spatial symmetry of Mn electron orbital α . The second term was the on-site Coulomb interaction. U was the Coulomb repulsion energy between two electrons occupying different e_g orbitals of the same Mn site with high spin configuration. The third term was Q_2 -type JT phonon contribution. ω_{ph} was the Q_2 phonon energy and $b^\dagger$ (b) was the phonon creation (annihilation) operator. The fourth term was the electron-phonon interaction. q was the electron-phonon coupling constant and T_i^α was the localized orbital pseudo-spin operator. The fifth term was Q_3 -type static JT distortion. Last term was the super-exchange interaction between the orbitals in the four-Mn-cluster and the outside orbitals surrounding the cluster. We solved the Hamiltonian numerically to find the eigenvalues and the eigen-states[10]. Fig.1(a) shows the energy eigen-states schematically. $|g\rangle$ represented a set of eigen-states, i.e. $|g_1\rangle, |g_2\rangle, \dots$ which included the ground state $|g_1\rangle$. Double occupation of electrons at one Mn-site e_g orbitals was not allowed for those states. The energy difference between $|g_n\rangle$ and $|g_{n+1}\rangle$ was due to the phonon-orbital coupling energy difference for different octahedral distortion and orbital ordering configuration. Second set, $|e\rangle = |e_1\rangle, |e_2\rangle, \dots$ represented the set of photo-excited eigen-states. The excited state denoted one hole and one double occupation. One element of the set can be represented schematically as $\begin{vmatrix} \uparrow & \downarrow \\ 0 & \uparrow\downarrow \end{vmatrix}$, for example. Here the arrows depict the pseudo-spin (i.e. orbital) state of a Mn-site in the cluster. The energy difference between $|g_n\rangle$ and $|e_n\rangle$ was mainly due to Coulomb energy (U). The energy difference between $|e_n\rangle$ and $|e_{n+1}\rangle$ was due to phonon-orbital coupling between the sites similar as in $|g_n\rangle$. Third set of higher energy ($\sim 2U$) photo-excited states, $|f\rangle$ (not shown in Fig.1(a)) can be also considered in the interaction process. This set corresponded to the two doubly occupied states which can be represented

schematically as $\begin{vmatrix} \uparrow\downarrow & 0 \\ 0 & \uparrow\downarrow \end{vmatrix}$.

B. Formalism of pump-probe signal

Here, the calculation procedure was briefly explained. Details of the method can be found in Refs.[9, 13]. $(\vec{k}_1, \omega_1)$ mode as the pump light mode and $(\vec{k}_2, \omega_2)$ mode as the probe mode was considered. The frequency domain PP signal with quantum optical modes ($S(\omega_1, \omega_2)$) was defined as $S(\omega_1, \omega_2) = T(\omega_1, \omega_2)_{with} - T(\omega_2)_{without}$. $T(\omega_1, \omega_2)_{with}$ indicated the transmittance intensity of probe light signal measured with pump light mode illumination and $T(\omega_2)_{without}$ indicated the transmittance intensity of probe light signal measured without pump light mode illumination. The PP signal was calculated as $P^{(3)}$ (third order polarization) in the probe mode direction. The probe mode direction was $\vec{k}_1 - \vec{k}_1 + \vec{k}_2$ because of the phase matching condition. Note that the phase matching condition was considered in the free space.

The nonlinear polarization was induced by the sequence of interactions with the optical fields. When the last interaction occurs with the $\vec{k}_2$ mode, it generated $P^{(3)}(\vec{k}_2, t)$. Thus, the signal was defined as following:

$$S(\omega_1, \omega_2) = -\text{Im} \left[\frac{1}{T} \int_{-T}^T dt \left\langle \varepsilon_2^\dagger(t) P^{(3)}(\vec{k}_2, t) \right\rangle \right] \quad (2)$$

Here $\varepsilon_2^\dagger(t)$ was the negative frequency component of the probe mode, and $2T$ was the measurement time [10]. In the rotating wave approximation (RWA), the matter-field coupling was given by

$$H_{int}(t) = \mu^\dagger(t) \varepsilon(t) + \mu(t) \varepsilon^\dagger(t). \quad (3)$$

Here the dipole operator was partitioned as $\mu^\dagger(t) + \mu(t)$, where

$$\mu(t) = \sum_{k>l} \mu_{lk} e^{-i(E_k - E_l)t} |l\rangle \langle k| \quad (4)$$

was the positive frequency part and it represented the transition from the higher energy state to lower energy state; $\{|k\rangle\}$ represented the energy eigenstates of the four-Mn-cluster system. $\mu^\dagger$ represented the transition from the lower energy state to the higher energy state.

The field of mode $\varepsilon_j(t)$ ($j = 1, 2$) was similarly partitioned as $\varepsilon(t) + \varepsilon^\dagger(t)$, where the positive frequency component was

$$\varepsilon_j(t) = \left(\frac{2\pi\omega_j}{\Omega} \right)^{(1/2)} a_j e^{-i\omega_j t}. \quad (5)$$

Here, a_j ($a_j^\dagger$) was the annihilation (creation) boson operator for the j -th mode and Ω was the quantization volume.

Using the super-operator non-equilibrium Green's function (SNGF) formalism [9] and the eight close-time-path-loop (CTPL) diagrams, Eq.(2) can be expressed in terms of four-point correlation function of the matter and the field as follows:

$$\begin{aligned} S(\omega_1, \omega_2) = & -\text{Im} \left\{ \langle \mu G^\dagger(\omega_1) \mu G^\dagger(\omega_1 + \omega_2) \mu^\dagger G(\omega_1) \mu^\dagger \rangle \langle a_1^\dagger a_2^\dagger a_2 a_1 \rangle + \langle \mu G^\dagger(\omega_2) \mu G^\dagger(\omega_2 + \omega_1) \mu^\dagger G(\omega_1) \mu^\dagger \rangle \langle a_2^\dagger a_1^\dagger a_2 a_1 \rangle \right. \\ & + \langle \mu G^\dagger(\omega_1) \mu G^\dagger(\omega_1 + \omega_2) \mu^\dagger G^\dagger(\omega_2) \mu^\dagger \rangle \langle a_1^\dagger a_2^\dagger a_1 a_2 \rangle + \langle \mu G^\dagger(\omega_2) \mu G^\dagger(\omega_1 + \omega_2) \mu^\dagger G^\dagger(\omega_2) \mu^\dagger \rangle \langle a_2^\dagger a_1^\dagger a_1 a_2 \rangle \\ & + \langle \mu G^\dagger(\omega_2) \mu^\dagger G(0) \mu G(\omega_1) \mu^\dagger \rangle \langle a_2^\dagger a_2 a_1^\dagger a_1 \rangle + \langle \mu G^\dagger(\omega_1) \mu^\dagger G(\omega_1 - \omega_2) \mu G(\omega_1) \mu^\dagger \rangle \langle a_1^\dagger a_2 a_2^\dagger a_1 \rangle \\ & \left. + \langle \mu G^\dagger(\omega_1) \mu^\dagger G^\dagger(0) \mu G^\dagger(\omega_2) \mu^\dagger \rangle \langle a_1^\dagger a_1 a_2^\dagger a_2 \rangle + \langle \mu G^\dagger(\omega_2) \mu^\dagger G^\dagger(\omega_2 - \omega_1) \mu G^\dagger(\omega_2) \mu^\dagger \rangle \langle a_2^\dagger a_1 a_1^\dagger a_2 \rangle \right\}. \quad (6) \end{aligned}$$

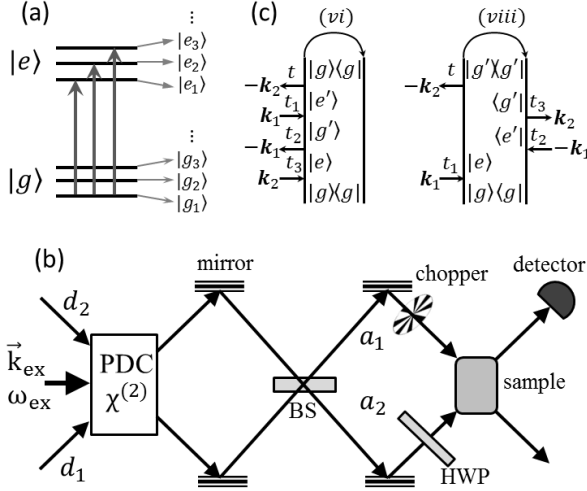
Here $G(\omega) = (\omega + E_{g_1} - H + i\gamma)^{-1}$. The eight terms in Eq.(6) corresponded to the eight diagrams of Fig. 4 in Ref.[9]. The interactions were time ordered within each branch of the diagram, but the two branches were not time ordered with respect to each other. By convention, the chronologically last interaction was absorption and it occurred at the left branch of the loop.

C. Pump-probe spectroscopy with entangled photons

It is proposed that the PP process carried out with two entangled optical modes. Original method was proposed by Roslyak to selectively investigate quantum pathways in the PP response of non-interacting molecules [9, 11]. In the proposed PP spectroscopy, the pump and the probe optical modes were produced by the parametric down conversion process (PDC) in a nonlinear optical crystal such as BaBO₂. External excitation light with frequency ω_{ex} and the wave-vector $\vec{k}_{ex}$ illuminates the nonlinear crystal, then two entangled optical modes (wave-vector $\vec{k}_1, \vec{k}_2$ and frequency ω_1, ω_2 respectively) were created. Due to the phase matching condition, the frequency (wave-vector) of the external excitation light and the two entangled optical modes should satisfy $\omega_{ex} = \omega_1 + \omega_2$ ($\vec{k}_{ex} = \vec{k}_1 + \vec{k}_2$). Note that the phase matching condition was considered inside of the nonlinear crystal. In the free space the value and the direction of the wave-vectors can be different because of the refraction.

Let's assume that our model system, i.e. the four-Mn-cluster interact with two entangled optical modes such as $(\vec{k}_1, \omega_1)$ mode as the pump light mode and $(\vec{k}_2, \omega_2)$ mode as the probe mode. Then the PP signal was generated by the change in the absorption of $(\vec{k}_2, \omega_2)$ mode due to the interaction of our model system with $(\vec{k}_1, \omega_1)$ mode. The arrival time of $(\vec{k}_2, \omega_2)$ mode and that of $(\vec{k}_1, \omega_1)$ mode on the sample were not well separated because of the same path length. We added a small modification, a half-wave plate (or periscope) to Roslyak's original idea for the polarization control of the pump light mode. Schematic diagram of the proposed setup was shown in Fig. 1(b).

Nonlinear optical processes can be generated by many optical modes. Those processes can be described by the CTPL diagrams [13]. We interested in only the PP process, which can be represented by the sum of eight CTPL diagrams according to the RWA [9, 13]. The CTPL diagrams are called as the transition pathways. More detail explanation of PP signal is given in pervious section. According to Roslyak, the pathways can be divided into two groups if three-energy-level system in the non-interacting atomic limit is involved in the PP process. In the first group, the pathways showed that the system evolves from the ground state (g) to an excited state (e) by absorbing an optical mode, then to another excited (f) by absorbing one more optical mode, and to a lower energy excited state (e) by emitting an optical mode, then finally to the ground state (g) by emitting an optical mode, which can be represented



Зүгар 1: (a) Schematic energy level diagram. (b) Schematic experimental setup for the pump-probe method with entangled photons. PDC was a nonlinear crystal used to obtain entangled-photon pairs from the classical external excitation beam by parametric down conversion. BS was 50:50 beam splitter. HWP (half wave plate) was used to control the polarization of $\vec{k}_1$ mode. The detector measured the photon flux in $\vec{k}_2$ mode. d_1 and d_2 were annihilation operators for the original non-entangled (canonical) modes and a_1, a_2 represent the entangled modes. (c) Loop diagrams representing the entangled photon-matter quantum pathways contributing to pump-probe signal with weak external excitation field.

shortly by $g \rightarrow e \rightarrow f \rightarrow e \rightarrow g$. All of these pathways were multiplied by the optical field correlation functions of the form $\langle a^\dagger a^\dagger a a \rangle$, where $a(a^\dagger)$ was the annihilation (creation) of the optical modes [9]. This group is called as two-photon absorption (TPA). In the second group, the system undergoes back and forth single photon absorption and emission, and the pathway can be described by $g \rightarrow e \rightarrow g \rightarrow e \rightarrow g$. This process or group is called as stimulated Raman-Scattering (SRS). All of these pathways were multiplied by the optical field correlation functions of the form $\langle a^\dagger a a^\dagger a \rangle$ [9].

In case of conventional PP experiments, optical correlation functions of the form $\langle a^\dagger a^\dagger a a \rangle$ and $\langle a^\dagger a a^\dagger a \rangle$ yields all identical response. Because the light fields are treated as the classical optical modes. Therefore optical correlation functions of the form $\langle a^\dagger a^\dagger a a \rangle$ and $\langle a^\dagger a a^\dagger a \rangle$ pathways are all summed together, hence TPA and SRS become indistinguishable.

On the other hand, the PP method with entangled optical modes can discriminate those pathways selectively as Roslyak *et al.* pointed [9]. It is because the optical correlation functions can have different signal intensity for different pathways. Let us look into the proposed setup shown in Fig. 1(b). Pair

of photons was generated by the PDC process and they illuminate the sample. The photon fields for the pump light can be described by $a_1(a_1^\dagger)$ and the photon fields for the probe light can be described by $a_2(a_2^\dagger)$. a_1 and a_2 fields can be transformed from the vacuum fields (d_1 and d_2) with the conversion coefficients $U = \cosh G$ and $V = -i \sinh G$ as follows;

$$\begin{aligned} a_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}}[(Ud_1 + Vd_2^\dagger) + i(Ud_2 + Vd_1^\dagger)], \\ a_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}}[i(Ud_1 + Vd_2^\dagger) - (Ud_2 + Vd_1^\dagger)]. \end{aligned} \quad (7)$$

Here G represented the single-pass gain of the conversion process and it can be written as $G = g|\varepsilon_{ex}|L$, where g was a gain coefficient proportional to the second-order susceptibility $\chi^{(2)}$ of the non-linear crystal, ε_{ex} was the amplitude of the external excitation field, and L was the interaction path length. i was $\sqrt{-1}$. More details of the operator representation of the method can be found in Ref.[14].

The PP experiment was conducted with these transformed fields a_1 and a_2 . For the first group of pathways (TPA), the optical field correlation function can be simplified into the following forms according to Roslyak *et al.* [9]:

$$\begin{aligned} \langle a_1^\dagger a_2^\dagger a_2 a_1 \rangle &= \langle a_1^\dagger a_2^\dagger a_1 a_2 \rangle = \langle a_2^\dagger a_1^\dagger a_2 a_1 \rangle \\ &= \langle a_2^\dagger a_1^\dagger a_1 a_2 \rangle = V^4 \end{aligned} \quad (8)$$

The second group (SRS) has different forms. Among eight pathways counted by Roslyak *et al.* [9], only the fifth (v), sixth (vi), seventh (vii), and the eight (viii) are belong to the second group. The fifth (v) and seventh (vii) pathways have the following forms,

$$\langle a_1^\dagger a_1 a_2^\dagger a_2 \rangle = \langle a_2^\dagger a_2 a_1^\dagger a_1 \rangle = V^4. \quad (9)$$

The sixth (vi) and eight (viii) pathways have the following forms,

$$\langle a_1^\dagger a_2 a_2^\dagger a_1 \rangle = \langle a_2^\dagger a_1 a_1^\dagger a_2 \rangle = V^2 + V^4. \quad (10)$$

The pathways were shown in Fig.1(c) for which the CTPL diagrams of Marx *et al.* were adopted [?]. Note that therefore at low excitation intensity, the intensity square term will be much weaker than the intensity term, i.e. $V^2 \gg V^4$ (V^2 corresponds to the external excitation light intensity). In this limit the contribution of pathways of Eqs.(8) and (9) can be neglected. The PP signal therefore will be given solely by (vi) and (viii) pathways shown in Fig.1(c), and it can be given by following equation;

$$S^{(Ent)}(\omega_1, \omega_2) \sim |\varepsilon_{ex}|^2 \text{Im}[\chi^{(vi)}(\omega_1, \omega_2) + \chi^{(viii)}(\omega_1, \omega_2)]. \quad (11)$$

For the derivation of the equation, see Eq.(6) in pervious section. Eq.(6) can be simplified into

Eq.(11), $S^{(ent)}(\omega_1, \omega_2)$ by considering only (vi) and (viii) pathways. To get this PP signal in the experiment, one need to measure the probe signal only by blocking the pump light, then subtract this signal from the probe signal with the pump light illumination.

D. Numerical simulation for the pump-probe signal with energy eigen-states

The PP signal of Eq. (11) was the sum of two pathways contributions. The third order susceptibilities of the pathways were given by

$$\chi^{(vi)}(\omega_1, \omega_2) = \sum_e \sum_{g'} \sum_{e'} \mu_{g_1 e'}^\beta \mu_{e' g'}^\alpha \mu_{g' e}^\beta \mu_{e g_1}^\alpha I_{eg_1}(\omega_2) I_{g' g_1}(\omega_2 - \omega_1) I_{e' g_1}(\omega_2), \quad (12)$$

$$\chi^{(viii)}(\omega_1, \omega_2) = \sum_e \sum_{g'} \sum_{e'} \mu_{g_1 e'}^\alpha \mu_{e' g'}^\beta \mu_{g' e}^\beta \mu_{e g_1}^\alpha I_{eg_1}(\omega_1) I_{g' g_1}^*(\omega_1 - \omega_2) I_{e' g_1}^*(\omega_1). \quad (13)$$

Here $\mu_{eg}^{\alpha, \beta}$ was the dipole matrix element between two energy eigen-states $|e\rangle$ and $|g\rangle$ of the full Hamiltonian (H), i.e $\langle e | \vec{r} | g \rangle$. $\vec{r}$ was the dipole displacement operator. The superscripts α and β indicated the polarization direction of a_1 (pump) and a_2 (probe) modes, respectively. $I_{eg}(\omega)$ was the auxiliary function;

$$I_{eg}(\omega) = 1/(\omega - (E_e - E_g) + i\gamma). \quad (14)$$

E_e was the energy or eigen-value of $|e\rangle$. γ was the dephasing rate which was equal to the phenomenological spectral broadening parameter [9]. To obtain the dipole matrix element, I used the current operator $\vec{j}$. $\vec{r}|g\rangle$ was obtained by solving $\vec{j}|g\rangle = i(H - E_g)\vec{r}|g\rangle$. Therefore the current operator $\vec{j}$ and the dipole operator $\vec{\mu}$ should satisfy the following relations:

$$j^{\alpha, \beta} = -i[\mu^{\alpha, \beta}, H], \mu_{eg}^{\alpha, \beta} = i j_{eg}^{\alpha, \beta} / (E_e - E_g). \quad (15)$$

[] represented the commutation relation [14]. $j = it \sum_{(n,m)\alpha} (c_{n,\sigma}^\dagger c_{m,\sigma} - h.c.)$. For $\alpha = x$, $\sigma = 3x^2 - r^2$. For $\alpha = y$, $\sigma = 3y^2 - r^2$. n, m represented the nearest neighboring Mn-ion site index of the four-Mn-cluster. This allows us to calculate Eqs.(12) and (13) based on the energy eigen-states of the full Hamiltonian (H) given by Eq.(1).

III. RESULTS & DISCUSSION

The PP signal Eq.(11) were numerically obtained. Fig. 2 shows the calculated $S^{(Ent)}(\omega_1, \omega_2)$. Here the pump and probe polarizations were both parallel to a crystal axis. To see the contribution of each pathways, (vi) pathway contribution ($\text{Im}[\chi^{(vi)}(\omega_1, \omega_2)]$) was shown in Fig. 2(a) and (viii) pathway contribution ($\text{Im}[\chi^{(viii)}(\omega_1, \omega_2)]$) was shown in Fig. 2(b).

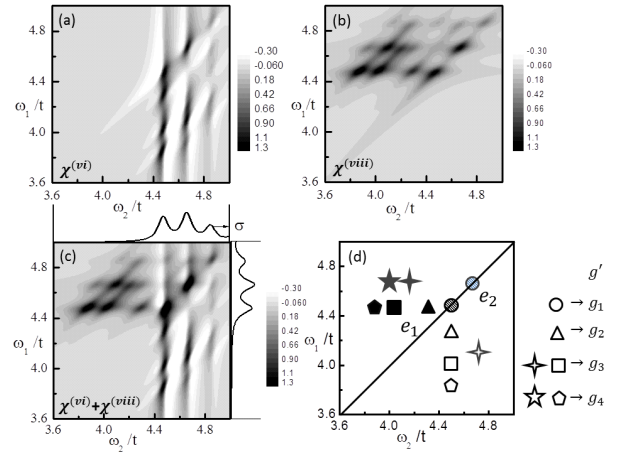


Fig. 2: The calculated transmittance intensity change, $T(\omega_1, \omega_2)$. Here the pump and probe polarizations were parallel. (a) $\text{Im}[\chi^{(vi)}(\omega_1, \omega_2)]$ as function of ω_1 and ω_2 , (b) $\text{Im}[\chi^{(viii)}(\omega_1, \omega_2)]$ as function of ω_1 and ω_2 (c) sum of (a) and (b), and for comparison, $\sigma(\omega)$ were shown. (d) Summary of peaks observed in (a) and (b). Involved intermediate states were noted.

Fig. 2(a) shows the calculated (vi) pathway contributions. Here two clear peaks appeared along the diagonal line at $\omega_1 = \omega_2 = 4.45t$ and at $\omega_1 = \omega_2 = 4.65t$. These peaks were schematically represented as circles in Fig. 2(d). The $\omega_1 = 4.45t$ peak was due to the $g_1 \rightarrow e_1 \rightarrow g_1 \rightarrow e_1 \rightarrow g_1$ transition process, and the $\omega_1 = 4.65t$ peak was due to the $g_1 \rightarrow e_2 \rightarrow g_1 \rightarrow e_2 \rightarrow g_1$ process. There could be numerous available photo-excited states at higher energies. In our calculation, only the lowest optically active two excited states were regarded, and they were named as $|e_1\rangle$ and $|e_2\rangle$.

In addition to these peaks, three more peaks appeared along the vertical line at $\omega_2 = 4.45t$ and one more peak appeared along the vertical line at

$\omega_2 = 4.45t$. Former three peaks were due to the $g_1 \rightarrow e_1 \rightarrow g_n \rightarrow e_1 \rightarrow g_1$ transition processes. The peak at $\omega_1 = 4.3t$ corresponded to $n = 2$ transition, which was marked by an open triangle in Fig. 2(d). In this process, Q_2 -type phonons can be generated according to our previous study. The strength of the peak indicates the transition probability between the ground state $|g_1\rangle$ and the quasi-ground state $|g_2\rangle$. If schematically described, $|g_2\rangle$ state was composed of the single-occupied Mn-ions and the collective vibration of MnO_6 octahedra. The width of the peak may be determined by the life time of the vibration, but in our calculation a phenomenological value ($0.05t$) was used for all peaks in Fig. 2 and Fig. 3. The peak at $\omega_1 = 4.0t$ corresponded to $n = 3$ transition, which was marked by an open square in Fig. 2(d). Also in this process, Q_2 -type phonons can be generated, however the phonons should be strongly coupled to the electron orbital occupations of every Mn ion. If schematically described, $|g_3\rangle$ state was composed of single-occupied Mn-ions and the collectively vibrating MnO_6 octahedra. The octahedral vibration frequency should be affected by the orbital occupation via JT interaction of the Mn-site. The peak at $\omega_1 = 3.8t$ corresponded to $n = 4$ transition, which was marked by an open pentagon in Fig. 2(d). In this process, Q_2 -type phonons can be generated. However the phonons should be strongly coupled to the orbital occupations of every Mn ions via JT interaction, and they should be also coupled to the collective excitation of the ordered orbitals mediated by the SE interaction. If schematically described, $|g_3\rangle$ state was composed of single-occupied Mn-ions and the collectively vibrating MnO_6 octahedra which is coupled to the so-called orbital wave.

The latter peak along the vertical line at $\omega_2 = 4.65t$ was due to $g_1 \rightarrow e_2 \rightarrow g_n \rightarrow e_2 \rightarrow g_1$ transition processes. Here the peak at $\omega_1 = 4.25t$ corresponded to $n = 3$ transition, which was marked by an open star in Fig. 2(d). The peaks was produced by the similar process as that of the open square peak, but the intermediate state $|e_2\rangle$ may be more strongly coupled to the lattice degree of freedom than $|e_1\rangle$ state. $|e_1\rangle$ and $|e_2\rangle$ were nearly degenerate photo excited states, the energy difference between the states was due to their different empty-site and double occupied site configurations and the interaction of phonon and orbital degrees of freedom.

Fig. 2(b) shows the calculated (viii) pathway contributions. About five peaks appeared in addition to the two diagonal peaks. These peaks were schematically represented as solid symbols in Fig. 2(d). Peaks along the horizontal line at $\omega_1 = 4.45t$ were due to $g_1 \rightarrow e_1 \rightarrow g_n \rightarrow e_1 \rightarrow g_1$ transition process ($n = 2, 3, 4$), and peaks along the horizontal line at $\omega_1 = 4.65t$ were due to the $g_1 \rightarrow e_2 \rightarrow g_n \rightarrow e_2 \rightarrow g_1$ process ($n = 3, 4$).

Fig. 2(c) the sum of two pathways or

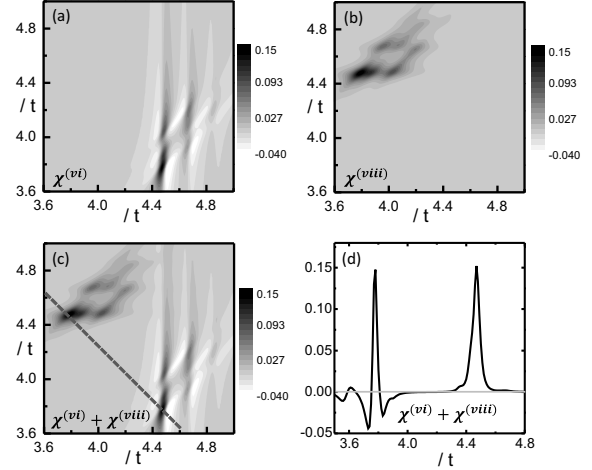


Fig. 3: The calculated transmittance intensity change, $T(\omega_1, \omega_2)$. Here the pump and probe polarizations were perpendicular. (a) $\text{Im}[\chi^{(vi)}(\omega_1, \omega_2)]$ as function of ω_1 and ω_2 , (b) $\text{Im}[\chi^{(viii)}(\omega_1, \omega_2)]$ as function of ω_1 and ω_2 (c) sum of (a) and (b). Dashed line represents the frequency phase matching condition (d) Off-diagonal cut of (c) along the dashed line, $S^{(en)}(\omega_1, \omega_{ex} - \omega_1)$.

$\text{Im}[\chi^{(vi)}(\omega_1, \omega_2) + \chi^{(viii)}(\omega_1, \omega_2)]$. Beside of the panel, the linear optical conductivity, $\sigma(\omega)$ was presented for comparison (Here the spectral broadening was given by a phenomenological parameter $\gamma = 0.05t$). Peaks of $\sigma(\omega)$ were well matched to the diagonal peaks of $S^{(ent)}(\omega_1, \omega_2)$.

Fig. 3 shows the highlight point of our study. It provides basically the same signal, $\text{Im}[\chi^{(vi)}(\omega_1, \omega_2)]$ and $\text{Im}[\chi^{(viii)}(\omega_1, \omega_2)]$, but here the probe optical mode polarization was assumed to be orthogonal to that of the pump mode polarization. The orthogonal polarization configuration was achieved by the half-wave plate (or periscope) as shown in Fig. 1(c). The highlight point is that only a peak due to the $g_1 \rightarrow e_1 \rightarrow g_4 \rightarrow e_1 \rightarrow g_1$ transition process was clearly observed here and other peaks were suppressed. Note that $g_1 \rightarrow e_1 \rightarrow g_4 \rightarrow e_1 \rightarrow g_1$ transition process involves the phonon-coupled orbital wave excitation response. A part of the spectrum along the dashed line in Fig. 3(c) was presented in Fig. 3(d). This was $S^{(en)}(\omega_1, \omega_{ex} - \omega_1)$ for a fixed external excitation light field frequency (ω_{ex}). The line crossed the two phonon-coupled orbital wave signal peaks for $\chi^{(vi)}$ and $\chi^{(viii)}$. The peak for $\chi^{(vi)}$ was sharper than that for $\chi^{(viii)}$ and it showed the negative response. The negative response suggested that the transmittance of the system was enhanced (or absorption of the system was suppressed) by the pump light.

In real experiment, Fig. 2 and 3 can be obtained by measuring the spectral transmittance of the probe light mode signal. First the transmittance of the probe light should be measured by blocking the pump light illumination ($T(\omega_2)_{without}$). To get the

wavelength dependence, gratings and pinholes can be used. Then the transmittance of the probe light should be measured with the pump light illumination ($T(\omega_1, \omega_2)_{with}$). By subtracting the first signal from the second one, $S(\omega_1, \omega_2)$ can be obtained. This procedure can be simply and repeatedly done if an optical chopper and a lock-in amplifier were combined. The chopper can block and pass the pump light repeatedly in a fixed frequency, the lock-in amplifier can pick up the given frequency signal only. $S(\omega_1, \omega_2)$ can be estimated from the signal; for example, photo-voltage increase (or decrease) with respect to the background corresponds to the signal. Also the gratings and pinholes can be used to select a specific wavelength components, but they should be correctly arranged to meet the phase matching condition ($\omega_{ex} = \omega_1 + \omega_2$ and $\vec{k}_{ex} = \vec{k}_1 + \vec{k}_2$)[12].

In present study, spontaneous parametric down conversion process was considered for the pump and probe light fields preparation. In the process, the generated light fields are quite weak, so it may be difficult to get clear signals. Intense light fields can be produced by parametric amplification process. Although the detailed nature of the quantum correlations can be quite different for parametric down conversion and for parametric amplification, quantum state signatures of light used in this study can remain also for intense light fields generated by the parametric amplification process as Nagasako *et al.* observed [14]. It means that we can expect the same results as predicted in Fig. 2 and 3 for the measurement used the parametric amplification process for pump and probe light sources. Also if broader band light source can be used for the external excitation light, more spectral information can be achieved. Ultra-short laser pulse can be used as the light source for such purpose, and further theoretical studies using pulse light source are demanded.

Finally, it should be noted that Fig. 3 implies the promising advantages of the proposed method. Note that in Fig. 3 only peaks corresponding to $g_1 \rightarrow e_1 \rightarrow g_4 \rightarrow e_1 \rightarrow g_1$ process (phonon-coupled orbital wave excitation) were shown and other peaks were suppressed. If the phonon-coupled orbital wave exists in reality, application of the additional external perturbation will reveal the different aspects of the orbital wave. In many optical experiments including the conventional PP method, the application of external perturbations such as magnetic field and hydrostatic pressure may change not only the optical response of the phonon-coupled orbital wave but also the other responses including the Mott gap excitation and the simple phonons. If the proposed method can be employed, it may have the capability to separate the phonon-coupled orbital wave signal from other responses clearly even under the magnetic field and hydrostatic pressure.

IV. CONCLUSION

A PP spectroscopy method with entangled photons was proposed to investigate the low energy collective excitations of LaMnO_3 theoretically. LaMnO_3 may have a few low energy collective excitations of which microscopic origins are different. Among them, the phonon-coupled orbital wave is interesting, but it was difficult to separate this mode from other excitation modes. With the proposed method, by controlling the degree of entanglement of incoming photon pairs, it is shown that phonon-coupled orbital wave mode can be selected clearly. This powerful method can be used to study the orbital wave of LaMnO_3 , but it can be also used to investigate the collective excitations in many other strongly correlated electron systems.

-
- [1] D. N. Basov, R. D. Averitt, D. V. Marel, M. Dressel, and K. Haule, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 471 (2011).
 - [2] Y. Tokura, and N. Nagaosa, *Science* **288**, 462 (2000).
 - [3] E. Saitoh, S. Okamoto, K. T. Takahashi, K. Yamamoto, T. Kimura, S. Ishihara, S. Maekawa, and Y. Tokura, *Nature* **410**, 180 (2001); E. Saitoh, S. Okamoto, K. Tobe, K. Yamamoto, T. Kimura, S. Ishihara, S. Maekawa, and Y. Tokura, *Nature* **418**, 40 (2002).
 - [4] M. Gr  ninger, R. R  ckamp, M. Windt, P. Reutler, C. Zobel, T. Lorenz, A. Freimuth, and A. Revcolevschi, *Nature* **418**, 39 (2002).
 - [5] Jeroen van den Brink, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 217202 (2001).
 - [6] M. W. Kim, P. Murugavel, S. Parashar, J. S. Lee, and T. W. Noh, *New J. Phys.* **6**, 156 (2004).
 - [7] S. Mukamel, *Principles of Nonlinear Optical Spectroscopy* (Oxford University Press, New York, 1995).
 - [8] P. Hamm, M. H. Lim, and R. M. Hochstrasser, *J. Phys. Chem.* **B 102**, 6123 (1998).
 - [9] O. Roslyak, C. Marx, and S. Mukamel, *Phys. Rev. A* **79**, 033832 (2009).
 - [10] P. Munkhbaatar, and K. Myung-Whun, *J. Mod. Opt.* **61**, 197 (2014).
 - [11] O. Roslyak, and S. Mukamel, *Phys. Rev. A* **79**, 063409 (2009).
 - [12] The phase matching condition was considered inside the nonlinear crystal. In free space the magnitude and the direction of the wave-vectors can be different because of the refraction.
 - [13] C. A. Marx, U. Harbola, and S. Mukamel, *Phys. Rev. A* **77**, 022110 (2008).
 - [14] E. M. Nagasako, S. J. Bentley, R. W. Boyd, and G.

S. Agarwal, Phys. Rev. **A 64**, 043802 (2001).

Time-and-Wavelength Resolved Pump Probe Spectroscopy & Calibration Measurement Using Semiconductors

P. Munkhbaatar^{1,2,*}, D. Ulam-Orgikh¹, K. Myung-Whun^{2,3}, M. Byambatseren⁴, and Ts. Baatarchuluun⁵

¹*Department of Physics, School of Science, NUM, Ulaanbaatar 210646, Mongolia*

²*Department of Physics, CNU, 561-756 Jeon-ju, Korea*

³*Institute of Photonics and Information Technology, CNU, 561-756 Jeon-ju, Korea*

⁴*School of Business, University of the Humanities, Ulaanbaatar, Mongolia*

⁵*Department of Geology and Geophysics, School of Science, NUM, Ulaanbaatar 210646, Mongolia*

Pump-probe experimental setup using 10 fs ultra-short laser pulse was successfully developed. Using this setup, the excitation of coherent phonons in Te and GaAs were measured for calibration and accuracy test of the developed setup. Coherent Raman-active phonons are observed by PP experiments. 10 fs pulse was not necessary to generate coherent optical phonon. Strongly chirped pulse with roughly ~ 20 fs duration can generate it. Frequencies of these modes was in good agreement to values reported. It was demonstrated how spectrum of laser near of band-gap could significantly affect the pump-probe signal. In near of band-gap, the PP response of GaAs is dependent on the spectrum of the laser, but coherent optic phonon oscillation isn't dependent on it. Time-and-frequency resolved pump-probe optical spectroscopy is used to investigate the effect of spectral dependence of pump-probe of GaAs. The measured modifications of the optical properties of GaAs are consistent with the creation of a non-thermal state, metastable on the ps timescale, after the pump-induced impulsive modification of the electron interactions.

PACS numbers: 78.47.J-, 78.66.Db

I. INTRODUCTION

Since the early 1980's, many groups have been studying the response of material systems to optical pulses on a femtosecond time scale using optical pulse pump-probe (PP) techniques. In a number of these experiments, oscillations due to a Raman excitation process are observed in the transmission of probe pulses as a function of time following the exciting pump pulse. Recently, femtosecond PP techniques have been applied to the study of metals and superconductors. In PP experiments on a number of conducting or semiconducting materials, oscillations have been observed in reflectivity (or transmission through thin samples) with frequencies that correspond to optical phonon modes of the samples. A number of mechanisms have been proposed to explain these oscillations, including impulsive stimulated Raman scattering, a nonlinear optical susceptibility mechanism, and the screening of space-charge fields at the surface of semiconducting samples.

In this paper, we developed pump-probe experiment which is appropriate for investigation of non-equilibrium system. In II section we will introduce the experimental setup and the laser source which is used to PP experiment.

In III section, a PP reflectivity of a GaAs single crystal is measured to check the measurement system. The PP data for GaAs was already reported in literature. G.C.Cho *et al.* measured PP reflectivity

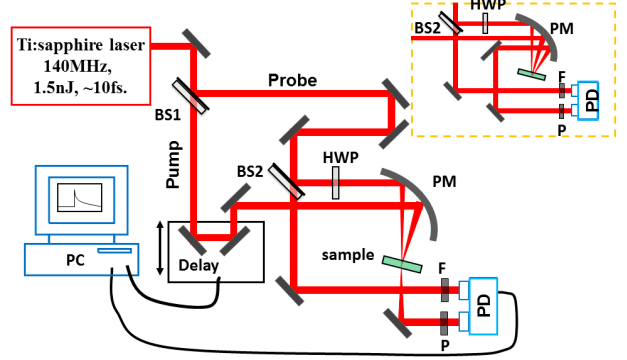


Fig. 1: Pump-probe transmittance measurement setup. PM: parabolic mirror, BS1: 70:30 beam splitter, BS2: 50:50 beam splitter, P: polarizer, F: neutral density filter. PD: photo detector, HWP: half wave plate. The inset is pump-probe reflectance measurement setup.

changes for GaAs as a function of delay time between pump and probe pulse using 50 fs laser pulses from a ring dye laser [2]. The PP response is strongly dependent on the pulse wavelength near the band gap of GaAs.

In IV section, we reported coherent phonon oscillations in Te crystal which is known as a good test system. It is because the coherent oscillation appears very clearly even with weak laser intensity.

In V section, we discussed the main difference of the mode-locking condition dependence of PP reflection signal reported in III section.

*Electronic address: p_munkhbaatar@yahoo.com

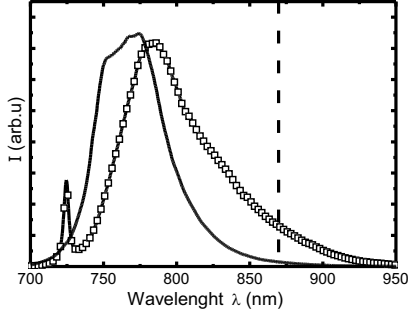


Fig. 2: Spectrums of femtosecond laser. Vertical dashed line marks the band gap of GaAs.

II. EXPERIMENTAL SETUP

For the PP measurement, the laser pulses were generated from a mode-locked Ti:sapphire oscillator [1]. The center wavelength of the pulse was 800 nm (1.5 eV). The pulse duration was 10 fs. The pulse energy was ~ 1.5 nJ at a repetition rate of 140 MHz. Experimental setup was shown in Fig. 1.

The band width of the laser pulse was shown in Fig. 2. The laser beam was split into a pump beam ($\sim 75\%$) and a probe beam ($\sim 10\%$). The pump and probe beams were focused on the surface of a sample with $100 \mu\text{m}$ in diameter. The pump beam was normally incident to the surface, the angle between the probe beam and surface normal was approximately 8° . The transmitted or reflected probe beam was detected with a balanced photo-detector, which subtracted the intensity of a reference beam to eliminate the laser noise. The temporal coincidence of the probe and pump pulses was checked by the sum frequency signal generated from a $\beta\text{-BaBO}_2$ crystal. The zero-time-delay was defined as the time delay point where the sum frequency signal was strongest. All experiments were performed at room temperature.

The inset of Fig. 1 shows the PP reflectance measurement setup. Here the reflected probe pulse from the sample surface were collimated by the parabolic mirror and guided by flat mirrors to the balanced detector. Others are same with the transmittance measurement setup.

III. CALIBRATION OF RELAXATION BEHAVIOR AND PHONON OSCILLATIONS USING *GaAs* CRYSTAL

A PP reflectivity of a GaAs single crystal was measured to check the measurement system. The PP data for GaAs was already reported in literature.

G.C.Cho *et al.* measured PP reflectivity changes for GaAs as a function of delay time between pump and probe pulse using 50 fs laser pulses from a ring dye laser [2]. The polarization of the probe beam was kept orthogonal to the pump beam. Periodic LO-phonon oscillation was only visible, when the polarization of the pump beam was parallel to the $[011]$ or $[0\bar{1}\bar{1}]$ axis, as required by the selection rules for RS. The frequency of this periodic oscillation matched exactly the frequency of the LO phonon at $\vec{q} = 0$ in GaAs (8.8 THz).

In the thesis experiment, the PP response is strongly dependent on the pulse wavelength near the band gap of GaAs (1.424 eV or 870 nm). Spectrums used in the experiments were shown in Fig. 2 for two different pulses. Vertical dashed line shows band gap of GaAs. One spectrum was whole in region of above band-gap (solid line). Some part of another spectrum was in under band gap (open square line).

In Fig. 3, the solid and open square lines show the PP reflectivity changes in GaAs for two different pulses, respectively. The response of the system shows small amplitude coherent oscillations, superimposed on an exponential decay. For spectrum with above band-gap, the decay was fitted well with a double exponential of the form $\sum_{i=1,2} A_i e^{-t/\tau_i}$ (gray dashed line). The first term is attributed to rapid electron-electron thermalization, $\tau_1 = 150$ fs. The slower, $\tau_2 = 2.5$ ps, second term is attributed to electron-phonon thermalization. In Fig. 3, the open circle line shows the coherent oscillations after the electronic backgrounds have been subtracted. The Fourier transforms of the data (open circle line) is shown in the inset of Fig. 3. Periodic LO-phonon oscillations

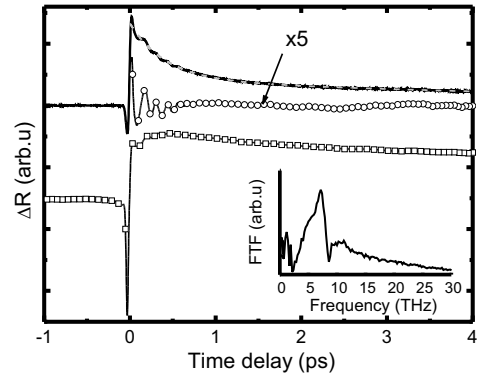


Fig. 3: Pump-probe reflectance change of GaAs.

are only visible, when the polarization of the pump beam is parallel to the $[011]$ or $[0\bar{1}\bar{1}]$ axis. The dominant oscillation has frequency of 8.8 THz and corresponds, with good agreement to the values reported in measurements reported by Cho *et al.* [2] and Sadao Adachi [3]. The consistency demonstrated that the setup of Fig. 1 worked properly. To check

pulse spectrum dependence, we developed frequency resolved PP experiment in section V.

IV. CALIBRATION OF PHONON OSCILLATIONS USING *Te* CRYSTAL

Te crystal is known as a good test system to observe the coherent phonon oscillations using laser pulse pump-probe experiment. It is because the coherent oscillation appears very clearly even with weak laser intensity. Coherent lattice vibrations in *Te* were first reported by a group at MIT [4]. Using a single-color PP setup, oscillations in the reflectivity were observed at the frequency of the symmetry-preserving A_1 phonon mode (3.6 THz) and at no other after excitation by a 60 fs pulse of influence 2.5 J/m^2 . Although the excitation of the symmetry-preserving A_1 phonon mode in *Te* dominates the optical response, the coherent excitation of other phonon modes has also been observed [5, 6]. The observation of oscillations at 2.77 THz and 4.2 THz in the anisotropic reflectivity, precisely the frequency of the two E_{TO} phonon modes in *Te*, suggested that other modes can be excited. Anisotropic reflectivity changes in other geometries as well as the detection of THz emission from *Te* under short-pulse excitation revealed that coherent E_{LO} phonons can be excited.

Fig. 4 depicts the PP reflectivity change from *Te* surface as a function of time delay (denoted as isotropic reflectivity change). The Fourier transforms of the time domain data are shown in the inset. The isotropic reflectivity change is strongly modulated by the coherent excitation of the fully symmetric A_1 mode at 3.6 THz, which is selectively excited via the dispersive mechanism [2, 7]. This value is also good agreement to value reported by Dekorsy *et al.* [5], which demonstrated that the set-up of Fig. 1 worked properly for coherent phonon measurement.

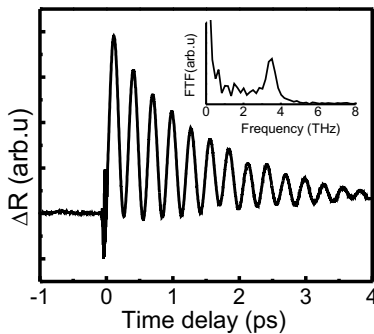


Fig. 4: Pump-probe reflectance change of *Te*. In the inset, the Fourier transform of the data, showing oscillation at 3.6 THz.

In conclusion, a pump-probe experimental setup using 10 fs ultra-short laser pulse was successfully

developed. Using this setup, the excitation of coherent phonons in *Te* and phonons and relaxation behavior in *GaAs* were measured for calibration and accuracy test of the developed setup. Experimental results consistent with the data in literature were obtained, which demonstrated that the setup worked properly and accurately.

V. WAVELENGTH OR FREQUENCY RESOLVED PUMP-PROBE EXPERIMENT IN *GaAs*

In this section, we explain the main difference of the mode-locking condition dependence of PP reflection signal discussed in section III. In order to obtain photon energy resolution, probe pulse was dispersed through a diffraction grating and detected after reflected on sample. The response was strongly dependent on the probe wavelength near the band gap of *GaAs*. The diffraction grating was located along the optical line of the reflected signal: it is in charge of the dispersion of the reflected spectrum before it is acquired by a photodiode. A slit in front of the photodiode was used for selecting a thin range of wavelengths of the spectra. The diffraction grating was setup on a rotation stage. Selected wavelength range can be changed by rotating of the diffraction grating. A spectrometer was used to check wavelength selection before the measurement.

We measured the normalized variation of reflectivity

$$\Delta R(\lambda, \tau) = \frac{R(\lambda, \tau) - R(\lambda, -\infty)}{R(\lambda, -\infty)}, \quad (1)$$

where τ is the delay between the two laser pulses, $R(\lambda, \tau)$ is the reflectivity of the pump excited sample, $R(\lambda, -\infty)$ is the reflectivity in the equilibrium state or before pumping. λ is wavelength of the selected thin range.

The obtained raw data was shown in Fig. 5. Laser pulse was broad spectrum in Fig. 2 (open square line).

As Fig. 5, $\Delta R(\lambda, t)$ above the band gap was similar to the solid lines in Fig. 3. However, in $\Delta R(\lambda, t)$ below the band gap, the amplitude (A) of rapid electron-electron thermalization was negative sign. Near of zero time delay, frequency resolved PP signal was strongly dependent on wavelength. The open square symbol line in Fig. 3 was the sum contribution of these two kind of signals.

In conclusion, a pump-probe experimental setup using 10 fs ultra-short laser pulse was successfully developed. Using this setup, the excitation of coherent phonons in *Te* and *GaAs* were measured for calibration and accuracy test of the developed setup. Coherent Raman-active phonons are observed by PP

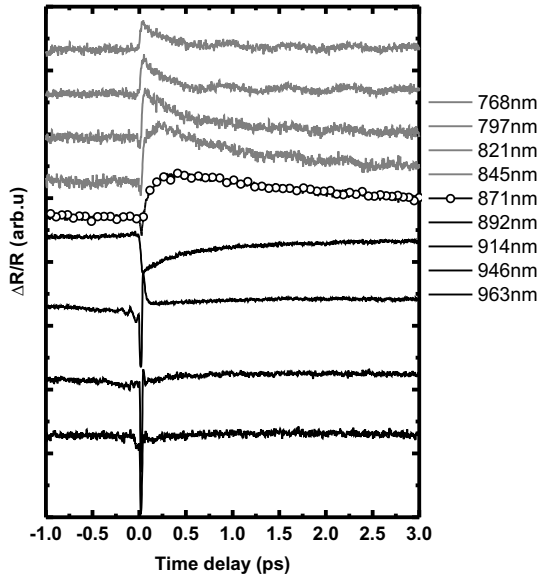


Figure 5: Wavelength resolved pump-probe signal $\Delta R(\lambda, t)/R$ of GaAs crystal.

experiments. 10 fs pulse was not necessary to generate coherent optical phonon. Strongly chirped pulse with roughly ~ 20 fs duration can generate it. Frequencies of these modes was in good agreement to values reported. It was demonstrated how spectrum of laser near of band-gap could significantly affect the pump-probe signal. In near of band-gap, the PP response of GaAs is dependent on the spectrum of the laser, but coherent optic phonon oscillation isn't dependent on it.

ACKNOWLEDGMENT

We are grateful to Jin Seung Kim, professor of Femtosecond Laser Laboratory of Chonbuk National University, and for his help in providing us with appropriate samples.

-
- [1] B. Tsermaa, Generation and characterization of sub-10-fs optical pulses (Ph.D thesis, Chonbuk National University 2007)
 - [2] G. C. Cho, W. Kutt, and H. Kurz, Phys. Rev. Lett. **65**, 764 (1990).
 - [3] Sadao Adachi, J. Appl. Phys. **58**, R1 (1985).
 - [4] H. J. Zeiger, J. Vidal, T. K. Cheng, E. P. Ippen, G. Dresselhaus, and M. S. Dresselhaus, Phys. Rev. **B 45**, 768 (1992).
 - [5] T. Dekorsy, H. Auer, C. Waschke, H. J. Bakker, H. G. Roskos, and H. Kurz, Phys. Rev. Lett. **74**, 738 (1995).
 - [6] T. Dekorsy, H. Auer, H. J. Bakker, H. G. Roskos, and H. Kurz, Phys. Rev. **B 53**, 4005 (1996).
 - [7] T. K. Cheng, S. D. Brorson, A. S. Kazeroonian, J. S. Moodera, G. Dresselhaus, M. S. Dresselhaus, and E. P. Ippen, Appl. Phys. Lett. **57**, 1004 (1990).

Wave Solutions of an a -cut Uniaxially Crystal

B. Daariimaa, G. Ochirbat, J. Khatanbaatar, and P. Munkhbaatar*
*Theoretical Physics Laboratory, Department of Physics, School of Science,
 National University of Mongolia, Ulaanbaatar 210646, Mongolia*

We consider the problem of a plane wave refraction on an a -cut uniaxially crystal. We show that ordinary and extraordinary waves in Kerr medium could be the plane wave with amplitude and wavevector independent of coordinates. The another result is that the problem of polarization of the isoradial wave in a biaxial crystal is reformulated. The driven equation is slightly different the equation given in Ref.[2]. We solved problem for eigenvalues and eigenvectors of polarization of the electric field for the isoradial wave.

PACS numbers: 81.05.Xj, 42.65.-k, 42.65.Hw

I. INTRODUCTION

Birefringence is used in many optical devices which also plays an important role in second harmonic generation and other nonlinear optical components, as the crystals used for this purpose are almost always birefringent and nonlinear[1]. If the intensity of light propagating through the nonlinear medium is sufficiently high, the refractive index of the medium depends on the intensity of propagating field. The effect is called Kerr effect.

In this paper, we focused on plane electromagnetic (EM) wave propagation in an anisotropic Kerr medium. We consider the intensity profile of refracted wave in uniaxial crystal in II section. In next section problem of polarization of the isoradial wave in a biaxial crystal is reformulated as Ref.[2]. We solved eigenvalues and eigenvectors problem for polarization of electric field of the isoradial wave.

II. DOUBLE REFRACTION AT A BOUNDARY OF AN a -CUT UNIAXIALLY CRYSTAL SURFACE

An important physical consequence for the wave propagation in anisotropic media is double refraction[3]. Poynting vector or energy flux of an electromagnetic field is

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2} \text{Re}[\mathbf{E} \times \mathbf{H}^*]. \quad (1)$$

The refracted wave, in general, is a mixture of ordinary wave and extraordinary wave, so its electric and magnetic fields are given, respectively, by

$$\mathbf{E} = (C_o \mathbf{o} e^{-i\mathbf{k}_o \cdot \mathbf{r}} + C_e \mathbf{e} e^{-i\mathbf{k}_e \cdot \mathbf{r}}) e^{i\omega t}, \quad (2)$$

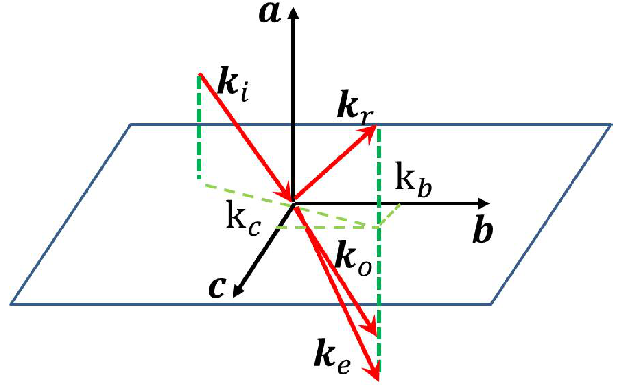


Figure 1: Double refraction at boundary of an a -cut uniaxially crystal surface

$$\mathbf{H} = \frac{1}{\omega \mu} \{ C_o e^{-i\mathbf{k}_o \cdot \mathbf{r}} \mathbf{k}_o \times \mathbf{o} + C_e e^{-i\mathbf{k}_e \cdot \mathbf{r}} \mathbf{k}_e \times \mathbf{e} \} e^{i\omega t}. \quad (3)$$

Here $\mathbf{k}_o$ ($\mathbf{k}_e$) and $\mathbf{o}$ ($\mathbf{e}$) are wavevector and unit vector of polarization of ordinary (extraordinary) wave, respectively.

The orientation of the crystal, the incident wave and refracted wave is shown in Fig. 1. For the case of an a -cut uniaxially crystal surface[3], the intensity of the wave is

$$I = \mathbf{a} \cdot \mathbf{S}. \quad (4)$$

Using (2) and (3), we can find three terms of the intensity:

$$I_o = \frac{C_o^2}{2\omega \mu} \mathbf{a} \cdot \mathbf{o} \times (\mathbf{k}_o \times \mathbf{o}), \quad (5)$$

$$I_e = \frac{C_e^2}{2\omega \mu} \mathbf{a} \cdot \mathbf{e} \times (\mathbf{k}_e \times \mathbf{e}), \quad (6)$$

*Electronic address: p_munkhbaatar@yahoo.com

$$\begin{aligned}
I_{oe} &= \frac{C_o C_e}{2\omega\mu} \text{Re}\{\mathbf{a} \cdot \mathbf{o} \times (\mathbf{k}_e \times \mathbf{e}) e^{i(\mathbf{k}_e - \mathbf{k}_o) \cdot \mathbf{r}} \\
&+ \mathbf{a} \cdot \mathbf{e} \times (\mathbf{k}_o \times \mathbf{o}) e^{-i(\mathbf{k}_e - \mathbf{k}_o) \cdot \mathbf{r}}\} \\
&= \frac{C_o C_e}{2\omega\mu} \{\mathbf{a} \cdot \mathbf{o} \times (\mathbf{k}_e \times \mathbf{e}) \\
&+ \mathbf{a} \cdot \mathbf{e} \times (\mathbf{k}_o \times \mathbf{o})\} \cos[(\mathbf{k}_e - \mathbf{k}_o) \cdot \mathbf{r}]. \quad (7)
\end{aligned}$$

The last (7) term is the interference between ordinary and extraordinary waves. This equals to zero: $I_{oe} = \mathbf{a} \cdot \mathbf{S}_{oe} = 0$ or

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{o} \times (\mathbf{k}_e \times \mathbf{e}) + \mathbf{a} \cdot \mathbf{e} \times (\mathbf{k}_o \times \mathbf{o}) = 0. \quad (8)$$

Thus, the intensity of transmitted wave is the sum of intensities of ordinary and extraordinary waves which is independent on coordinates and time.

If the refractive index of the principal axis is dependent on an intensity (Kerr medium), i.e both ordinary and extraordinary indexes independent on space coordinates and time, there could be the self-consistent plane wave with amplitude and wavevector independent on coordinate.

When directions of the phase velocities of ordinary and extraordinary waves are matched (isonormal wave, $\mathbf{k}_o/\|\mathbf{k}_e\|$), the interference term in eq.(7) of energy flux is non zero. For instance,

$$S_{oe} = -\frac{C_o C_e}{2\omega\mu} \mathbf{o} (\mathbf{k}_o \cdot \mathbf{e}) \cos((\mathbf{k}_e - \mathbf{k}_o) \cdot \mathbf{r}). \quad (9)$$

If refractive indexes on the principal axis are depending on an intensity, the refractive indexes depend on coordinated because the interference term dependent on coordinates. Thus, there cannot be an isonormal plane wave with constant amplitude and wave vector.

III. PLANE WAVE IN BIAxIAL CRYSTAL

Let us consider $\mathbf{E}$, $\mathbf{D}$ and $\mathbf{H}$ real vectors. A wave packet can be viewed as a linear superposition of many monochromatic plane waves, each with a definite frequency ω and wavevector $\mathbf{k}$. Each plane wave component satisfies the following Maxwell's equations in momentum space. Then Maxwell's equations are:

$$\mathbf{k} \times \mathbf{H} = -\omega \mathbf{D}, \quad \mathbf{k} \times \mathbf{E} = \omega \mu_0 \mathbf{H}. \quad (10)$$

The energy flux in the plane wave, i.e. its Poynting vector is

$$\mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H} = \frac{1}{\omega \mu_0} \mathbf{E} \times (\mathbf{k} \times \mathbf{E}) = \frac{1}{\omega \mu_0} [\mathbf{k} E^2 - \mathbf{E} (\mathbf{k} \cdot \mathbf{E})]. \quad (11)$$

The energy flux in biaxial crystal isn't in same direction of the wavevector. On the other hand the energy density is

$$w = \frac{1}{2} (\mathbf{E} \cdot \mathbf{D} + \mathbf{B} \cdot \mathbf{H}) = \frac{1}{\omega} \mathbf{k} \cdot \mathbf{S}. \quad (12)$$

The refractive vector of the ray is given by

$$\mathbf{p} = \frac{\mathbf{S}}{c w}. \quad (13)$$

As well know connection,

$$\mathbf{k} = \frac{\omega}{c} \mathbf{n}. \quad (14)$$

Here $\mathbf{n}$ is the refractive vector of the phase. Using these definitions of $\mathbf{p}$ and $\mathbf{n}$, we can get as following form of the eq.(12):

$$\mathbf{p} \cdot \mathbf{n} = 1. \quad (15)$$

$\mathbf{p}$ is in same direction of $\mathbf{s}$:

$$\mathbf{p} \cdot \mathbf{E} = 0, \quad \mathbf{p} \cdot \mathbf{H} = 0. \quad (16)$$

If (10) equations are multiplied by the cross product of $\mathbf{p}$ vector, using equations of (14)-(16), we have

$$\mathbf{H} = c \mathbf{p} \times \mathbf{D}, \quad \mathbf{E} = -c \mu_0 \mathbf{p} \times \mathbf{H}. \quad (17)$$

If we use these notations $\mathbf{H}' \equiv \mu_0 c \mathbf{H}$, $\mathbf{D}' \equiv \varepsilon \mathbf{E}$, $\varepsilon \equiv \mu_0 c^2 n^2$, (17) equations become

$$\mathbf{E} = -\mathbf{p} \times \mathbf{H}', \quad \mathbf{H}' = \mathbf{p} \times \mathbf{D}'. \quad (18)$$

Now, lets assume that $\mathbf{u}_1$, $\mathbf{u}_2$, $\mathbf{u}_3$ are unit vectors of the principal axis of dielectric tensor, the tensor is given by the outer product of these vectors ($\varepsilon_1 < \varepsilon_2 < \varepsilon_3$):

$$\varepsilon = \varepsilon_1 \mathbf{u}_1 \mathbf{u}_1 + \varepsilon_2 \mathbf{u}_2 \mathbf{u}_2 + \varepsilon_3 \mathbf{u}_3 \mathbf{u}_3. \quad (19)$$

Furthermore, we will establish the following two vectors using $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_3$:

$$\mathbf{c}_1 = k_1 \mathbf{u}_1 + k_3 \mathbf{u}_3, \quad \mathbf{c}_2 = -k_1 \mathbf{u}_1 + k_3 \mathbf{u}_3. \quad (20)$$

Here,

$$k_1 = \sqrt{\frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}{\varepsilon_3 - \varepsilon_1}}, \quad k_3 = \sqrt{\frac{\varepsilon_3 - \varepsilon_2}{\varepsilon_3 - \varepsilon_1}}.$$

So, let us express the eq.(19) by $\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2$ vectors:

$$\varepsilon = \varepsilon_2 \mathbb{I} + \frac{\varepsilon_3 - \varepsilon_1}{2} (\mathbf{c}_1 \mathbf{c}_2 + \mathbf{c}_2 \mathbf{c}_1). \quad (21)$$

Here $\mathbb{I}$ is unit operator.

Polarization isoradial wave: According to the literature [2], an equation for electric field of isoradial wave have been written as following form:

$$\begin{aligned}
\{1 - p^2 \varepsilon_2 - \frac{\varepsilon_3 - \varepsilon_1}{2} ([\mathbf{p}^\times \mathbf{c}_1][\mathbf{p}^\times \mathbf{c}_2] \\
+ [\mathbf{p}^\times \mathbf{c}_2][\mathbf{p}^\times \mathbf{c}_1])\} \mathbf{E} = 0. \quad (22)
\end{aligned}$$

Here $\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2$ vectors are defined by (20). And $\mathbf{p}^\times$ is the antisymmeter tensor of the vector $\mathbf{p}$. Using this

tensor, the cross product of two vectors can be written as $\mathbf{p}^\times \mathbf{c} \equiv \mathbf{p} \times \mathbf{c}$.

$$\mathbf{p}^\times \mathbf{p}^\times = \mathbf{p} \mathbf{p} - p^2, \quad \mathbf{c} \mathbf{p}^\times = -\mathbf{p}^\times \mathbf{c} = -\mathbf{p} \times \mathbf{c}. \quad (23)$$

We couldn't understand completely the eq.(22). Thus we decided to solve the problem from the begin. From the eq.(18)

$$\mathbf{E} = -\mathbf{p}^\times \mathbf{H}' = -\mathbf{p}^\times \mathbf{p}^\times \mathbf{D}', \quad \mathbf{D}' = \varepsilon \mathbf{E} \quad (24) \quad \text{If we use the eq.(21), we have}$$

$$\mathbf{E} + \mathbf{p}^\times \mathbf{p}^\times \varepsilon \mathbf{E} = 0. \quad (25)$$

$$\mathbf{p}^\times \mathbf{p}^\times \varepsilon \mathbf{E} = \varepsilon_2 \mathbf{p}^\times \mathbf{p}^\times \mathbf{E} + \frac{\varepsilon_3 - \varepsilon_1}{2} (\mathbf{p}^\times \mathbf{p}^\times \mathbf{c}_1 (\mathbf{c}_2 \cdot \mathbf{E}) + \mathbf{p}^\times \mathbf{p}^\times \mathbf{c}_2 (\mathbf{c}_1 \cdot \mathbf{E})). \quad (26)$$

We can change two terms within the parentheses:

$$\begin{aligned} \mathbf{p}^\times \mathbf{p}^\times \mathbf{c}_1 (\mathbf{c}_2 \cdot \mathbf{E}) &= (\mathbf{E} \times (\mathbf{p} \times \mathbf{c}_2)) \times (\mathbf{p} \times \mathbf{c}_1) = (\mathbf{p} \times \mathbf{c}_2) ((\mathbf{p} \times \mathbf{c}_1) \cdot \mathbf{E}) - ((\mathbf{p} \times \mathbf{c}_1) \cdot (\mathbf{p} \times \mathbf{c}_2)) \mathbf{E}, \\ \mathbf{p}^\times \mathbf{p}^\times \mathbf{c}_2 (\mathbf{c}_1 \cdot \mathbf{E}) &= (\mathbf{E} \times (\mathbf{p} \times \mathbf{c}_1)) \times (\mathbf{p} \times \mathbf{c}_2) = (\mathbf{p} \times \mathbf{c}_1) ((\mathbf{p} \times \mathbf{c}_2) \cdot \mathbf{E}) - ((\mathbf{p} \times \mathbf{c}_2) \cdot (\mathbf{p} \times \mathbf{c}_1)) \mathbf{E}. \end{aligned} \quad (27)$$

In here, we used $\mathbf{p}(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{E}) = \mathbf{E} \times (\mathbf{p} \times \mathbf{c}_i)$ because of $\mathbf{p} \cdot \mathbf{E} = 0$. Thus, the eq.(25) is now:

$$\left\{ 1 - p^2 \varepsilon_2 - 2 \frac{\varepsilon_3 - \varepsilon_1}{2} [\mathbf{p}^\times \mathbf{c}_1] \cdot [\mathbf{p}^\times \mathbf{c}_2] + \frac{\varepsilon_3 - \varepsilon_1}{2} ([\mathbf{p}^\times \mathbf{c}_1][\mathbf{p}^\times \mathbf{c}_2] + [\mathbf{p}^\times \mathbf{c}_2][\mathbf{p}^\times \mathbf{c}_1]) \right\} \mathbf{E} = 0. \quad (28)$$

The eq.(28) is quite different from the eq.(22). First, the third term is new. Second, fourth term has opposite sign. But, the problem of eigenvectors and eigenvalues of this equation procedure is same as finding eigenvectors and eigenvalues of isonormal waves for magnetic field. Further, we have

$$Q = [\mathbf{p}^\times \mathbf{c}_1][\mathbf{p}^\times \mathbf{c}_2] + [\mathbf{p}^\times \mathbf{c}_2][\mathbf{p}^\times \mathbf{c}_1].$$

Also, eigenvalues of this operator are

$$\lambda_{\pm} = [\mathbf{p}^\times \mathbf{c}_1] \cdot [\mathbf{p}^\times \mathbf{c}_2] \pm \sqrt{[\mathbf{p}^\times \mathbf{c}_1]^2 [\mathbf{p}^\times \mathbf{c}_2]^2}. \quad (29)$$

Eigenvectors are

$$\sqrt{[\mathbf{p}^\times \mathbf{c}_2]^2} \mathbf{p}^\times \mathbf{c}_1 \pm \sqrt{[\mathbf{p}^\times \mathbf{c}_1]^2} \mathbf{p}^\times \mathbf{c}_2. \quad (30)$$

For the eigenvalue of the refractive vector of the ray, the eq.(28) is now

$$1 - p^2 \varepsilon_2 - 2 \frac{\varepsilon_3 - \varepsilon_1}{2} [\mathbf{p}^\times \mathbf{c}_1] \cdot [\mathbf{p}^\times \mathbf{c}_2] + \frac{\varepsilon_3 - \varepsilon_1}{2} \lambda_{\pm} = 0. \quad (31)$$

If we write the refractive vector of the ray $\mathbf{p} = \frac{\mathbf{s}}{s}$ using $\mathbf{s}$ unit vector, substitution $\mathbf{p}$ into the eq.(31) give us eigenvalues for s :

$$s_{\pm}^2 = \varepsilon_2 + \frac{\varepsilon_3 - \varepsilon_1}{2} ([\mathbf{s}^\times \mathbf{c}_1] \cdot [\mathbf{s}^\times \mathbf{c}_2] \mp \sqrt{[\mathbf{s}^\times \mathbf{c}_1]^2 [\mathbf{s}^\times \mathbf{c}_2]^2}). \quad (32)$$

Corresponding eigenvectors are

$$\mathbf{E}_{\pm} = A_{\pm} \mathbf{e}_{\pm}. \quad (33)$$

Here A_{+}, A_{-} is arbitrary constant,

$$\mathbf{e}_{\pm} = \sqrt{[\mathbf{s}^\times \mathbf{c}_2]^2} \mathbf{s}^\times \mathbf{c}_1 \pm \sqrt{[\mathbf{s}^\times \mathbf{c}_1]^2} \mathbf{s}^\times \mathbf{c}_2. \quad (34)$$

We have shown that the driven equation for $\mathbf{E}$ electric fields of isoradial waves is slightly different the equation given in Ref.[2]. We solved the problem for eigenvalues and eigenvectors of the driven equation.

-
- [1] G. Stegeman, D. G. Papazoglou, R. Boyd, and S. Tzortzakakis, *Optics Express*. **19**, 6387 (2011).
 [2] Ф. И. Федоров, В. В. Филиппов, *Отражение и преломление света прозрачными, изд. "наука и техника", Минск, (1976).*

- [3] Pochi Yeh, *Optical waves in layered media*, A Wiley-Interscience Publication, USA, ISBN-0471-82866-1, (1988).

Берлинитийн Харимхайн Тогтмол болон Пьезо-электрик Коэффициентийн Онолын Тооцоолол

Н.Төвжаргал¹, Ж.Даваасамбуу¹, П.Дашдэмбэрэл¹, and Ш.Чадраабал²

¹Монгол Улсын Их Сургууль,
Шинжлэх ухааны сургуулийн физикийн тэнхим,
Улаанбаатар хот 210646, Монгол улс
²ШУА-ийн физик технологийн хүрээлэн

Бид энэхүү ажлаар Берлинитийн харимхайн тогтмолууд, пьезо-электрик коэффициентүүдийг ab-initio квант механикийн аргаар CRYSTAL14 программ ашиглан тооцоолов. Бидний тооцоолсон үр дүнгүүд бусад тооцооны болон туршилтын үр дүнгүүдтэй сайн тохирч байна. Түүнчлэн уг системийн хувьд эзэлхүүн шахалтын модуль B , шилжилтийн модуль G , Юнгийн модуль E , Пуассоны харьцаа ν болон Дебайн температурыг тодорхойлов.

PACS numbers: 77.84.-s, 62.20.de, 77.65.Bn

I. ОРШИЛ

Берлинит буюу AlPO_4 нь пьезо-электрик шинж чанар бүхий материал юм. Пьезо-электрик эффектийг атомын түвшинд анх 1927 онд Meisner $\alpha\text{-SiO}_2$ -ийн жишээн дээр тайлбарласан байдаг [1]. Гэвч энд кварцийн бүтцийг хэт хялбарчилсан, түүнийг ионы холбоостой гэж ойролцоолсон байдаг. Сүүлийн үед хийгдсэн нилээд ажлууд Meisner-ийн загвараар тайлбарлагддаггүй. Кварц нь хүчтэй ковалент холбоостой байдаг учир гадны цахилгаан оронд Si-O хоорондох өөрчлөлт бага харин кварцад явагдаж байгаа гол механизм нь SiO_4 тетраэдрийн эргэлт гэдгийг дифракцийн аргаар тогтоосон байдаг [2]. AlPO_4 -ийн бүтэц нь SiO_2 -ийн бүтэцтэй төсөөтэй бөгөөд Si-ийн оронд Al болон P-ийн атомыг ээлжлэн байрлуулсан тетраэдруудаас тогтоно. Бид өмнө AlPO_4 -ийн зарим физик шинж чанарын онолын тооцоо хийх замаар P-O холбоосын хувьд ковалент, Al-O холбоосын хувьд ионы шинж чанартай болохыг үзүүлсэн [6]. Иймээс энэ систем нь химийн холбоосын хувьд холимог шинж чанартай. Мөн бид синхротрон цацраг болон модуляцийн арга ашиглан AlPO_4 -ийн урвуу пьезо-электрик коэффициентүүдийг тодорхойлсон [6,7]. Бид

энэ ажлаар берлинитийн хувьд ab-initio квант механикийн арга ашиглан харимхайн тогтмолууд болон пьезо-электрик коэффициентуудыг тооцох зорилго тавьсан.

II. ТООЦООНЫ АРГА БОЛОН ОНОЛЫН ҮНДЭС

Бид ab-initio квант механикийн аргаар үндсэн төлвийн энерги, энергийн градиент, электроны долгионы функцуудыг ашиглан кристалл системийн шинж чанаруудыг тооцоолох CRYSTAL14 программ [8] ашиглан AlPO_4 -ийн харимхайн тогтмолууд, пьезо-электрик коэффициентүүдийг тооцоолов. Энэхүү тооцоонд атомын орбиталаар Гауссын функц (GTF) болон B3LYP (Bescke-ийн гурван параметртэй солилцолын функц болон локал биш Lee-Yang-Parr-ийн корреляцийн функц) хамильтониан ашигласан болно. Харимхайн тогтмолуудыг бид гажилт үүсгэх хүчдэлийн функцээс хамаарах системийн энергийн полинаминал тохируулгаас олох болно. Эгэл торын энергиг харьцангуй деформацийн функцаар цуваанд задлан бичье.

$$E(\eta) = E(0) + \sum_{i=1}^6 \left[\frac{\partial E}{\partial \eta_i} \right]_0 \eta_i + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^6 \left[\frac{\partial^2 E}{\partial \eta_i \partial \eta_j} \right]_0 \eta_i \eta_j \quad (1)$$

Харимхайн тогтмол C_{ij} нь системийн энергиэс харьцангуй деформациар авсан хоёрдугаар эрэмбийн уламжлалаар дараахи байдлаар

илэрхийлэгдэнэ:

$$C_{ij} = \frac{1}{V_0} \left[\frac{\partial^2 E}{\partial \eta_i \partial \eta_j} \right], \quad (2)$$

энд V_0 нь тэнцвэрт төлөв дэх системийн эзэлхүүн. η нь харьцангуй деформацийн 2-р рангийн симметр тензор бөгөөд Войгтийн тэмдэглэгээ ашиглан бичвэл $ij = 1, \dots, 6$ ($1 = xx, 2 = yy, 3 = zz, 4 = yz, 5 = xz, 6 = xy$) байна. Берлинит нь тригональ кристалл систем $R\bar{3}121$ симметртэй учир үл хамаарах хувьсагчийн тоо цөөрч 6 болно:

$$C_{ij} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & C_{15} & 0 \\ 0 & C_{11} & C_{13} & 0 & -C_{15} & 0 \\ 0 & 0 & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & C_{15} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{66} \end{bmatrix}.$$

Энд C_{66} тогтмол нь C_{11} болон C_{12} -аар дараахи байдлаар илэрхийлэгдэнэ.

$$C_{66} = (C_{11} - C_{12})/2.$$

Түүнчлэн доорхи ойролцоолсон эмпирик тэгшитгэлүүд ашиглан AlPO_4 -ийн эзэлхүүн шахалтын (B), шилжилтийн (G), Юнгийн (E) модулиуд, пуассоны харьцаа (ν) болон тодорхой чиглэлд хөндлөн (v_s), тууш (v_p) чиглэлд харимхай долгион тарах хурд зэргийг тооцоолов:

$$B = \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12}),$$

$$G = \frac{1}{10}(C_{11} - C_{12} + 3C_{44}) + \frac{5}{2}(4(S_{11} - S_{12}) + 3S_{44})^{-1},$$

$$E = \frac{9B \cdot G}{3B + G}; \quad \nu = \frac{3B - 2G}{2(3B + G)},$$

$$v_p = \sqrt{\frac{B + 4G/3}{\rho}}, \quad v_s = \sqrt{\frac{G}{\rho}},$$

энд C_{ij} нь харимхайн тогтмол, S_{ij} нь харимхайн модуль, ρ нь нягт. Харимхай деформацийн мужид шууд e болон урвуу d пьезо-электрик тензорууд нь харьцангуй деформацийн дүнд үүсэх туйлшрал P болон гадны цахилгаан орон E -ээр үүсэх харьцангуй деформаци η -аас дараахи байдлаар хамаарна:

$$P = e \cdot \eta, \quad (3)$$

$$\eta = e^T \cdot E. \quad (4)$$

Туйлшралын компонентууд нь харьцангуй деформацийн тензорын компонентуудаар дараахи байдлаар илэрхийлэгдэнэ:

$$P_i = \sum_v e_{iv} \eta_v. \quad (5)$$

Эндээс пьезо-электрик тензорыг олбол:

$$e_{iv} = \left(\frac{\partial P_i}{\partial \eta_v} \right)_E, \quad (6)$$

энд $i = 1, \dots, 3$; η нь цэвэр харьцангуй деформацийн тензор. CRYSTAL программын хувьд Ванниерийн функц эсвэл Варри фазын арга ашиглан цахилгаан туйлшралыг тооцоолдог. Пьезо-электрик тогтмолуудыг Варри фаз φ_l -аас харьцангуй деформациар авсан нэгдүгээр эрэмбийн уламжлалаар илэрхийлэн бичвэл

$$e_{iv} = \frac{|e|}{2\pi V} \sum_l a_{li} \frac{\partial \varphi_l}{\partial \eta_v}, \quad (7)$$

болох ба энд a_{li} нь l -р шууд торын векторын i -р компонент.

Шууд болон урвуу пьезо-электрик тензорууд нь хоорондоо дараахи хамааралтай байна.

$$e = d \times C, \quad d = e \times S. \quad (8)$$

Энд C нь системийн энергиас харьцангуй деформациар авсан хоёрдугаар эрэмбийн уламжлалаар илэрхийлэгдэх дөрөвдүгээр эрэмбийн харимхайн тензор ба $S = C^{-1}$ нь дөрөвдүгээр рангийн харимхайн модулийн тензор.

III. ТООЦООНЫ ҮР ДҮН

Бид энэхүү тооцоог бүрэн чөлөөтэй тохиолдолд хийсэн бөгөөд энэ үед эгэл тор дэх атомууд болон торын параметрууд нь гадны үйлчлэлээс хамааран өөрчлөгдөнө. Ингээд бидний тооцоолсон харимхайн тогтмол C_{ij} (ГПа) болон харимхайн модуль S_{ij} (1/ГПа)-ийг дор үзүүлэв:

$$C_{ij} = \begin{bmatrix} 84.13 & 22.67 & 25.52 & 0 & 10.28 & 0 \\ 0 & 84.13 & 25.52 & 0 & -10.28 & 0 \\ 0 & 0 & 113.41 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 46.70 & 0 & -10.28 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 46.70 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 30.72 \end{bmatrix},$$

$$S_{ij} = \begin{bmatrix} 14.02 & -3.57 & -2.36 & 0 & -3.86 & 0 \\ 0 & 14.02 & -2.36 & 0 & 3.86 & 0 \\ 0 & 0 & 9.88 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 23.1 & 0 & 7.73 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 23.1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 35.13 \end{bmatrix}.$$

Эндээс бусад харимхайн тогтмолуудыг олбол эзэлхүүн шахалтын модуль $B = 47.18$ ГПа, шилжилтийн модуль $G = 36.835$ ГПа, Юнгийн

модуль $E = 87.68 \text{ ГПа}$, Пуассоны харьцаа $\nu = 0.19$ байна. Харимхай долгион тарах хурдыг Кристоффелийн тэгшитгэл ашиглан олсоныг хүснэгт.1-т үзүүлэв:

Долгионы вектор	$V_p(\text{км/с})$	$V_{s1}(\text{км/с})$	$V_{s2}(\text{км/с})$
[001]	6.53	4.19	4.19
[010]	5.62	4.41	3.11
[100]	5.71	4.07	3.4
[110]	5.67	4.26	3.23
[101]	6.69	3.71	3.27
[011]	6.46	3.94	3.46
[111]	6.05	3.98	3.73

Дебайн температур T_D нь хатуу биеийн харимхай шинж чанарыг дулаан багтаамж, хайлах температур, энтропийн өөрчлөлт зэрэг термодинамик шинж чанаруудтай холбодог суурь хэмжигдэхүүн юм. T_D -ийг тодорхойлох нэг стандарт арга бол поликристалл материалд харимхай долгион тарах дундаж хурд v_m -ийг ашиглан дараахи тэгшитгэлээр тодорхойлдог [9]:

$$T_D = \frac{h}{k_B} \left[\frac{3n}{4\pi} \left(\frac{N_A \rho}{M} \right) \right]^{1/3} v_m, \quad (9)$$

энд h Планкийн тогтмол, k_B Больцманы тогтмол, n молекул дэх атомын тоо, N_A Авогадрын тоо, ρ нягт, M молекулын жин. v_m -ийг дараахи илэрхийллээр олох болно:

$$v_m = \left[\frac{1}{3} \left(\frac{2}{v_p^3} + \frac{1}{v_s^3} \right) \right]^{1/3}. \quad (10)$$

Эндээс AlPO_4 системийн Дебайн температур нь $T_D = 215.5 \text{ К}$ гарч байна. AlPO_4 -ийн хувьд шууд

e_{ij} болон урвуу d_{ij} пьезо-электрик тензоруудын хувьд системийн симметрээс хамааран зөвхөн хоёр үл хамаарах гишүүнтэй байна:

$$e_{ij} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & -e_{14} & 0 & e_{21} \\ e_{21} & -e_{21} & 0 & 0 & e_{14} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Үүнээс Варри фазын арга ашиглан тооцоолсон пьезо-электрик коэффициентууд нь $e_{11} = 0.182 \text{ кл/м}^2$, $e_{14} = 0.05 \text{ кл/м}^2$ болон $d_{11} = 0.3.008 \text{ пм/В}$, $d_{14} = 0.248 \text{ пм/В}$ байна.

IV. ДҮГНЭЛТ

Бид энэхүү ажлаар Берлинит буюу AlPO_4 -ийн харимхайн тогтмолууд болон пьезо-электрик коэффициентүүдийг ab-initio квант механикийн аргаар CRYSTAL14 программ ашиглан тооцоолов. Түүнчлэн уг системийн хувьд эзэлхүүн шахалтын модуль B , шилжилтийн модуль G , Юнгийн модуль E , Пуассоны харьцаа ν болон Дебайн температур зэргийг тооцоолов. Эдгээр тооцооны үр дүнгүүд нь бусад тооцооны үр дүн болон туршилтын утгуудтай чанарын хувьд тохирч байна. Бид цаашид супер торын ойролцоолол ашиглан нэмэлт тооцоо хийх болон бидний өмнө хийсэн туршилтын үр дүнгүүдийг ашиглан AlPO_4 -ийн хувьд пьезо-электрик эффектийг атомын түвшинд тайлбарлах зорилт тавьж байна. AlPO_4 -ийн харимхай шинж чанар болон пьезо-электрик эффектийг бүрэн гүйцэд таньж мэдсэнээр түүний хэрэглээний боломжуудыг нэмэгдүүлэх боломжтой.

-
- [1] A. Meissner. Z. techn. Phys. **2**, 74 (1927).
 [2] J.Davaasambuu, A.Pucher, V.Kochin and U.Pietsch . Europhys. Lett. **62(6)**, 834-840 (2003).
 [3] G.V. Gibbs K.M, Rosso, Teter D.M, Jr.M.B. Boisen and M.S.T.Bukowinski J. Mol. Struct. **13**, 485-486 (1999).
 [4] R.A. Young and B. Post, Acta Cryst. **15**, 337 (1962).
 [5] H. D'Amour, W. Denner and H. Schultz, Acta Cryst. **B35**, 550 (1979).
 [6] N.Tuvjargal, J.Davaasambuu, et, al Master Research Papers, National University of Mongolia, (2005).
 [7] J. Davaasambuu, N.Tuvjargal, B.Burmaa and U.Pietsch, Physics Journal, National University of Mongolia 251 PHYSICS (**13**), 78-83 (2005).
 [8] R. Dovesi, V.R. Saunders, C. Roetti, R. Orlando, C. M. Zicovich-Wilson, F. Pascale, B. Civalleri, K. Doll, N.M. Harrison, I.J. Bush, Ph. D'Arco, M. Llunell, M. Causa and Y. Noel, CRYSTAL14 User's Manual,

- University of Torino, Torino, (2014)
 [9] O. L. Anderson, J. Phys. Chem. Solid. **24**, 909 (1963).

Metamorphism Trend in Some Mongolian Coals Revealed by Raman Spectroscopy

S. Munkhtsetseg, R. Galbadrakh*, and L. Enkhtur

*Department of Physics, School of Art and Science, National University of Mongolia,
Ulaanbaatar, Mongolia,*

Raman scattering spectra of the representative samples from Mongolian low metamorphic coal deposits as of Sharyn-Gol, Baganuur, Nalaikh, Alagtolgoi and Dovt were measured. Total carbon content of these samples was measured by X-ray microanalysis method. An existence of graphite-like domains in vitrinite of the low metamorphism coals has been revealed by the Raman measurements. A Raman amorphous A band at $1342\text{--}1364\text{ cm}^{-1}$ is less intense and broader than that of a graphitic G band at $1560\text{--}1580\text{ cm}^{-1}$ for all studied samples. The graphitic G band is found to be shifted to higher frequencies within $1560\text{--}1580\text{ cm}^{-1}$ with a decrease of coal maturity, while the Raman amorphous-graphitic band intensity ratio $R=f_A/f_G$ is found to be increased.

PACS numbers: 89.30.ag, 91.65.Pj, 91.65.Qr, 42.65.Dr,

I. INTRODUCTION

The energy sector of Mongolia based almost only on a coal mining represents both a significant economic hope and a considerable environmental threat for the country. Consequently, coal processing into clean charcoal or other refined products through proven, existing modern technology is highly required. In these circumstances, start of structural characterization analysis of all kinds of Mongolian coals also represents immediate task.

The high sensitivity Raman spectroscopy has been found useful for defining the level of organic metamorphism (LOM) in carbonaceous natural objects. For example, the degree of structural order of polyaromatic chains in coals can be characterized using Raman spectra, simply because spectral frequencies are principally assignable to carbonaceous functional groups.

In this work Raman spectra of five coal samples from the biggest Mongolian coal deposits were measured and used to characterize their LOM. Total carbon content of the four coal deposit samples determined by X-ray microanalysis method was used as references for the studied coal samples.

II. EXPERIMENTAL

Freshly broken surfaces of the coal samples from the Sharyn-Gol, Baganuur, Nalaikh, Alagtolgoi, and Dovt coal deposits were radiated by focused laser beam to excite Raman scattering spectra. Spectra were excited by 50 mWt power, 647.1 nm red light of an argon-ion laser (Innova 90) and recorded with a Horiba Jobin Yvon T 64000 spectrometer. The Raman spectra in the $4000\text{--}250\text{ cm}^{-1}$ range of wave number of each coal sample was recorded in an usual laboratory condition for 4 times by 1 sec data acquisition at

each spectral position and then four spectra were averaged to reach the best possible signal-to-noise ratio. Spectra recorded from different spots standing within 1-3 mm each other on a sample surface were similar in background fluorescence wide band intensity, shape, and Raman narrow bands.

Raman bandwidth analysis was done using a standard curve resolution algorithm and a multiple point correction for background subtraction to distinguish the amorphous (f_A) and graphitic (f_G) Raman scattering clear bands of a carbonated molecular species in samples.

A total carbon content of four coals (Sharyn-Gol, Baganuur, Nalaikh, Alagtolgoi) was determined by scanning electron microscopy (LEO1455VP, Carl Zeiss, Germany) with X-ray microanalysis using energy dispersive SiLi-detector (Rontec, Germany) and the determined values were used as a measured maturity of the samples.

III. RESULTS AND DISCUSSION

It seems reasonable to expect an equal number of spectral frequencies of Raman scattering and infra-red absorption bands [1, 2] in organic matter, but for these coal samples a number of Raman bands is much fewer than a number of their FTIR bands [3-7]. For the coal samples studied, two intensive Raman bands of carbon in the wave number range of $1520\text{--}1600$ and $1340\text{--}1370\text{ cm}^{-1}$ were well dominated (see Table 1) over broad weak shoulders in the region of 1900 and $2750\text{--}2850\text{ cm}^{-1}$.

A Raman band around $1560\text{--}1580\text{ cm}^{-1}$ is from a CH bond stretching of all pairs of sp^2 atoms in both rings and chains labeled graphite-like (G) and a peak near $1342\text{--}1364\text{ cm}^{-1}$ is assigned to the breathing modes of sp^2 atoms in rings [8-12]

*Electronic address: galbadrakh@num.edu.mn

labeled amorphous (A) or defect (D), which are typical to the Raman spectra of the bituminous coal.

Table 1: Raman frequencies in the some Mongolian coal samples

Coal sample name	Raman bands			
	ν , cm^{-1}	Band assignment	ν , cm^{-1}	Band assignment
Sharyn-Gol	1344		1560	
Baganuur	1357		1571	
Nalaikh	1364	Amorphous	1578	Graphite-like
Alagtolgoi	1363	C-H bending	1580	
Dovt	1342		1574	C-H bending

The graphitic band shift to higher frequencies within $1560\text{--}1580\text{ cm}^{-1}$ means a disorder increase of carbon CH bonds in a coal vitrinite structure. It is generally observed for coals that the A band at $1342\text{--}1364\text{ cm}^{-1}$ is less intense and broader than the graphitic band G at $1560\text{--}1580\text{ cm}^{-1}$. As shows in Figure 1 (spectrum 1 and 2), for the coals from Sharyn-Gol and Baganuur, A peaks are comparable or stronger than neighboring G peaks, which may be explained as a relatively increased number of disorder defects with an increased number of broken Raman transition rule in these samples. Similar behavior has been observed in Raman spectra of bituminous coal previously [13]. It is also found that during metagenesis and beyond, the intensity of the G band increases while the A band decreases with an increasing sample maturity [13]. This phenomenon has been also observed here and shows metamorphism level of the coals studied.

A band near 1900 cm^{-1} is clearly appeared on the shoulder of the graphitic bands of Sharyn-Gol and Baganuur coal samples (Figure 1, spectra 1 and 2), while this band is negligible for the rest of the coals. Therefore, we assume that this weak band at 1900 cm^{-1} is from defect disorder-induced vibrations. Low intense broad band near 2800 cm^{-1} is usually attributed to CH stretching vibration. This band has been registered clearly on the spectra of Dovt coal (Figure 1, spectra 5).

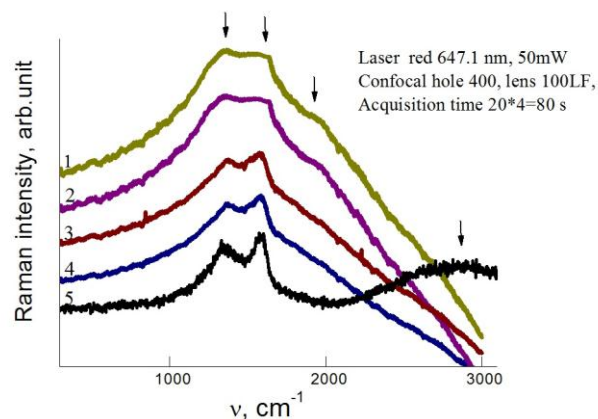


Figure 1: Raman spectrums of the coal samples (1– Sharyn-Gol, 2 – Baganuur, 3 – Nalaikh, 4 – Alagtolgoi, 5 – Dovt)

Images of fresh broken cleavage surface of coals from the optical microscope (Olympus) with a magnification of 100 were made to reveal heterogeneity in a structure of the studied coals. The typical image of Sharyn-Gol coal sample (Fig. 2) shows a thin ($1\text{--}10\text{ }\mu\text{m}$ thick) yellowish-brown color inclusive of mostly oxidized organic matter included between coal vitrinite domains. Sharyn-Gol coal sample was the richest with this oxidized inclusive among studied coals, which indicate the lowest stage of metamorphism of the deposit.



Figure 2: Typical optical image of fresh broken surface of the Sharyn-Gol coal sample

In the table 2 it is given the band separation ($G\text{--}A$) and the Raman intensity ratio $R=f_A/f_G$ for the studied coals. Differences in the appearance of these bands well associated with the geological history of coals. Depending on a maturity of coals, both amorphous and graphitic bands might shift to the high frequency side. Consequently, two bands location have been shifted to a higher frequency up

to 20 cm^{-1} (Table 1). As shows direct X-ray determination and fresh broken surface optical images, coals from Sharyn-Gol has the lowest content of carbon and relatively enriched with inclusive of oxygen containing complexes.

Table 2: Carbon graphitic A and amorphous G bands separation G-A and intensity ratio $R=f_A/f_G$ (found by curve fitting) for the some Mongolian coals. Carbon mass content was measured using micro X-Ray analysis mode of a scanning electron microscopy

Coal sample	Carbon content, mass %	Raman band separation G-A, cm^{-1}	Raman intensity ratio, $R=f_A/f_G$
Sharyn-Gol	43.67	216	1.01
Baganuur	72.38	214	1.00
Nalaikh	81.76	214	0.96
Alagtolgoi	82.93	217	0.95
Dovt	≥ 80	232	0.90

The Raman graphitic and amorphous band separation and Raman band strength ratio for the studied coals are plotted below versus carbon content ranking in studied coals in the Figure 3a and 3b.

As shows in Figure 3a, the Raman G-A separation almost the same when the carbon content in coals increases approximately two times in the samples 1-4. However, the sample 5 shows the highest band separation alone. It has significantly different Raman bands from those of others. It has the lowest background fluorescence intensity and clear shaped Raman band with narrow width. From the unusual Raman spectra features of the sample 5a, here we note that a carbon content measurement of the sample 5 should have been measured again for the clarity.

The Raman amorphous-graphitic band intensity ratio $R=f_A/f_G$ drops slightly from 1 to 0.9 with an increase of carbon content in coals (Figure 3b). This behavior might be explained by a disappearance of oxygen rich inclusive and a simultaneous size growing of graphitic domains in vitrinite bulk of samples. The Raman intensity ratio, $R=f_A/f_G$ is the highest in the coal of Sharyn-Gol deposit, which indicates again less graphitic domains or less maturity of this coal among the studied five coals.

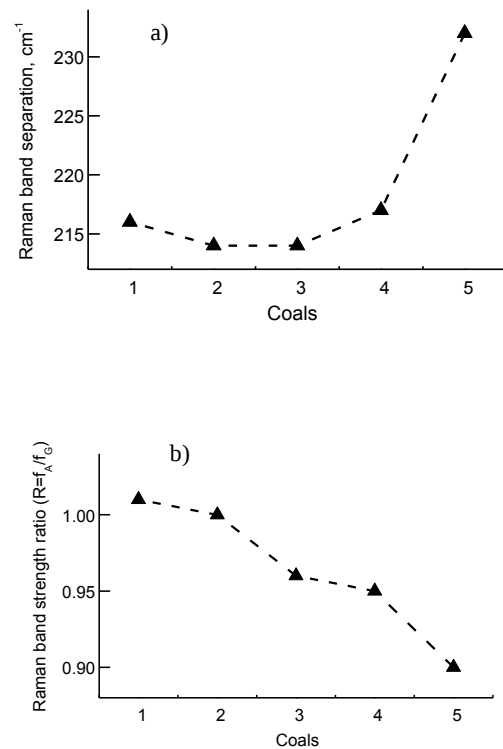


Figure 3: Raman band separation G-A (3a) and Raman amorphous/graphitic band intensity ratio, $R=f_A/f_G$ (3b) for the studied coal samples (1–Sharyn-Gol, 2 – Baganuur, 3 – Nalaikh, 4 – Alagtolgoi, 5 – Dovt)

IV. CONCLUSION

The present Raman measurements reveal an existence of graphite-like domains in vitrinite bulk of the low metamorphism coals studied. The amorphous A band at 1342-1364 cm^{-1} is less intense and broader than that of the graphitic G band at 1560-1580 cm^{-1} for all samples studied.

The graphitic G band is found to be shifted to higher frequencies within 1560-1580 cm^{-1} with a decrease of coal maturity, while the Raman amorphous/graphitic band intensity ratio $R=f_A/f_G$ is found to be increased.

The high sensitivity Raman spectroscopy can be an independent tool to reveal a metamorphism grade of coals.

V. ACKNOWLEDGEMENT

The authors are kindly grateful to the Laboratoire de Physique de l'Etat Condense, Universite du Maine, Le Mans, France, (Professor Philippe Daniel and his group) for the Raman spectroscopy measurements and the Laboratory of the Electron Microscopy of the Belarusian State University, Minsk, Belarus, (Professor

Poklonski and his group) for the X-Ray measurements.

- [1] S. Munkhtsetseg, G. Shilagardi, and J. Davaasambuu, ICCP-IV. Ulaanbaatar. Mongolia. **100** (2007).
- [2] S. Munkhtsetseg, ICCP-IV. Ulaanbaatar. Mongolia. **102** (2007).
- [3] S. Roberts, P. M. Tricker, and J. E. A. Marshall, Org. Geochem. **23**, 223 (1995).
- [4] C. Spotl, D. W. Houseknecht, and R. C. Jaques, Org. Geochem. **28**, 535 (1998).
- [5] J. D. Pasteris, and B. Wopenka, Can. Mineral. **29**, 1 (1991).
- [6] B. Wopenka, and J. D. Pasteris, Am. Mineral. **78**, 533 (1993).
- [7] T. F. Yui, E. Huang, and J. J. Xu, Metamorphic Geol. **14**, 115 (1996).
- [8] A. C. Ferrari, and J. Robertson, (Eds.) Phil. Trans. Roy. Soc. **A 362**, 2267 (2004).
- [9] F. Tuinstra, and J. L. Koenig, J. Chem. Phys. **53**, 1126 (1970).
- [10] C. Thomsen, and S. Reich, Physical Review Letter. **85**, 5214 (2000).
- [11] C. Castiglioni, E. Di Donato, M. Tommasini, F. Negri, and G. Zerbi, Synth. Met. **139**, 885 (2003).
- [12] S. Piscanec, M. Lazzeri, F. Mauri, A.C. Ferrari, and J. Robertson, Phys. Rev. Lett. **93**, 185503 (2004).
- [13] S. R. Kelemen, and H. L. Fang, Energy & Fuels. **15**, 653 (2001).

Цахилгаан Статик Шүүлтүүрийн Шүүх Чадварыг Түүний Хэлбэр Хэмжээтэй Уялдуулан Тооцоолох нь

Ж.Ванчинхүү, Б.Бат-эрдэнэ
МУИС, ШУС, Физикийн тэнхим

Цахилгаан шүүлтүүрийн шүүлтийн коэффициентийг онолоор тодорхойлж шүүлтийн коэффициент шүүлтүүрийн хэлбэр хэмжээ, хийн урсгалын хурд, бөөмцрийн хэмжээнээс хэрхэн хамаарч байгааг судлав. Шүүлтүүрийн хөндлөн огтлолыг ерөнхий тохиолдолд олон өнцөгт байна гэж үзвэл олон өнцөгтийн талын тоо буурахад шүүлтийн коэффициент нэмэгдэх бөгөөд адилт талт гурвалжны хувьд шүүлт хамгийн их, тойрог огтлолын хувьд хамгийн бага байна.

Мөн шүүлтийг бөөмцрийн хэмжээнээс хамааруулан судалж $r < 1 \text{ мкм}$ бөөмцрүүдийн хувьд шүүлтийн коэффициент эрс багасахыг тогтоов. Шүүлтийн коэффициентийн утга хийн урсгалын хурд ба дрейфийн хурдны харьцаанаас хамаарах бөгөөд энэ харьцаа бага байх тусам шүүлт нэмэгдэнэ.

PACS number: 52.80.Hc, 47.57.-s

Цахилгаан орон дотор байгаа цэнэгт бөөмд Кулоны хүч үйлчилдэг. Энэ үйлчлэлийг ашиглан хийг бөөмцрөөс нь цэвэрлэж болох бөгөөд энэ зарчимд тулгуурлан бүтээсэн төхөөрөмжийг цахилгаан статик шүүлтүүр гэдэг [1,3,4]. Үйлдвэрлэл, техник, технологийн процесст цахилгаан шүүлтүүрийг өргөн ашигладаг [2,5,7]. Өндөр хүчдэлтэй шүүлтүүрээр бөөмцөр агуулсан хийн урсгалыг өнгөрүүлэхэд (Зураг 1) шүүлтүүр дотор явагдах процессуудын дүнд бөөмцрүүд цэнэглэгдэж орны үйлчлэлээр электродын гадаргуу дээр сууж үлдэн бөөмцрөөс цэвэрлэгдсэн хий гадагшилдаг.

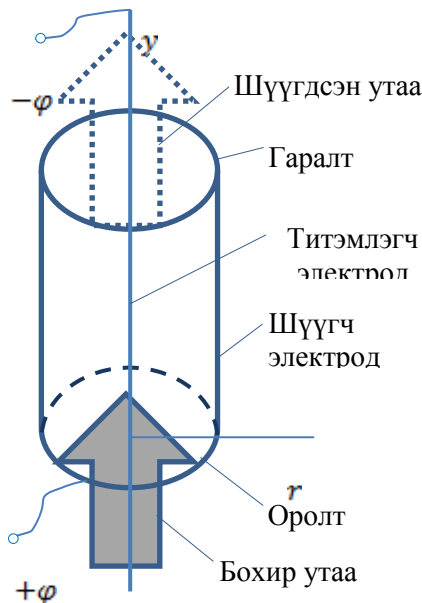
Манай улсын нийтийн халаалтад холбогдоогүй орон сууц, монгол гэрт амьдардаг айл өрх бүр өөрийн ахуйн хэрэгцээндээ гал ашигладаг бөгөөд шатаалт явуулж буй зуухнаас их хэмжээний агаар бохирдуулагч агентууд бүхий утаа ялгарч байдаг. Шаталтаас ялгарах агентуудын дотроос дутуу шаталтын үр дагавар болон гарах бөөмцөр (тоосонцор) хүний амьсгалах өндрийн түвшинд ихээр хуримтлагдаж эрүүл мэндэд сөрөг нөлөө үзүүлж байдаг. Цахилгаан шүүлтүүрийг айл өрхийн ахуйн хэрэгцээний зуухнаас яндангаар дамжин гадагшлах утаанд буй бөөмцрүүдийг шүүхэд хэрэглэх боломжтой бөгөөд энэ нь яндангаар гадагшилж байгаа утааны хөдөлгөөнд саад учруулдаггүй, хэрэглэхэд хялбар, овор хэмжээ багатай, найдвартай ажиллагаатай зэрэг олон давуу талтай байх юм. Гэрийн зууханд тохируулан хийсэн ийм шүүлтүүр овор хэмжээг тооцоолох асуудлыг энэ өгүүлэлд авч үзэх болно.

Шүүлтүүр дотуур хийн урсгал өнгөрөх үед бөөмцрийн концентраци ямар хуулиар буурахыг эхлээд авч үзье. Бөөмцөр агуулсан хийн системээс цахилгаан орны үйлчлэлээр

бөөмцрийг зайлуулахын тулд эн тэргүүнд түүнийг цэнэглэх шаардлагатай болдог. Хийн урсгал дотор байгаа бөөмцрүүдийг трибоцахилгаан үзэгдэл, титэмт цахилалт, хэт ягаан туяаны үйлчлэл, цацраг идэвхи зэргийг ашиглан цэнэглэж болох бөгөөд эдгээрийн дотроос утааны шүүлтүүрт хамгийн тохиромжтой, энгийн хямд төсөр цэнэглэх арга нь титэмт цахилалт юм [4]. Титэмт цахилалтыг ашигласнаар бөөмцрийг цэнэглэх, түүнийг хийн урсгалаас зайлуулах ажлыг нэг ижил орноор гүйцэтгэх боломж бүрддэг.

Тэнхлэгүүд нь давхацсан цилиндр хэлбэртэй шүүлтүүрийн хялбар байгууламжийг авч үзье (Зураг 1.). Шүүлтүүрийн сөрөг хүчдэлтэй нарийхан электродыг титэмлэгч электрод, харин эерэг хүчдэлд холбогдсон цилиндр хэлбэртэй гадаад электродыг цуглуулагч электрод гэдэг. Хүчдэл өгөхөд эдгээр электродын хооронд орон үүсэх бөгөөд титэмлэгч электродын орчим орон маш хүчтэй нэгэн төрөл биш байдаг. Шүүлтүүр рүү n бөөмцрийн концентрацитай v урсгалын хурдтай утаа (хий ба тоосонцроос тогтох дисперслэгдсэн систем) ордог гэж саная. Шүүлтүүрийн дотор энэ концентраци хөндлөн огтлолын дагуу жигд түгсэн байж чадахгүй [2,4]. Түүнчлэн шүүлтүүрийн дагуу хөдлөх үед шүүлтийн улмаас утга нь өөрчлөгдөнө. Хялбарчлах үүднээс хийн тоосонцрын концентрацийн түгэлт шүүлтүүрийн хөндлөн огтлолын дагуу жигд байдаг гэж төсөөлье. Энэ төсөөллийг бодит байдалтай нийцүүлэх зорилгоор оролтоос y зайд орших хөндлөн огтлолоор өнгөрөх утааны доторх бөөмцрийн концентрацийг дундаж утгаар нь аваад $n_d(y)$ гэж тэмдэглэе. Энэ тохиолдолд бөөмцрийн

урсгалын нягт $n_d(y)v$ байна. Шүүлтүүр дотуур хөдлөх бөөмцрүүд хийн хамт y тэнхлэг дагуу v хурдтай урсахаас гадна хөндлөн чиглэлд орны үйлчлэлээр u хурдтайгаар шүүгч электродын зүг хөдөлнө. Хөндлөн чиглэсэн энэ урсгалын нягт $n_d(y)u$ байна. Шүүлтүүрийн уртын дагуух dy өндөртэй хэсгийг утаа туулан гарах үед тоосонцрын концентрацид гарах өөрчлөлтийг



Зураг 1. Цахилгаан шүүлтүүрийн бүдүүвч

dn гэе. Шүүлтүүрийн хөндлөн огтлолын талбай S бол шүүлтүүр дээр бөөмцөр сууж үлдсэний улмаас dy урттай хэсгийг туулж өнгөрөхөд гарах урсгалын өөрчлөлтийн хэмжээ $Svdn$ байна. Нөгөө талаас сууж үлдсэн бөөмцрийн тоо шүүгч талбай (Pdy , P -хөндлөн огтлолын периметр) болон урсгал нягтын үржвэр $n_d(y)uPdy$ буюу хөндлөн чигт хөдлөх урсгалаар тодорхойлогдоно. Энэ хоёр хэмжигдэхүүн тэнцүү тул

$$Svdn = -n_d(y)vPdy.$$

Эндээс

$$\frac{dn}{dy} = -\frac{Pu}{Sv}n_d(y).$$

Энэ тэгшитгэлд бид шүүгч электрод хүрсэн бөөмс бүхэн суух албагүй гэдгийг тооцсонгүй. Өөрөөр хэлбэл, шүүгч электрод дээр очиж байгаа бөөмцрийн урсгал $n_d u P dy$ бүгд тэндээ шингэх албагүй. Шингэсэн урсгалын хэмжээг

$Pv_1 n_{ш}$ гэвэл энэ хоёр урсгалыг харьцуулснаар $\frac{n_{ш}}{n_d} = \delta$ хувь нь л шингэж үлдэнэ гэсэн үг юм. Үүнийг тооцвол энэ тэгшитгэл дараах хэлбэртэй болно:

$$\frac{dn}{dy} = -\delta \frac{Pu}{Sv}n_d(y).$$

Энэ тэгшитгэлийг $n_d(y=0) = n_0$ (n_0 -шүүлтүүр рүү орж байгаа утааны бөөмцрийн концентрацийн анхны утга) анхны нөхцөлтэйгээр интегралчилбал:

$$n = n_0 \exp\left(-\delta \frac{Pu}{Sv}y\right).$$

Энэ функц шүүлтүүрийн уртын дагуу концентрац ямар хуулиар буурахыг үзүүлнэ.

Шүүлтүүрийн өндрийг L гэж үзээд түүнийг туулан гарсан утааны бөөмцрийн концентраци $n_L = n(y=L)$ ямар болсон байхыг олбол:

$$n_L = n_0 \exp\left(-\delta \frac{Pu}{Sv}L\right). \quad (1)$$

Шүүлтүүрийн шүүх чадвар буюу шүүлтийн коэффициентийг шүүгдсэн бөөмцрийн тоо $n_{ш} = n_0 - n_L$ -ийг анхны утганд харьцуулсан $\eta = 1 - \frac{n_L}{n_0}$ харьцаагаар үнэлдэг [1-4, 6]. Энд дээрх илэрхийллийг тооцвол шүүх чадвар

$$\eta = 1 - \frac{n_L}{n_0} = 1 - \exp\left(-\delta \frac{Pu}{Sv}L\right).$$

Эндээс үзэхэд шүүлтүүрийн шүүх чадвар түүний хэлбэр буюу $\frac{P}{S}L$ -ийн зохистой харьцаанаас гадна хийн урсгалын хурд ба бөөмцрийн хөндлөн чиглэлд хөдлөх хурдны харьцаагаар тодорхойлогдоно. Цаашдын тооцоонд бид $\delta \approx 1$ гэж авах болно.

Туршлагаас үзэхэд гэрийн зуухны яндангаар гадагшилж байгаа утааны урсгалын хурд ~ 1 м/с байдаг бөгөөд утааны урсгалыг ламинар, хөндлөн огтлолын дагуу жигд гэж үзэж болно [1,3]. Харин шүүлтүүр дотор орны дагуу хөдөлж байгаа бөөмцрийн дрейфийн хурдыг дараах хэлбэртэйгээр [3] авч болно:

$$u = 0.11810^{-10} E^2 r / \mu, \quad (2)$$

энд: E -шүүгч орны хүчлэг, r -бөөмцрийн радиус, μ -бөөмцрийн хөдлөц. Энэ хурд гадны орны утга болон бөөмцрийн хэмжээнээс

хамаарч байгаа тул шүүлтийн коэффициент ч мөн эдгээрээс хамаарна.

Шүүлтүүрийн хөндлөн огтлол ерөнхий тохиолдолд олон өнцөгт хэлбэртэй байна. Ийм учраас зөв олон өнцөгтийн периметр ба талын харьцааг судалъя. a талтай n тооны талс бүхий зөв олон өнцөгтийн периметр $P = na$. Энэ олон өнцөгт n ширхэг гурвалжнаас тогтох тул талбай нь $S = nS_{\Delta}$. Олон өнцөгтийг бүтээж байгаа нэг гурвалжны нийлэгч оройн өнцөг $\alpha = 360^\circ/n$.

Энэ гурвалжин a суурьтай адил хажуут гурвалжин байх ба түүний өндөр

$$h = \frac{a}{2} \cdot \operatorname{ctg}\left(\frac{360^\circ}{2n}\right) \quad \text{тул} \quad \text{талбай} \quad \text{нь}$$

$$S_{\Delta} = \frac{a}{2} \cdot h = \frac{a^2 \operatorname{ctg}\left(\frac{360^\circ}{2n}\right)}{4} \quad \text{байна.} \quad \text{Гурвалжны}$$

хажуу талын урт $l = \left(\frac{a}{2}\right) / \sin\left(\frac{360^\circ}{2n}\right)$ байна.

Иймд, a урттай n тал бүхий зөв олон өнцөгтийн

$$\text{талбай} \quad S = nS_{\Delta} = n \cdot \frac{a^2 \operatorname{ctg}\left(\frac{360^\circ}{2n}\right)}{4} = \frac{n}{2} \cdot l^2 \sin\left(\frac{360^\circ}{n}\right)$$

байна. r радиус-тай тойрогт багтсан олон өнцгийн чанарыг ашиглан бүтээгч гурвалжны талын урт нь багтаасан тойргийн радиустай тэнцүү $l = r$ байхыг олж болно. Олон өнцөгтийн талбай ба периметрийн харьцаа

$$\frac{S}{P} = \frac{a \cdot \operatorname{ctg}\left(\frac{360^\circ}{2n}\right)}{4} = \frac{1}{2} l \cdot \cos\left(\frac{360^\circ}{2n}\right).$$

Тухайлбал,

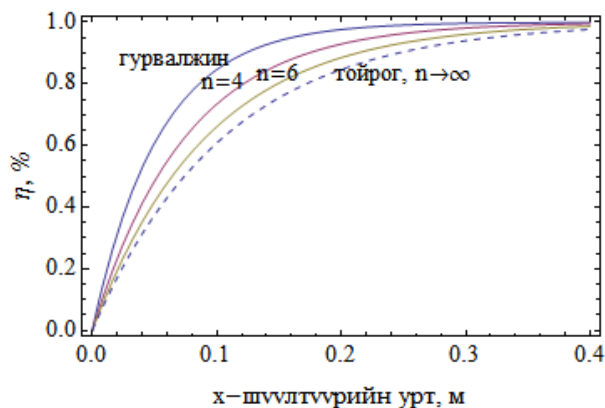
$$n = 3 \text{ бол } \frac{S}{P} = \frac{r}{4} = \frac{a}{4\sqrt{3}},$$

$$n = 4 \text{ бол } \frac{S}{P} = \frac{\sqrt{2}r}{4} = a/4,$$

$n = 6$ бол $\frac{S}{P} = \frac{\sqrt{3}r}{4} = \sqrt{3}a/4$ байна. Шүүлтийн коэффициентэд шүүлтүүрийн периметр ба талбайн харьцааг тооцож шүүлтийн коэффициент шүүлтүүрийн уртын дагуу ямар байхыг олж болно (Зураг 2). Энэ хамаарлыг тооцоолохдоо практикт нийцүүлэн

$$E = 150 \text{ кВ/м}, \quad \mu = 0.181 \cdot 10^{-4}, \quad r = 5 \text{ мкм},$$

$$\alpha = 1.61 \cdot 10^{-2} \text{ утгуудыг ашиглав.}$$



Зураг 2. Шүүлтийн коэффициент ба уртын хамаарал

Энэ графикаас харахад шүүлтийн коэффициент шүүлтүүрийн хөндлөн огтлолоос хүчтэй хамаарах бөгөөд зөв олон өнцөгт суурь бүхий цилиндр хэлбэртэй шүүлтүүрүүд дотроос адил талт гурвалжин огтлолтой шүүлтүүр хамгийн сайн шүүлттэй байх нь харагдаж байна. Үүнээс гадна шүүлтийн коэффициентийн өгөгдсөн нэг утганд шүүлтүүрийн өөр өөр өндөр харгалзана. Энэ нь шүүлтүүрийн хөндлөн огтлолыг өөрчлөх замаар шүүлтүүрийн өндрийг өгөгдсөн шаардлагад

Хүснэгт 1

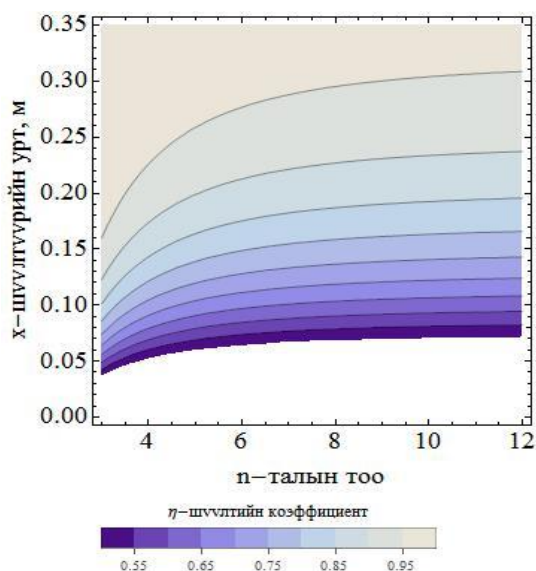
шүүлтийн хөндлөн огтлолын	Гурвалжин	Квадрат	Октаэдр	Тойрог
$l, \text{ м}$	0.16	0.23	0.28	0.321

тохируулан багасгах боломжтой олгодог.

Тухайлбал, $\eta = 0.95$ шүүлттэй шүүлтүүрийн урт түүний хөндлөн огтлолоос хамаарч ямар байхыг Хүснэгт 1-д үзүүлэв. Ерөнхий

тохиолдолд η -шүүлтийн коэффициент өгөгдсөн утгатай үед шүүлтүүрийн урт огтлолын олон өнцөгтийн талын тооноос хэрхэн хамаарахыг Зураг 3-т үзүүлэв.

Эндээс харахад шүүлтүүрийг хамгийн цөөн тал бүхий олон өнцөгт огтлолтой хийвэл ийм шүүлтүүр хамгийн богино бөгөөд хамгийн сайн шүүх чадвартай байх нь харагдаж байна. Өгөгдсөн радиустай тойрогт багтах олон өнцөгтийн талын тоо цөөрөх тусам үүсгэгч гурвалжны суурь уртасч, харин өндөр нь буурдаг.



Зураг 3. Шүүлтийн урт ба хөндлөн огтлолын олон өнцөгтийн талын тоо

Ийм учраас үүнд харгалзан шүүх талбайн хэмжээ ихсэж электрод хоорондын зай багасах учраас цөөн талтай олон өнцөгт хэлбэртэй хөндлөн огтлол бүхий шүүлтүүрийн шүүх чадвар дээшилнэ.

Одоо олон өнцөгтийг үүсгэгч гурвалжны суурийн урт, талын урт, өндрийн харьцааг авч

үзье. $a = 2 \cdot r \cdot \sin(360^\circ/2n)$ -г ашиглан $a = r$

байх хязгаарыг олбол $n = 6$ буюу зургаан өнцөгтийн хувьд талын урт суурийн урттай тэнцэх ба үүнээс олон өнцөгтийн хувьд суурийн урт нь талын уртаасаа бага байна.

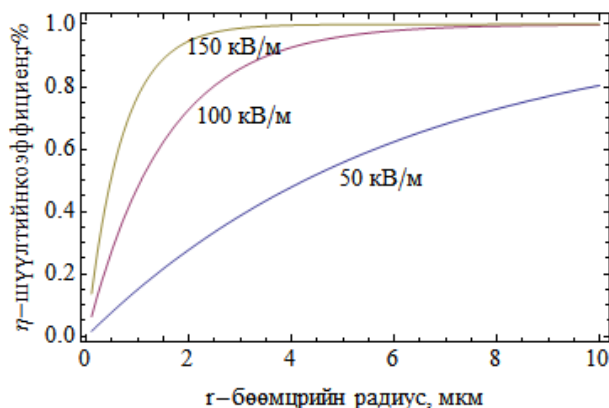
Харин $h \leq a$ нөхцөлөөс $\text{tg}(360^\circ/2n) \leq 1/2$

тэгшитгэлийг хангах $n \leq \frac{\pi}{\arctg(\frac{1}{2})} = 6.75$ -ийн

хувьд олон өнцөгтийг үүсгэгч гурвалжны өндөр суурийн урттайгаа тэнцэх бөгөөд үүнээс их болоход өндөр нь суурийн уртаасаа их болно. Иймд, суурийн урт нь өндрөөсөө их байх хамгийн олон өнцөгт бол зургаан талт юм. Иймээс шүүлтүүрийн огтлол олон өнцөгт байх тохиолдолд талын урт өндрөөсөө бага болж шүүгч талбайн хэмжээг багасгахаас гадна бөөмцрийн хөндлөн чигт туулах замыг ихэсдэг. Эндээс шүүлтүүрийн хөндлөн огтлол

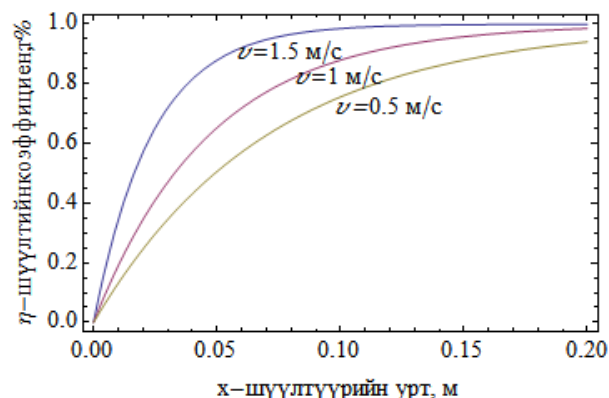
$n > 6$ олон өнцөгт байх нь үр ашиггүй гэсэн дүгнэлт хийж болно. Харин шүүлтүүрийг параллель ялтас ($n = 1, 2$) хэлбэртэй хийвэл шүү талбай ихсэж, электрод хоорондын зай багасах боловч шүүгч электродын хоёр зах орчмоор явж байгаа хийн урсгал цахилгаан оронд бараг өртөлгүйгээр явах учраас шүүгдээгүй бөөмцрийн тоо хэмжээ ихэсдэг. Үүнээс зайлсхийхийн тулд титэмлэгч

электродын тоог нэмэгдүүлж өгөх хэрэгтэй юм. Энэ тохиолдолд цахилгаан оронд өртөгдөх хийн урсгалын шугамын тоо олширч шүүлт мэдэгдэхүйц сайжирна.



Зураг 4. Орны янз бүрийн утганд харгалзах шүүлтийн коэффициент ба бөөмцрийн хэмжээний хамаарал

Одоо шүүлтийн коэффициент бөөмцрийн хэмжээнээс хэрхэн хамаарахыг авч үзье. (2) илэрхийллийг шүүлтийн коэффициентэд тооцож том хэмжээтэй бөөмцрийн хувьд шүүлтийн коэффициент их байх бөгөөд бөөмцрийн хэмжээ жижигрэх тусам шүүлтийн коэффициентийн утга багасна гэсэн дүгнэлтийг



Зураг 5. Хийн хурдны янз бүрийн утганд харгалзах шүүлтийн коэффициент (Хурдны харгалзах утгыг график бүрт зааж өгөв.

Дрейфийн хурд $u = 0.15$ м/с)

хялбархан гаргаж болно. Мөн шүүлтүүрийн доторх орны хэмжээг нэмэх замаар шүүлтийн коэффициентийг нэмэгдүүлж болох бөгөөд орны их утганд бага хэмжээтэй бөөмцөр шүүгдэх боломжтой гэдгийг хялбархан харж болно. Утааны доторх бөөмцрийн хэмжээ $0.1 \text{ мкм} < r < 10 \text{ мкм}$ байдаг [8]. Бөөмцрийн хэмжээ энэ мужид байх тохиолдолд шүүлтийн коэффициент ямар байхыг Зураг 4-т үзүүлэв.

Шүүлтийн коэффициент хийн хурд ба дрейфийн хурдны харьцаанаас хэрхэн хамаарахыг Зураг 5-д үзүүлэв. Хийн урсгалын

хурдыг багасгаж дрейфийн хурдыг нэмэгдүүлэх замаар шүүлтийн коэффициентийг нэмэгдүүлэх боломжтой юм. Хийн хурдыг бууруулахын тулд шүүлтүүрийн байрлах хэсэгт хоолойн диаметрийг нэмэгдүүлэх нь хамгийн тохиромжтой зам юм. Тасралтгүйн тэгшитгэл ёсоор яндангийн S огтлолтой хэсгээр v хурдтай хөдөлж буй хий хоолойн S' огтлолтой хэсэгт $v' = \left(\frac{S}{S'}\right) v$ хурдтай хөдөлнө. Ийм учраас шүүлтүүр байрлах хэсгийн диаметрийг ихэсгэснээр хийн хурдыг багасгаж болно.

Ингэснээр хийн хурдыг бууруулаад зогсохгүй өргөн хэсэгт байрлах шүүгч үүрүүдийн тоог нэмэгдүүлэх боломжтой болдог. Шүүлтүүр олон үүртэй тохиолдолд шүүлтийн коэффициентийг үүр бүрийн шүүлтийн коэффициентийн арифметик дундаж

$$\eta = \frac{1}{n} \sum_i \eta_i \text{--аар олно.}$$

Эцэст нь өгөгдсөн утгатай цахилгаан шүүлтүүрийг хийхийн тулд энэ өгүүлэлд дурдсан хүчин зүйлүүдийг тооцон түүний хэлбэр хэмжээг бүрэн тодорхойлж болно.

-
- [1] K. Parker, "Electrical operation of electrostatic precipitators", The institution of engineering and technology, (2007).
 - [2] В. С. Швыдкий, М. Г. Ладыгичев, "Справочник: Очистка газов" Теплоэнергетик, Москва, (2002).
 - [3] В. Н. Ужов "Очистка промышленных газов электрофильтрами", Издательство Химия, Москва, (1967).
 - [4] В. И. Левитов, И. К. Решидов и др. "Дымовые электрофильтры", Издательство Энергия, (1980).
 - [5] K. Yan, "Electrostatic precipitation 11th International Conference on Electrostatic Precipitation", Hangzhou, (2008).
 - [6] H. J. White Ind. Engineering Chem, 47, 932, (1955).
 - [7] V. Thonglek, T. Kiatsiriroat, J. Eng. Technol. Sci., 46, 271, (2014).
 - [8] M. W. Mcelroy, R. C. Carr and et. al. Science. 215, 4528, 13, (1982).

NaFe(W_{0.75}Mo_{0.25}O₄)₂ ба NaFe(W_{0.5}Mo_{0.5}O₄)₂ Нэгдлүүдийн Кристалл Бүтцийн Судалгаа

Л.Ням-Очир^{1,*}, О.Гэрэлмаа¹, Н.Төвжаргал¹, Р.Галбадрах¹, Б.Энхсаруул²

¹Физикийн тэнхим, МУИС-ШУС

²Химийн тэнхим, МУИС-ШУС

Хатуу биеийн урвалын аргаар NaFe(W_{0.75}Mo_{0.25}O₄)₂ ба NaFe(W_{0.5}Mo_{0.5}O₄)₂ нэгдлүүдийн кристаллыг гарган авах туршилтыг урвалын температур, хугацаа, орчны өөр өөр нөхцөлд гүйцэтгэв. Дээжүүдийг нунтгийн рентген дифракцын аргаар судалж, кристалл нэгдлүүдийг тодорхойлсон ба бүтцийн параметруудийг тодорхойлохдоо Ритвельдийн аргаар тооцоо хийв. NaFe(W_{0.75}Mo_{0.25}O₄)₂ кристаллын эгэл тор нь моноклин сингоний P2/c (13) огторгуйн групптэй, торын параметрууд нь $a=9.908(2)\text{\AA}$, $b=5.743(1)\text{\AA}$, $c=4.963(1)\text{\AA}$, $\beta=90.632(1)^\circ$ байсан бол NaFe(W_{0.5}Mo_{0.5}O₄)₂ кристаллын хувьд $a=9.904(1)\text{\AA}$, $b=5.746(1)\text{\AA}$, $c=4.955(1)\text{\AA}$, $\beta=90.574(1)^\circ$ байв.

PACS numbers: 61.05.cp, 61.05.cf

I. ОРШИЛ

Давхар вольфрамит NaFe(WO₄)₂ кристаллын соронзон бүтцийн судалгаагаар нам температурт соронзон харилцан үйлчлэлийн дүнд эгэл торын a тэнхлэг дагуу $10\text{\AA}$ орчим зайд Fe атомын ионууд харилцан эсрэг байрласан үр дүн илэрсэн [1]. Мөн NaFe(MoO₄)₂ кристаллын соронзон бүтцийг судалсан судалгаанд спинүүдийн нам температур дахь чиглэлийг тогтоожээ [2]. Эдгээр судалгаануудыг харьцуулахад NaFe(WO₄)₂ ба NaFe(MoO₄)₂ нэгдлүүдийн кристалл эгэл тор нь өөр өөр симметрийн огторгуйн групптэй, өөр өөр торын тогтмолуудтай байгаа бөгөөд соронзон бүтцийн эгэл торууд нь мөн өөр хэмжээстэй байгаа юм [1-4]. W болон Mo атомуудын ионы радиус кристалл бүтцийн эгэл торын хэмжээсүүдэд нөлөөлөх асуудал болон нам температур дахь Fe³⁺ ион хоорондын торын a тэнхлэг дагуух соронзон харилцан үйлчлэл нь эдгээр атомуудаар хэрхэн дамжиж, NaFe(WO₄)₂ ба NaFe(MoO₄)₂ нэгдлүүдийн соронзон бүтэц нь ялгаатай байгааг тодруулах зэрэг асуудлуудын үүднээс NaFe(W_xMo_{1-x}O₄)₂ нэгдлийн кристалл бүтцийн судалгаа нь ач холбогдолтой юм. Иймээс тус ажилд NaFe(W_xMo_{1-x}O₄)₂ нэгдлийн кристаллыг $x=0.75$; 0.25 утгуудад хатуу биеийн урвалын аргаар гарган авах зорилго тавьж ажиллалаа.

II. ТУРШИЛТ

Хатуу биеийн урвалын аргаар NaFe(W_xMo_{1-x}O₄)₂ нэгдлийн кристаллыг $x=0.75$; 0.25 утгуудад гарган авахын тулд Na₂MoO₄·2H₂O, MoO₃, WO₃, Fe₂O₃ нэгдлүүдийг тодорхой харьцаагаар жигнэж, шингэн ацетонд соронзон холигчоор 4 цагийн хугацаатайгаар холив. Үүний дараагаар хатааж, шахсан бэлдэцийг агаарт болон агаарыг соруулсан кварц хоолойд

байрлуулж, 550°C-ээс 900°C хүртэлх температурыудад 12-24 цагийн хугацаатайгаар урвал явуулж NaFe(W_{0.75}Mo_{0.25}O₄)₂ ба NaFe(W_{0.5}Mo_{0.5}O₄)₂ нэгдлүүдийн кристаллыг гаргаж авах тохиромжтой нөхцлийг тодорхойлох туршилтуудыг явуулсан. Туршилтуудыг явуулсны дараагаар дээжүүдийг нунтгийн рентген дифрактометр PW1800 төхөөрөмжөөр Cu анодын Ka цацрагаар, STOE Stadi P дифрактометрт Mo анодын Ka цацрагаар тус бүр Брэггийн 5°-60° өнцгийн мужид хэмжиж, хэмжилтийн дүнд кристалл фазын чанарын анализ хийсэн ба торын параметруудийг тодорхойлохдоо Ритвельдийн аргаар FullProf программд [5] тооцоо хийсэн.

III. РЕНТГЕН ДИФРАКЦЫН ХЭМЖИЛТ, ТООЦОО

NaFe(W_{0.5}Mo_{0.5}O₄)₂ нэгдлийн бэлдэцүүдийг өөр өөр температурт 12-24 цагийн хугацаатай тавьж урвал явуулсны дараах нунтгийн рентген дифракцын хэмжилтийг Зур. 1-д үзүүлээ. Дифрактограммд хийсэн кристалл фазын чанарын анализын дүнд Fe₂O₃, Na₂W₂O₇, NaFe(MoO₄)₂ зэрэг нэгдлүүд илэрч байсан бөгөөд 600°C температурт урвал явуулсан дээжид шинээр NaFe(W_{0.5}Mo_{0.5}O₄)₂ кристалл дангаар үүссэн үр дүн гарав. NaFe(W_{0.5}Mo_{0.5}O₄)₂ нэгдлийг тооцохдоо NaFe(WO₄)₂ бүтцийг анхны загвар болгон авав.

NaFe(W_{0.75}Mo_{0.25}O₄)₂ нэгдлийн бэлдэцүүдэд мөн урвал явуулсны дараа хийсэн нунтгийн рентген дифракцын хэмжилтүүдэд кристалл фазын чанарын анализ хийхэд 800°C температурт явуулсан урвалын дээж хамгийн сайн үр дүнг үзүүлсэн. Иймд уг хэмжилтийг сонгон авч Ритвельдийн аргаар бүтцийн параметруудийг тооцоолохдоо NaFe(WO₄)₂ бүтцийн өгөгдлийг анхны загвар болгон авав. NaFe(W_xMo_{1-x}O₄)₂ цувааны нөгөө зах болох

*Electronic address: nyam_ochir@yahoo.com

$\text{NaFe}(\text{MoO}_4)_2$ бүтцийн өгөгдлийг мөн анхны загварт ашиглаж туршсан бөгөөд эгэл торын өөр хэмжээсээс шалтгаалж огт тохирохгүй байсан болно. Тооцооны үр дүн буюу дифрактограммын цэг бүрд загвараас тооцсон утга болон хэмжилтийн утгуудыг харьцуулсан үр дүнг Зур.2-т үзүүлээ. Онол болон туршлагын зөрүүг хамгийн бага байлгах хувьсагчуудын утгыг олох уг тооцооны дүнд эгэл торын параметруудийг $a=9.901(2)\text{\AA}$, $b=5.741(1)\text{\AA}$, $c=4.960(1)\text{\AA}$, $\beta=90.632(1)^\circ$ утгатайгаар тодорхойлсон бөгөөд симметрийн хувьд моноклин сингоний $P2_1/c$ (13) огторгуйн групп тус бүтцэд тохиров. Ритвельдийн аргаар хийсэн тооцоонд 30 хүртэлх параметрийн утгыг хувьсгаж минимальчлах тооцоог хийсэн ба эцсийн үр дүнг гарган авахад $R_F=4.9$ байв.

Ритвельдийн аргаар гарган авсан кристалл бүтцүүдийн эгэл тор дахь атомын байрлалуудыг тооцоолсон үр дүнг Хүс.1-д нэгтгэв. Эдгээр үр дүнгүүдээс үзэхэд $\text{NaFe}(\text{W}_{0.75}\text{Mo}_{0.25}\text{O}_4)_2$ ба $\text{NaFe}(\text{W}_{0.5}\text{Mo}_{0.5}\text{O}_4)_2$ кристаллууд нь бүтцийн хувьд тун ойролцоо байгаа бөгөөд харгалзах параметруудийн хувьд 1% болон түүнээс бага зөрүүтэйг тооцоо харуулав.

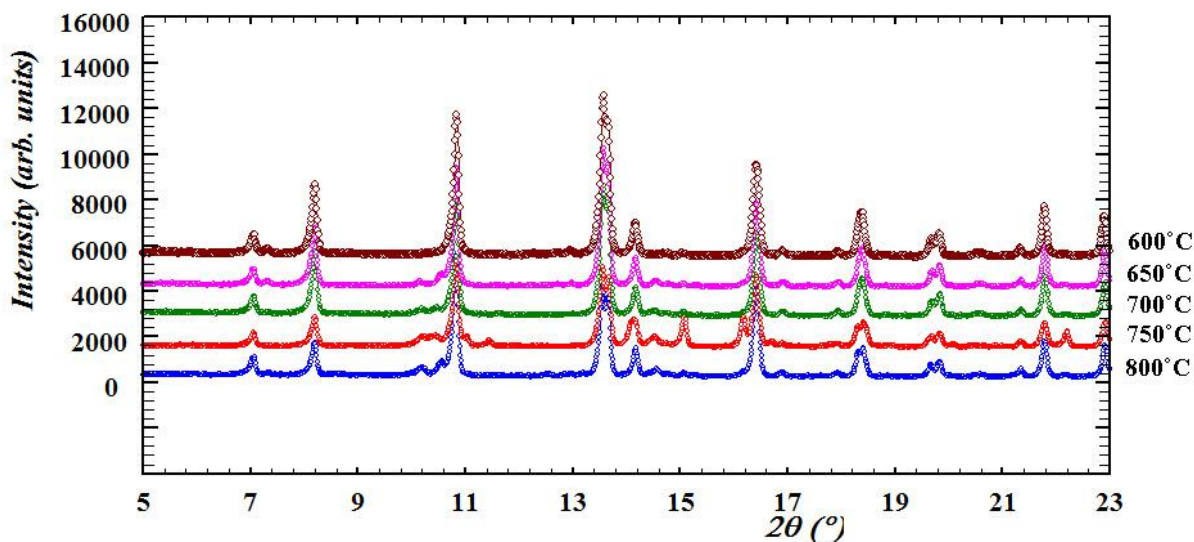
IV. ДҮГНЭЛТ, ҮР ДҮН

Хатуу биеийн урвалын аргаар $\text{NaFe}(\text{W}_{0.75}\text{Mo}_{0.25}\text{O}_4)_2$ ба $\text{NaFe}(\text{W}_{0.5}\text{Mo}_{0.5}\text{O}_4)_2$ нэгдлүүдийн кристаллыг гарган авах

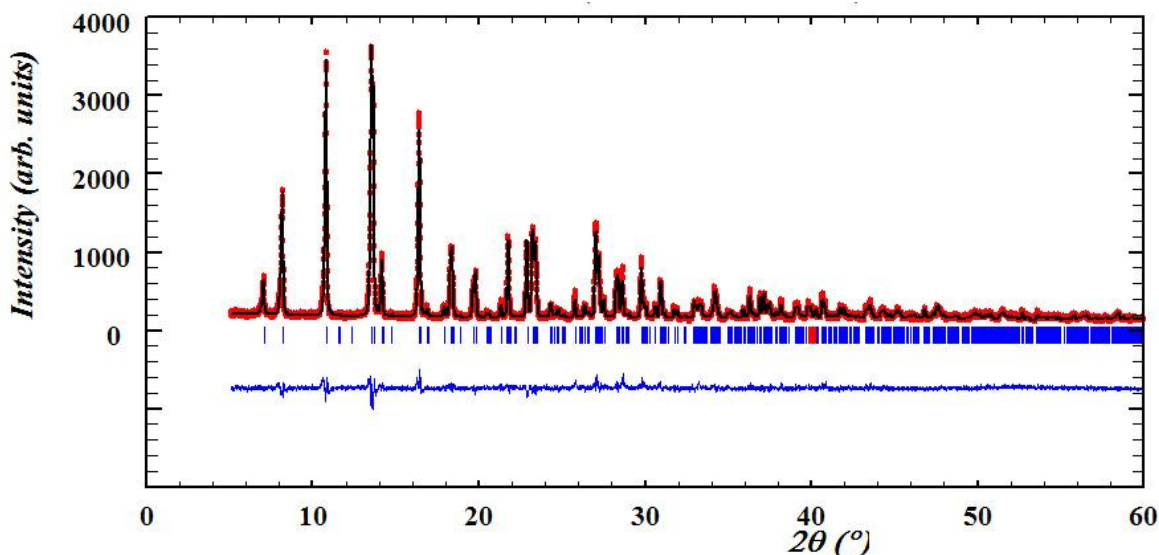
туршилтыг 550°C -ээс 900°C хүртэлх температурыудад 12-24 цагийн хугацаатайгаар хийсэн үр дүнгүүдээс үзэхэд $\text{NaFe}(\text{W}_{0.75}\text{Mo}_{0.25}\text{O}_4)_2$ кристаллд урвалын 800°C , $\text{NaFe}(\text{W}_{0.5}\text{Mo}_{0.5}\text{O}_4)_2$ кристаллд урвалын 600°C температурыуд тохиромжтой байв. Дээжид агуулагдах W болон Мо-ийн харьцаа бага хэмжээгээр зөрүүтэй хэдий ч кристаллыг гарган авах урвалын температур нь харьцангуй их, 200°C -ийн ялгаатай байна.

Урвал явуулан гарган авсан дээжид нунтгийн рентген дифракцын аргаар кристалл фазын чанарын анализ хийж дээжийн цэвэр байдлыг шалгасан бөгөөд шинэ бүтцүүдийн хувьд $\text{NaFe}(\text{WO}_4)_2$ бүтцийг анхны загвар болгон авч үзлээ. Уг загварыг ашиглан Ритвельдийн аргаар дифрактограммтай харьцуулан тооцох замаар $\text{NaFe}(\text{W}_{0.75}\text{Mo}_{0.25}\text{O}_4)_2$ ба $\text{NaFe}(\text{W}_{0.5}\text{Mo}_{0.5}\text{O}_4)_2$ кристаллуудын бүтцийн параметруудийг тодорхойлж Хүс.1-д нэгтгэв.

Тус тооцооноос үзэхэд туршилтаар гарган авсан кристаллуудын бүтцийн параметрууд нь хоорондоо 1% болон түүнээс бага зөрүүтэй ба дээжид тухайн кристалл дангаараа агуулагдаж байгаа үр дүн гарч байна. Иймээс цаашид $\text{NaFe}(\text{W}_x\text{Mo}_{1-x}\text{O}_4)_2$ нэгдлийн соронзон бүтцэд Мо болон W атомуудын үзүүлэх нөлөөг судлах дараагийн судалгаанд тус ажлаар тодорхойлсон аргачлалаар дээжийг бэлтгэж, судалгаа явуулах бололцоотой гэж дүгнэж байна.



Зур.1. $\text{NaFe}(\text{W}_{0.5}\text{Mo}_{0.5}\text{O}_4)_2$ нэгдлийн бэлдэцүүдийг зурагт заасан температурыудад урвал явуулсны дараах дифрактограммуудын хэсэг.



Зур.2. $\text{NaFe}(\text{W}_{0.75}\text{Mo}_{0.25}\text{O}_4)_2$ кристалл бүтцийг $\text{NaFe}(\text{WO}_4)_2$ бүтцийн загвараас Ритвельдийн аргаар тооцсон тооцоо болон туршилтын өгөгдлийн харьцуулалт. Хар шугамаар тооцооны үр дүн, улаан цэгүүдээр хэмжилтийн өгөгдлийг дүрслэв. ($R_F=4.9$)

Хүснэгт.1. Дифрактограммаас тооцсон $\text{NaFe}(\text{W}_{0.75}\text{Mo}_{0.25}\text{O}_4)_2$ ба $\text{NaFe}(\text{W}_{0.5}\text{Mo}_{0.5}\text{O}_4)_2$ кристалл бүтцийн параметрууд.

	$\text{NaFe}(\text{W}_{0.75}\text{Mo}_{0.25}\text{O}_4)_2$ $a=9.901(2)\text{\AA}$, $b=5.741(1)\text{\AA}$, $c=4.960(1)\text{\AA}$, $\beta=90.632(1)^\circ$				$\text{NaFe}(\text{W}_{0.5}\text{Mo}_{0.5}\text{O}_4)_2$ $a=9.904(1)\text{\AA}$ $b=5.746(1)\text{\AA}$ $c=4.955(1)\text{\AA}$ $\beta=90.574(1)^\circ$			
	x/a	y/b	z/c	Occ	x/a	y/b	z/c	Occ
W	0.237(1)	0.184(2)	0.257(1)	0.75	0.238(1)	0.184(1)	0.258(1)	0.5
Mo	0.237(1)	0.184(2)	0.257(1)	0.25	0.238(1)	0.184(1)	0.258(1)	0.5
Fe	0	0.671(1)	0.25	0.5	0	0.675(1)	0.25	0.5
Na	0.5	0.693(2)	0.25	0.5	0.5	0.687(1)	0.25	0.5
O-1	0.092(1)	0.631(2)	0.625(2)	1	0.097(1)	0.637(1)	0.609(1)	1
O-2	0.372(2)	0.393(1)	0.380(1)	1	0.358(1)	0.387(1)	0.388(2)	1
O-3	0.323(3)	0.093(1)	0.938(1)	1	0.326(2)	0.085(1)	0.951(1)	1
O-4	0.105(1)	0.106(2)	0.572(3)	1	0.124(1)	0.095(1)	0.570(1)	1

- [1] L. Nyam-Ochir, H. Ehrenberg, A. Buchsteiner, A. Senyshyn, H. Fuess, and D. Sangaa, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, **320**, 3251 (2008).
- [2] E. Muessig, K. G. Bramnik, and H. Ehrenberg, Acta Cryst. **B 59**, 611. (2003).
- [3] P. V. Klevtsov, and R. F. Klevtsova, J. Solid State Chem. **2**, 278 (1970).
- [4] R. F. Klevtsova, and N. V. Belov, Soviet Physics-Crystallography **15**, 32 (1970).
- [5] T. Roisnel, and J. Rodriguez-Carvajal, Mater. Sci. Forum, 378-381, 118 (2001)

Альфа Төмрийн Уян Харимхайн Тогтмолуудыг Фононы Спектрээс Тооцоолох нь

А. Дулмаа*, Н. Цогбадрах, Р. Галбадрах
МУИС, ШУС, Физикийн тэнхим

Борн–вон–Карманы онолоор эзлэхүүн төвлөсөн шоо (ЭТШ) тогтоцтой α -Fe монокристаллын фононы спектрын $[100]L$, $[100]T$, $[110]L$ ба $[111]T$ чиглэлийн дагуу фиттинг хийж уян харимхайн тогтмолуудыг тооцоолох боломжтой болохыг харуулав.

PACS numbers: 89.30.ag, 91.65.Pj, 91.65.Qr, 42.65.Dr

I. УДИРТГАЛ

Кристалл дээрх бөөмсийн (нейтрон, фотон) сарнилын үзэгдлүүд, кристалл доторх дууны долгионы тархалт, соронзон эрэмбэлэлт, харимхайн энергийн тооцоолол зэрэгт уян харимхайн C_{ij} тогтмолууд ач холбогдолтой байдаг [1]. Уян харимхайн тогтмолуудыг тодорхойлоход хэт авианы аргыг хэрэглэдэг боловч уг аргыг зөвхөн монокристалл дээжид хэрэглэж харимхайн тогтмолуудын утгыг иж бүрэн тодорхойлох боломжтой. Жишээлбэл, шоо эгэл үүртэй кристаллд C_{11} , C_{12} , C_{44} гурван тогтмол ач холбогдолтой байдаг бол эдгээрээс зөвхөн хоёрыг нь поликристалл дээжид хэт авианы аргаар тодорхойлох боломжтой байдаг. Уян харимхайн тогтмолуудыг монокристалл дээрх нейтроны болон рентген цацрагийн харимхай бус сарнилын судалгаагаар буюу фононы спектрээс дам тодорхойлж болдог. Үүнд Борн – вон - Карманы онолыг [2] түгээмэл хэрэглэдэг ба энэ нь кристалл торын динамикийн судалгааны чухал хэрэгсэл юм.

Энэ өгүүллийн зорилго нь эзлэхүүн төвлөсөн шоо (ЭТШ) тогтоц бүхий α -Fe кристаллын C_{11} , C_{12} , C_{44} уян харимхайн тогтмолуудыг фононы спектрээс нил орчны дөхөлтийн аргаар тооцоолоход орших бөгөөд үр дүнг хэт авианы аргаар тодорхойлсон харгалзах утгуудтай харьцуулахад оршино. α - Fe монокристаллын фононы спектрийг [3] бүтээлд нейтроны харимхай бус сарнилын аргаар хэмжиж Борн - вон - Карманы онолыг хэрэглэн эхний таван хөрш атомын хүчний тогтмолуудыг оролцуулан фиттинг хийж фононы төлвийн нягтыг тооцоолсон байдаг. Хүчний тогтмолуудын утгуудыг ашиглан [4,5] бүтээлийн аргачлалуудыг хэрэглэн C_{11} , C_{12} , C_{44} уян харимхайн тогтмолуудыг тооцоолох боломжийг [3] бүтээлийн зохиогчид ашиглаагүй байна. Орчин үед торын динамикийн судалгаанд нягтын функционалийн аргуудыг өргөн хэрэглэж байгаа бөгөөд [6]

бүтээлд α ба β - Fe кристалл торын динамикт спиний эрэмбэлэлт болон соронзжилтын нөлөөг илрүүлэх тооцоонд Борн – вон - Карманы онол ба [4] аргачлалыг хэрэглэн уян харимхайн тогтмолуудыг үнэлнэ.

II. ТООЦООНЫ АРГАЧЛАЛ

Борн-вон-Карманы онолын хүрээнд атом хоорондын буцаах хүч нь атомуудын харьцангуй шилжилтээс шугаман хамааралтай гэж тооцдог. Тухайн тэгш хэмийн чиглэл дагуух модын хувьд l дэх атомын (l дэх эгэл үүрийн) хөдөлгөөний тэгшитгэл дараах хэлбэртэй байна:

$$M\ddot{u}_{\alpha l} = -\sum_{l'} \Phi_{\alpha\alpha}(l, l') u_{\alpha l'}. \quad (1)$$

Үүнд $u_{\alpha l}$ нь l дэх атомын тухайн α чиглэл (туйлшралын) дагуух шилжилт, атомын масс M , $\Phi_{\alpha\alpha}(l, l')$ нь l' дэх атом α чиглэлд нэгж зайд шилжихэд l дэх атомд α чиглэлийн дагуу үйлчлэх буцаах хүч юм. Дээрх нийлбэрт $l = l'$ гишүүн ордог тул $\sum_l \Phi_{\alpha\alpha}(l, l') = 0$, учир нь нэгэн төрөл шилжилтэд кристалл тогтвортой байна. (1) тэгшитгэлийн шийд нь гүйгч долгионы хэлбэртэй:

$$u_{\alpha l'} = U_{\alpha} \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_l) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_{ll'} - i\omega t). \quad (2)$$

Үүнд $\mathbf{R}_l$ нь тооллын эхлэлээс l дэх атом хүртэлх байрлалын вектор, $\mathbf{R}_{ll'}$ нь l дэх атомоос l' дэх атом хүртэл татсан вектор байна. (2) -ийг (1) –д орлуулбал

$$M\omega^2 = \sum_{l'} \Phi_{\alpha\alpha}(l, l') \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_{ll'}). \quad (3)$$

Энэ тэгшитгэлийн хэлбэрийг хувиргаж бичвэл

$$M\omega^2 = \sum_{n=1}^N \Phi_n [1 - \cos(naq/2)]. \quad (4)$$

Үүнд a нь торын параметр, $q = |\mathbf{q}|$ ба Φ_n нь $\Phi_{\alpha\alpha}(l, l')$ –үүдийн шугаман комбинац бөгөөд эдгээрийн хувьд $\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_{ll'}$ фаз тогтмол байна. Бид (4) томъёог хэрэглэн [3] бүтээлд $T = 295\text{K}$ температурт хэмжсэн α -Fe фононы спектрт фиттинг хийхэд кристалл торын параметрыг $a = 2.865\text{\AA}$, атомын массыг $M = 55.847$ м.а.н. хэмээн тооцсон. Φ_n

*Electronic address: dulmaa@num.edu.mn

хэмжигдэхүүн нь тухайн атом ба n ширхэг хавтгай алгасч q вектор нормаль байрласан хавтгай (хоёр) хоорондын хүчийг илэрхийлдэг. Нийлбэрт N гишүүн орох ба $n > N$ бол $\Phi_n = 0$. (4) илэрхийллийн дөрвөлжин хаалт доторх ялгаврыг $q \rightarrow 0$ хязгаарт авч үзвэл

$$1 - \cos(naq/2) \approx 1 - \left(1 - \frac{1}{2} \left(\frac{naq}{2}\right)^2\right) = \frac{1}{8} n^2 a^2 q^2.$$

Энэ тохиолдолд (4) тэгшитгэлийн хэлбэр

$$M\omega^2 = \sum_{n=1}^N \frac{1}{8} n^2 a^2 q^2 \Phi_n. \quad (5)$$

[1] номын 4-р бүлэгт тэгш хэмийн [100], [110] ба [111] чиглэл тус бүрийн дагуу тархах тууш ба хөндлөн долгионуудын хурд ба уян харимхайн тогтмолуудын хамаарлын томъёонуудын гаргалгааг хийсэн байдаг. Үүнд [100] чиг дагуу тууш долгионы хурд

$$v_s = \frac{\omega}{q} = \left(\frac{c_{11}}{\rho}\right)^{1/2} \text{ буюу } \rho\omega^2 = c_{11}q^2. \quad (6)$$

ЭТШ тогтоцын хувьд $\rho = 2M/a^3$ учир (5) ба (6)-аас c_{11} тогтмолыг илэрхийлбэл:

$$c_{11} = \frac{1}{2a} \sum_{n=1}^N \frac{n^2}{2} \Phi_n. \quad (7)$$

Иймээс [100] чиг дагуух тууш фононы мөчрийн туршилтын $\omega^2(q)$ хамааралд фиттинг хийж Φ_n хүчний тогтмолуудын утгуудыг олбол (7) томъёогоор уян харимхайн тогтмол c_{11} -ийг тооцоолж болно.

Дээрхийн адилаар [100] чиг дагуух хөндлөн фононы туршилтын $\omega^2(q)$ хамаарлаас c_{44} тогтмолыг тооцоолох томъёо

$$c_{44} = \frac{1}{2a} \sum_{n=1}^N \frac{n^2}{2} \Phi_n. \quad (8)$$

Мөн [110] дагуу хөндлөн ба тууш фононы туршилтын $\omega^2(q)$ хамаарлаас

$$c_{11} + c_{12} + 2c_{44} = \frac{1}{2a} \sum_{n=1}^N \frac{n^2}{2} \Phi_n \quad (\text{тууш } L); \quad (9)$$

$$c_{44} = \frac{1}{4a} \sum_{n=1}^N \frac{n^2}{2} \Phi_n \quad (\text{хөндлөн } T_2); \quad (10)$$

$$c_{11} - c_{12} = \frac{1}{2a} \sum_{n=1}^N \frac{n^2}{2} \Phi_n \quad (\text{хөндлөн } T_1). \quad (11)$$

[111] дагуу хөндлөн ба тууш фононы туршилтын $\omega^2(q)$ хамаарлаас

$$c_{11} + 2c_{12} + 4c_{44} = \frac{1}{2a} \sum_{n=1}^N \frac{n^2}{2} \Phi_n \quad (\text{тууш } L); \quad (12)$$

$$c_{11} - c_{12} + c_{44} = \frac{1}{2a} \sum_{n=1}^N \frac{n^2}{2} \Phi_n \quad (\text{хөндлөн } T); \quad (13)$$

Дээрх (7)-(13) томъёо бүрт Φ_n тогтмолын цуврал утгууд өөр өөр байх ба туршилтын фононы спектрийн мөчир бүрээс фиттинг хийж тодорхойлдог.

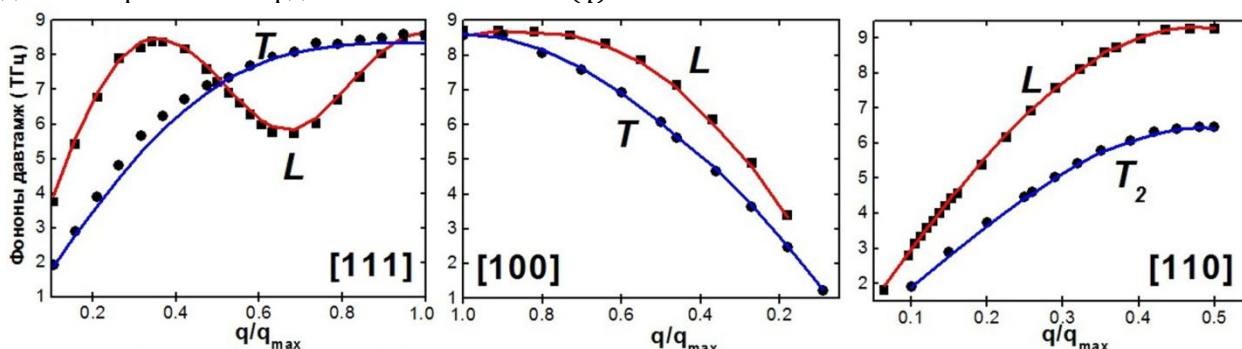
III. ТООЦООНЫ ҮР ДҮН БА ХЭЛЭЛЦҮҮЛЭГ

Бид төмрийн фононы спектрийн тэгш хэмийн [100], [110] ба [111] чиглэл тус бүрийн дагуух $\omega(q)$ хамаарал тус бүрийн фиттингийн хувьд (4) томъёоны нийлбэрт орсон гишүүдийн n тоог харилцан адилгүй авсан бөгөөд тооцоолсон хавтгай хоорондын хүчний Φ_n тогтмолуудыг ашиглан (7) – (13) томъёонуудаар харимхайн тогтмолуудыг тооцоолоход үр дүн нь аль болох туршилтын утгуудтай ойр байхаар сонгосон болно. Жишээлбэл, [100] чиглэлийн дагуух фононы тууш мөчрийн фиттингээр гарсан $\Phi_1 = 138.8$ Н/м, $\Phi_2 = 34.3$ Н/м утгуудыг оролцуулан (7) томъёогоор бодсон $c_{11} = 24.06 \cdot 10^{10}$ Н/м² утга хэт авианы аргын туршилтаар [7]-д 300К температурт хэмжсэн $c_{11} = 23.31 \cdot 10^{10}$ Н/м² үр дүнтэй ойр байна. Иймээс (4) томъёонд зөвхөн эхний хоёр гишүүнийг оролцуулан тохируулгын муруйг байгуулах нь зүйд нийцэх бөгөөд 1-р зураг дээр [111], [100], [110] чиглэл дагуух L мөчрийн туршилтын ба тохируулгын хамаарлуудыг үзүүлэв.

Хүснэгт 1 дээр тэгш хэмийн [100], [110] ба [111] чиглэл тус бүрийн дагуух төмрийн фононы спектрээс тооцоолсон Φ_n тогтмолуудын утгууд ба уян харимхайн тогтмолууд болон тэдгээрийн нийлбэрүүдийн утгуудыг туршилтын [7] үр дүнтэй харьцуулан үзүүлэв. [100] L , [100] T , [110] L ба [111] T чиглэл тус бүрийн дагуух фононы дисперст фиттинг хийхэд тус бүрт нь (4) нийлбэрийн эхний хоёр гишүүн буюу задаргааны эхний хоёр гармоник хангалттай байна. Үүнд (7) - (9) ба (13) томъёонуудад Φ_1 , Φ_2 -ийн харгалзах утгуудыг оролцуулан тооцоолоход нь гарсан уян харимхайн тогтмолуудын утгууд ба тэдгээрийн нийлбэрүүд туршилтын харгалзах утгуудтай ойр болох нь 1-р хүснэгтээс харагдаж байна. Дээрх чиглэлүүдийн дагуух фононы спектрт фиттинг хийхэд зөвхөн хоёр гармоник хангалттай байгааг бид туршилтын чиглэл тус бүрийн дагуух $\omega^2(q)$ хамаарлууд хялбар монотон функцийн хэлбэртэй байгаагаар тайлбарлаж болох юм. Эдгээр чиглэл дагуу тухайн атомд үйлчлэгч хүчийг зэргэлдээх хоёр хавтгайгаар тооцох боломжтойг харуулж байна.

[110] T_1 мөчирт фиттинг хийхэд эхний гурван гармоникийн задаргаа хангалттай байна. [111] L мөчрийг илэрхийлэхэд (4) задаргааны эхний долоон гармоник шаардлагатай байгаа нь $\omega^2(q)$

хамаарлын синусоид хэлбэрээр тайлбарлагдах ба [111] чиглэл дагуу атомууд хамгийн ойр зайтай байрласантай холбоотой байж болох юм.



Зураг 1. α -Fe монокристаллын [111], [100], [110] чиглэл дагуух тууш L ба хөндлөн T мөчир Энд $\blacksquare$ -туршилтын утгууд [3]. L -ийн тохируулсан муруй. T -ийн тохируулсан муруй

Хүснэгт 1. α - Fe монокристаллын фононы спектрээс тооцоолсон хавтгай хоорондын хүчний тогтмолууд ба уян харимхайн тогтмолууд.

Чиглэл	Хүчний тогтмол (Н/м)							Харимхайн тогтмол (10^{10} Н/м ²)	
	Φ_1	Φ_2	Φ_3	Φ_4	Φ_5	Φ_6	Φ_7	Бидний тооцоо	Туршилт [3]
[100] L	138.8	34.3	-	-	-	-	-	$C_{11} = 24.06$	$C_{11} = 23.31$
[100] T	134.0	-0.5	-	-	-	-	-	$C_{44} = 11.53$	$C_{44} = 11.78$
[110] L	-53.9	184.7	-	-	-	-	-	$C_{11} + C_{12} + 2C_{44} = 59.75$	$C_{11} + C_{12} + 2C_{44} = 60.41$
[110] T_2	-62.7	113.8	-13.7	-	-	-	-	$C_{44} = 11.75$	$C_{44} = 11.78$
[111] L	44.3	30.8	91.8	6.3	1.8	-	-0.52	$C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44} = 97.06$	$C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44} = 97.51$
						0.06			
[111] T	127.8	29.0	-	-	-	-	-	$C_{11} - C_{12} + C_{44} = 21.27$	$C_{11} - C_{12} + C_{44} = 21.58$

IV. ДҮГНЭЛТ

Борн–вон–Карманы онолоор ЭТШ тогтоцтой α -Fe монокристаллын фононы спектрт фиттинг хийж уян харимхайн тогтмолуудыг тооцоолох боломжтой байна. Үүнд туршилтын $\omega^2(q)$ хамаарлыг гармоник функцүүдээр задлахад [100] L , [100] T , [110] L ба [111] T дагуух мөчрүүдийг зөвхөн хоёр гишүүнээр задлахад хангалттай бол [111] L мөчрийн хувьд долоон

гишүүн орж байгаа нь уг мөчир атом хоорондын харилцан үйлчлэлийн талаар илүү их мэдээлэл агуулж буйг харуулж байна.

V. ТАЛАРХАЛ

Энэ судалгааг МУИС-ийн өндөр түвшний “Кристалл торын динамик, соронзон бүтэц, оптик шинж чанарууд ба эрэмбэлэлтийн судалгаа” сэдэвт (МУИС - ШУС – 2015 - 09) төслийн хүрээнд гүйцэтгэв.

- [1] C. Kittel, Introduction to Solid State Physics, 4th Edition. USA. (1971).
- [2] M. Born, and K. Huang, Dynamical Theory of Crystal Lattice, Oxford University Press, New York (1954).
- [3] V. J. Minkewitz, G. Shirane, and R. Narans, Phys. Rev. **162**, 528 (1967).

- [4] G. L. Squires, Arkiv Physics, 21 (1963).
- [5] B. N. Brockhouse, T. Arase, G. Gaglioti, K. R. Rao, and A. D. B. Woods, Phys. Rev. **128**, 1099 (1962).
- [6] I. Leonov, A. I. Poletaev, V. I. Anosimov, and D. Vollhardt, Phys. Rev. **B 85**, 020401(R) (2012).

- [7] J. A. Rayne, and B. S. Chandrasekhar, Phys. Rev. **122**, 1714 (2012).

Атомыг Лазерын Пульсээр Өдөөх Магадлалыг Псевдоспектриал Аргаар Тооцоолох

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

¹ШУТИС, ХШУС, Физикийн тэнхим

²МУИС, ШУС, Физикийн тэнхим

Энэхүү ажилд нанометр урттай лазерын богино пульс, атомын харилцан үйлчлэлийг судлаж хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлээр илэрхийлж, Лежандрын псевдоспектриал аргаар шийдсэн. Үндсэн төлөвт байгаа устөрөгчийн атом ба гелийн ионтой хүчтэй лазерын пульсын үйлчлэлээр тодорхой төлөвүүдэд өдөөгдөх магадлалын хугацааны хамааралыг тооцоолж, бусад ажлуудын үр дүнтэй харьцуулан дүн шинжилгээ хийлээ. Өдөөлтийн магадлал нь пульсын урт болон лазерын эрчмээс хамаарах бөгөөд лазерын эрчим өсөхөд магадлал ихсэж, эхний төлөвт үлдэх магадлал багасаж байгаа нь ажиглагдсан. Хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлийг шийдэж эдгээр гаргасан үр дүн нь MADNESS програмын мультивэйллет баазаар [14] бодсон үр дүнтэй тохирч байна.

PACS number : 67.63.Gh, 67.80.Fh, 67.25.dt, 42.60.Rn, 31.55.ee

I. ОРШИЛ

Атом, молекулд явах үзэгдэл хувирал нь $10^{-15} - 10^{-18}$ с эрэмбэтэй буюу асар богино хугацаанд үргэлжилдэг. Иймд атомын өдөөлт, иончлол, болон химийн урвалын өрнөл хувирлын процессын шинж чанарыг лазерын богино пульсээр тандан судлах нь атом молекулын судалгааны шинэ чиглэлийг тодорхойлж байна [1,2]. 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 хөгжиж буй гурван хэмжээст торын арга, бас суурь функцаар задлах аргаар бодож байна. Бааз функцыг сонгохдоо атомын хувийн долгион функц эсвэл Волковын [3] функц болон бусад [4,5] функцыг ашиглан хугацаанаас хамаарсан хоёрдугаар эрэмбийн дифференциал тэгшитгэл гарган авч, уг систем тэгшитгэлийн шийдийг тооцооллын аргаар тодорхойлж байна. Торын аргаар бодохдоо төгсгөлөг ялгавар [6,7] тоон базис [8], төгсгөлөг элемент [9], В сплайныг [10] ашиглан тооцоог хийсэн байна. Эдгээрээс хөндөх онол, хүчтэй орны болон Кулон – Волковын ойролцооллыг түлхүү хэрэглэдэг.

Цөмийн Кулоны орны үйлчлэл нь лазерын орны үйлчлэлээс бага үед өөрөөр хэлбэл лазерын орон нэн эрчимтэй байхад хүчтэй орны ойролцооллыг хэрэглэх боломжтой. Лазерын орон дахь электроны хөдөлгөөнд цөмийн Кулоны орны үзүүлэх нөлөөг Кулон-Волковын функц ашиглан тооцоолж болно. Энэхүү ажилд лазерын богино пульсээр, устөрөгчийн атом ба гелийн ионы өдөөгдөх ба иончлох процессыг хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлээр илэрхийлж, уг тэгшитгэлээ Лежандрын псевдоспектриал аргаар шийдсэн.

II. ПСЕВДОСПЕКТРИАЛ АРГА

Лазерын оронд байгаа атомын электроны хувьд Шредингерийн тэгшитгэлийг бичвэл [11]

$$i \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = (\hat{H}_0 + \hat{V}(\vec{r}, t)) \Psi(\vec{r}, t) \quad (1)$$

$\Psi(\vec{r}, t)$ -атомын электроны долгион функц, $\hat{H}_0$ - атомын гамилтанион, $\hat{V}(\vec{r}, t)$ -лазер атомын харилцан үйлчлэл. Хүчтэй лазерын оронд лазер-атомын харилцан үйлчлэлийг диполийн ойролцооллод уртын тохируулгаар сонгон авбал [12]:

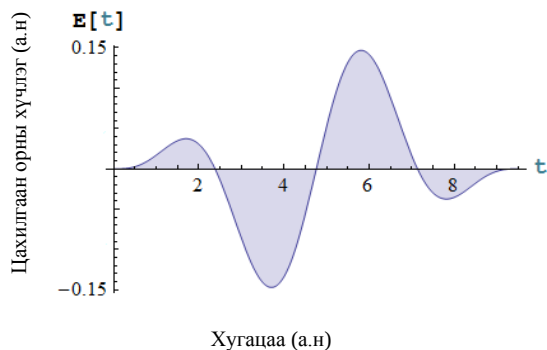
$$\hat{V}(\vec{r}, t) = -\vec{r} \cdot \vec{E}(t) \quad (2)$$

Лазерын цахилгаан орныг синус квадрат хүрээтэйгээр сонгон авлаа [14].

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

E_0 -лазерын цахилгаан орны далайц, τ - пульсийн үргэлжлэх хугацаа, ω -давтамж, хугацааны t эгшинд долгион функц мэдэгдэж байгаа тохиолдолд $t + \Delta t$ эгшин дэх долгион функцийг олбол [13]:

*Electronic address: aldaraa2004@yahoo.com



Зураг 1: Лазерын цахилгаан орны хугацааны хамаарал ($\tau = 9.6 \text{ а.н} = 230 \text{ а.с}$)

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

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

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

Долгион функцыг Лежандрын олон гишүүнтийн нийлбэр байдлаар илэрхийлбэл:

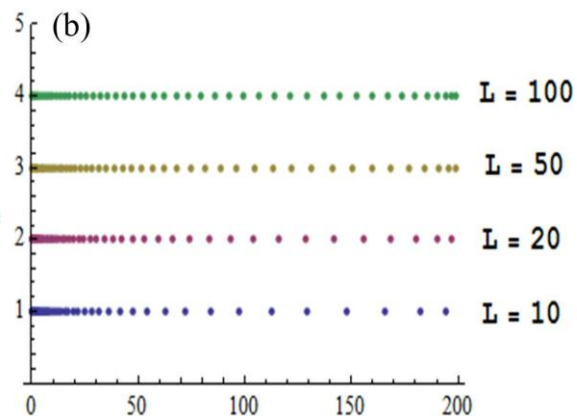
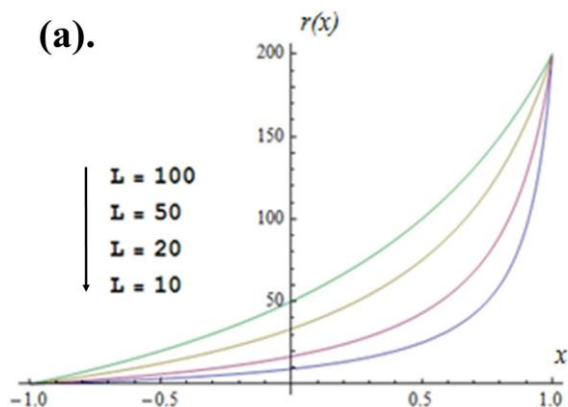
$$\Psi(r_i, \theta_j, t) = \sum_{l=0}^{l_{\max}} g_l(r_i) P_l(\cos \theta_j). \quad (6)$$

P_l -Лежандрын олон гишүүнт, $g_l(r_i)$ -ийг Гаусс- Лежандрын квадратураар олж:

$$g_l(r_i) = \sum_{k=1}^{L+1} w_k P_l(\cos \theta_k) \Psi(r_i, \theta_k, t) \quad (7)$$

r - ийн $(0, r_{\max})$ мужийг x нь $(-1, +1)$ мужид утга авахаар шугаман бус хувиргалт хийе:

$$r = r(x) = L \frac{1+x}{1-x+a} \quad a = \frac{2L}{r_{\max}} \quad (8)$$



Зураг 2: Шугаман бус хувиргалтын функц (а). Функцын хотойлт (б). Зангилаа цэгүүд

Шугаман бус хувиргалтын функцын графикаас үзэхэд (Зураг 2А) L -ийг ихэсгэхэд r -ийн их утга руу зангилаа цэгүүд нягтарч байна. x_i зангилааны утгуудад харгалзах $r_i(x_i)$ утгууд нь L -ээс хамааран хэрхэн тархаж байгааг (Зураг 2В)-д харуулав. Шугаман бус хувиргалт нь r -ийн бага утгуудад олон зангилаа цэг авах боломжийг олгодог. Бөмбөлөг координатын системд атомын гамилтанионыг бичвэл:

$$\hat{H}_l^0 = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{r} + \frac{1}{2} \frac{l(l+1)}{r^2} \quad (9)$$

r -ээс x хувьсагчид шилжвэл:

$$\hat{H}_l^0 = -\frac{1}{2} \frac{1}{r'(x)} \frac{d^2}{dx^2} \frac{1}{r'(x)} + V_l(r(x)), \quad (10)$$

$$V_l(r(x)) = -\frac{1}{r(x)} + \frac{l(l+1)}{2r(x)^2}. \quad (11)$$

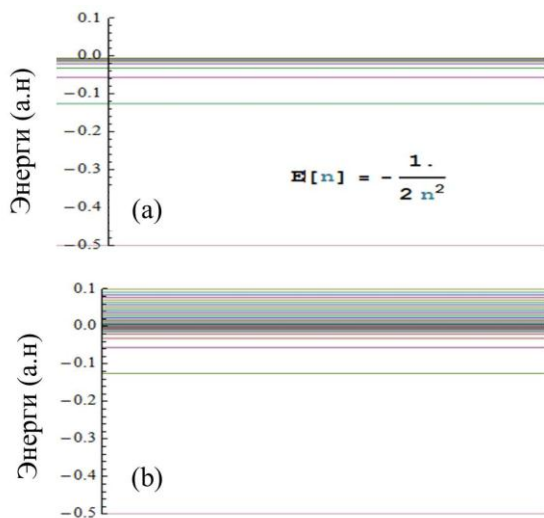
Лежандрын олон гишүүнтийн уламжлалын язгууруудыг олж x координатыг дискретчилвэл H_l^0 -нь матриц хэлбэрт шилжинэ. Лежандрын псевдоспектриал арга нь x координатыг дискретчилж, Лежандрын олон гишүүнтийн x -ээр авсан уламжлал болон интегралыг -ашиглан тодорхойлоход оршино. Атомын Шредингерийн тэгшитгэлийн шийдийг $-1 < x < 1$ мужид Гаусс-Лежандр-Лобаттогийн квадратурын зангилаа цэгүүд дээр тодорхойлж болно. Үүний тулд эдгээр зангилаа цэгүүдийг P_{N+1} буюу Лежандрын $N+1$ эрэмбийн олон гишүүнтийн уламжлалын язгууруудаар бодож олно. Ингэснээр атомын гамилтанионы H_l^0 нь дараах матриц хэлбэрт шилжинэ [13].

$$[H_l^0]_{ij} = (D_2)_{ij} + V_l(x_i) \delta_{ij} \quad (12)$$

$$(D_2)_{ij} = \frac{1}{r'(x_i)} \frac{(N+1)(N+2)}{6(1-x_i^2)} \frac{1}{r'(x_i)}, \quad i = j$$

$$(D_2)_{ij} = \frac{1}{r'(x_i)} \frac{1}{(x_i - x_j)^2} \frac{1}{r'(x_j)}, \quad i \neq j \quad (13)$$

H_0 матрицын хувийн утга $E_k(l)$ псевдоспектр болон хувийн векторыг $X_k(l)$ Математика7.0 програмаар тооцоолов. Тодорхойлогдсон хувийн утгууд нь атомын спектртэй харьцуулахад шууд давхцахгүй боловч ойролцоо спектрийг псевдоспектр үзүүлдэг. Үүнд холбоост төлөвөөс гадна тасралтгүй төлөвүүд ч бас дискрет спектртэй байна.

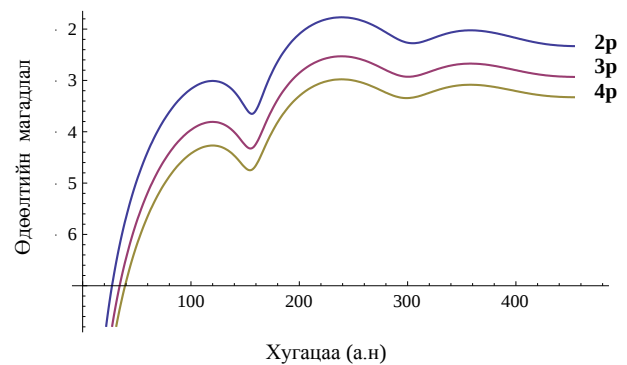


Зураг 3: Устөрөгчийн атомын спектр ба Псевдоспектр (a). Атомын спектр (b). Псевдоспектр

Энэ нь хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлийн шийдийг хялбар илэрхийлэх боломжийг олгодог. Эдгээр спектрүүдийн хувийн векторууд нь бүрэн бааз болох учир хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлийн долгион функцыг энэхүү бааз дээр задлан, хугацааг хуваах аргаар (5) тэгшитгэлийн шийдийг тооцоолно. Энэхүү ажилд атом нэгжийн системийг ашигласан.

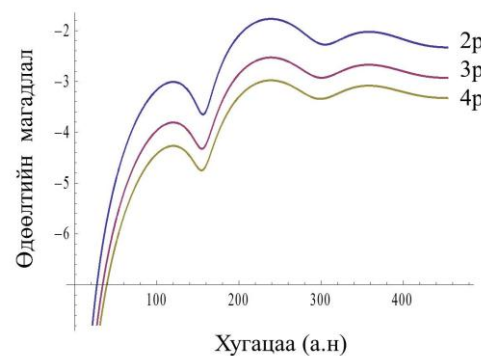
III. ТООЦООЛОЛ БА ХАРЬЦУУЛАЛТ

Үндсэн төлөвт байгаа устөрөгчийн атом ба гелийн ионтой хүчтэй лазерын пульс харилцан үйлчлэхэд атом ба ионы тодорхой төлөвүүдэд өдөөгдөх магадлалын хугацааны хамаарлыг тооцоолж бусад ажлуудтай үр дүнтэй харьцууллаа. Үндсэн төлөвтөө байгаа устөрөгчийн атом дээр үндсэн төлөвт 230 а.с урттай 10^{15} Вт/см² эрчимтэй лазерын пульс тусгавал 2s, 3s, 4s төлөвт өдөөгдөх магадлал 10^{-6} - 10^{-4} эрэмбэтэй байна.

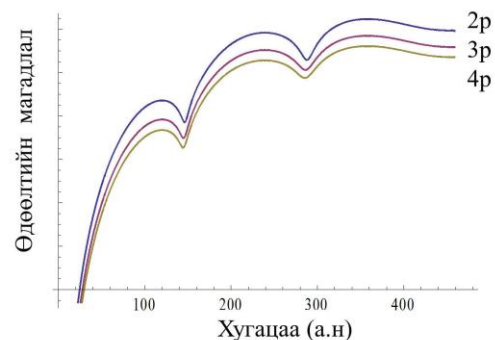


Зураг 4: Устөрөгчийн атомын үндсэн төлөвөөс өдөөгдөх магадлал хугацааны хамаарал (S-S төлөв)

2p, 3p, 4p төлөвт өдөөгдөх магадлал нь 10^{-4} - 10^{-2} эрэмбэтэй бөгөөд үндсэн төлөвөөс өдөөгдөх учир s, d төлөвүүдэд өдөөгдөх магадлал бага байна



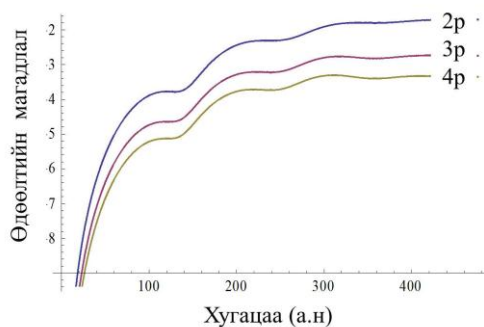
Зураг 5: Устөрөгчийн атомын үндсэн төлөвөөс өдөөгдөх магадлал хугацааны хамаарал (S-P төлөв)



Зураг 6: Гелийн ионы үндсэн төлөвөөс өдөөгдөх магадлал хугацааны хамаарал (S-S төлөв)

Гелийн ионы үндсэн төлөвөөс 2s, 3s, 4s төлөвт өдөөгдөх магадлал нь 10^{-6} - 10^{-4} эрэмбэтэй байна. Мөн гелийн ионы үндсэн төлөвөөс 2p, 3p, 4p төлөвт өдөөгдөх магадлал 10^{-4} - 10^{-2} эрэмбэтэй. Устөрөгчийн атом ба гелийн ионы үндсэн төлөвөөс өдөөгдөх магадлалын тооцоолсон үр дүнг Nicolas Vence, Robert Harrison [14] нарын MADNESS загварчлалаар

тооцоолсон үр дүнтэй харьцуулж 1-р хүснэгтэд харууллаа.



Зураг 7: Гелийн ионы үндсэн төлөвөөс өдөөгдөх магадлал хугацааны хамаарал (S-P төлөв)

IV. ДҮГНЭЛТ

Энэ судалгааны ажилд үндсэн төлөвт байгаа устөрөгчийн атом ба гелийн ионыг хүчтэй

Хүснэгт 1: Өдөөлтийн магадлал (H, He)

	1s	2s	2p	3d	4f	5g	P _{bound}	P _{ion}	
H	0.976	2.09x10 ⁻⁵	5.03x10 ⁻³	1.17x10 ⁻⁶	2.4x10 ⁻⁷	10 ⁻¹³	0.0076	0.016	[14]
H	0.978	1.78x10⁻⁵	4.63x10⁻³	0.98x10⁻⁶	5.74x10⁻¹¹	1.11x10⁻¹⁵	0.006998	0.01469	Бидний тооцоо
He ⁺	0.975	1.00x10 ⁻⁴	2.14x10 ⁻²	6.72x10 ⁻⁵	2.1x10 ⁻⁸	10 ⁻¹²	0.025	8.5x10 ⁻⁴	[14]
He⁺	0.976	0.84x10⁻⁴	1.96x10⁻²	5.67x10⁻⁵	1.71x10⁻⁸	2.26x10⁻¹²	0.0225	7.3x10⁻⁴	Бидний тооцоо

- | | |
|---|---|
| <p>[1] 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>[2] C. D. Lin, T. Morishita, R. Lucchese, and A. T. Le, Z. Chen, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 43, 122001 (2010).</p> <p>[3] L. A. Collins, and A. L. Merts, J. Opt. Soc. Am. B 7, 647 (1990).</p> <p>[4] Xiaoxin Zhou, and C.D.Lin, Phys. Rev. Lett. 64, 862 (1990).</p> <p>[5] Q. Su, J. H. Eberly, and J. Javanainen, Phys. Rev. Lett. 64, 862 (1990).</p> <p>[6] V. C. Reed, K. Burnett, Phys. Rev. A 42, 3152 (1990).</p> <p>[7] J. H. Eberly, J. Javanainen and Q. Su, J. Opt. Soc. Am. B 6, 1289 (1989).</p> <p>[8] B. I. Schneider, Phys. Rev. A 55, 3417 (1997).</p> <p>[9] M. Gavril, and J. Shertzer, Phys. Rev. A 53, 3431 (1996).</p> <p>[10] Jian Zhang, and Lambropoulos, Phys. Rev. Lett. 77, 2186 (1996).</p> | <p>[11] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Физика III, Москва (1974).</p> <p>[12] Frank Grossman, "Theoretical Femtosecond Physics" (2008).</p> <p>[13] Xiao-Min, Tong Shih IChu, Chem. Phys. 217, 119 (1997).</p> <p>[14] Nicolas Vence, Robert Harrison Phys. Rev. A 85, 033403 (2012).</p> <p>[15] Ч. Алдармаа, Л. Хэнмэдэх, О. Лхагва, МУИС, ФИЗИК сэтгүүл 397(18), 96 (2013).</p> <p>[16] R. Guichard, H. Bachau, E. Cormier, R. Gayet and V. D. Rodriguez, Phys. Scr. 76, 397 (2007).</p> <p>[17] Ch. Aldarmaa, L. Khenmedekh, O. Lkhagva, American Institute of Physics (AIP) Proceedings, 1589. 239 (2014).</p> |
|---|---|

лазерын пульс үйлчлэхэд тэдгээрийг өдөөгдсөн төлөвүүдэд шилжих магадлалын хугацааны хамааралыг тооцоолж бусад ажлуудын үр дүнтэй харьцуулан дүн шинжилгээ хийсэн. Өдөөлтийн магадлал нь пульсын урт болон лазерын эрчимээс хамаарах бөгөөд лазерын эрчим өсөхөд магадлал ихсэж, эхний төлөвт үлдэх магадлал багасаж ажиглагдлаа. Хүчтэй орны ойролцоолол, олон сувгийн хүчтэй холбоосын арга, Кулон-Волковын ойролцооллуудтай [15-17] харьцуулахад бодолтын нарийвчлал сайжирч гаргасан үр дүн нь MADNESS (Multiresolution ADaptive Numerical Environment for Scientific Simulation) мультивэйвлет баазаар [14] бодсон үр дүнтэй тохирч байна (Хүснэгт 1.1). Цаашид бодолтын нарийвчлалыг сайжруулан атомын иончлолыг тооцоолох зорилт тавьж байна.

Квант Шингэний Динамик Ойролцооллоор Гелийн Атомын Үндсэн Төлөвийг Тооцоолох нь

Д. Наранчимэг^{1,*}, О. Сүх¹, Л. Хэнмэдэх¹, Н. Цогбадрах²

¹ШУТИС, ХШУС, Физикийн тэнхим

²МУИС, ШУС, Физикийн тэнхим.

Олон электронт системийн электрон бүтцийн тооцооллыг квант шингэний динамик ойролцооллоор хийх нь илүү хялбар байдаг. Квант шингэний динамик болон нягтын функционалийн онолыг хослуулан хугацаанаас хамаарсан шугаман бус квант шингэний динамикийн нэг тэгшитгэлийг гаргаж авсан. Энэ тэгшитгэлийг цааш нь 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.

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

I. ОРШИЛ

Нягтын функциональ онол (НФО) нь хатуу бие, молекул, атомын электроны бүтцийн тооцооллыг хийдэг квант механикийн арга бөгөөд Хонберг-Кон [1], Кон-Шэмийн [2] ажлууд дээр үндэслэгддэг. Кон-Шэмийн тэгшитгэлүүд нь 3 хэмжээст огторгуйд Хартри-Фокийн тэгшитгэлүүд олон биеийн харилцан үйлчлэл нь локаль солилцоо-корреляцийн потенциалаар илэрхийлэгддэг. Энэ ойролцоололд электроны нягт нь N ширхэг орбиталд задрах учраас тэгшитгэлийн систем үүсгэнэ. Олон биеийн системийн бодлогыг Томас-Фермийн хугацаанаас [5,6] хамаарсан загвар дээр Блох [4] анх бодсон. Энэ загвар нь квант шингэний динамик (КШД)-ын анхны загвар төдийгүй электроны системийг чөлөөт электроны хий гэж үзсэн, олон электронтой системийн электроны статик нягтыг нэг л тэгшитгэлээр боддог. НФО ба КШД-ын томъёолол нь 1980-аад оноос хөгжсөн [7-9]. Үүнд КШД ба НФО-ыг хослуулан хугацаанаас хамаарсан электроны нягтын нэг тэгшитгэлийг гаргах нь сонирхол татаж байсан [10]. КШД-ын үндсэн хоёр тэгшитгэл нь 3 хэмжээст Эйлерын хэлбэрийн 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. Энэ тэгшитгэл нь том системийг бодоход сайн тохирдог. КШД-НФО-ЕШБШТ-ийн ойролцооллыг үндсэн

төлөвийн тооцоо [12,13] ба динамик процесст [14-16] хэрэглэсэн байдаг.

Энэ өгүүлэлд КШД-НФО тэгшитгэлийг бөмбөлөг координатад ерөнхий псевдоспектрийн аргыг (ЕПС) [11,17] 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 дифференциаль тэгшитгэлд шилжүүлсэн.

II. СУДАЛГААНЫ АРГА ЗҮЙ

Квант механикийн КШД томъёололыг Маделунг [18], Де-Бройл [19], Бом [20] 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 үзсэн. КШД-ын үндсэн хоёр тэгшитгэл нь электроны нягт $\rho(\vec{r}, t)$, гүйдлийн нягт $j(\vec{r}, t)$ хэмжигдэхүүнүүдээс хамаардаг [7,10,12-16].

Урсгал тасралтгүйн тэгшитгэл:

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

Эйлерийн хэлбэрийн тэгшитгэл:

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

*Electronic address: naranchimeg@must.edu.mn

Энд $\vec{j}(\vec{r}, t) = \rho \nabla \chi(\vec{r}, t)$, $\chi(\vec{r}, t)$ – хурдны потенциал, E_{ee} – электронуудын түлхэлцлийн энерги, $G[\rho]$ – нягтын универсаль функц, $v(\vec{r}, t)$ – электрон-цөмийн таталцлын болон гадны орны потенциалуудын нийлбэр.

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

Энд $E_{xc}[\rho]$ – солилцоо ба корреляцийн функциональ, T_w – Вайцзеккерийн кинетик энерги [3], Вайцзеккерийн кинетик энерги нь нэг ба хоёр электроной Хартри-Фокийн системд маш сайн тохирдог учраас T_{corr} энерги нь гелийн тохиолдолд тэгтэй тэнцүү гэж үзнэ.

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

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 авна.

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

$\tau = -it$ 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 [12,13].

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 системүүдэд энергийн функционалийн локаль хэлбэрүүдийг сонгож авдаг [21].

$$E_x = -\frac{1}{4} \iint \frac{\rho(\vec{r}, t) \rho(\vec{r}', t)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r} d\vec{r}' \quad (8)$$

$$\frac{\delta E_x}{\delta \rho} = -\frac{1}{2} \int \frac{\rho(\vec{r}', t)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}' \quad (9)$$

Локаль параметрчлэгдсэн Вигнерийн хэлбэрийн корреляцийн энергийн функционалийг [23] нийт системд хэрэглэнэ. a, b, c – параметрууд нь бүх системд тохирдог. Энэ функционалийг хүчтэй лазер атомын харилцан үйлчлэл, молекул систем, атомын үндсэн ба өдөөгдсөн төлөвүүдэд бүгдэд нь хэрэглэж болдог [24, 25].

$$E_c = -\int \frac{\rho}{a + b \cdot \rho^{-1/3}} d\vec{r} \quad (10)$$

$$\frac{\delta E_c}{\delta \rho} = -\frac{a + c \cdot \rho^{-1/3}}{(a + b \cdot \rho^{-1/3})^2} \quad (11)$$

Энд: $a = 9.81$, $b = 21.437$, $c = 28.582667$

Диффузийн тэгшитгэлийн тоон шийд: (ЕПС арга)

(6) тэгшитгэлийг

$$\hat{L}R(\vec{r}, t) = -\frac{\partial R(\vec{r}, t)}{\partial t} = [\hat{H}_0(\vec{r}) + \hat{V}(\vec{r}, t)]R(\vec{r}, t) \quad (12)$$

гэж дахин бичнэ.

Энэ тэгшитгэл нь хуурмаг хугацаатай тэгшитгэл юм.

$$\hat{H}_0(\vec{r}) = -\frac{1}{2} \nabla^2 + v_{\phi}([\rho]; \vec{r}, 0) \quad (13)$$

$$\hat{V}(\vec{r}, t) = v_{\phi}([\rho]; \vec{r}, t) - v_{\phi}([\rho]; \vec{r}, 0) \quad (14)$$

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.

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

$$R(\vec{r}, t) + O(\Delta t^3) \quad (15)$$

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

$$R(r_i, \theta_j, t) = \sum_l g_l(r_i, t) P_l \cos(\theta_j) \quad (16)$$

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

$$g_l(r_i, t) = \sum_{k=1}^{L+1} w_k P_l(\cos \theta_k) R(r_i, \theta_k, t) \quad (17)$$

Үүнд $\{\cos \theta_k\}$ нь $L+1$ эрэмбийн Лежандрын полиномын шийд, w_k квадратурын жин болно. Хугацааны эхний алхам (18) илэрхийлэлээр хийгдэнэ.

$$e^{-\hat{H}_0 \Delta t / 2} R(r_i, \theta_j, t) = \sum_l e^{-\hat{H}_l^0 \Delta t / 2} g_l(r_i, t) P_l(\cos \theta_j) \quad (18)$$

$$\hat{H}_l^0 = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} + v_{eff}([\rho]; \vec{r}, 0) \quad (19)$$

(18) илэрхийлэлийн долгион функц нь g_l болгоны хувьд бие биенээсээ үл хамааран бодогдоно. Энэ тэгшитгэлийн r нь $[0, \infty]$ мужид байх ба шугаман бус [26] хувиргалтын тусламжтай $[-1, 1]$ мужид оруулна.

$$r = r(x) = L \frac{1+x}{1-x+\alpha} \quad (20)$$

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 [26]:

$$\phi_l(r) = \sqrt{r'(x)} \cdot \chi_l(r(x)) \quad (21)$$

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

$$\hat{H}_l^0(r) = -\frac{1}{2} \frac{1}{r'(x)} \frac{d^2}{dx^2} \frac{1}{r'(x)} + V_l(r(x)) \quad (22)$$

Энд:

$$V_l = \frac{l(l+1)}{2r^2} + v_{eff}([\rho]; \vec{r}, 0) \quad (23)$$

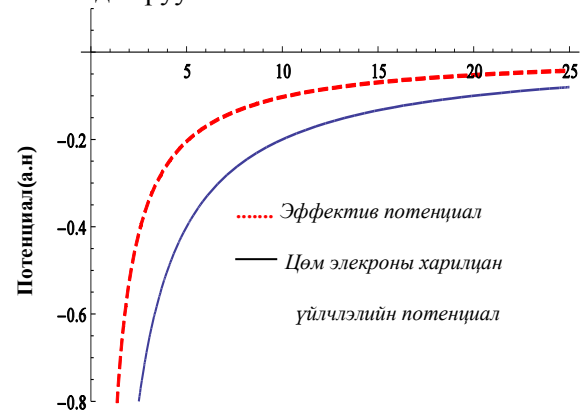
Хүснэгт 1: Гелийн атомын үндсэн төлөвийн энергийн тооцооны үр дүн (а.н. -ээр)

	$\left\langle \frac{1}{r_{12}} \right\rangle$	$-E_x$	$-E_c$	$\langle -Z/r \rangle$	$\langle T \rangle$	$-E$
Хартри-Фок [22]	2.0516	-	0.042	6.7492	2.8617	2.8617
Роу нар [25]	2.0651	1.0325	0.0423	6.7850	2.8974	2.8973
Манай үр дүн	2.1093	1.0546	0.048	6.75	2.8476	2.8869
Зөв утга [27]		1.026				

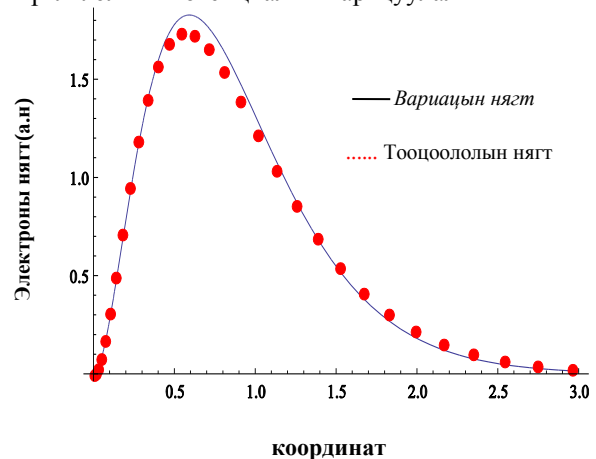
Диффузийн тэгшитгэлийг хугацаагаар бодоход $R(\vec{r}, t)$ функц нь нормчлогдоогүй байдаг тул хугацааны алхам бүрд нормчлох шаардлагатай.

III. ТООЦООНЫ ҮР ДҮН

Тооцоололын үр дүнд гелийн атомын эффектив ба цөм электроны харилцан үйлчлэлийн потенциалын харьцуулалт байгуулсныг 1-р зурагт үзүүлэв. Вариацийн нягт болон тооцоололын нягтын функцүүдийн хамаарлыг 2-р зурагт үзүүлэв. Гелийн атомын үндсэн төлөвийн энергийг Хартри - Фок [22] болон Роу нарын [25] тооцоолсон үр дүнтэй өөрсдийн үр дүнг харьцуулсан үр дүнг 1-р хүснэгтэнд харууллаа.



Зураг 1: Эффектив ба цөм электроны харилцан үйлчлэлийн потенциалын харьцуулалт



Зураг 2: Вариацийн нягт олон тооцоололын нягтын функцүүдийн харьцуулалт

IV. ДҮГНЭЛТ

Энэ ажилд НФО - оор гелийн атомын 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 бодолтын нарийвчлалыг сайжруулан инертийн хийн атомуудын (Ne, Ar, Kr, Xe) электроны нягт, үндсэн төлөвийн энергийг тооцоолох зорилт тавьж байна.

-
- | | |
|---|--|
| [1] P. Hohenberg, and W. Kohn, <i>Phys. Rev. B</i> 136 , 864 (1964). | [21] S. K. Ghosh, and B. M. Deb, <i>J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.</i> 27 , 381 (1994). |
| [2] W. Kohn, and L. J. Sham, <i>Phys. Rev. A</i> 140 , 1133 (1965). | [22] E. Clementi, and C. Roetti, <i>At. Data Nucl. Data Tables</i> , 14 , 174 (1974). |
| [3] R. G. Parr, and W. Yang, <i>Density Functional Theory of Atoms and Molecules (New York: Oxford University Press)</i> (1989). | [23] G. Brual, and S. M. Rothstein, <i>J. Chem. Phys.</i> 69 , 1177 (1978). |
| [4] F. Bloch, <i>Z. Phys.</i> 81 , 263 (1928). | [24] A. K. Roy, R. Singh, and B. M. Deb, <i>J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.</i> 30 , 4763 (1997). |
| [5] L. H. Thomas, <i>Proc. Camb. Phil. Soc.</i> 23 , 542 (1927). | [25] A. K. Roy, R. Singh, and B. M. Deb, <i>Int. J. Quantum Chem.</i> 65 , 317 (1997). |
| [6] E. Fermi, <i>Z. Phys.</i> 48 , 73 (1928). | [26] G. Yao, and S. I. Chu, <i>Chem. Phys. Lett.</i> 204 , 381 (1992). |
| [7] B. M. Deb, and S. K. Ghosh <i>J. Chem. Phys.</i> 77 , 342 (1982). | [27] A. D. Becke, <i>J. Chem. Phys.</i> 84 , 4524 (1986), A. D. Becke, <i>J. Chem. Phys.</i> 96 , 2155 (1992). |
| [8] L. J. Bartolotti, <i>Phys. Rev. A</i> 24 , 1661 (1981). | |
| [9] E. Runge, and E. K. U. Gross, <i>Phys. Rev. Lett.</i> 52 , 997 (1984). | |
| [10] B. M. Deb, and P. K. Chattaraj, <i>Phys. Rev. A</i> 39 , 1696 (1989). | |
| [11] X. Chu, and S. I. Chu, <i>Phys. Rev. A</i> 63 , 023411 (2001). | |
| [12] B. K. Dey, and B. M. Deb, <i>J. Chem. Phys.</i> 110 , 6229 (1999). | |
| [13] A. K. Roy, B. K. Dey, and B. M. Deb, <i>Chem. Phys. Lett.</i> 308 , 523 (1999). | |
| [14] B. K. Dey, and B. M. Deb, <i>Int. J. Quantum Chem.</i> 56 , 707 (1995), B. K. Dey, and B. M. Deb, <i>Int. J. Quantum Chem.</i> 70 , 441 (1998). | |
| [15] B. K. Dey, and B. M. Deb, <i>Chem. Phys. Lett.</i> 276 , 157 (1997). | |
| [16] A. K. Roy, and B. M. Deb, <i>Nonlinear Phenomena in Physical and Biological Sciences</i> , edited by S. K. Malik, M. K. Chandrasekharan and N. Pradhan, (New Delhi: INSA) p. 947 (2000). | |
| [17] X. M. Tong, and S. I. Chu, <i>Chem. Phys.</i> 217 , 119 (1997). | |
| [18] E. Madelung, <i>Z. Phys.</i> 40 , 332 (1926). | |
| [19] L. de Broglie, and C. R. Acad. Sci., Paris, 183 , 447 (1926). | |
| [20] D. Bohm, <i>Phys. Rev.</i> 85 , 166 (1952). | |

Dependence of the g-Factor of Mineral Coals on a Metamorphism Level

G. Shilagardy^{1,*}, P. Tuvshintur¹, S. V. Adashkevich², V. S. Kiranov², N.M. Lapchuk³,
I.V. Sedkova³, V.F. Stelmach, G.D. Frolkov, Ts. Nyamdulam, R. Khandmaa

¹National University of Mongolia, Ulan Bator, Mongolia

²Institute of Heat and Mass Transfer of NAS Belarus, Minsk, ul.Brovki, 15

The basic directions of the up-to-date use of fossil mineral coals of all levels of metamorphism: energetic electric power, heat production and technological reception of furnace coke, chemical raw materials, gasification and devolatilization of coal of coals. Mineral coals also use at their transmutation into liquid yields as motor, furnace fuel and raw materials for the chemical industry [1]. Efficiency of their application is in many respects spotted by quality of diagnostics of their physicochemical properties at procedure stages. Methods of magnetic-resonance spectroscopy are accessible express methods of their controls [2]. Perfection of quick tests of diagnostics of heterogeneous structure of coals is necessary also at definition dangerous the gas-dynamic phenomena (fire danger, bump hazard, sudden exhausts of coal and gas) [3].

In the report possibility of use of specialized evaluators of a magnetic resonance for the express control of a level of metamorphism of coals on value of the g-factor [4] is proved. The method is grounded on sensitivity of a signal of a magnetic resonance of coals with various concentration ch- and c-phases [5]. The physicochemical connection of the g-factor of a signal of a magnetic resonance and a linewidth of a spectrum of the gauged sample is compared with similar observational dependence. Character of dependence of the g-

factor from the c-phase share in the sample of coal is presented in figure 1.

RESULTS

It is positioned, that accuracy of definition of shared C- and CH-phases in heterostructure practically does not depend on the shape of the first derivative spectrum line. Thus, the expedient of definition of the g-factor by measured of a zero signal of the powdery sample of the coal traditionally used in methods of magnetic-resonance spectroscopy of mineral coals [3] is necessary.

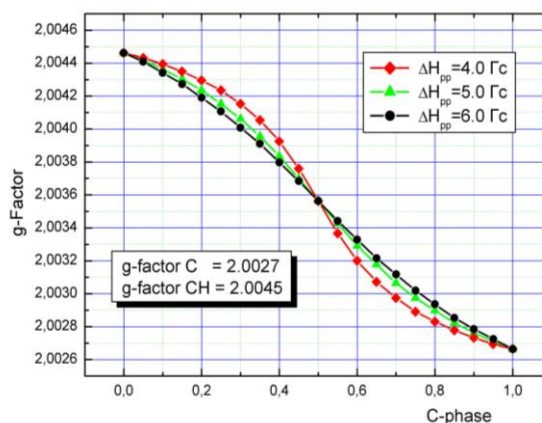


Figure1: Dependence of the g-factor of absorption spectrum (EPR) from a C-phase shared at three values ΔH_{p-p}

- [1] Н. А. Поклонского, Энциклопедия для школьников и студентов / под общей ред. // Минск: Беларуская Энцыклапедыя імя П. Броўкі, 177 (2012).
- [2] С. В. Адашкевич, В. Г. Баев, Н. М. Лапчук, В. Ф. Стельмах, Г. Шилагарди, Х. Цоохуу. Спектроскопия ЭПР каменных углей низкой степени метаморфизма // II-я Международная научно-техническую конференцию «Альтернативные источники сырья и топлива»: сб. тез. докл. – Минск: БГТУ, 66 (2009).
- [3] А. А. Обухов, Г.Д. Фролков, В. Б. Артемьев. Структурно-химическая механика углей метаморфического ряда пластов, опасных по внезапным выбросам угля и газа. – Шахты: издательство ЮРО АГН, 152 (2000).
- [4] В. В. Акунец, В. Ф. Стельмах, Л. В. Цвирко. Анализатор электронного парамагнитного резонанса: Учебно-справочное пособие /. – Мн.: УП «Технопринт», 102 (2002).
- [5] S. V. Adashkevich, A. D. Smychnic, V. F. Stelmakh, G. D. Frolkov, G. Shilagardi, L. Demberel, R. Galbadrah, L. Enkhtor. Динамические явления в углях // Proceedings of International School on Contemporary Physics-II (ISCP-II). Edited by G. Khuukhenkhuu. – University Press, Ulaanbaatar, Mongolia, 105 (2002).

*Electronic address: gshilagardi@yahoo.com

Материалы: Свойства И Возможные Применения

Э.М. Шпилевский^{1,*}, С.А. Филатов¹, Г. Шилагарди^{2,+}, П. Тувшинтур², А.Т. Богорош^{3,#}, Ц. Хандмаа³, Р. Нямдулам³

¹Институт тепло- и массообмена НАН Беларуси, Минск, ул.Бровки, 15

²Национальный университет Монголии, Улан-Батор, Монголия,

³Национальный технический университет Украины «Киевский политехнический институт»

С открытием фуллеренов в конце прошлого века материаловеды получили принципиально новые инструменты для конструирования материалов и структур, позволившие управлять их свойствами. За короткое время появилось множество публикаций как по методам синтеза фуллеренов, так и их использованию в разработке новых материалов [1]. К настоящему времени наиболее острой проблемой стала проблема применения фуллеренсодержащих материалов.

В данной работе рассмотрены некоторые способы формирования материалов, содержащих фуллерены C_{60} , их свойства и перспективные направления применения.

1. Электротехнический материал. Металл-фуллереновые пленки при некоторых долевых соотношениях атомов металла и молекул C_{60} структурно представляют собой систему электропроводящих частиц металла, разделенных небольшими промежутками из диэлектрических наночастиц фуллерита. Электрически такие структуры эквивалентны серии подключенных конденсаторов и, следовательно, их полное сопротивление должно уменьшаться при увеличении частоты переменного тока. Увеличение доли фуллеритовых наночастиц в металл-фуллереновой структуре для переменного тока влечёт за собой изменение значения, как емкостной, так и резистивной составляющих электросопротивления. Это изменение приводит к сдвигу минимума сопротивления в область более низких частот.

Таким образом, металл-фуллереновые структуры на переменном токе проявляют свойства R-C-L – цепочек [2] и могут использоваться как материал электротехнического назначения.

2. Материал для подвижных электрических контактов. Разработка покрытий для подвижных электрических контактов осуществлялась с использованием вакуумной [3] и гальванической [4] технологий.

Для выявления подходящих композиционных материалов вакуумной технологией были приготовлены 40 вариантов композиционных материалов с различными долевыми составами компонентов систем Ag - C_{60} Cu - C_{60} , Al - C_{60} , Fe - C_{60} , и их смесей. Оптимизация составов композиционных материалов проходила по двум критериям: а) композиционный материал должен иметь наиболее высокую электрическую проводимость, б) высокую проводимость сочетать с низким коэффициентом трения. Из рассмотренных вариантов лучшие электрические и трибологические характеристики показал состав 60%Al + 30%Cu + 9% Fe + 1% C_{60} , который имеет удельное электросопротивление $60 \cdot 10^{-4}$ Ом*м и коэффициент сухого трения равный 0,22 [4].

3. Покрытие для эндопротезов. Покрытия для эндопротезов получали совместной конденсацией в вакууме титана и фуллеренов C_{60} . Титан-фуллереновые покрытия показали высокую химическую стойкость в разбавленных кислотах и щелочах (3%-ые растворы HCl, NaOH, KOH). Выдержка образцов в кислотной и щелочной средах в течение 2400 ч не приводила к заметным изменениям на поверхности покрытий.

Высокая биохимическая стойкость [5] и сравнительно невысокое удельное электрическое сопротивление [6] позволяют использовать титан-фуллереновые пленки в качестве покрытий для электродов кардиостимулятора, а так же для медицинских инструментов.

4. Покрытие для узлов трения. Наиболее подходящим покрытием для узлов трения оказалась оксидокерамические покрытия, сформированные на алюминиевом сплаве АК5М2 методом микродугового оксидирования и последующей пропиткой в насыщенном растворе фуллеренов C_{60} в толуоле. Такие покрытия, содержащие фуллерены, показали значения износостойкости в три раза выше

*Electronic address: eshpilevsky@rambler.ru

+Electronic address: gshilagardi@yahoo.com

#Electronic address: bogorosh@mail.ru

($I_h=2,5 \cdot 10^{-10}$) [2], чем для покрытий без фуллеренов, а значения коэффициента трения - на 30...40 % ниже. Апробация покрытия $Al_2O_3-C_{60}$ в конкретном изделии (пуансон пресс-формы пластмассовых изделий, Минский завод холодильников «Атлант») показала увеличение ресурса работы в 14 раз.

5. *Тензорезистивные элементы.* Используя тензоэлектрический эффект могут быть построены тензодатчики на металл-фуллереновых пленках. Металл-фуллереновые пленки имеют высокий коэффициент тензочувствительности (более 10, в то время как самый высокий для металлов - для платины он 1,6).

6. *Фотонные датчики.* Фуллерены обладают фотопроводимостью в диапазоне длин волн от 280 до 680 нм. Вероятность образования электрон-ионной пары при поглощении одного фотона составляет 0,9 [7]. На основе фуллереновых и металлических частиц можно создавать структуры двух типов: островковые (т.е. с изолированными включениями металла) и сетевые (т.е. с соединяющимися между собой включениями металла). Такие структуры с периодичностью, существенно меньшей длины волны электромагнитного излучения, ведут себя как фотонные кристаллы с запрещенной фотонной зоной.

7. *Сорбционные датчики.* Металл-фуллереновые пленки являются хорошими сорбентами. Наши исследования электрических свойств тонких пленок $Cu - C_{60}$ разного состава (изменялось соотношение числа атомов меди в расчете на одну молекулу фуллерена $N_{Cu}:N_{C_{60}}$) показали высокую чувствительность их электрического сопротивления к сорбции кислорода [3].

Образование фаз в металл-фуллереновых структурах [2] позволяет технологическими методами добиваться для них желаемых характеристик и высокой избирательности адсорбции. По этим параметрам видно, что фуллереносодержащие материалы являются перспективными для сенсорных фотоэлектрических устройств.

Полученные изменения электрического сопротивления на десятки процентов указывают на хорошую перспективу для использования подобных структур в качестве сорбционных датчиков.

8. *Датчики силовых полей.* Внешние электрическое и магнитное поля, взаимодействуя с электронами металл-фуллереновой пленки изменяют её

электрические свойства [4]. Это позволяет использовать такие пленки в качестве датчиков не только для определения величин внешнего воздействия, но для фиксации положений, значений деформаций и др. Вкрапленные в металлическую матрицу фуллерены могут служить датчиками слабых электронных и электромагнитных потоков, деформаций, силовых полей, дополняя другие используемые материалы, расширяя диапазон возможных подходов и решений.

9. *Стимуляторы роста растений.* Ранее [8, 9] была создана методика выращивания нанокристаллов фуллеридов металлоценов методом спонтанной кристаллизации и обнаружено их свойство влиять на процессы жизнедеятельности. При инкрустации семян рапса и пустыrnика сердечного наноструктурированным фуллеридом ферроцена в результате неспецифического эндоцитоза клетками семян наночастиц биоактивного материала к 6-му дню онтогенеза наблюдается увеличение всхожести до 16,5 %. Кроме того, на 10% увеличивается длина проростков рапса при одинаковой длине корня у инкрустированных в сравнении с контрольными образцами.

10. *Оптические устройства.* При исследовании спектров пропускания сверхтонких слоев фуллерита золота, меди, серебра, олова $Au - C_{60}$, $Ag - C_{60}$, $C_{60} - Cu$ и $Sn - C_{60}$, в видимом и ближнем ИК диапазонах установлено, что спектральное положение и интенсивность полосы резонансного плазмонного поглощения зависят от параметров наноструктур, условий их получения и длительности хранения на воздухе [10].

Тип металла, долевые соотношения металлического и фуллеренового компонентов, размер наночастиц определяют спектральное положение максимума резонансного плазмонного поглощения, ширину и интенсивность поглощения. Варьирование толщиной наноструктур может позволить и при одинаковых долевых соотношениях компонентов получать дополнительные возможности по управлению характеристиками полос резонансного плазмонного поглощения, что обеспечивает создание оптических устройств с разным диапазоном характеристик.

Уникальные свойства фуллеренов и материалов их содержащие указывают на широкие возможности использования этих материалов в приборостроении, биомедицине,

оптоэлектронике, других областях хозяйственной деятельности.

- [1] П. А. Витязь, С. А. Жданок, Э Шпилевский, Вещества и материалы на основе углеродных наночастиц. //Фуллерены и фуллереноподобные структуры. Сб. науч. статей. Минск: Институт тепло- и массообмена им. А.В. Лыкова НАН Беларуси, **3** (2005).
- [2] P. A. Vityaz, E. M. Shpilevsky, Fullerenes in matrices of different substances //Journal of Engineering Physics and Thermophysics, **780** (2012).
- [3] Э. М. Шпилевский Структура и физические свойства металл-фуллереновых тонких пленок. //Вакуумная наука и технология, **73** (2014).
- [4] Э. М. Шпилевский, Г. Г. Горох, М. Э. Шпилевский Функциональные покрытия, содержащие фуллерены. //Высокие технологии в промышленности России. Наноинженерия. Москва. МГТУ им. Н. Э. Баумана, **82** (2014).
- [5] В. П. Зорин, И. Е. Кравченко, Э. М. Шпилевский Модификация фуллереном C₆₀ процессов адгезии иммунных клеток на поверхности материалов. //Низкоразмерные системы. Вып. 4. – Гродно: ГрГУ, **50** (2005).
- [6] E. M. Shpilevsky, E. M. Shpilevsky, Y. I. Prylutsky, L. Y. Matzuy, M. I. Zakharenko, F. Le Normand. Structure and properties of C₆₀ fullerene films With titanium atoms.// Mat.-wiss.u.Werkstofftech. **59** (2011).
- [7] O. Dmitrenko, O. Pavlenko, M. Kulish, E. Shpilevsky Component hydridization in thin granulated C60-Cu nanocomposite films. Ukr. J. Phys **828** (2011).
- [8] A. G. Soldatov, E. M. Shpilevsky, A. L. Pushkarchuk, N. Pushkina, V. A. Goranov, V. I. Potkin Bioactivity of nanocrystals of C₆₀(FeCp₂)₂, C₆₀(NiCp₂)₂ and their derivatives. NANOMATERIALS: APPLICATIONS AND PROPERTIES. 101 (2013).
- [9] A. G. Soldatov, E. M. Shpilevsky, G. G. Gorokh New Bioactive Composition Nanomaterials Based on Fullerene Derivatives // Proceedings of International Conference Nanomeeting – 2013 Physics, chemistry and application of nanostructures, Reviews and Short Notes, Minsk, Belarus, **24** May (2013). Ed V. E. Borisenko, S. V. Gaponenko, V. S. Gurin, C. H. Kam, **400** (2013).
- [10] Э. М. Шпилевский, А. Д. Замковц Плазмонный резонанс в наноструктурах золото-фуллерен. Оптический журнал **18** (2008).

Структурирование Полимеров Фуллеренами

Э. М. Шпилевский^{1*}, С. А. Филатов¹, Г. Шилагарди², П. Тувшинтур², Ц. Хандмаа², А. Т. Богорош³

¹Институт тепло- и массообмена НАН Беларуси, Минск, ул. Бровки, 15

²Национальный университет Монголии, Улан-Батор, Монголия

³Национальный технический университет Украины «Киевский политехнический институт»

Фуллерены являются уникальными углеродными наночастицами, открытие которых дало материаловедцам принципиально новые инструменты для конструирования материалов с управляемыми свойствами. За короткое время появились тысячи публикаций как по методам синтеза фуллеренов, так и их использованию в разработке новых материалов [1,2]. Фуллерены, обладающие большей энергией сродства к электрону, чем акцепторные фрагменты многих полимерных молекул, могут образовывать комплексы с переносом заряда [3].

В качестве полимерных матриц служили полистирол (ПС) и полиэтилен высокого давления (ПЭВД). Молекулы фуллерена C_{60} вводились в полимерную матрицу двумя способами: а) смешиванием растворов полиэтилена и фуллеренов в толуоле, б) пропиткой пленок ПЭВД в растворе C_{60} в толуоле (1,4 мг/мл). В последнем случае долевое содержание фуллерена в пленке варьировалось путем изменения времени пропитки (0,5 и 3 ч).

Исследовались механические (разрывная машина) и трибологические свойства (трибометр ТЭУ-1), структура (РЭМ). Оптическая диагностика исследуемых образцов проводилась с помощью Фурье-спектрометра IFS66 Bruker в диапазоне $500-1500\text{ см}^{-1}$, соответствующем активным колебаниям ПС, ПЭВД и C_{60} .

Допирование полимерного материала фуллеренами приводит к значительному повышению прочности материала, снижению коэффициента трения, изменению упругих характеристик и других свойств материала. Свойства полимеров в большой степени зависят от долевого содержания фуллеренов. Показано, что наибольший эффект применения фуллеренов обнаруживается при их концентрации 0,1...0,2 масс.%. В этом случае обеспечивается наибольшее снижение коэффициента трения (в 3,2 раза), однако добавление фуллеренов в полимерную матрицу

приводит к охрупчиванию материала, предел растяжения снижается на 10-30 %, модуль Юнга при этом возрастает.

В области невысоких концентраций взаимодействие поверхности углеродных наночастиц с полимерными молекулами происходит повышение эффективной плотности сетки полимера. Связи макромолекул с поверхностью частиц можно рассматривать как дополнительные узлы пространственной структуры сетки. Это дополнительное структурирование определяет механические свойства наполненной системы. Наполнитель влияет на условия надмолекулярного структурообразования матрицы, изменяя состояние полимера на поверхности наполнителя. Кроме того, фуллереновые кластеры проявляют способность сами структурироваться в полимерной матрице.

Полимеры, содержащие фуллерены, по структурной организации можно разделить условно на четыре типа: *звёздообразные* – в них молекула фуллерена выполняет роль ядра для присоединенных линейных цепочек матрицы; *«жемчужное ожерелье»* — содержат молекулы фуллерена в основной цепи; *«браслет с подвесками»* — содержащие молекулы фуллерена в боковых заместителях и являются, разновидностью гребнеобразной структуры; *«нерегулярная сетка»* — молекулы фуллерена включены в замкнутые цепочки.

Изменением состава композиционного материала на основе полимера и фуллеренов можно управлять его свойствами. При этом все получаемые материалы имеют низкую плотность и повышенную температурную устойчивость.

Работа выполнена в рамках международного сотрудничества между Институтом тепло- и массообмена имени А.В.Лыкова НАН Беларуси и Национальным университетом Монголии при финансовой поддержке Белорусского и Монгольского фондов фундаментальных исследований (код проекта T15MH-001).

*Electronic address: eshpilevsky@rambler.ru

- [1] М. Э.Шпилевский, В. Ф. Стельмах
Фуллерены и фуллерено-подобные
структуры—основа перспективных
материалов // ИФЖ. 106 (2001).
- [2] Л. Н. Сидоров, М. А. Юровская
Фуллерены. М.: МГУ, 688 (2004).
- [3] Э. М. Шпилевский, Г. Шилагарди, Г. С.
Ахремкова Механические и
трибологические свойства полиэтилена
высокого давления, модифицированного
фуллеренами // Фуллерены и
фуллереноподобные структуры. Минск:
Институт тепло- и массообмена им. А. В.
Лыкова НАН Беларуси, 218 (2005).
- [4] П. А. Витязь, Э. М. Шпилевский
Углеродные наночастицы как активные
модификаторы материалов // Материалы,
технологии и оборудование в
производстве, эксплуатации, ремонте и
модернизации машин. В 3-хт. Т.1.—
Новополоцк: УО «ПГУ», 54 (2007).

Спектральное Проявление Плазмонного Резонанса в Металл-Фуллереновых Наноструктурах

Э. М. Шпилевский¹, А. Д. Замковец¹, М. Э. Шпилевский¹, С. А. Филатов¹, Г. Шилагарди^{2,*}, П. Тувшинтур², Ц. Хандмаа², Р. Нямдулам²

¹Институт тепло- и массообмена им. А.В.Лыкова НАН Беларуси, г. Минск, Беларусь, 220072, Минск, П.Бровки, 15,

²Национальный университет Монголии, Улан-Батор, Монголия

Показано, что положение максимума, форма и ширина полосы резонансного плазмонного поглощения в оптических спектрах металл-фуллереновых наноструктур зависят от объемной доли металлической и фуллереновой компонентов, размера островков, степени заполнения поверхности подложки.

Spectral manifestations plasmon resonance in metal-fullerene nanostructures.

It is shown that the maximum position, shape and width of the plasmon resonance absorption spectra of optical nanostructures metal-fullerene depend on the volume fraction of the metal and the fullerene phases island size, degree of surface coverage of the substrate.

I. ВВЕДЕНИЕ.

Металлосодержащие наноструктуры обладают уникальными оптическими и оптоэлектронными свойствами. Эти свойства во многом обусловлены тем, что в УФ и видимом диапазонах для металлических наночастиц проявляются полосы резонансного плазменного поглощения (или так называемые поверхностные моды), возникающие вследствие коллективных колебаний свободных электронов в наночастицах [1]. Спектральная область проявления поверхностных мод для наночастиц металлов определяется условием Фрелиха для диэлектрических проницаемостей матрицы и используемого металла. Характеристики поверхностных мод (или полос плазменного поглощения) зависят от многих факторов: материала наночастиц и окружающей матрицы, размеров частиц и их формы, плотности упаковки и т.д. [2-4].

Метод испарения и конденсации материалов в вакууме является одним из эффективных экспериментальных методов формирования сверхтонких металлodieлектрических структур, в которых проявляется поверхностный плазмонный резонанс поглощения (ППРП). Наряду с возможностью практического использования таких наноструктур для детектирования молекул в биологии и медицине, широкие перспективы открываются для создания на основе тонкопленочных структур устройств нового поколения для хранения и обработки информации, обладающих нанометровым диапазоном размеров элементов и высоким быстродействием. Для решения этих задач могут оказаться эффективными металл-фуллеритовые структуры, у которых

*Electronic address: gshilagardi@yahoo.com

уникальными свойствами обладают как фуллереновая, так и металлическая нанофазы.

В настоящей работе исследованы структура и спектры пропускания наноструктур Au - C₆₀, Ag - C₆₀ и Cu - C₆₀ с различной поверхностной плотностью компонентов. Выбранные три металла располагаются в одной группе таблицы химических элементов и имеют одинаковое число электронов на внешней оболочке, однако размеры их атомных остовов различаются, поэтому характеризуются разной степенью экранирования заряда ядра.

II. МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА.

Исследованы наноструктуры толщиной 2 – 20 нм с различной массовой долей металлической и фуллереновой компонентов (от 0 до 100 %), которые получали термическим испарением и конденсацией в вакууме на подложках из стекла и кварца в вакууме при остаточном давлении воздуха $2 \cdot 10^{-3}$ Па из двух испарителей (отдельно для металла и фуллерита). В процессе формирования металл-фуллереновых структур подложки не подогревались. Температура подложек составляла 20-21°C. Варьирование соотношением плотностей потока атомов металла и молекул фуллерена в зоне формирования наноструктур обеспечивалось изменением места расположения подложки относительно испарителей. Структурные исследования осуществлялись с помощью атомно-силового микроскопа «Nanoscan». Спектральные характеристики записывались на спектрофотометре «Cary 500».

III. ПОЛУЧЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ.

Изготовленные структуры представляли собой тонкую пленку фуллерита с хаотически расположенными вкраплениями металлических наночастиц. Типичные виды поверхностей исследованных наноструктур, полученные с помощью атомно-силового микроскопа представлены на рис.1.

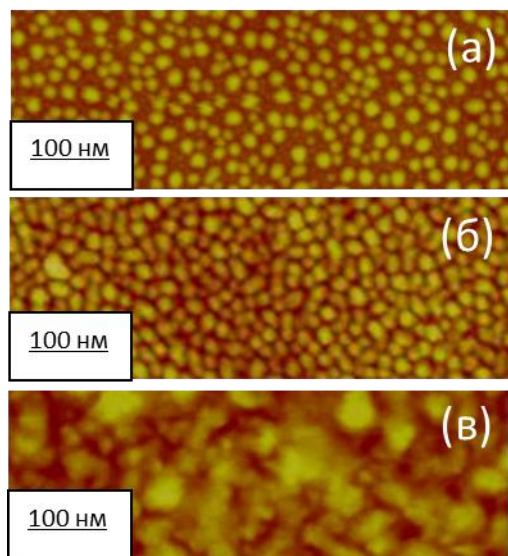


Рис.1. АСМ изображение островковых металл-фуллереновых структур: а) Au - C₆₀, ($3,92 \cdot 10^{-6}$ г/см² Au, $1,52 \cdot 10^{-6}$ г/см² C₆₀); б) Cu - C₆₀, ($4,40 \cdot 10^{-6}$ г/см² Cu, $3,12 \cdot 10^{-6}$ г/см² C₆₀); в) Ag - C₆₀, ($3,62 \cdot 10^{-6}$ г/см² Ag, $3,52 \cdot 10^{-6}$ г/см² C₆₀)

Спектральное положение максимума полосы резонансного плазмонного поглощения (для металлических наночастиц определяется условием Фрелиха: $\epsilon_0 = -2\epsilon_m$, где ϵ_0 и ϵ_m - диэлектрические проницаемости металлической частицы и окружающей среды, соответственно) [1].

Спектры пропускания островковых структур C₆₀ демонстрируют наличие у них трех полос поглощения с центрами на длинах волн $\lambda_1 \sim 340$ нм, $\lambda_2 \sim 450$ нм и $\lambda_3 \sim 600$ нм. По-видимому, эти полосы обусловлены межзонным поглощением у фуллерита (ширина запрещенной зоны у C₆₀ порядка 1,5-1,95 эВ). На рис. 2 представлены спектры пропускания однокомпонентных островковых структур фуллерита C₆₀ и меди.

Совместная конденсация металла и фуллеренов меняет как структуру самих металлических частиц, так и условия на границе раздела металл-фуллерит. Наличие фуллеренов в наноструктурах приводит к коротковолновому сдвигу и изменению формы полосы резонансного плазмонного поглощения. Некоторое ослабление плазмонного

поглощения в металл-фуллеритовых наноструктурах связано с отличием от нуля для C₆₀ мнимой части диэлектрической проницаемости.

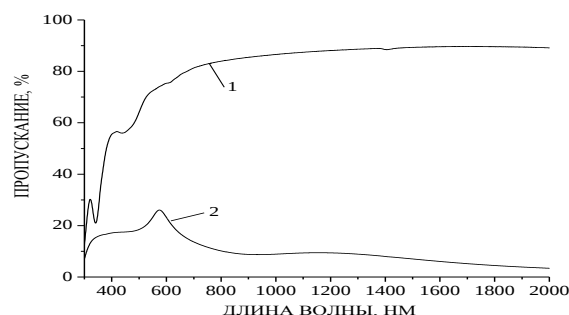


Рис.2. Спектры пропускания островковых структур фуллерита C₆₀ (1) и меди (2)

Увеличение поверхностной плотности металла приводит к уширению полосы ППРП и ее сдвигу в длинноволновую область. Например, при изменении поверхностной плотности золота от $3,38 \cdot 10^{-6}$ г/см² до $4,50 \cdot 10^{-6}$ г/см² спектральный сдвиг максимума полосы ППРП составляет более 80 нм, а для наноструктур меди изменение поверхностной плотности от $3,57 \cdot 10^{-6}$ г/см² до $4,46 \cdot 10^{-6}$ г/см² приводит к сдвигу максимума на 35 нм (рис. 3).

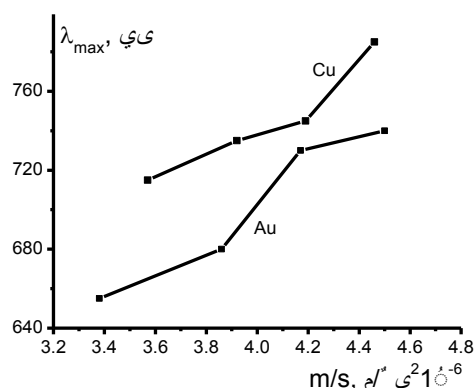


Рис.3. Положение максимума полосы пропускания ППРП наноструктур меди и золота от объемной доли металлической фазы (эффективная толщина наноструктур ~ 23 нм)

На рис. 4 приведены спектры пропускания двухкомпонентных островковых структур Au - C₆₀ с различными объемными долями золота.

Для всех рассмотренных наноструктур полосы плазмонного резонанса расположены в видимой области спектра. Для наноструктур, содержащих разные металлы с близкими значениями поверхностных плотностей,

наблюдаются существенные различия спектрального положения и формы полос плазмонного резонанса, что связано с разной степенью влияния на оптические характеристики рассматриваемых металлов межзонного поглощения и различными значениями для них частоты Фрейлиха.

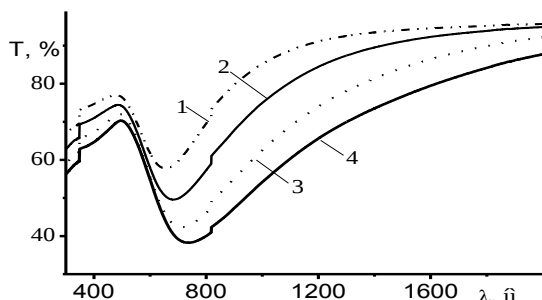


Рис.4. Спектры пропускания островковых структур Au - C₆₀ с различными объёмными долями золота: 1 - 20%, 2 - 23%, 3 - 25%, 4 - 32% (эффективная толщина 16 нм)

При совместной конденсации металлов и фуллеренов количественное соотношение атомов металла и молекул фуллерена в зоне формирования наноструктуры определяет ее архитектуру, детали которой находят свое отражение в оптических спектрах. От этого соотношения зависит степень деформации электронных оболочек и распределение напряжений на границах нанопаз. Как было показано в работе [5] значительные внутренние механические напряжения могут создаваться в молекулах C₆₀ в результате их захвата металлическими наночастицами.

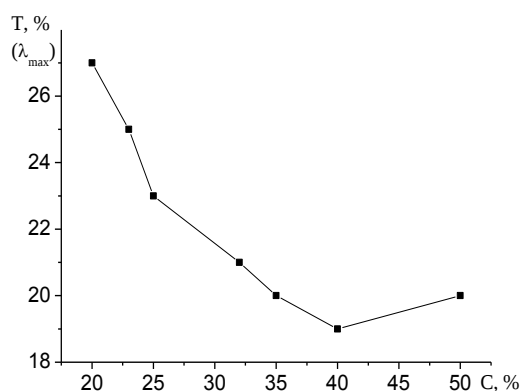


Рис.5. Зависимость пропускания на длине волны максимума полосы РПП наноструктур Cu - C₆₀ от объемного содержания Cu (толщина наноструктур ~ 23 нм)

Полосы ППП наноструктур Me - C₆₀ отличаются по форме от полос ППП для структур из чистых металлов. Для

наноструктур Me - C₆₀, в которых массовая доля C₆₀ превышает 10%, резонансное плазмонное поглощение ослабляется. Ослабление полос ППП в наноструктурах Me - C₆₀ частично может быть связано с отличием для C₆₀ от нуля мнимой части диэлектрической проницаемости. В координатах «спектральное положение максимума полосы плазмонного поглощения наноструктур - эффективная толщина пленки» (рис.6) получаем почти линейные зависимости, что указывает на взаимосвязь выбранных величин.

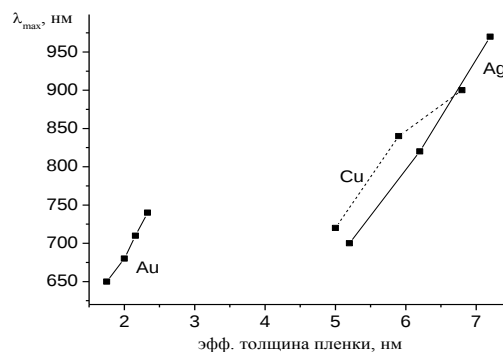


Рис.6. Спектральное положение максимума полосы плазмонного поглощения наноструктур Au-C₆₀, Cu-C₆₀ и Ag-C₆₀ в зависимости от эффективной толщины пленки

В координатах «спектральное положение максимума полосы плазмонного поглощения - массовая поверхностная плотность металла» наблюдаем достаточно выраженные гладкие зависимости (рис.7).

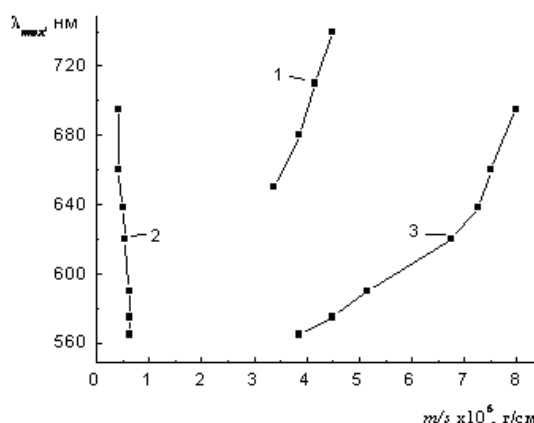


Рис. 7. Спектральное положение максимума полосы плазмонного поглощения наноструктур: Au- C₆₀ (1), Ag- C₆₀ (2), Cu- C₆₀ (3) в зависимости от значений суммарной массовой поверхностной плотности металла (соотношение компонентов Me/ C₆₀=2/3)

Таким образом, оптические спектры наноструктур металлов, а так же металл-фуллеренов с разной эффективной толщиной, сформированных на стеклянных и кварцевых подложках, различаются положением максимума, формой и шириной полосы резонансного плазмонного поглощения.

При одинаковом содержании металла наличие фуллеренов в структурах приводит к коротковолновому сдвигу полосы резонансного плазмонного поглощения. В наноструктурах Me

- C₆₀ с массовой долей C₆₀, составляющей более 10 %, резонансное плазмонное поглощение ослабляется.

Варьируя объемной долей металлической и фуллереновой компонентов, размером островков, степенью заполнения поверхности подложки, можно изменять форму и ширину полосы плазмонного резонансного поглощения, а так же положение максимума этой полосы.

-
- [1] К. Борен, Д. Хафмен, Поглощение и рассеяние света малыми частицами. М. Мир, 660 (1986).
 - [2] Э. М. Шпилевский, А. Д. Замковц, Плазмонный резонанс в наноструктурах золото-фуллерен.// Оптический журнал. 18 (2008).
 - [3] A. N. Ponyavina, E. E. Tselesh, A. D. Zamkovets, Optical properties of densely packed plasmonic nanocomposites // Physics and Chemistry of Solid State. 756 (2013).
 - [4] А. Н. Понявина, С. М. Качан, Е. Е. Целеш Эффективная диэлектрическая проницаемость композитных материалов с произвольной объемной концентрацией включений // Журн. прикл. спектр. 765 (2012).
 - [5] Э. М. Шпилевский, Металл-фуллереновые плёнки: получение, свойства, применение. //Алмазные плёнки и плёнки родственных материалов. – Харьков. «Констаната», 242 (2003).

Улаанбаатар Хот Орчмын Агаар Мандлын Зарим Оптик Параметруудийг Тодорхойлсон Дүн

Л.Бадрах, Ц.Баатарчулуун, Б.Даариймаа, Б.Ганбат
МУИС, ШУС, Геологи Геофизикийн Тэнхим

Энэхүү судалгааны ажилд агаарын бохирдлын ажиглалт, хяналтын олон улсын “SKYNET” сүлжээний Улаанбаатар хот дахь ажиглалтын автомат станцын 2013-2014 оны хэмжилтийн мэдээллээр Улаанбаатар хот орчмын агаар мандлын оптик төлвийн параметрууд болох аэрозольн оптик зузаан болон Ангстромын экспонентын жил болон хоногийн турш дахь хувьслын зүй тогтлыг судлаж, эдгээр параметруудийн зарим онцлог өөрчлөлтүүдийг байгаль, цаг уур, нийгмийн хүчин зүйлстэй холбон тайлбарлах оролдлого хийлээ.

PACS numbers: 92.60.Mt, 92.60.Sz, 92.60.Vb

I. ОРШИЛ

Нарнаас ирж буй цацраг агаар мандал дундуур нэвтрэн газрын гадаргууд ирэхдээ агаар мандлыг бүрдүүлж буй хийн молекулууд болон агаар мандалд агуулагдаж буй аэрозолюуд дээр сарних болон шингээгдэх процессуудын үр дүнд эрчим нь сулардаг. Нарны цацрагийн эрчмийг сулруулах аэрозолюуд нь уур амьсгал, хүний эрүүл мэнд, газар тариалан гэх мэт олон зүйлд сөргөөр нөлөөлөх боломжтой тул агаар мандал дахь аэрозолюн оптик шинж чанар, хэмжээний түгэлт, орон зай цаг хугацааны өөрчлөлтийн зүй тогтлыг судлах нь онол, практикийн ихээхэн ач холбогдолтой юм [1-2].

Улаанбаатар хотын хувьд хүн амын нягтаршил ихсэж, хүний үйл ажиллагааны гаралтай аэрозолюн хэмжээ үлэмж нэмэгдсэнтэй холбоотойгоор тус хотын агаар мандлын төлөв байдлыг орчин үеийн, мэдрэмтгий багаж төхөөрөмжөөр судлах асуудал тулгарсан билээ. Энэхүү асуудлын хүрээнд 2013 оны 9 сараас эхлэн Япон улсын Чибегийн Их Сургуулийн эрдэмтэдтэй хамтарч SKYNET олон улсын сүлжээний Скайрадиометр (Skyradiometer) болон хэмжилтийн бусад багажийг МУИС-ийн Геологи, Геофизикийн тэнхимийн агаар мандлын оптикийн хэмжилтийн лабораторид суурилуулан судалгааны ажлыг эхэлсэн болно[4].

Энэ судалгааны ажлын хүрээнд Улаанбаатар хот орчим дахь агаар мандлын оптик төлөвийн үзүүлэлтүүд болох аэрозолюн спектраль оптик зузаан болон ангстромын экспонентыг тодорхойлон, тэдгээрийн жилийн болон хоногийн явцыг гаргаж, өөрчлөлт хувьслын зүй тогтлыг тайлбарлах оролдлого хийлээ.

II. СУДАЛГААНЫ МАТЕРИАЛ, АРГА ЗҮЙ

SKYNET олон улсын сүлжээний Улаанбаатар хот (47.55Ө, 106.53У, д.т.д 1310 м)

дахь станц 2013 оны 9 сараас агаар мандлын оптик төлвийн хэмжилт хийж эхэлсэн. Энэхүү судалгааны ажлын хүрээнд тус станцид 2013 оны 9 сараас 2014 оны 10 сар хүртлэх нэг жилийн хугацаанд хийгдсэн хэмжилтийн өгөгдлийг сонгон авч, зохих аргачлалын дагуу өгөгдлийн боловсруулалт хийж гүйцэтгэсэн болно.

Скайрадиометр багаж нь нарнаас ирж буй шулуун болон тодорхой өнцгөөр сарнисан цацрагийн (альмункантиратын хэмжилт) эрчмийг долгионы уртын хэд хэдэн мужид, тогтмол хугацааны интервалтайгаар хэмжих боломжтой автомат багаж юм. Улаанбаатар станц дахь ажиглалтын POM-01 скайрадиометр нь 315нм, 400нм, 500нм, 675нм, 870нм, 940нм, 1020нм долгионы урт бүхий нарны цацрагийн эрчимийг хэмжих ба эдгээр хэмжилтийн үр дүнгээр агаар мандлын оптик параметрууд болох аэрозолюн спектраль оптик зузаан, Ангстромын экспонент, аэрозолюн хугарлын илтгэгч, сарнилын альбедо, ассимметрийн параметр, аэрозолюн эзэлхүүний түгэлт гэх мэт агаар мандлын оптик төлөв, аэрозолюн шинж чанарыг илэрхийлэх олон параметруудийг тодорхойлох боломжтой.

A. Аэрозолюн Оптик Зузаан

Спектрийн янз бүрийн мужид газрын гадаргууд ирж буй нарны цацрагийн эрчмийг Буге-Ламбертын хуулиар тодорхойлдог.

$$V(\lambda) \cdot d^2 = V_{\odot}(\lambda) \exp[-\tau(\lambda) \cdot m(\theta_0)] \quad (1)$$

Энд: $V_{\odot}$ нь спектрийн тухайн мужид агаар мандлын гадна хилд ирж буй нарны шулуун цацрагийн эрчим, V нь спектрийн тухайн мужид газрын гадарга дээр ирж буй нарны шулуун цацрагийн эрчим, $m(\theta_0) = 1/\cos\theta_0$ —агаарын мандлын масс, d нь нар-дэлхий хоорондын зайг Астрономийн нэгж зайд харьцуулсан харьцаа, θ_0 нь оройн зай, $\tau(\lambda)$ нь спектрийн тухайн муж

дахь агаар мандлын ерөнхий оптик зузаан болно.

Агаар мандлын ерөнхий оптик зузааныг дараах хэлбэрээр буюу оптик зузаануудын нийлбэр байдлаар илэрхийлж болно [2].

$$\tau(\lambda) = \tau_A(\lambda) + \tau_R(\lambda) + \tau_{O_3}(\lambda) + \tau_{mg}(\lambda) + \tau_{PW}(\lambda) \quad (2)$$

Үүнд: $\tau_A(\lambda)$ -аэрозолын, $\tau_R(\lambda)$ -релейн сарнилын, $\tau_{O_3}(\lambda)$ -озоны, $\tau_{mg}(\lambda)$ -холимог хийн, $\tau_{PW}(\lambda)$ -усны уурын оптик зузаан тус тус болно.

(1) болон (2) томъёоноос аэрозолын оптик зузааныг тодорхойлбол дараах хэлбэртэй олддог.

$$\tau_A(\lambda) = \frac{1}{m(\theta_0)} (\ln V_{\odot}(\lambda) - \ln V(\lambda) \cdot d^2) - (\tau_R(\lambda) + \tau_{O_3}(\lambda) + \tau_{mg}(\lambda) + \tau_{PW}(\lambda)) \quad (3)$$

В. Ангстромын экспонент

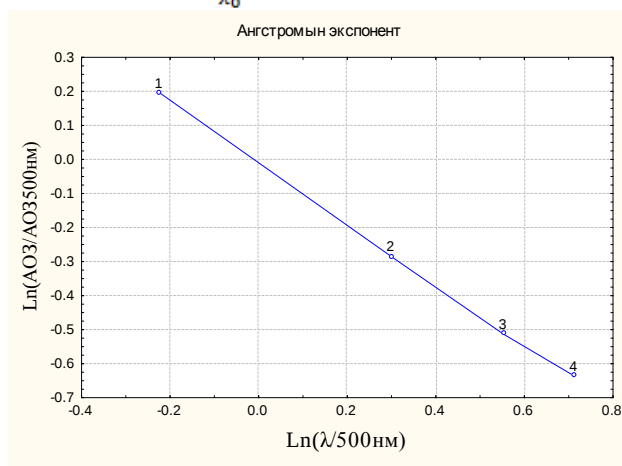
Энэ параметр нь тухайн ажиглалт, судалгаа хийж буй бүс нутгийн агаар мандалд агуулагдаж буй аэрозолын шугаман хэмжээстэй хамааралтай бөгөөд ангстромын экспонентийн их утга нь тухайн агаар мандал дахь аэрозолын хэмжээс харьцангуй жижиг байгааг, харин бага утга нь тухайн агаар мандалд харьцангуй том хэмжээст аэрозол голчлон түгсэнийг тус тус илтгэдэг.

Ангстромын экспонентийг спектрийн тухайн муж дахь аэрозолын оптик зузаан болон долгионы уртын харьцаагаар тодорхойлдог [5].

$$\frac{\tau_\lambda}{\tau_{\lambda_0}} = \left(\frac{\lambda}{\lambda_0} \right)^{-\alpha} \quad (4)$$

α -ангстромын экспонентийг тодорхойлбол:

$$\alpha = - \frac{\ln \frac{\tau_\lambda}{\tau_{\lambda_0}}}{\ln \frac{\lambda}{\lambda_0}} \quad (5)$$

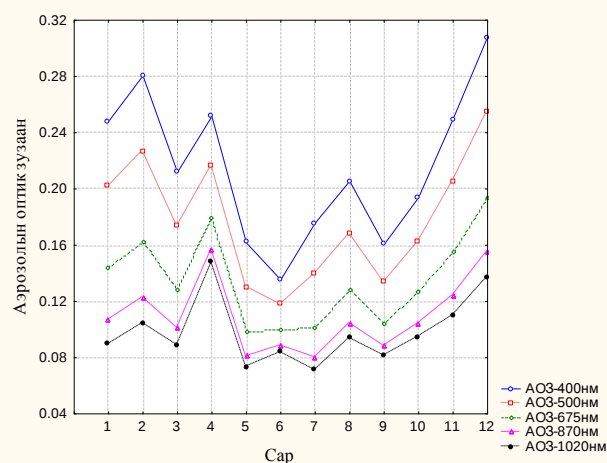


болно.

Дээрх хамаарал шугаман хэлбэртэй байгаа (корреллиацийн коэффициентын утга $R^2 = 0.9993$) нь ангстромын экспонент нь долгионы уртаас хамаардаггүй болохыг илтгэж байна.

III. СУДАЛГААНЫ ҮР ДҮН БА ХЭЛЭЛЦҮҮЛЭГ

Улаанбаатар хот орчмын агаар мандлын аэрозолын хэмжээг үнэлэх зорилгоор 400нм, 500нм, 675нм, 870нм, 1020нм долгионы уртын утгууд дахь агаар мандлын аэрозолын оптик зузааны жилийн явцыг Зураг 1-д харуулав.



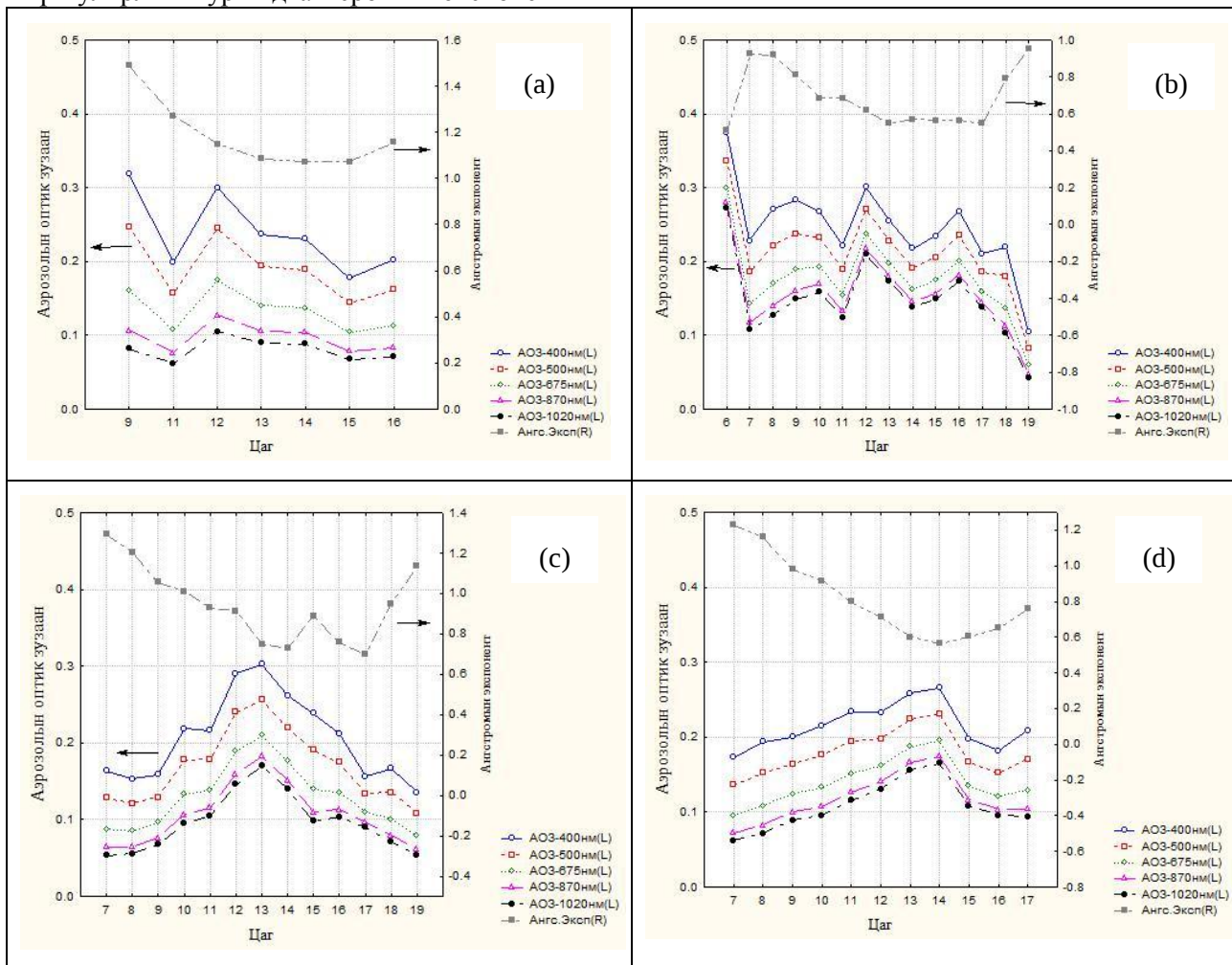
Зураг 1. 400нм, 500нм, 675нм, 870нм, 1020нм долгионы уртын мужууд дахь аэрозолын оптик зузааны жилийн явц.

Зураг 1-ээс харахад өвлийн саруудад (XII, I, II сар) аэрозолын оптик зузааны утга харьцангуй их, харин зуны саруудад (VI, VII, VIII сар) бага утгатай байгаа нь Улаанбаатар хотын хувьд өвөл нь гэр хорооллын галлагаанаас үүдэлтэй аэрозол ихээр тархдагтай холбоотой гэж үзэж байна. Харин IV сард аэрозолийн оптик зузааны утга бараг өвлийн саруудын утгатай ойролцоо болж өсөж байгаа нь хэдийгээр галлагааны үүдэлтэй утааны хэмжээ багасдаг ч цасан бүрхүүл хайлж, хуурайшилт явагдсантай холбоотойгоор шороо, тоос хэлбэрийн аэрозол ихэсдэгийг харуулж байна.

Зураг 2-т Улаанбаатар хот орчмын агаар мандлын аэрозолын оптик зузаан болон ангстромын экспонентийн хоногийн явцыг улирал тус бүрээр үзүүлээ. Эндээс харахад ангстромын экспонент болон аэрозолын оптик зузааны утгын улирал бүрийн хоногийн турш дахь дундаж өөрчлөлт нь харилцан адилгүй байна. Ангстромын экспонентийн хувьд өвлийн улиралд бусад улирлаас харьцангуй өндөр утгатай, харин хаврын улиралд өвлийн улиралтай харьцуулахад 2 дахин бага утгатай

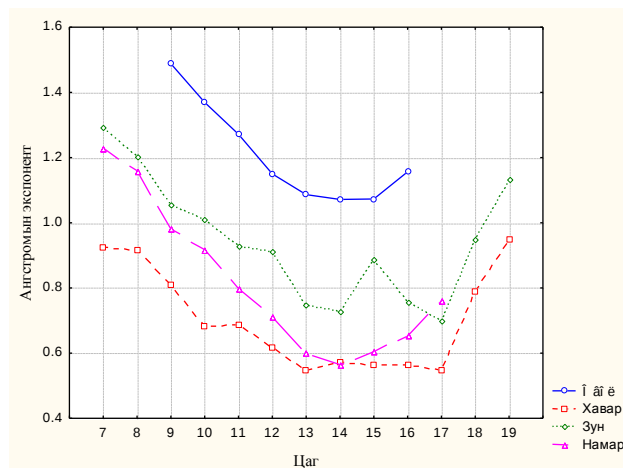
байгаа нь хаврын улиралд том хэмжээт аэрозолийн хэмжээ эрс өсдгийг харуулж байна. Бүх улирлын туршид ангстромын экспонент нь

өглөө, оройдоо өндөр утгатай, харин өдөртөө харьцангуй бага утгатай байна.



Зураг 2. Улаанбаатар хот орчмын агаар мандлын аэрозолийн спектраль оптик зузаан болон Ангстром экспонентийн хоногийн явц. (a)-өвөл, (b)-хавар, (c)-зун, (d)-намар

Ангстромын экспонентийн утга өглөөдөө их, өдөртөө буураад оройдоо буцаад өсөж байгаа нь Улаанбаатар хотын хувьд өглөө оройдоо аэрозолийн хэмжээс жижиг, харин өдөртөө харьцангуй том хэмжээт аэрозол давамгайлж буйг харуулж байна. Үүний шалтгаан нь өдөртөө газрын гадарга халснаар агаарын босоо чиглэлт урсгал бий болж, агаар мандалд том ширхэгтэй аэрозол (тоос, тоосонцор) дээш хөөрдөгтэй холбоотой юм. Өвөл болон хаврын улиралд аэрозолийн оптик зузааны утга өглөөгүүр өндөр утгатай байгаа нь хүний үйл ажиллагаатай холбоотой буюу антропоген бохирдолтой хамааралтай байж болох юм. Ангстромын экспонентийн хоногийн явцыг улирлаас хамааруулан тодорхойлсон дүнг Зураг 3-д үзүүлээ.



Зураг 3. Улаанбаатар хот орчмын агаар мандалд агуулагдах аэрозолийн ангстромын экспонент параметрийн улирлаас хамаарсан хоногийн явц.

Зургаас харвал Улаанбаатар хотын агаар мандлын ангстромын экспонентийн утга хавар

болон намрын улиралд өдрийн цагаар өвлийн улиралтай харьцуулахад 2 дахин бага утгатай байгаа нь агаар мандал дахь аэрозолийн шугаман хэмжээс их буюу харьцангуй том хэмжээтэй аэрозол их хэмжээгээр түгсэнийг харуулж байна.

І. ДҮГНЭЛТ

Улаанбаатар хот орчмын агаар мандлын аэрозолийн оптик зузаан болон ангстромын экспонентийг тодорхойлсон дүнгээс дараах дүгнэлтүүдийг хийж байна. Үүнд:

Долгионы уртын муж бүрт тодорхойлогдсон аэрозолийн оптик зузааны утга өвлийн улиралд

бусад улиралтай харьцуулахад харьцангуй өндөр утгатай байна. Энэ нь Улаанбаатар хотод гэр хороололын галлагаанаас шалтгаалан их хэмжээний аэрозол үүсдэгтэй холбоотой.

Аэрозолийн оптик зузааны утга 4-р сард их дүнтэй байгаа нь хэт хуурайшилтаас үүдэн их хэмжээний тоосжилт үүсдэгтэй холбоотой байна.

Ангстромын экспонент параметрийн хувьд өвөлдөө харьцангуй өндөр утгатай, хаврын улиралд өвөлтэй харьцуулахад 2 дахин бага байгаа нь хавар том хэмжээст аэрозолийн хэмжээ эрс ихэсдэгийг харуулж байна.

-
- [1] T. Takamura, P. Khatri, B. J. Sohn, N. Tugjsuren, B. Thana, M. Campanelli and G. Padithurai, "Aerosol optical properties and aerosol direct effect over typical sites of SKYNET network", ICCASR (2013).
 - [2] Jianrong BI, Jinsen SHI, Yongkun XIE, Yuzhi LIU, Tamio TAKAMURA and Pradeep KHATRI "Dust Aerosol Characteristics and Shortwave Radiative Impact at a Gobi Desert of Northwest China during the Spring of 2012", Journal of the Meteorological Society of Japan, **92A**, 33, (2014).
 - [3] N. Tugjsuren and Ts. Baatarchuluun, "Aerosol optical properties over Ulaanbaatar and Mandalgovi, Mongolia", The 2014 International Workshop on SKYNET and Asian Lidar Network, (2014).
 - [4] Gregory L. Schuster, Oleg Dubovik and Brent N. Holben "Angstrom exponent and bimodal aerosol size", Journal of geophysical research, vol.111,D07207, doi:10.1029/2005JD006328, (2006).

Phase Change Properties in Chalcogenide Semiconductors

M. Batpurev,¹ and J. Battogtokh^{2,*}

¹ Department of Physics, School of Art and Science, National University of Mongolia, Ulaanbaatar

² Department of Electronics and Communication Engineering, School of Engineering and Applied Sciences, National University of Mongolia, Ulaanbaatar, Mongolia,

Since the discovery of chalcogenide semiconductors in 1955 at Ioffe Institute, it had passed half a century. During this time the unique properties of chalcogenide semiconductors were extensively studied, which had found many technical applications. In the past decades has seen an explosion of new interest to the chalcogenide semiconductors, due to their use as media for optical and electrical recording information based on “glass-crystal” phase transition. The properties of a high-resistance state (“OFF” state) and low-resistance state (“ON” state), which is resulting from the switching effect, i.e. phase change and nonlinearity of the current-voltage characteristics are studied intensively in recent year. In this research work, we studied the properties of phase change in chalcogenide semiconductors. Calculations was made by using Matlab.

PACS numbers: 74.70.Xa, 61.43.Dq, 47.20.Hw, 83.10.Tv.

I. INTRODUCTION

Since the discovery of chalcogenide semiconductors in 1955 at Ioffe Institute, it had passed half a century. During this time the unique properties of chalcogenide semiconductors were extensively studied, which had found many technical applications. In the past decades has seen an explosion of new interest to the chalcogenide semiconductors, due to their use as media for optical and electrical recording information based on “glass-crystal” phase transition. Several firms such as Intel, Samsung and others are working on flash memory devices based on phase-change memory (PCM) cells, which is a promising device for nonvolatile technology. The properties of a high-resistance state (“OFF” state) and low-resistance state, which is resulting from the switching effect, i.e. phase change and nonlinearity of the current-voltage characteristics are studied intensively in recent year. In this research work, we studied the properties of phase change in chalcogenide semiconductors.

II. ELECTRONIC-THERMAL BREAKDOWN

Thermal breakdown or thermal instability is the explosive increase in current and temperature of the sample, which occurs to the exponential dependence of conductivity on temperature. In this case electrons, receiving energy from the electric field, give it to the atomic lattice. Heating the lattice increases the concentration of electrons. The breakdown that occurs in the presence of an explicit dependence of the conductivity on the voltage of electric field is called “electronic-thermal breakdown”. It is known, that in semiconductors with conductivity of form

$$\sigma = \sigma_0 e^{\frac{\Delta E}{kT}}$$

breakdown heat can't be more than:

$$\Delta T = T - T_0 \approx \frac{kT_0^2}{\Delta E} \text{ for } \Delta E \gg kT_0$$

where T_0 is ambient temperature and ΔE is the activation energy of conduction. Thus maximum increase in conductivity, associated with Joule mechanism, can't be greater than:

$$\frac{\sigma(T)}{\sigma(T_0)} \approx \exp(1) \approx 3$$

But in subsequent studies show, that the increase in conductivity due to nonlinearity reaches the greater value. This implies, that nonlinearity observed in fields $F < F_{th}$ can't be explained not only by the Joule mechanism.

It was shown, that the dependence of conductivity on the field with good accuracy obeys:

$$\sigma \sim e^v$$

For composition $\text{Si}_3\text{Te}_{49}\text{As}_{33}\text{Ge}_6\text{Ga}_9$ conductivity was presented as:

$$\sigma = \sigma_0 e^{-\frac{\Delta E_a}{kT_0} + \frac{V}{V_0}}$$

The most significant conclusion made in these studies can be considered as the assumption of an existence of phase-change “semiconductor-metal”, which occurs at temperature, close to the temperature T_2 , at which linear dependence of $\frac{V_0}{T_0}$ on T_0 approaches to zero.

Also decreases linearly the value of V_{th} with increasing T_0 . Extrapolation to zero the dependence $V_{th}(T_0)$ gives the value of temperature, up to tens of

*Electronic address: batpurev@num.edu.mn

degrees, which matches with the values of T_2 . The temperature T_2 is called “temperature of switch”.

The most probable view of explicit dependence of conductivity on the field is:

$$\sigma = \sigma_0 e^{\frac{F}{F_0}}$$

Namely this dependence for single thin films and volumetric samples, taking into account the presence of a phase transition from the conductivity of

$$\frac{F_0}{T} = a(T^* - T)$$

at the temperature T^* is the most consistent with some experimental facts:

$$\sigma \sim e^{\frac{F}{F_0 T (T - T^s)}} \sim e^{\frac{F}{F (1 - \frac{T}{T_s})}}$$

III. MODELS FOR ELECTRONIC-THERMAL BREAKDOWN

Thermal breakdown in a sample plate with a thickness of L occurs in the “weak” place with a few more conductive than the rest of the material, and having a kind of thin filaments, with cross sectional q . Neglecting the release of heat in the material out of the thread, we form the heat balance equation, that determines the temperature of thread:

$$qL\sigma_0 F^2 e^{\frac{\Delta E}{kT}} = \lambda L(T - T_0)$$

on the left the total power Q , which distinguishes the entire volume of the thread qL and on the right is the term describing the heat Q_2 . Since the thread with a small cross section, the heat occurs throughout the length of the sample L and the λ is a heat transfer coefficient. Let's expand in Taylor's series around the T_0 :

$$T = T_0 + \Delta T$$

$$\sigma = \sigma_0 e^{-\frac{\Delta E}{kT_0} + \frac{\Delta E \Delta T}{kT_0^2}}$$

For thin films, the heat balance equation would look like:

$$qL\sigma_0 F^2 e^{\frac{\Delta E}{kT}} = \lambda L(T - T_0) \quad (1)$$

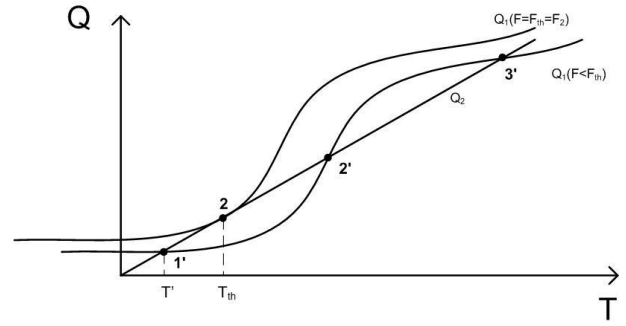


Figure 1: Heat Balance Equation

points 1', 2', 3' are representing solutions of equation (1) in the case, where $F < F_{th}$ and the conductivity is a type

$$\sigma = \sigma_0 e^{-\frac{\Delta E}{kT}}$$

When temperature was expanded near T_0 just like $T = T_0 + \Delta T$, the heat Q with increasing the temperature T , increases without limit, and the equation (1) has a only two roots, corresponding to 1', 2'.

Thus, for small values of F the equation (1) has only two solutions 1', 2' which are towards each other with increasing F and the temperature T' (point 1') corresponds to a slight heating in a fields smaller than the threshold value. The value of the field, when the solutions 1' and 2' merges, denote by F_{th} . Let's find this value.

IV. CALCULATION AND MODELING

A. General Case

Mathematically, the merge of the two roots of the equation (1) is a equality of derivation by temperature from the left and right sides of the equation.

$$\left\{ \begin{aligned} qLF^2\sigma_0 \frac{\Delta E}{kT_0^2} e^{\frac{\Delta E}{kT_0} + \frac{\Delta E}{kT_0^2}} &= \lambda L \\ qLF^2\sigma_0 e^{\frac{\Delta E}{kT_0} + \frac{\Delta E \Delta T}{kT_0^2}} &= \lambda L(T - T_0) \end{aligned} \right\}$$

and therefore

$$\left\{ \begin{aligned} T_{th} &= T_0 + \Delta T_{th} = T_0 + \frac{kT_0^2}{\Delta E} \\ F_{th} &= \sqrt{\frac{\lambda kT_0^2}{L\sigma_0 \Delta E}} e^{\frac{\Delta E}{2kT_0} - \frac{1}{2}} \end{aligned} \right\}$$

we obtain the roots of the systems of equation.

The meaning of T_{th} is the maximum temperature of the high-resistance state.

In further calculation, we will take

$$\Delta E = 0.8 \cdot 10^{-19} \text{ J and}$$

$$T_{th} = T_0 + \frac{kT_0^2}{\Delta E} = 316K$$

For convenience, let's make equation (1) dimensionless:

If we multiply by $\frac{k}{\Delta E}$, then

$$\frac{L\sigma_0}{\lambda} \frac{k}{\Delta E} F^2 \sigma_0 e^{-\frac{\Delta E}{kT_0}} = (T - T_0) \frac{k}{\Delta E}$$

we introduce dimensionless values of field f , and use:

$$f = \sqrt{\frac{q\sigma_0}{\lambda} \frac{k}{\Delta E}} F$$

$$f = 4.2 \cdot 10^{-7} F$$

instead of F .

Do the same for the T , and use dimensionless t instead of T :

$$t = \frac{kT}{\Delta E} \text{ and } t = 1.75 \cdot 10^{-4} T.$$

Let's rewrite the equation (1) in this form:

$$f^2 e^{-\frac{1}{t}} = t - t_0.$$

and find the roots, through graphical method to the point where the curve will intersect with the line.

The scientist of the time, considered the thermal break, as a harmful effect, since in those days it was always about the electrical strength of insulating materials. The situation changed after the discovery of the switching effect in chalcogenide semiconductors.

There was done theoretical works from the point of view of its beneficial use. In contrast to the breakdown of insulation materials, breakdown in halcogenide semiconductors was reversible under certain condition, i.e. halcogenide thin film can withstand a large number of switches, each time restoring their properties, which is important for technical applications.

B. S-Shaped Current-Voltage Characteristics of the Halcogenide Semiconductor.

An importance reason for the disappearance of S-shaped current-voltage characteristics was pointed out in a 1966 by Chirkin L.K., Lototskii B.Yu. [2].

According them:

$$\begin{cases} qLF_{1.2}^2 \sigma_0 e^{-\frac{\Delta E}{kT_{1.2}}} = \lambda L(T_{1.2} - T_0) \\ qLF_{1.2}^2 \sigma_0 \frac{\Delta E}{kT_{1.2}^2} e^{-\frac{\Delta E}{kT_{1.2}}} = \lambda L \end{cases}$$

$$(2)$$

Expanding near temperature T_0 , we get:

$$\lambda L(T_{1.2} - T_0) \frac{\Delta E}{kT_{1.2}^2} = \lambda L$$

And this leads as to a quadratic equation for temperature:

$$T_{1.2}^2 - \frac{\Delta E}{k} T_{1.2} + \frac{\Delta E T_0}{k} = 0$$

The solutions are:

$$T_{1.2} = \frac{\Delta E}{2k} \left(1 \pm \sqrt{1 - \frac{4kT_0}{\Delta E}} \right) \approx T_0 \pm \frac{kT_0^2}{\Delta E}$$

(at condition $\frac{\Delta E}{kT_0} > 4$). In our case T_2 is a T_{th} .

Let's find a differential conductivity. We can write a current by the product of conductivity and voltage.

$$I = \sigma F = F \sigma_0 e^{-\frac{\Delta E}{kT}}$$

then the differential conductivity is a first order differential from current by voltage. By substituting above expression, gives:

$$\frac{dI}{dF} = \sigma_{differ} = \sigma_0 e^{-\frac{\Delta E}{kT}} + F \sigma_0 e^{-\frac{\Delta E}{kT}} \frac{\Delta E}{kT^2} \frac{dT}{dF}$$

Let's consider an implicit function $\Phi(T(F), F)$:

$$\Phi(T(F), F) = qLF^2 \sigma_0 e^{-\frac{\Delta E}{kT}} - \lambda L(T(F) - T_0) = 0$$

$$\begin{cases} \frac{d\Phi}{dT} = qLF^2 \sigma_0 \frac{\Delta E}{kT^2} e^{-\frac{\Delta E}{kT}} - \lambda L = 0 \\ \frac{d\Phi}{dF} = 2qLF \sigma_0 e^{-\frac{\Delta E}{kT}} \end{cases}$$

From this we get a differential form of conductivity

$$\begin{aligned} \sigma_{diff} = \frac{dI}{dF} &= \sigma_0 e^{-\frac{\Delta E}{kT}} + F \sigma_0 e^{-\frac{\Delta E}{kT}} \frac{\Delta E}{kT^2} \frac{2qLF \sigma_0 e^{-\frac{\Delta E}{kT}}}{qLF^2 \sigma_0 e^{-\frac{\Delta E}{kT}} \frac{\Delta E}{kT^2} - \lambda L} \\ &= \frac{-qLF^2 \sigma_0^2 e^{-\frac{\Delta E}{kT}} \frac{\Delta E}{kT^2} - \lambda L \sigma_0 e^{-\frac{\Delta E}{kT}}}{qLF^2 \sigma_0 \exp(-\frac{\Delta E}{kT}) \frac{\Delta E}{kT^2} - \lambda L} \end{aligned}$$

From the expression of differential conductivity, we can see current-voltage characteristics has two vertical sections, at value of the field $F_2 = F_{th}$ and F_1 . For these values of field $\sigma_{differ} = \infty$, and in

the interval between F_1 and F_2 , for one value of field correspond three value of current. In other words at the values of F_1 and F_2 the differential conductivity goes to infinity, and between them three values of current is located. Thus we can assume, that current-voltage characteristics has a S-shape.

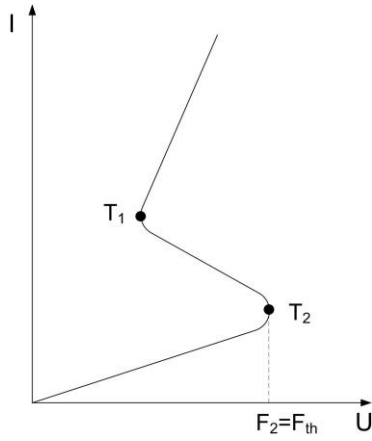


Figure 2: Current-Voltage Characteristics

C. Explicit Form of Conductivity

But later it turned out, that some of the features of the electrical transmission can be explained, if we take into account in the calculation of the explicit dependence of the conductivity in the form $e^{-\frac{F}{F_0}}$. Thus conductivity in the case of electronic-thermal breakdown has a form:

$$\sigma = \sigma_0 e^{-\frac{\Delta E}{kT} + \frac{F}{F_0}}, \text{ where } F = aT \text{ (} a = \text{const)}$$

Experimentally, in some range of temperature and voltage we can write the explicit form of conductivity:

$$\sigma = \sigma_0 e^{-\frac{\Delta E}{kT} + \frac{F}{F_0(1-\frac{T}{T_s})}}$$

This can lead us to apparently phase change. In the exponent, two terms

$$-\frac{\Delta E}{kT} + \frac{F}{F_0(1-\frac{T}{T_s})} = 0$$

are cancelling each other and we get the constant conductivity $\sigma = \sigma_0$, as in metal. This phase change is meant not on the structure of semiconductors, but the conductivity, which depends on temperature and voltage is constant and we consider impact of such a phase transition to the electronic-thermal instability.

And so we have the equation, which changes:

$$qLF^2\sigma_0 e^{-\frac{\Delta E}{kT} + \frac{F}{F_0(1-\frac{T}{T_s})}} = \lambda q(T - T_0) \quad (3)$$

To make the equation above dimensionless, let's make substitution as before:

$$f = \sqrt{\frac{L\sigma_0 k}{\lambda \Delta E}} F \text{ for field, and } t = \frac{kT}{\Delta E} \text{ for temperature}$$

and we get the dimensionless form of the equation (3):

$$f^2 e^{-\frac{1}{t} + \frac{F}{aT_s(T_s-T)}} = t - t_0$$

so therefore:

$$\frac{F}{a(1-\frac{T}{T_s})} = \frac{fF_0}{a(1-\frac{t}{t_s})} = \frac{f}{f_0(1-\frac{t}{t_s})}$$

Where $f_0 = a\sqrt{\frac{L\Delta E}{\lambda k}}$, $a = 6 \cdot 10^8 \text{ V/m}$, and t is a dimensionless temperature, f is a dimensionless field.

Considering this, we get:

$$f^2 e^{-\frac{1}{t} + \frac{f}{f_0(1-\frac{t}{t_s})}} = t - t_0 \quad (4)$$

V. RESULTS OF CALCULATION

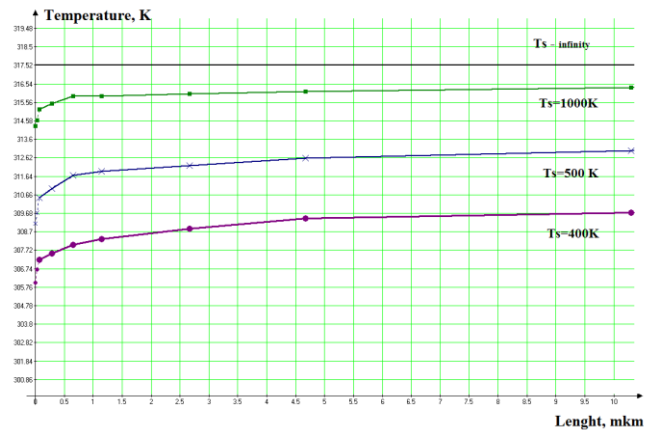
A. Dependence of Heat from the Thickness of Sample

Let's solve the equation (4) graphically. We take three values of T_s : $T_s = 1000\text{K}$, 500K , 400K . For each value of T_s , vary the f_0 until the straight line $t - t_0$ will be tangent to curve:

$$f^2 e^{-\frac{1}{t} + \frac{f}{f_0(1-\frac{t}{t_s})}}$$

The intersection point F_{th} , T_{th} is a switching temperature and field. The thickness of sample depends from f parameter as below:

$$L = \frac{\lambda k f_0^2}{a^2 \Delta E}$$

Figure 3. Dependence of heat ΔT , required for electronic-thermal switch, at different values of T_s

As can be seen from the Figure 3, for $T_s = 1000\text{K}$, dependence of heating temperature ΔT , from thickness of sample is weaker. This weak dependence due to the fact that the phase change transition temperature is far from the phase change. With a decrease of T_s to room temperature, dependence is increasing.

As a result, accounting phase change semiconductor-metal transition occurring in a strong electric field, reduces this heating ΔT , required for electronic-thermal switch.

This reduction is expressed more strongly, if the thickness of sample is smaller. This means that the electron thermal switch in thin films, in a strong electric field occurs at much lower temperature than the bulk samples

B. Conclusion

The main goal achieved in this work is the fact, that inclusion of the phase change semiconductor-

metal transition, occurring in a strong electric field reduces that heating is required for electronic – thermal switch. This reduction is expressed more strongly, if the thickness of sample is smaller. This calculation takes into account, that conductivity has a nonlinearity form of $\sigma \sim e^{\frac{F}{F_0}}$, and effect of this nonlinearity on the characteristics of electron thermal instability.

-
- [1] K.D.Tsendin, E.A.Lebedev, A.B.Shmelkin Instability with the S and N shaped current-voltage characteristics and phase change in halcogenide glassy semiconductors and polymers, Solid State Physics, vol.47, issue 3, Ioffe Physical Technical Institute, (2005).
 - [2] Yu.B.Lototskii, L.K.Chirkin Negative Differential resistance due to mirco heat Solid State Physics, vol 6, Ioffe Physical Technical Institute, (1967).
 - [3] N.A.Bogoslovskii, K.D.Tsendin Physics effects switching and memory in chalcogenide glassy semiconductors, Physics and semiconductors, vol 46, issue 5, Ioffe Physical Technical Institute, pp. 577-608, (2012).
 - [4] B.T.Kolomiets, N.A.Goriynova Semiconducting properties of chalcogenide glasses, Journal of Technical Physics, vol 25, issue 6,, pp. 984-994 (1955).

Улаанбаатар Хотын Зарим Сургууль, Цэцэрлэгийн Байрны Агаар Дахь Радоны Судалгаа

Б. Уранчимэг*, Н. Норов

Монгол улсын их сургууль, Цөмийн физикийн судалгааны төв

Энэхүү өгүүллээр Улаанбаатар хотын 120 их, дээд болон ерөнхий боловсролын сургууль болон цэцэрлэгийн 367 байрлалд радоны эзлэхүүний идэвхийг РАД7 багажаар хэмжиж, радоноос авах цацрагийн эффектив тунг тодорхойлж, Монгол Улсын зөвшөөрөгдөх хэмжээтэй харьцуулан, хэмжилтийг өгөгдлүүдийг ашиглан математик статистикийн аргаар түгэлтийн функцийг байгууллаа.

Түлхүүр үг: радон, торон, актинон, радоны эзлэхүүний идэвх, эффектив тун

I. УДИРТГАЛ

Манай орны хувьд цахилгаан станц, уурын зуухны цацраг идэвх ихтэй хаягдал үнсийг ашиглаж үнсэн блок үйлдвэрлэх, ханын материалд ашиглах, байшингийн дулаалгад шууд ашиглах зэрэг сөрөг үзэгдлүүд байдаг. Энэ нь хэдий хэмжээний цацраг идэвхтэй үнс ашиглаж байгаагаас шалтгаалж үйлдвэрлэж байгаа зарим барилгын материал цацрагийн аюулгүй байдлын шаардлага хангахгүй тохиолдолд тэнд ажиллаж, амьдарч, суралцаж байгаа хүмүүсийн эрүүл мэндэд сөрөг нөлөө үзүүлэхийг үгүйсгэх аргагүй.

Радон нь ураны цацраг идэвхт задралын бүлд радийн задралаар үүсдэг цацраг идэвхтэй инертийн хий юм. Байгалийн цацрагийн дэвсгэр түвшний эх үүсвэрийн 55%-ийг радон эзлэх бөгөөд түүний 69.3%-ийг барилга байгууламж дахь радон, 18.5%-ийг цооногийн усны радон, 9.2%-ийг гаднах агаар дахь радон, 2.5%-ийг барилгын материалын радон, 0.5%-ийг хүн амын хэрэглээ ундны усны радон тус тус эзэлж байна [1]. Радон нь хөрснөөс, гадна агаар, түүнчлэн барилгын материал, шугам хоолойн ус, ундны ус зэргээр орон байраны агаарт хуримтлагддаг байна [2,3]. Радоны хийгээр амьсгалсан тохиолдолд радоны богино настай задралын бүтээгдэхүүний ионжуулах альфа бөөм уушгины эд эстэй харилцан үйлчлэн хавдар үүсгэх, цаашлаад альфа бөөм генетикийн эсэд гэмтэл учруулж ДНК-ийн түвшинд нөлөө үүсгэж болдог [1;3]. Радоны агаар дахь агуулга намрын сүүлчээс өвлийг дуустал хамгийн их, хаврын сүүлчээс зуныг дуустал хамгийн бага, шөнө, өглөө, үүрээр хамгийн өндөр, хагас үдэд хамгийн бага байдаг [1-5].

Улаанбаатар хотын хүн амын дийлэнх хувийг эзэлдэг сургууль, цэцэрлэгийн насныхны сургууль, цэцэрлэгийн барилгын орон байрны агаар дахь радоны эзлэхүүний идэвхийн хэмжээг судалж, үндэсний болон

олон улсын зөвшөөрөгдөх хэмжээтэй харьцуулах, мөн радоноос авч байгаа цацрагийн тунг үнэлж, хэмжилтийг өгөгдлүүдийг ашиглан математик статистикийн аргаар түгэлтийн функцийг байгуулахыг зорьсон.

Дэлхийн эрүүл мэндийн байгууллага (World Health Organization)-аас гаргасан орон байрны агаарын радоны судалгаагаар насанд хүрэгчдээс илүү цэцэрлэг, сургуулийн насныхан, мөн тамхи татдаг хүмүүсээс илүүтэй тамхи татдаггүй хүмүүс илүү өртдөг болохыг тогтоосон байна [1].

II. ОНОЛЫН ХЭСЭГ

XV-XVI зууны үед хар тугалганы хүдэр олборлох үед Австрийн уурхайчид нууцлаг “Уулын өвчин”-өөр үхэх нь их байв. 1879 онд Хартинг ба Хессе нар энэ уурхайчдын мэргэжлийн өвчлөл нь уушигны рак байж болох тухай бичиж байв. 1987 оноос Рак өвчний судалгааны Олон Улсын Төв (CIRC, Лион, Франц) хүмүүст уушгины рак үүсгэгч радоны задралын бүтээгдэхүүнүүдийг ангилжээ. 1994 онд Рак Өвчлөлийн Үндэсний Дээд Сургууль газар доорх уурхайн 11 ажилчдыг хамруулсан судалгаа шинжилгээ явуулав. Энэ шинжилгээ нь 65 мянгаас илүү уушгины ракаар өвчилсөн тохиолдол гарчээ. Зарим үзүүлэлтүүдээр радон нь хүүхдэд насанд хүргэгчдээс илүү мэдрэмтгий байгааг харуулжээ [3;4].

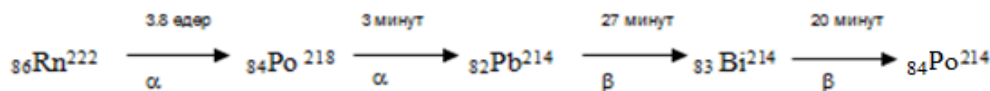
Радон (^{222}Rn) нь өнгө, үнэр, амтгүй, цацраг идэвхт, агаараас 7.5 дахин хүнд хий байдалтай, альфа бөөм цацаруулдаг ба радоны бүлийн цацраг идэвхтэй гэж нэрлэгдэх хэд хэдэн цацраг идэвхтэй нэгдлийг үүсгэдэг. Радоны байгалийн 3 цацраг идэвхт изотоп байдаг [2]. Үүнд:

- Радон ^{222}Rn (Rn), $T_{1/2} = 3.82$ хоног
- Торон ^{220}Rn (Tn), $T_{1/2} = 55.6$ с

*Electronic address: Urnaa_r@yahoo.com

- Актинон ^{220}Rn (An), $T_{1/2} = 3.96$ с Энд: $T_{1/2}$ – хагас задралын үе
Радоны задралын богино наст

бүртгэдэг. Детектор цахилгаан соронзон оронтой бөгөөд эерэг цэнэгтэй бөөмийг өдөөж өгдөг. Энэ нь ямар изотоп (полони-218, полони-



Зураг 1. Радоны задралын бүтээгдэхүүнүүд

бүтээгдэхүүнүүд (^{218}Po , ^{214}Pb , ^{214}Bi , ^{212}Pb , ^{212}Bi , ^{211}Pb , ^{211}Bi)-ийн задралыг 1-р зурагт харуулав.

Ураны хольцтой чулуулаг, хөрсөнд радоны агуулга их байна. Байгалийн хий, ус, гаднах агаар, барилгын материал, барилга доорх хөрсөнд байдаг ба радон нь хана, шал, усан хангамжийн систем, холболтын хоолойнуудаар дамжин, орон байранд нэвтэрч ордог. Орон байрны агаар дахь радоны эзлэхүүний идэвх гаднах агаар дахь хэмжээнээс дунджаар 8 дахин их байдаг.

Радоны хийгээр амьсгалсан тохиолдолд радоны богино настай задралын бүтээгдэхүүнүүд альфа цацрагийг гаргаснаар уушгины эд эстэй харилцан үйлчлэн өвчлөл, хавдар үүсгэх ба цаашлаад ДНК-д гэмтэл учруулдаг. Радоны хий, тамхи татах хоёр зэрэгцэхээр уушгинд маш ноцтой аюул буюу хорт хавдар үүсгэдэг. Дэлхийн янз бүрийн нутаг дэвсгэрт орон байрны агаар дахь радоны дундаж эзлэхүүний идэвх $11\text{--}140\text{Бк/м}^3$ ба Европ, хойд Америкт радоны дундаж эзлэхүүний идэвх $10\text{--}50\text{Бк/м}^3$, Скандиновийн хойгийн орнуудад 20000Бк/м^3 -д хүрдэг байна [1-4; 14]. Агаар дахь радоны эзлэхүүний идэвхийн хэмжээ хамгийн их улсууд: Казакстан $\sim 5000\text{Бк/м}^3$; Солонгос- 1350Бк/м^3 ; Иран – 3070Бк/м^3 ; БНХАУ- 380Бк/м^3 илэрсэн байна. Олон улс оронд орон байрны агаарт радоны зөвшөөрөгдөх хэмжээг тогтоож ($150\text{--}400\text{Бк/м}^3$) стандартчилсан байдаг [1]. Манай орны хувьд мөн орон байрны радоны зөвшөөрөгдөх хэмжээг хуучин ($<200\text{Бк/м}^3$) болон шинэ ($<100\text{Бк/м}^3$) барилгын хувьд тогтоосон стандартыг мөрддөг [7].

III. СУДАЛГААНЫ АРГА, АРГА ЗҮЙ

Судалгаанд Америкийн нэгдсэн улсад 2009 онд үйлдвэрлэсэн, $-40\text{--}+60^\circ\text{C}$ температурт ажилладаг, нэг минутанд 1 литр агаар сорж, ундны ус, ажлын болон орон байрны агаар, хөрсний хийн дэх радон болон тороны $4\text{--}40000\text{Бк/м}^3$ эзлэхүүний идэвхийг тодорхойлох цахиур детектор бүхий зөөврийн РАД7 багажийг ашиглав. Цахиурт детектор нь $0\text{--}10\text{МэВ}$ энергийн мужид альфа бөөмийн энергийг

214 гэх мэт)-ын цацраг болох түүнчлэн шууд шинэ үүссэн радоныг хуучин радон, торонгоос ялгаж дохио өгдөг. ^{222}Rn нь альфа задралд орж эерэг цэнэгтэй ^{218}Po ион болж хувирдаг. Цахилгаан орноор энэ эерэг цэнэгтэй ионыг удирдан детекторт бүртгэдэг. ^{218}Po изотопын хагас задрал үе богино (3.1 минут) учраас детекторын гадарга дээр туссан альфа бөөмийн бүртгэж, альфа бөөмийн энергитэй пропорционалаар цахилгаан соронзон долгион болгон хувиргадаг.

РАД7 зөвхөн ^{218}Po -ийн дохиог ашиглан радоны эзлэхүүний идэвхийг тодорхойлох бөгөөд хагас задралын үе урттай радоны задралын дараа дараагийн бүтээгдэхүүнүүдийг бүртгэхгүй. Орон байрны төв хэсэгт, шалнаас дээш $75\text{--}120\text{см}$, цонх, хана, задгайзуух, хаалга болон нарны шууд тусгалаас аль болох хол байлган хэмжинэ [6].

IV. СУДАЛГААНЫ ҮР ДҮН

Судалгаанд нийт 6 дүүргийн 120 сургууль, цэцэрлэгийн 367 байрлал (хичээлийн анги, танхим, подваль, шатны хөндий)-д радоны хэмжилт хийв. Барилгын насжилтийн хувьд 1960-1980-аад оны барилгууд дийлэнх хувийг эзэлсэн.

Хүснэгт 1: Хэмжилтэд хамрагдсан нийслэлийн сургууль, цэцэрлэгийн болон хэмжилтийн тоо

Дүүрэг	Нийт сургууль	Хэмжилтийн тоо	Стандарт-с хэтэрсэн хэмжилтийн тоо
Хан-уул	17	47	24
Чингэлтэй	18	57	14
Сүхбаатар	28	90	30
Баянзүрх	20	66	20
Баянгол	16	56	20
Сонгиноха йрхан	21	60	26
Нийт	120	376	134

I. ОРОН БАЙРНЫ АГААР ДАХЬ РАДОНООС АВАХ ЭФФЕКТИВ ТУНГИЙН ЧАДАЛ:

Орон байрны агаар дахь радоны эзлэхүүний идэвхээс эффектив тунг үнэлэхийн тулд агаар дахь радоны эзлэхүүний идэвхийг тунгийн чадалд шилжүүлэх коэффициент, радоны задралын бүтээгдэхүүний хоорондох цацраг идэвхийн тэнцвэрийн коэффициент, тухайн байранд хүүмүүсийн байрлах хугацаа зэргийг авч үзнэ. 2000 оны UNSCEAR тайланд радоны эзлэхүүний идэвхийг тунгийн чадалд шилжүүлэх коэффициентийг Бк/м^3 бүрт 9.0 мЗв/цаг байхаар үнэлэн, орон байр дахь ^{222}Rn цацраг идэвхийн тэнцвэрийн коэффициент 0.4, сургууль дотор сурагч, оюутны байх хугацааны коэффициент 0.3 гэж үзвэл, сургууль, цэцэрлэгийн тухайн байршилд сурагч оюутны жилд авах эффектив тун (H_E)-г дараах томъёогоор тооцоолно [3;9]:

$$H_E = C_{Rn} * F * T * D \quad (1)$$

C_{Rn} – ^{222}Rn –ы эзлэхүүний идэвх, Бк/м^3

F – Агаар дахь ^{222}Rn -ы цацраг идэвхийн тэнцвэрийн коэффициент- 0.4

T – Сургууль дотор сурагч, оюутны байх хугацаа ($0.3 \cdot 24 \text{ цаг} \cdot 365.25 \cong 2630 \text{ цаг/жил}$),

D – Тунгийн чадалд шилжүүлэх коэффициент-1 Бк/м^3 бүр дэх эзлэхүүний идэвх нь $9.0 \cdot 10^{-6} \text{ мЗв/цаг}$ тунд харгалзана.

Судалгаагаар агаар дахь радоны эзлэхүүний идэвх хамгийн их 550 Бк/м^3 байхад тухайн байранд хичээлд сууж байгаа сурагчийн жилд авах эффектив тун 5.2 мЗв (хүснэгт 1) болно.

Хүснэгт 2: Радоны эзлэхүүний идэвхээс жилд авах цацрагийн эффектив тунг тооцоолсон дүн

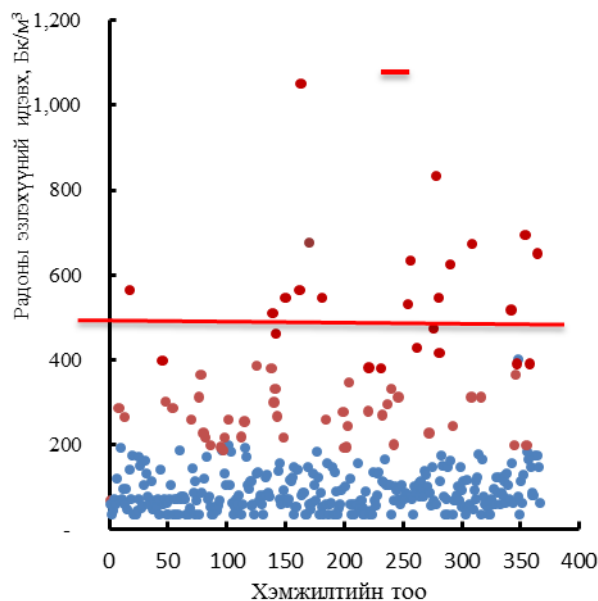
I. МОНГОЛ УЛСЫН ҮНДЭСНИЙ

Радоны эзлэхүүний идэвх, Бк/м^3	Эффекти в тун, мЗв	Радоны эзлэхүүний идэвх, Бк/м^3	Эффекти в тун, мЗв
50	0.47	170	1.61
80	0.76	190	1.80
100	0.95	200	1.89
120	1.14	400	3.79
150	1.42	550	5.21

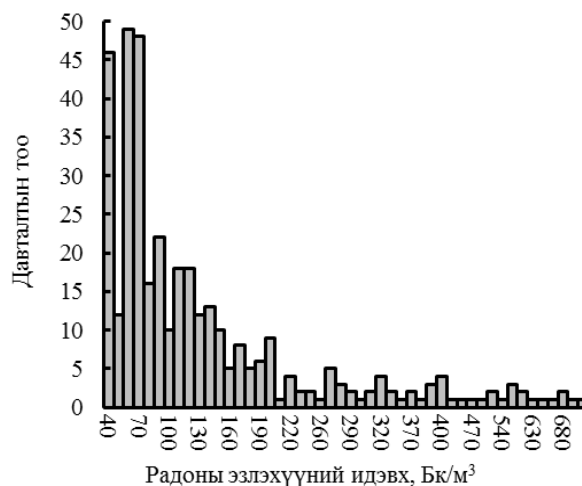
СТАНДАРТ (MNS 5627:2006)-ТАЙ ХАРЬЦУУЛСАН ДҮН:

Судалгааны үр дүнд математик статистик анализ хийх зорилготой хэмжилтийн утгаар

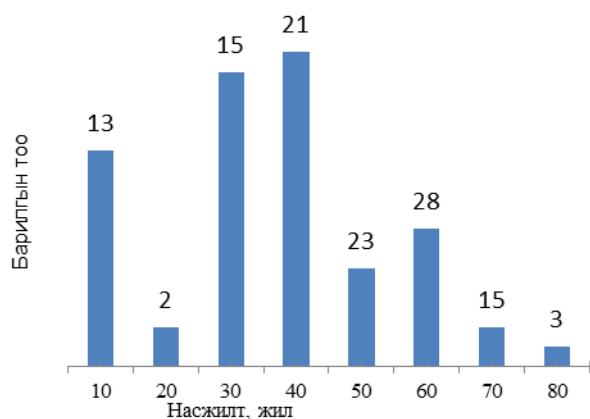
байгуулсан гистограммыг 4-р зурагт харуулав. Хэмжилтийн тоо: $n=367$, 120 сургууль, цэцэрлэг, арифметик дундаж 138 Бк/м^3 , геометр дундаж 99 Бк/м^3 , хамгийн их утга 1052 Бк/м^3 , хамгийн бага утга 34 Бк/м^3 , медиан 86 Бк/м^3 байна.



Зураг 2: Хэмжилтээр хийсэн дүнг Монгол улсын үндэсний стандарт (MNS 5627:2006) тай харьцуулан үзүүлэв.



Зураг 3: 1940-өөд онд баригдсан барилгыг 80 настай гэж үзнэ.



Зураг 4. Радоны эзлэхүүний идэвхийн өөрчлөлтийн гистограм

II. ДҮГНЭЛТ

1. Нийслэлийн 6 дүүргийн 5 их дээд, сургууль, 63 ерөнхий боловсролын сургууль, 52 цэцэрлэгийн нийт 120 байгууллагын орон байрыг хамруулсан ба нэг сургууль, цэцэрлэгт дунджаар 2-4 өрөө, тасалгаанд буюу нийт 367 радоны хэмжилт хийлээ.
2. Хэмжилтийн дүнгээс харахад 200 Бк/м³-ээс дээш хэмжээтэй 62 тохиодол, доош хэмжээтэй 305 тохириол, харин 200-400 Бк/м³ хоорондох утга 49 тохиодол тус тус байна.
3. Судалгааны дүнгээс үзвэл цацраг идэвхт радоны агууламж 367 байрлалд МУ-ын

үндэсний стандарт хэмжээнээс өндөр буюу 202-1600 Бк/м³ хэмжээтэй илэрсэн байна. Үүнд 5 их дээд, 28 ерөнхий боловсролын сургууль, 24 цэцэрлэгийн подваль, 1-р давхрын хичээлийн анги танхим, шатны хөндий хамаарч байна.

4. Их дээд болон ерөнхий боловсролын сургууль, цэцэрлэгийн барилгын насжилтын хугацааг 1940-2010 он хүртэл арав, арван жилээр жилээр нь гаргалаа. Судалгаанд сонгосон нийт барилгын 13 хувь нь 2007 оноос хойш буюу 9 жилийн настай, 17 хувь нь 20-30 жилийн настай, 68 хувь нь 40-60 жил, 2 хувь нь 80 аас дээш жилийн насжилттай барилга хамрагдсан болно.
5. Нийт радоны 367 хэмжилтийн арифметик дундаж 138 Бк/м³, геометр дундаж 99 Бк/м³, хамгийн их утга 1052 Бк/м³, хамгийн бага утга 34 Бк/м³ байна. Хэмжилтийн хамгийн их утга нь 1052 Бк/м³ байгаа нь БНСУ-ийн орон байрны агаар дахь радоны эзлэхүүний идэвхийн хамгийн их утга (1350 Бк/м³)-тай ойролцоо байна.
6. Радоны эзлэхүүний идэвхийн утга 550 Бк/м³ байхад сурагчдын авах эффектив тун 5.2мЗв/жил нь хүн амын жилд зөвшөөрөгдөх хэмжээ-1 мЗв/жил-ээс 5.2 дахин их болно.

- [1] Дэлхийн эрүүл мэндийн байгууллага, WHO, "HANDBOOK ON INDOOR RADON", 2009 он
- [2] WHO, UNSCEAR 2006 Report "Effects of ionizing radiation",
- [3] Олон улсын атомын энергийн агентлаг IAEA; Basic safety standards: DS421: Protection of the Public against Exposure Indoors due to Natural Sources of Radiation, 2012 он,
- [4] Олон улсын атомын энергийн агентлаг IAEA; Radiation Protection and Safety of radiation Sources: International Basic Safety Standards, General Safety Requirements Part 3, 2011 он,
- [5] Ус, хөрс, агаарт радоныг тодорхойлох РАД 7 багажтай ажиллах арга аргачлал, 2009 он
- [6] MNS 5627:2006 "Орон байрны агаар дахь радоны зөвшөөрөгдөх хэмжээ",
- [7] MNS 5632:2006 "Усан дахь радоны хэмжээг тодорхойлох гаммаспектрометрийн арга",
- [8] Цацрагийн аюулгүйн норм; цацрагийн ариун цэврийн үндсэн дүрэм-83, 1984 он,

ТРИГА Төрлийн Судалгааны Реакторын Реактивитийн Анализ

Б.Туул¹, Н.Норов², Бат.Мөнхбат²

¹Цөмийн Энергийн Комиссын Ажлын алба,

²Монгол улсын их сургууль, Цөмийн физикийн судалгааны төв

Энэхүү ажлаар Тайланд улсын TRP-1/M1 судалгааны реакторыг 1.2 МВт, 1.5 МВт, 2.0 МВт тогтвортой чадалтай ажиллаж байх тохиолдлуудад реактивитийн өөрчлөлтийг судлав. Эдгээр тохиолдолд реактивитийг 0.5 \$, 1.0 \$ гэж сонгон авч реакторын чадал, түлшний дундаж температур, реактивитийн хамаарлыг EUREKA-2RR код ашиглан тооцоолов. Энэ реакторын чадал нь импульсын горимд 2000 МВт хүрдэг. Реакторын голомтоос шарагдаж байгаа дээжийг сугалахад үүсэх реактивитийн хамгийн их утга 1.0 \$ байхад реакторын чадал 18.1 МВт болж байна. Энэ нь импульсын горимд ажиллах хамгийн их чадалтай харьцуулахад маш бага байна. Мөн энэ үед түлшний максимум температур 394⁰ C байгаа нь түүний хайлах температур (650⁰ C)-аас бага байна. Иймд реакторын ажиллагаанд ямар нэгэн доголдол үүсэхгүй юм.

This study investigated relation between reactor power, average fuel temperature and reactivity using EUREKA-2RR code for steady state of the TRR-1/M1 research reactor when initial power values are 1.2 MW, 1.5 MW and 2.0 MW, reactivity values are \$ 0.5 and \$ 1.0 and SCRAM signal is considered. The maximum pulsing power of TRR-1/M1 reaches 2000 MW. When the maximum reactivity which allowed to insert to irradiation hole of TRR-1/M1 is \$ 1.0, the peak power is 18.1 MW. It is relatively low compared to the maximum pulsing power. Also, the maximum fuel temperature is 394⁰ C, which is less than its melting temperature (650⁰ C). In this case, any failure in the reactor safe operation will not arise.

Түлхүүр үг: реактивити, реакторын чадал, түлшний температур, EUREKA-2RR,

I. ОРШИЛ

Дэлхийн 71 оронд 773 сургалт, судалгааны реактор ажиллуулж байснаас одоо 247 реактор ажиллаж байна. Манай улс сургалт, судалгааны реактортой болж цөмийн салбарын мэргэжилтэн бэлтгэх, эмнэлгийн оношлогоо, эмчилгээний изотоп үйлдвэрлэх, нейтрон идэвхжилийн шинжилгээ хийх зэрэгт ашиглах зорилт тавьж байна[1].



Зураг 1. Марокко улсын ТРИГА МАК-II судалгааны реакторын усан сан

Судалгааны реакторын эрчим хүчний реактороос ялгагдах онцлог нь түүнд үүсэх дулааны энергийг биш харин нейтроны урсгалыг ашиглахад оршино. Судалгааны реакторын гол хэрэглээ нь сургалт, судалгаа болон цөмийн олон төрлийн туршилт судалгаанд шаардлагатай нейтроны үүсгүүр болгон ашиглах явдал юм. Судалгааны реакторын дулааны чадал нь тэгээс (критик эвлүүлэг) 200 МВт хүртэл байдаг.

Судалгааны реакторын ажиллагаа нь эрчим хүчний реактороос хялбар бөгөөд бага температурт ажилладаг. Түүнээс гадна судалгааны реактор овор хэмжээ бага учраас их дээд сургуулиудад лаборатори байдлаар ашиглах нь түгээмэл байдаг. Мөн маш бага хэмжээний түлш хэрэглэдэг учраас ашигласан түлшний хаягдал маш бага. Өмнө нь судалгааны реакторт түлш болгон өндөр баяжилттай уран ашигладаг байсан бол сүүлийн үед 20% хүртэл бага баяжилттай уран хэрэглэдэг болж байна.

Судалгааны реактор дээр гарах нейтроныг ашиглан материалын судалгаа, үл эвдэх сорил, нейтрон идэвхжилийн шинжилгээ хийх, эмнэлгийн болон аж үйлдвэрийн зорилгоор хэрэглэх цацраг идэвхт изотоп үйлдвэрлэх, трансмутацийн аргаар цэвэр хагас дамжуулагч үйлдвэрлэх, гоёлын чулууны өнгийг өөрчлөх зэрэг амьдралд өдөр тутам хэрэглэгдэх зүйлсийг үйлдвэрлэж байна. Түүнээс гадна цацрагийн хамгаалалт, аюулгүй байдал, реакторын үйл ажиллагааг удирдах зэрэгт оюутан суралцагчдыг дадлагажуулж цөмийн технологийг төрөл бүрийн салбарт ашиглах боломжийг бүрдүүлэх чухал ач холбогдолтой юм[2,3].

II. СУДАЛГААНЫ ЗОРИЛГО

TRP-1/M1 судалгааны реакторын хувьд шууд унтрах систем нь хоёр тохиолдолд ажилладаг[4]. Үүнд:

1. Реакторыг хурдан зогсоох чадал (SCRAM)
 2.2 МВт-аас хэтрэхэд удирдлагын савааг голомтод шууд оруулж, реакторыг унтраана.
 2. Түлшний температур 600⁰ С-ээс их болоход удирдлагын савааг оруулж, реактор шууд унтарна.

Энэхүү судалгааны ажилд TRR-1/M1 реакторын реактивитийн анализыг гүйцэтгэхийн тулд дараах зорилго тавьсан.

- Реактор 1.2, 1.5, 2.0 МВт чадалтай тогтвортой горимоор ажиллаж байх үед удирдлагын савааг сугалан гаргахад реакторын чадал, түлшний температур, реактивитийн өөрчлөлтийн анализ хийх. Энэ үед реакторыг шууд зогсоох чадлын утгыг 2.2 МВт гэж сонгон авч реактивитийн утгыг 0.5 \$ гэж авч үзэх.
- Реактор 1.2, 1.5, 2.0 МВт чадалтай тогтвортой горимоор ажиллаж байх үед шарлагын дээжийг сугалан гаргахад реакторын чадал, түлшний температур, реактивитийн өөрчлөлтийн анализ хийх. Энэ үед реакторыг шууд зогсоох чадлын утгыг 2.2 МВт гэж сонгон авч реактивитийн утгыг 1.0 \$ гэж авч үзэх.

III. ОНОЛЫН ХЭСЭГ

Цөмийн реакторын кинетикт реактивити гэдэг нь цөмийн реактор критик төлвөөсөө хазайх хазайлтыг илэрхийлдэг үзүүлэлт юм. Реакторын хяналтын савааг ашиглан реактивитийг удирддаг. Реакторын голомтод явагдаж байгаа цөмийн хуваагдах урвалаас үүсч байгаа нейтрон олширох эффектив коэффициент ($k_{эф}$) нь үүсч байгаа нейтроны тоо, шингэсэн болон алдагдсан нейтроны тоогоор тодорхойлогддог.

$$K_{эф} = \frac{\text{нейтрон үүсэх хурд}}{\text{нейтрон шингэх хурд} + \text{алдагдах хурд}}$$

Хэрвээ $K_{эф} = 1$ бол цөмийн гинжин урвал өөрийгөө дэмжих буюу дараагийн урвалд шаардлагатай нейтроныг хангалттай үйлдвэрлэж байна гэсэн үг. Өөрөөр хэлбэл реактор критик төлөвт оршин тогтмол чадалтай ажиллана.

Реактивити:

$$\rho = \frac{K_{эф} - 1}{K_{эф}}$$

гэж тодорхойлогдоно.

$K_{эф} = 1$ үед реактивити 0 байна. Реактивитийн абсолют тоон утга нь критик төлвөөсөө хэр хол байгааг харуулах ба. сөрөг

утга нь реактор унтрах, эерэг утга нь суперкритик төлөвтөө хүрэх магадлалыг заана.

Реактивити “доллар”, “цент”, “хожимдсон нейтроны хувь” гэх мэт үнэмлэхүй ба харьцангуй нэгжээр хэмжигдэнэ. Үнэмлэхүй нэгжээр хэмжих үед заримдаа реактивитийн утгын дараа $\Delta k/k$ үсэг холбож тавьдаг. Энэ нь ямар ч нэмэлт мэдээлэл авч явахгүй бөгөөд хэмжилтийн нэгж алдагдаагүй болохын өвөрмөц илрүүлэгч болно. Харин заасан реактивитийг үнэмлэхүй нэгжтэй болгоно. Заримдаа реактивити процентоор илэрхийлэгдэнэ. Жишээ нь $\rho = 0.002$ нь $\rho = k_{эф} - 1/k_{эф} = 0.002$ гэсэн үг. Мөн $\rho = 0.002 \Delta k/k$ эсвэл $\rho = 0.2\% \Delta k/k$ эсвэл $\rho = 0.2\%$ хэлбэртэй бичиж болно. Хэрэв жишээ нь хожимдсон нейтроны эффектив хувийн утга $\beta = 0.004$ бол харьцангуй нэгжид бичигдсэн 0.002 реактивити нь $\rho = 0.002/0.004 = 0.5$ буюу $\rho/\beta = 0.5$ болно. Заримдаа реактивити хожимдсон нейтроны эффектив хувийн процентоор илэрхийлэгдэнэ. Хэрэв реактивити β -аас олон дахин бага бол энэ нь тохиромжтой. Билний энэ тохиолдолд реактивити 50% β -тай тэнцүү. Хэмжилтийн нэгж “доллар” (\$) нь β -тай эквивалент, өөрөөр хэлбэл $1\$ = 1\beta$. Бага реактивитийг хэмжихэд “доллар”-ын зууны нэг $1¢ = 0.01\$ = 0.01\beta$ болох “цент” (¢)-г хэрэглэнэ[5].

Ийнхүү манай тохиолдолд:

$$\rho = 0.007 = 0.007 \Delta k/k = 0.7\% \Delta k/k = 0.7\% = 1.0 \$$$

$$\rho = 0.0035 = 0.0035 \Delta k/k = 0.35\% \Delta k/k = 0.35\% = 0.5 \$$$

Харин $\beta = 0.007$ үед:

$$\rho = 0.007 = 0.007 \Delta k/k = 0.7\% \Delta k/k = 0.7\% = 1.0 \beta = 1.0 \$ = 100 ¢$$

Цөмийн хуваагдлын гинжин урвалын дүнд агшин зуурын болон хожимдсон нейтронууд бий болдог. Реактивитигээс үүдэлтэй осол нь зөвхөн агшин зуурын нейтронуудын улмаас үүсдэг. Реакторын чадал экспоненциалаар өсч, хяналт алдагдана. Реактивитигээс үүдэлтэй осол нь миллисекундын үзэгдэл учраас нэгэнт энэ төрлийн осол болж, реакторын ажиллагаа доголдсон бол реакторыг тогтворжуулах ямар ч боломжгүй. Иймд реактивити нь реакторын тогтвортой, аюулгүй ажиллагааны чухал үзүүлэлтүүдийн нэг юм[6].

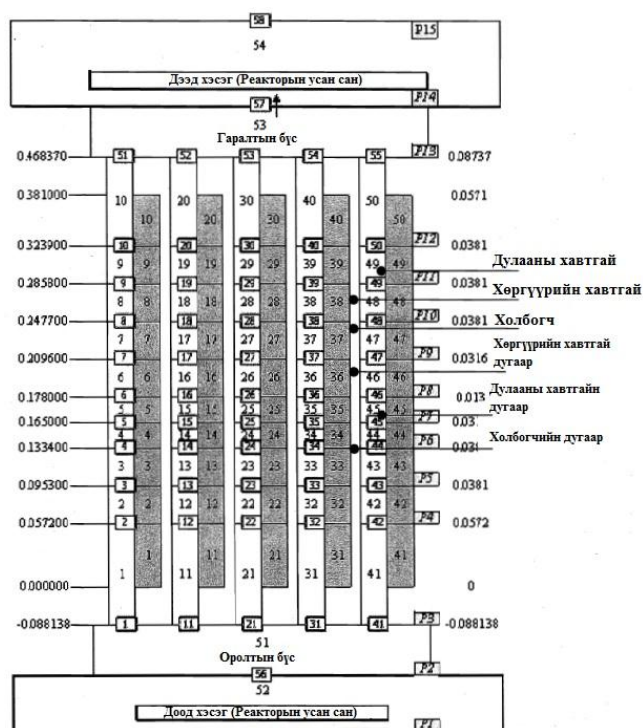
IV. СУДАЛГААНЫ АРГА ЗҮЙ

Судалгааны реакторын аюулгүй байдлын үнэлгээний шаардлагыг тавихдаа реактор ажиллаж байх үед аливаа эрсдэл гарахад, өөрөө унтрах хангалттай чадавхитай байж, үргэлжлэн хэвийн горимдоо орж ажиллах реакторын загварыг баримтална. EUREKA-2RR нь

судалгааны реакторын голомтод эерэг, сөрөг реактивити үүсгэх үед реакторын аюулгүй байдалд дүн шинжилгээ хийх өндөр чадамжтай компьютерийн код юм. EUREKA-2RR-ын тооцоолол нь реакторын кинетик компьютерийн код хосолсон цөмийн дулааны болон гидравликийн анализад үндэслэдэг [8].

Тогтвортой төлвийн тооцоололд EUREKA-2RR нь реакторын голомтын системийн хамгийн их температурыг тооцоолох үүрэгтэй. EUREKA-2RR-ын үр дүнд агшин зуурын дулааны урсгал, үрлэн түлшний температур, түлшний бүрхүүлийн температур, хөргүүрийн температур зэрэг олон нөхцөлд температурын тархалтыг харуулна. Реакторын тогтворгүй чадлын горимын тооцоололд EUREKA-2RR нь хяналтын савааг оруулж гаргах, реактивити үүсгэх зэрэг тохиолдолд маш олон төрлийн параметруудийн өөрчлөлтийг харуулдаг.

EUREKA-2RR-ын тооцооллын загварыг 2-р зурагт харуулав. Тооцооллын загвар нь 5 сувагтай байх бөгөөд суваг бүр нь дулааны хавтгай, хөргүүрийн хавтгай, холбогч, дулааны хавтгайн дугаар, хөргүүрийн хавтгайн дугаар, холбогчийн дугаараас бүрдэнэ[4], [7].



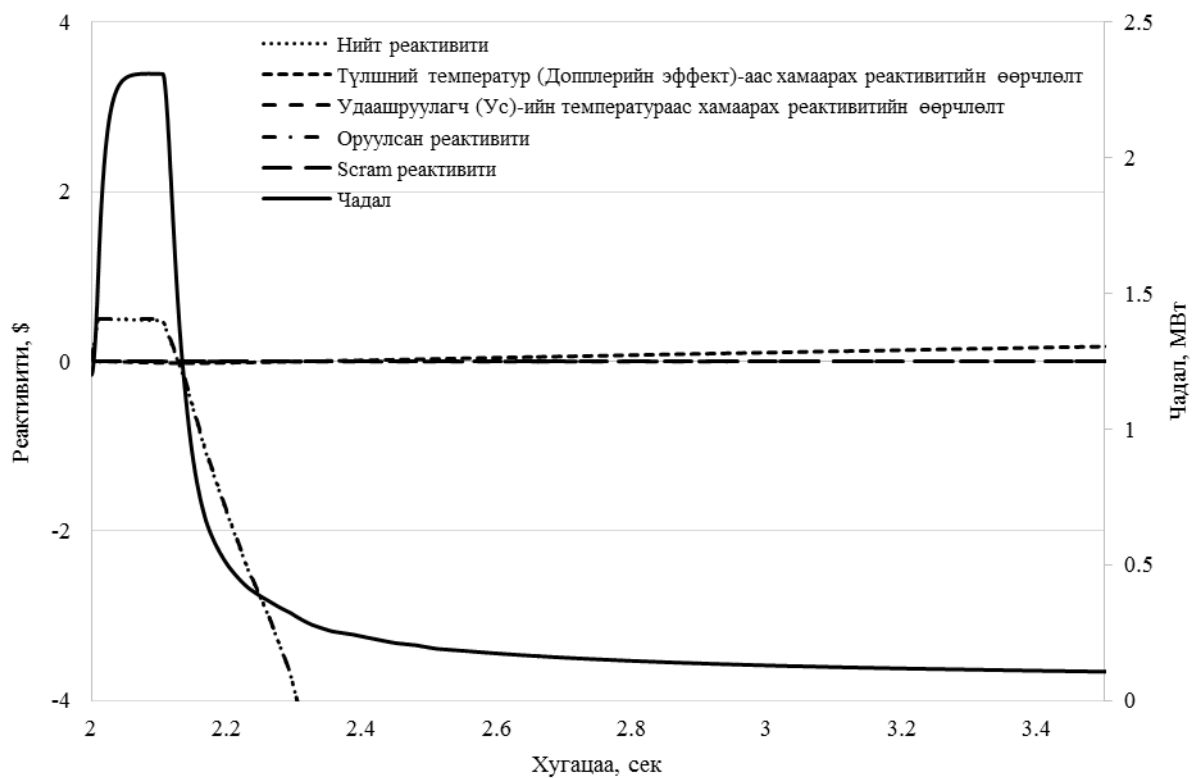
Зураг 2. EUREKA-2RR-ын тооцооллын загвар

V. СУДАЛГААНЫ ҮР ДҮН

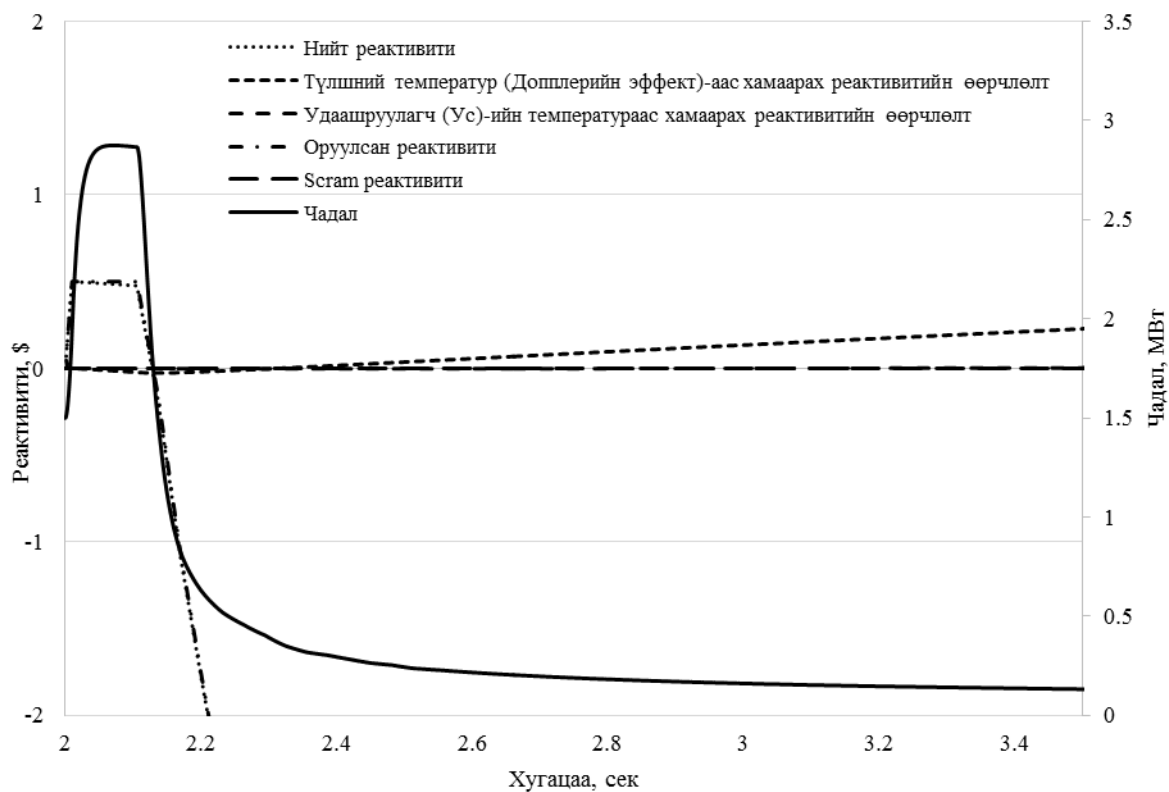
1. Реакторын голомтоос удирдлагын савааг реактивийн хэмжээ 0.5 \$-оор сугалах үеийн үр дүнг 1-р хүснэгтэд үзүүлэв. Зураг 3, 4, 5-г реакторын чадал болон реактивитийн өөрчлөлтийг хугацаанаас хамааруулан үзүүлэв.

Хүснэгт 1. Реактивити 0.5 \$ байх үеийн үр дүн

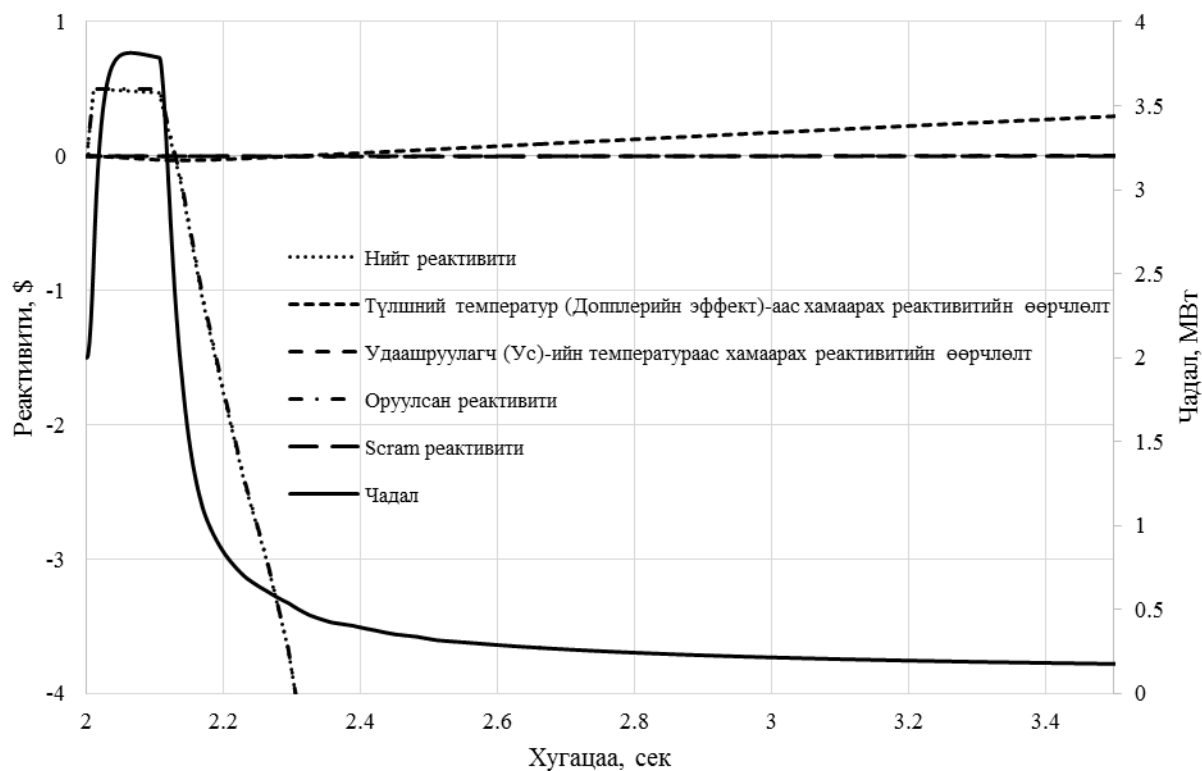
Үзүүлэлтүүд	Үр дүн		
Реактор тогтвортой горимд ажиллах чадал, МВт	1.2	1.5	2.0
Максимум чадал, МВт	2.31	2.87	3.81
Максимум чадалд хүрч байгаа хугацаа, сек	2.084	2.071	2.064
Түлшний максимум температур, °C	275	312	374
Түлшний бүрхүүл материалын температур, °C	135	138	150
Энерги ялгаралт, МВт-сек	3.09	3.86	5.14



Зураг 3. Реакторын чадал, реактивити, хугацааны хамаарал (Реактивити 0.5 \$, Тогтвортой төлөвт чадал 1.2 MWt)



Зураг 4. Реакторын чадал, реактивити, хугацааны хамаарал (Реактивити 0.5 \$, Тогтвортой төлөвт чадал 1.5 MWt)

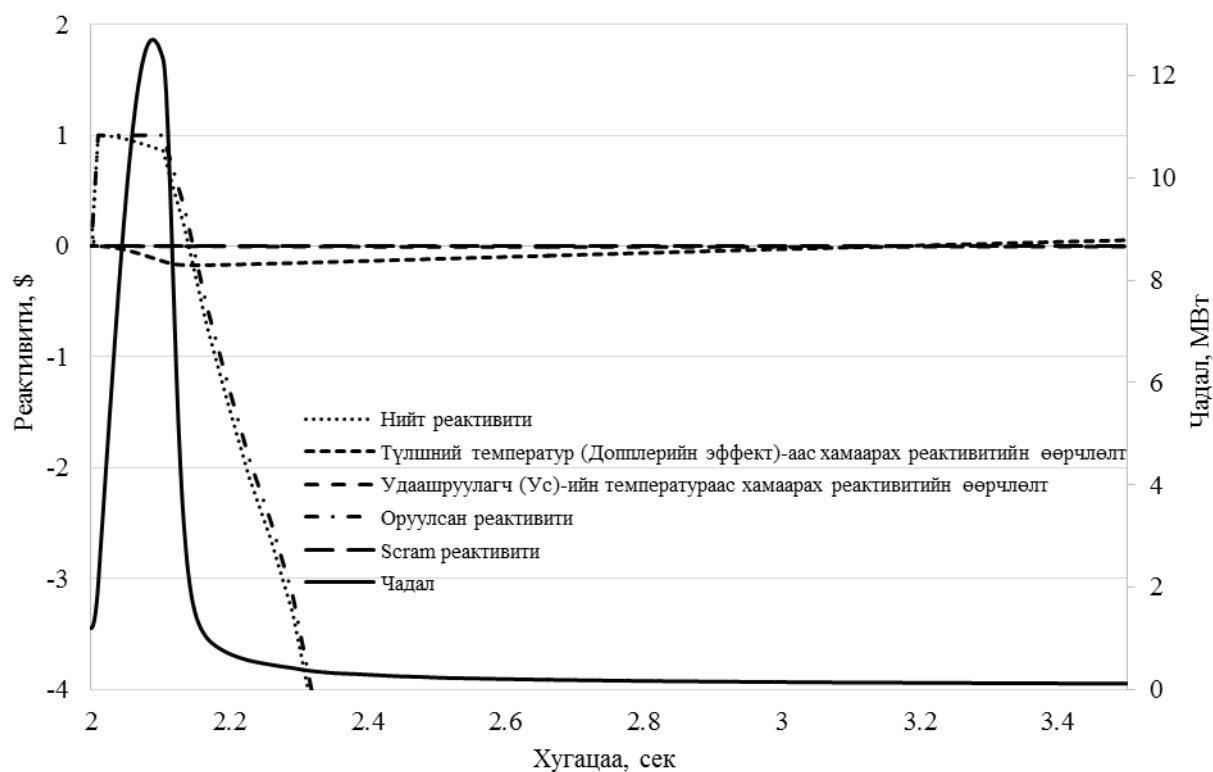


Зураг 5. Реакторын чадал, реактивити, хугацааны хамаарал (Реактивити 0.5 \$, Тогтвортой төлөвт чадал 2.0МВт)

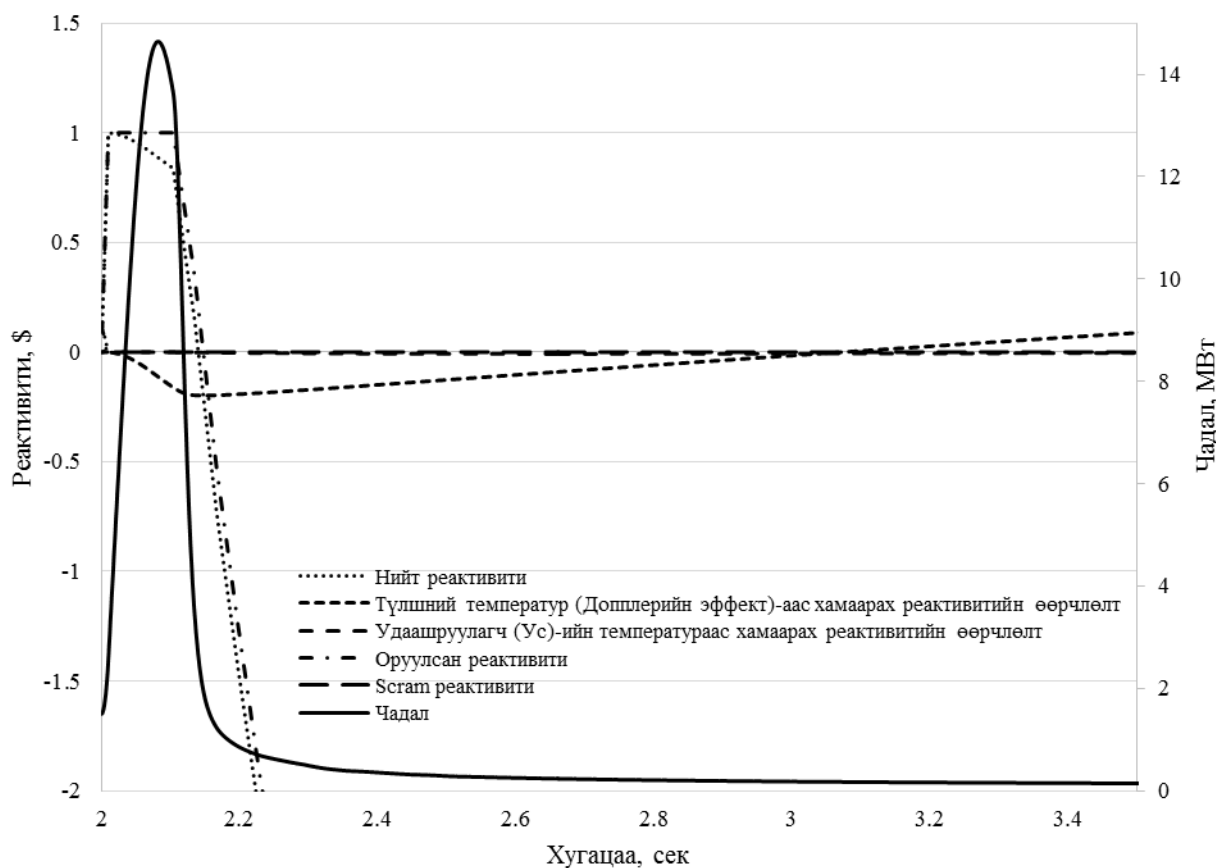
2. Реакторын голомтоос шарлагын дээжийг сугалан 1.0 \$ реактивити үүсгэх үеийн үр дүнг 2-р хүснэгтэд харуулав. Зураг 6, 7, 8-д реакторын чадал болон реактивитийн өөрчлөлтийг хугацаанаас хамааруулан үзүүлэв.

Хүснэгт 2. Реактивити 1.0\$ байх үеийн үр дүн

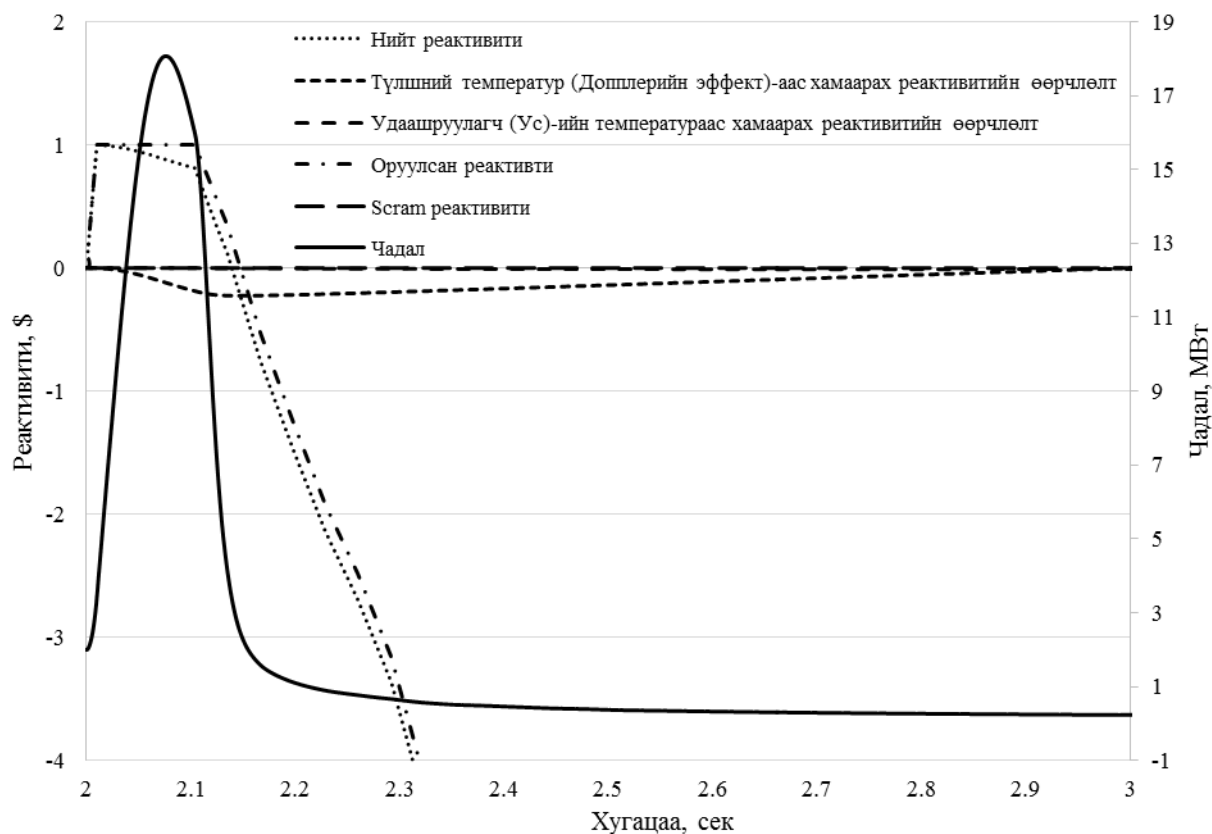
Үзүүлэлтүүд	Үр дүн		
Реактор тогтвортой горимд ажиллах чадал, МВт	1.2	1.5	2.0
Максимум чадал, МВт	12.7	14.6	18.1
Максимум чадалд хүрч байгаа хугацаа, сек	2.089	2.082	2.076
Түлшний максимум температур, °C	289	328	394
Түлшний бүрхүүл материалын температур, °C	139	144	166
Энерги ялгаралт, МВт-сек	4.03	4.93	6.44



Зураг 6. Реакторын чадал, реактивити, хугацааны хамаарал (Реактивити 1.0 \$, Тогтвортой төлөвт чадал 1.2 MWt)

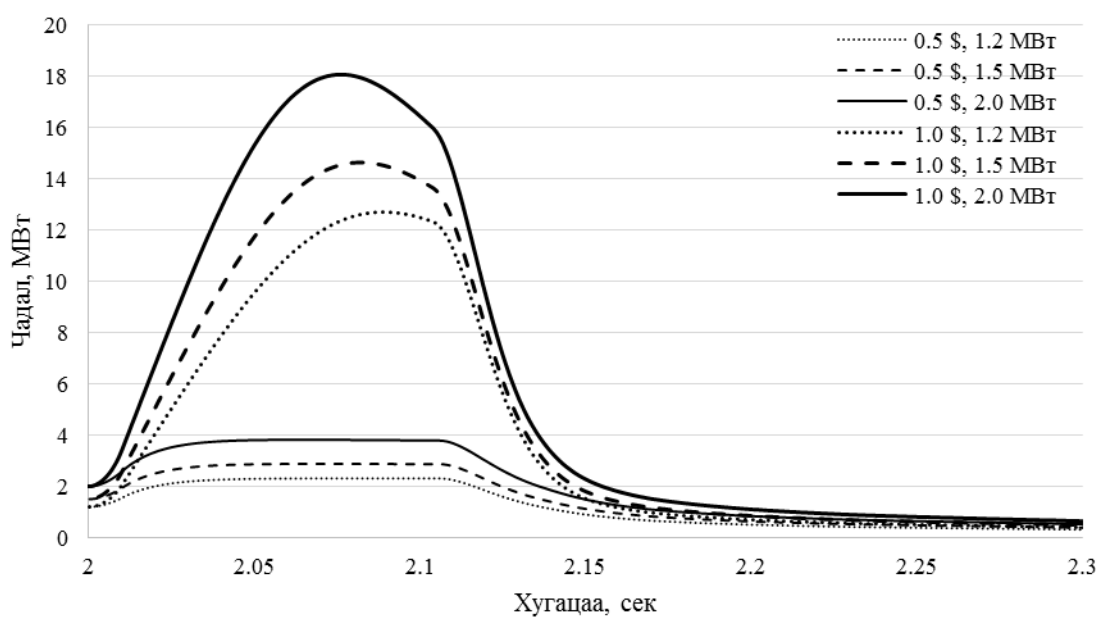


Зураг 7. Реакторын чадал, реактивити, хугацааны хамаарал (Реактивити 1.0 \$, Тогтвортой төлөвт чадал 1.5 MWt)

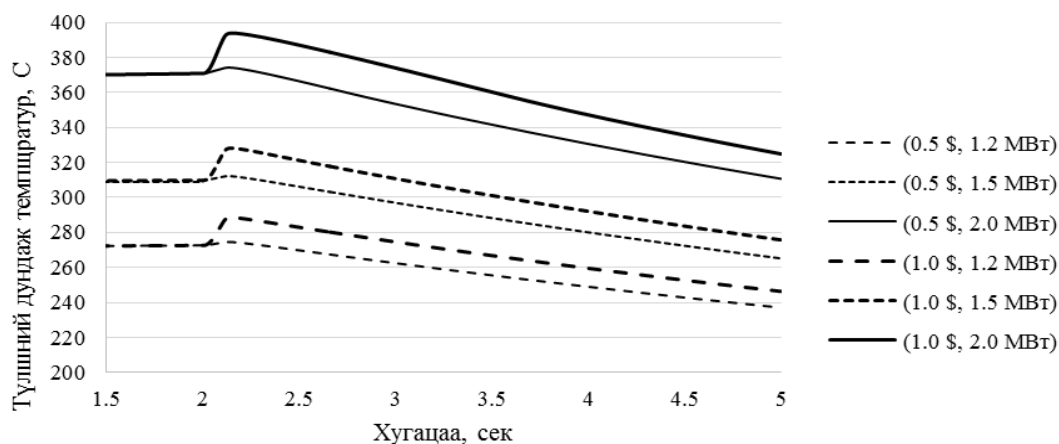


Зураг 8. Реакторын чадал, реактивити, хугацааны хамаарал (Реактивити 1.0 \$, Тогтвортой төлөвт чадал 2.0MWт)

3. Дээрх тохиолдлуудад реакторын чадал болон түлшний температурын өөрчлөлтийг Зураг 9, 10-т харуулав.



Зураг 9. Реакторын тогтвортой төлвийн чадал 1.2 MWт, 1.5 MWт, 2.0 MWт, реактивитийг 0.5 \$, 1.0 \$ утгаар өгөхөд чадлын өөрчлөлт өөрчлөлт



Зураг 10. Реакторын тогтвортой төлвийн чадал 1.2 МВт, 1.5 МВт, 2.0 МВт, реактивитийг 0.5 \$, 1.0 \$ утгаар өгөхөд түлшний температурын өөрчлөлт

VI. ДҮГНЭЛТ

Реактор тогтвортой горимд ажиллаж байх үед 0.5 \$ реактивитийн хэмжээтэйгээр удирдлагын савааг голомтоос сугалж, реакторыг хурдан унтраах чадлыг 2.2 МВт гэж сонгон авч үзэв. Реакторын тогтвортой горимын чадал 1.2 МВт, 1.5 МВт, 2.0 МВт байхад харгалзан 2.031 сек, 2.014 сек, 2.006 секундэд реакторыг хурдан унтраах чадалд хүрч байгаа хэдий ч реакторын чадал цааш үргэлжлэн өсч 2.084 сек, 2.071 сек, 2.064 секундэд хамгийн их утгандаа хүрээд буурч байна. Энэ үед түлшний максимум температур харгалзан 275° C, 312° C, 374° C байна.

Реактор тогтвортой горимд ажиллаж байх үед реакторын голомтоос шарлагын дээжийг сугалах хамгийн их утга буюу 1.0 \$ реактивитийн хэмжээтэйгээр шарлагын дээжийг сугалан авав. Мөн реакторыг хурдан унтраах чадлыг 2.2 МВт гэж сонгов. Реактор тогтвортой горимд 1.2 МВт, 1.5 МВт, 2.0 МВт чадлаар ажиллаж байхад харгалзан 2.011 сек, 2.009 сек, 2.004 секундэд реакторыг хурдан унтраах чадалд хүрч байгаа хэдий ч реакторын чадал цааш үргэлжлэн өсч харгалзан 2.089 сек, 2.082 сек, 2.076 секундэд хамгийн их утгандаа хүрч байна. Энэ үед түлшний максимум температур харгалзан 289° C, 328° C, 394° C байна.

Энэ реакторын чадал нь импульсын горимд 2000 МВт хүрдэг. Реакторын голомтоос шарагдаж байгаа дээжийг сугалахад үүсэх реактивитийн хамгийн их утга 1.0 \$ байхад реакторын чадал 18.1 МВт болж байна. Энэ нь импульсын горимд ажиллах хамгийн их чадалтай харьцуулахад маш бага байна. Мөн энэ үед түлшний максимум температур 394° C байгаа нь түүний хайлах температур (650° C)-аас бага байна. Иймд реакторын ажиллагаанд ямар нэгэн доголдол үүсэхгүй юм.

- | | |
|---|---|
| <p>[1] Монгол Улсын төрөөс цацраг идэвхт ашигт малтмал болон цөмийн энергийн талаар баримтлах бодлого. 2009.</p> <p>[2] IAEA, Research Reactor Database.</p> <p>[3] С.Одмаа, Н.Норов, Г.Хүүхэнхүү, С.Даваа. Монгол улсад тохиромжтой судалгааны реактор сонгох асуудалд. МУИС-ийн Эрдэм шинжилгээний бичиг.Физик №355(16) 2011, 100-108-р тал.</p> <p>[4] D.SAENGCHANTR and N.ONISHI, Analytical Study with EUREKA-2/RR coupled Nuclear Thermal-Hydraulic Kinetic Code, Chulalongkorn University, Thailand, 2006.</p> | <p>[5] S.GLASSTONE and A.SESONNSKE, <i>Nuclear Reactor Engineering</i>, 3rd edition, 1981</p> <p>[6] T.SUGIYAMA, <i>Reactivity Initiated Accident</i>, ITC-2012 training course material, Japan, 2012</p> <p>[7] D.SAENGCHANTR and N.ONISHI, Analysis of Steady-State and Transient Behavior on TRR-1/M1 with Computer Codes Coupled Neutronic Thermal-Hydrodynamic Model, Office for Atom Peace, Thailand,</p> <p>[8] M.KAMINAGA, EUREKA-2/RR: A Computer Code for the Reactivity Accident Analyses in Research Reactors, the 50th Instructor Training Program – Course on Reactor Engineering III – (2012), Japan.</p> |
|---|---|

ГАРЧИГ

1. **Pump-Probe Spectroscopy with Entangled Photons**
P. Munkhbaatar, K. Myung-Whun, D. Ulam-Orgikh.....1-8
2. **Time-and-Wavelength Resolved Pump Probe Spectroscopy & Calibration Measurement Using Semiconductors**
P. Munkhbaatar, D. Ulam-Orgikh, K. Myung-Whun, M. Byambatseren, Ts. Baatarchuluun.....9-12
3. **Wave Solutions of an a-cut Uniaxially Crystal**
B. Daariimaa, G. Ochirbat, J. Khatanbaatar, P. Munkhbaatar.....13-16
4. **Берлинитийн Харимхайн Тогтмол болон Пьезо-Электрик Коэффициентийн Онолын Тооцоолол**
Н. Төвжаргал, Ж. Даваасамбуу, П. Дашдэмбэрэл, Ш. Чадраабал.....17-20
5. **Metamorphism Trend in Some Mongolian Coals Revealed by Raman Spectroscopy**
S. Munkhtsetseg, R. Galbadrakh, L. Enkhtur.....21-24
6. **Цахилгаан Статик Шүүлтүүрийн Шүүх Чадварыг Түүний Хэлбэр Хэмжээтэй Уялдуулан Тооцоолох нь**
Ж. Ванчинхүү, Б. Бат-эрдэнэ.....25-30
7. **$\text{NaFe}(\text{W}_{0.75}\text{Mo}_{0.25}\text{O}_4)_2$ ба $\text{NaFe}(\text{W}_{0.5}\text{Mo}_{0.5}\text{O}_4)_2$ Нэгдлүүдийн Кристалл Бүтцийн Судалгаа**
Л. Ням-Очир, О. Гэрэлмаа, Н. Төвжаргал, Р. Галбадрах, Б. Энхсаруул.....31-34
8. **Альфа Төмрийн Уян Харимхайн Тогтмолуудыг Фононы Спектрээс Тооцоолох нь**
А.Дулмаа, Н.Цогбадрах, Р.Галбадрах.....35-38
9. **Атомыг Лазерын Пульсээр Өдөөх Магадлалыг Псевдоспектриал Аргаар Тооцоолох**
Ч. Алдармаа, Л. Хэнмэдэх, Г. Зоригт, О. Лхагва.....39-42
10. **Квант Шингэний Динамик Ойролцооллоор Гелийн Атомын Үндсэн Төлөвийг Тооцоолох нь**
Д. Наранчимэг, О. Сүх, Л. Хэнмэдэх, Н. Цогбадрах.....43-46
11. **Dependence of the g-Factor of Mineral Coals on a Metamorphism Level**
G. Shilagardy, P. Tuvshintur, S. V. Adashkevich, V. S. Kiranov, N. M. Lapchuk, I. V. Sedkova, V. F Stelmach. G. D. Frolkov, Ts. Nyamdulam, R. Khandmaa.....47-48

12. **Материалы: Свойства И Возможные Применения**
Э. М. Шпилевский, С. А. Филатов, Г. Шилагарди, П. Тувшинтур,
А. Т. Богорош, Ц. Хандмаа, Р. Нямдулам.....49-52
13. **Структурирование Полимеров Фуллеренами**
Э. М. Шпилевский, С. А. Филатов, Г. Шилагарди, П. Тувшинтур,
Ц. Хандмаа, А. Т. Богорош.....53-54
14. **Спектральное Проявление Плазмонного Резонанса в Металл-
Фуллереновых Наноструктурах**
Э. М. Шпилевский, А. Д. Замковец, М. Э. Шпилевский, С. А. Филатов,
Г. Шилагарди, П. Тувшинтур, Ц. Хандмаа, Р. Нямдулам.....55-58
15. **Улаанбаатар Хот Орчмын Агаар Мандлын Зарим Оптик
Параметруудийг Тодорхойлсон Дүн**
Л.Бадрах, Ц.Баатарчулуун, Б.Даариймаа, Б.Ганбат.....59-62
16. **Phase Change Properties in Chalcogenide Semiconductors**
М. Batpurev, J. Battogtokh.....63-68
17. **Улаанбаатар Хотын Зарим Сургууль, Цэцэрлэгийн Байрны Агаар
Дахь Радоны Судалгаа**
Б. Уранчимэг, Н. Норов.....69-72
18. **ТРИГА Төрлийн Судалгааны Реакторын Реактивитийн Анализ**
Б. Туул, Н. Норов, Бат. Мөнхбат.....73-80

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