

МОНГОЛ УЛСЫН ИХ СУРГУУЛЬ
ФИЗИК ЭЛЕКТРОНИКИЙН СУРГУУЛЬ

МУИС-ийн Эрдэм Шинжилгээний Бичиг

ФИЗИК
№ 362(17)

УЛААНБААТАР

2012

Эрдэм Шинжилгээний Бичигийн Редакцийн зөвлөл

Дарга
Нарийн бичгийн дарга
Гишүүд

Д-р. Ж.Даваасамбуу
Д-р. Н.Цогбадрах
ШУ-ны д-р., проф. Ц.Ганцог
ШУ-ны д-р., дэд проф. П.Зузаан
Д-р., проф. С.Даваа
Д-р., проф. Л.Дэмбэрэл
Д-р., дэд проф. Г.Батсүх
Д-р., дэд проф. С.Лодойсамба
Д-р., дэд проф. Л.Энхтөр
Д-р. Д.Улам-Оргих
Магистр М.Ганбат

Сэтгүүлийн хаяг:

МУИС-ийн Физик Электроникийн Сургууль
Их сургуулийн гудамж-1, Улаанбаатар- 210646, Монгол Улс
Утас: +976-11-329993
Факс: +976-11-329993
Электрон шуудан: Tsogbadrakh@num.edu.mn

Editorial board

Chairman
Secretary
Members

PhD. J.Davaasambuu
PhD. N.Tsogbadrakh
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. S.Lodoisamba
PhD., Ass.prof. L.Enkhtur
PhD. D.Ulam-Orgikh
MSc. M.Ganbat

Editorial address:

School of Physics and Electronics
National University of Mongolia
University Street-1, Ulaanbaatar-210646, Mongolia
Tel: +976-11-329993
Fax: +976-11-329993
E-mail: Tsogbadrakh@num.edu.mn

Сөрөг керр суурь орчин дахь эллипс туйлширалтай хавтгай долгионд харгалзах анхны интегралын тогтмолыг факторизацлах нь

О.Нямсүрэн, Г. Очирбат*, Д.Улам-Оргих

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

Физик Электроникийн Сургууль, Онолын Физикийн Тэнхим

*Э-шуудан ochirbatquseelee@yahoo.com

Анхны интегралын тогтмолыг бодлого бүрд тохируулан яаж сонгон авах вэ гэдэг нь тэр болгон илэрхий байдаггүйгээс зарим тохиолд зохих судалгаа шаарддаг арга зүйн чухал ач холбогдолтой асуудал болдог аж[1]. Бид [2]-д эерэг керр суурь орчин дахь эллипс туйлширалтай хавтгай долгионд харгалзах анхны интегралын тогтмолыг утгажуулсан билээ. Энэ удаа тэнд хэрэглэсэн арга зүйг хэрэглэж сөрөг керр суурь орчин дахь эллипс туйлширалтай хавтгай долгионд харгалзах анхны интегралын тогтмолыг утгажуулах ажил гүйцэтгэе.

Сөрөг керр орчин дахь долгионд

$$\varepsilon = \varepsilon_l - A^2 - e^2 - e_y^2, \quad e^2 = \frac{\beta^2}{\varepsilon^2} h^2 \quad (1)$$

$$\left(\frac{\varepsilon - \beta^2}{\varepsilon} \right)^2 h^2 + H^2 = \beta^2 (e^2 + e_y^2) - \frac{\varepsilon_l^2 - \varepsilon^2}{2} + c_{nst} \quad (2)$$

Дурын туйлширалтай ерөнхий тохиолд энэ хоёр төгслөг тэгшитгэл

$A^2(\varepsilon), h^2(\varepsilon), e_y^2(\varepsilon), H^2(\varepsilon)$ дөрвөн функц тодорхойлоход хүрэлцдэггүй.

Дор бид сөрөг керр орчны гүнд нэвтрэх эллипс туйлширалтай долгионд хүрэлцэх тооны тэгшитгэл хэрхэн бүрдүүлж болох тухай асуудал авч үзнэ. Эхлээд шийд нь тодорхой болчихсон тухайн тохиолуудаа эргэн нэг харья[2].

Соронзон долгионд энергийн урсгал тогтмол

$$\frac{1}{2} Ah \sin(\Phi_E - \Phi_A) = c_{o1} \quad (3)$$

-гэсэн нөхцлийг шинжилж үзэхэд хавтгай долгио $A^2(\varepsilon)h^2(\varepsilon)$ үржвэрийн максимум утгад харгалздаг нь илэрсэн.

$$\frac{d}{d\varepsilon} (A^2(\varepsilon)h^2(\varepsilon)) = 0 \quad (4)$$

-нөхцөл хангах диэлектрикийн функцийг ξ гэж тэмдэглэвэл $\varepsilon = \xi$ дээр

$$-\frac{1}{2} A(\xi)h(\xi) = c_{o1}, \Delta\Phi_h = \Phi_E - \Phi_A = -\frac{\pi}{2} \quad (5)$$

$$2c_{nst} = -(\xi - \varepsilon_l)(3\xi - 4\beta^2 + \varepsilon_l) \quad (6)$$

(4) өөс

$$\frac{d}{d\varepsilon} A^2(\varepsilon) / \frac{d}{d\varepsilon} h^2(\varepsilon) = -A^2(\varepsilon) / h^2(\varepsilon) \quad (7)$$

Үүнийг

$$\frac{dA^2}{d\varepsilon} = \frac{\beta^2 - \varepsilon}{\varepsilon^2} \frac{dh^2}{d\varepsilon} \quad (8)$$

-тэгшитгэлтэй холбоход $\varepsilon = \xi$ дээр

$$A^2(\xi) / h^2(\xi) = (\xi - \beta^2) / \xi^2 \quad (9)$$

гэсэн харьцаа үүүснэ. Диэлектрикийн тогтмол нь ξ -тэй тэнцүү шугаман орчин дахь соронзон долгионд ийм харьцаа байдаг. Цахилгаан долгионд энергийн урсгал тогтмол

$$-\frac{1}{2} He_y \sin(\phi_e - \phi_h) = c_{o2} \quad (10)$$

гэсэн нөхцлийг шинжилж үзэхэд хавтгай долгио $e_y^2(\varepsilon)H^2(\varepsilon)$ үржвэрийн максимум утгад харгалздаг нь мэдэгдсэн.

$$\frac{d}{d\varepsilon} (e_y^2(\varepsilon)H^2(\varepsilon)) = 0 \quad (11)$$

нөхцөл хангах диэлектрикийн функцийг ξ гэж тэмдэглэвэл $\varepsilon = \xi$ дээр

$$\frac{1}{2} e_y^2(\xi)H(\xi) = c_{o2}, \Delta\Phi_e = \Phi_{e_y} - \Phi_h = -\frac{\pi}{2} \quad (12)$$

$$2c_{nst} = -(\xi - \varepsilon_l)(3\xi - 4\beta^2 + \varepsilon_l) \quad (13)$$

(11) аас

$$\frac{d}{d\varepsilon} e_y^2(\varepsilon) / \frac{d}{d\varepsilon} H^2(\varepsilon) = -e_y^2(\varepsilon) / H^2(\varepsilon) \quad (14)$$

Үүнийг

$$\frac{dH^2}{d\varepsilon} = (\beta^2 - \varepsilon) \frac{de_y^2}{d\varepsilon} \quad (15)$$

- тэгшитгэлтэй холбоход $\varepsilon = \xi$ дээр

$$H^2(\xi) / e_y^2(\xi) = \xi - \beta^2 \quad (16)$$

Харьцаа үүснэ. Диэлектрикийн тогтмол нь ξ -тэй тэнцүү шугаман орчин дахь цахилгаан долгионд мөн ийм харьцаа бий.

Эцэст, эллипс туйлширалтай хавтгай долгионыг зураглах тэгшитгэлүүдийг системчлэн сийрүүлэн бичье

$$\xi = \varepsilon_l - A^2 - e^2 - e_y^2, \quad e^2 = \frac{\beta^2}{\xi^2} h^2 \quad (17)$$

$$\left(\frac{\xi - \beta^2}{\xi} \right)^2 h^2 + H^2 = \beta^2 (e^2 + e_y^2) - \frac{\varepsilon_l^2 - \xi^2}{2} + c_{nst} \quad (18)$$

$$A^2(\xi) / h^2(\xi) = (\xi - \beta^2) / \xi^2 \quad (19)$$

$$H^2(\xi) / e_y^2(\xi) = \xi - \beta^2 \quad (20)$$

Энэ системээс юуны урьд гарах хоёр дүгнэлттэй танилцъя. (17) ба (19) өөс

$$e_y^2 + \frac{1}{\xi} h^2 = \varepsilon_l - \xi \quad (21)$$

Энэ томъёо эллипс туйлширалтай долгион дотор цахилгаан ба соронзон хэсгүүдийн эзлэх хувь хэмжээг илэрхийлнэ. Тухайн $\varepsilon = \xi$ утгад e_y^2 нь 0 оос $\varepsilon_l - \xi$ хүртэл утгатай байж болох бөгөөд үүнтэй холбоотойгоор h^2 нь тэгээс $h^2 = (\varepsilon_l - \xi)\xi$ хүртэл утга авч болно.

Шугаман тохиолд энэ хоёр хэсгийн хооронд ямар ч холбоо байдаггүй болохыг тэмдэглэе.

(17), (18), (19), (20) оос, жишээлбэл, $e_y^2(\xi)$ -г тодорхойлох гэж оролдвол эцсийн мөчид $e_y^2(\xi)$ - той гишүүд харилцан хоорондоо усталцаж харин

$$2c_{nst} = (\varepsilon_l - \xi)(3\xi - 4\beta^2 + \varepsilon_l) \quad (22)$$

- гэсэн харьцаа үлдэнэ. Энэ бол тухайн эрчимтэй ($\varepsilon = \xi$), дурын эллипс туйлширалтай хавтгай долгионд интегралчилалын тогтмол ийм утгатай байж болно гэдгийн нотолгоо юм.

Ийнхүү дөрвөн тэгшитгэл хоорондоо хамааралгүй биш, эндээс

$A^2(\xi), h^2(\xi), H^2(\xi), e_y^2(\xi)$ дөрвүүлэнг

нэгэн утгатай тодорхойлж болохгүй, нэг функц нь тодорхойгүй үлдэх аж. Жишээлбэл тухайн $\varepsilon = \xi$ -д e_y^2 -д үзэмжээр утга өгөхөд бусад гурав нь (21), (19), (20)-томъёогоор бодогдоно гэсэн үг.

Хавтгай долгионы фазын асуудал триваль нэгэн.

$$\Phi_A = \sqrt{\xi - \beta^2} z + \Phi_A(0), \quad \Phi_{E_z} = \sqrt{\xi - \beta^2} z + \Phi_{E_z}(0)$$

$$\Delta\Phi_h = \Phi_{E_z}(0) - \Phi_A(0) = -\frac{\pi}{2}.$$

$$\Phi_H = \sqrt{\xi - \beta^2} z + \Phi_H(0), \quad \Phi_{E_y} = \sqrt{\xi - \beta^2} z + \Phi_{E_y}(0)$$

$$\Delta\Phi_e = \Phi_{E_y}(0) - \Phi_H(0) = -\frac{\pi}{2}.$$

Манай судалгааны ажлыг дэмжсэнд нь академич Х. Намсрайд талархал илэрхийлье

ДҮГНЭЛТ

Өөрөө сарниулагч керр суурь орчны гүнд нэвтрэх хавтгай долгионд харгалзах анхны интегралын тогтмолыг рефракцийн тогтмол, диэлектрикийн констант, долгионы оронгийн эрчмээс хамааруулан тодорхойлсон томъёо олов. Энэ ажил методологийн ач холбогдолтой юм.

РЕЗЮМЕ

Для константа первого интеграла, соответствующего к плоским волнам в дефокусирующей подложке, получена формула факторизующая ёго через констант рефракции, диэлектрический констант среды и интенсивность волнового поля. Подчеркивается методологическое значение этой работы.

ИШЛЭЛ

1. А.А. Kolokolov, Fresnel Formulas and the principle of causality, Physics-Uspekhi **42** (9 931-940) (1999).
2. О. Нямсүрэн, Г. Очирбат, Эерэгг керр суурь орчин дахь эллипс туйлширалтай хавтгай долгионд харгалзах анхны интегралын тогтмолыг факторизацлах нь МУИС, ФЭС, эрдэм шинжилгээний бичиг № 355(16), 2011, Улаанбаатар.

Эерэг керр илтэс дэх гэрлийн дурын туйлшралтай стационар долгионы оронгийн амплитуд бүр диэлектрикийн функцээс хамаарах хамаарлыг тодорхойлох бүрэн систем тэгшитгэл

О. Нямсүрэн, Г. Очирбат*

Монгол Улс, Улаанбаатар-210646, Их сургуулийн гудамж-1, Монгол Улсын Их Сургууль,
Физик Электроникийн Сургууль, Онолын Физикийн Тэнхим
*Э-шуудан ochirbatguseelee@yahoo.com

I.ОРШИЛ

Геометр сонгохдоо долгио x –тэнхлэгийн дагуу гүйхийн хамт z –тэнхлэгийн дагуу тарж байхаар бодолцож, долгионы оронг

$$\begin{aligned} E_x &= iAe^{i\Phi_A} \zeta, \quad E_z = e e^{i\Phi_E} \zeta, \\ H_y &= h e^{i\Phi_E} \zeta, \quad A, e > 0, h < 0 \\ E_y &= e_y(z) \tau \exp(i\phi_e), \\ H_x &= iH(z) \tau \exp(i\phi_H), \\ H_z &= h_z(z) \tau \exp(i\phi_e), \end{aligned}$$

гэж төсөөлөв. Үүнд $\Phi_A, \Phi_E, \phi_e, \phi_H$ - фазууд $\zeta = \exp(-i\omega t + ik\beta)$, β -рефракцийн тогтмол, ω -дугуй давтамж.

Максвеллийн тэгшитгэлийн фаз агуулсан анхны интегралууд:

$$\frac{1}{2} A h \sin(\Phi_E - \Phi_A) = c o_1 \quad (1)$$

$$-\frac{1}{2} H e \sin(\phi_e - \phi_H) = c o_2 \quad (2)$$

Үүнд $c o_1, c o_2$ – интегралчлалын тогтмолууд нь энергийн z -дагуу урсгалуудын хэмжээг илэрхийлнэ.

Эерэг керр орчны диэлектрикийн функц ϵ нь

$$\epsilon = \epsilon_l + A^2 + e^2 + e_y^2 \quad (3)$$

Үүнд ϵ_l -диэлектрикийн тогтмол.

Максвеллийн систем тэгшитгэлийн өөр нэгэн анхны интеграл:

$$\left(\frac{\epsilon - \beta^2}{\epsilon} \right)^2 h^2 + H^2 = \beta^2 (e^2 + e_y^2) - \frac{\epsilon^2 - \epsilon_l^2}{2} + c n s t \quad (4)$$

Соронзон ба цахилгаан долгионд (3) ба (4) нь оронгийн амплитудуудыг диэлектрикийн функцээр илэрхийлэх боломж олгодог бөгөөд энэ нь улмаар хоёр орчны

заагаас ойх бодлогыг бодоход хүрэлцэхүйц мэдээлэл болж өгдөг. Харин дурын туйлширалтай долгионы ерөнхий тохиолд бүх амплитудыг диэлектрикийн функцээр илэрхийлэх бодлого одоо хүртэл нээлттэй байсаар байна. Дурын туйлширалтай ерөнхий тохиолд Максвеллийн бүрэн хэмжээний шугаман бус вектор тэгшитгэлийг аналитик бодох оролдлого гарсан эсэхийг бид мэдэхгүй. Изотроп эерэг керр хавтгай бүтэц дотор ТМ ба ТЕ туйлширалтай долгионы оронгийн амплитуд бүр диэлектрикийн функцээрээ илэрхийлэгддэг билээ[1]. Бас эерэг керр суурь орчиноос бүрэн ойх ерөнхий туйлширалтай долгионы хувьд ч ийм байсан[2]. Үүнээс ургуулан бид изотроп керр хавтгай илтэс дэх ерөнхий туйлширалтай гэрлийн долгионы оронгийн амплитуд бүр бас диэлектрикийн функцээр илэрхийлэгдэнэ гэж үзэж байгаа.

II.ЗОРИЛГО

Изотроп эерэг керр илтэс дотор дурын туйлширалтай гэрлийн долгионы оронгийн $A(\epsilon), e(\epsilon), e_y(\epsilon), H(\epsilon)$ -дөрвөн амплитудыг диэлектрикийн функцээр яаж илэрхийлж болох вэ гэсэн асуудалд хариу өгөх.

III.СИСТЕМ ТЭГШИТГЭЛ

Дурдсан дөрвөн функцийг агуулсан (3), (4)-төгслөг илэрхийлэл дөрвөн функцийг тодорхойлоход хүрэлцэхгүй нь мэдээж. Бид урьд максвеллийн тэгшитгэлүүдээс фаз зайлуулан

$$\frac{dA^2}{dz} = \frac{\beta^2 - \epsilon}{\epsilon^2} \frac{dH^2}{dz} \quad (5)$$

$$\frac{dH^2}{dz} = (\beta^2 - \epsilon) \frac{de_y^2}{dz} \quad (6)$$

гэсэн хоёр тэгшитгэл үүсгэн нэг бус удаа хэрэглэсэн билээ[1]. Энд орж буй функцуудыг зөвхөн ε ээр дамжуулж координатаас хамаарна гэж үзэх юм бол эдгээр тэгшитгэлүүд нь

$$\frac{dA^2}{d\varepsilon} = \frac{\beta^2 - \varepsilon}{\varepsilon^2} \frac{dh^2}{d\varepsilon} \quad (7)$$

$$\frac{dH^2}{d\varepsilon} = (\beta^2 - \varepsilon) \frac{de_y^2}{d\varepsilon} \quad (8)$$

гэсэн тэгшитгэлүүд болж хувирна. Энэ хоёр дифференциаль тэгшитгэл (3), (4) ийн хамт дөрвөн тэгшитгэлийн систем бүрдүүлэх боловч дөрвөн функц тодорхойлоход хүрэлцэхүйц систем болж эс чадна. Үүнийг мэдэхийн тулд (3), (4)-г e_y^2 ба H^2 -ийн хувьд бодож

$$e_y^2 = \varepsilon - \varepsilon_l - A^2 - \frac{\beta^2}{\varepsilon^2} h^2 \quad (9)$$

$$H^2 = -\beta^2 A^2 - \frac{(\varepsilon - \beta^2)^2}{\varepsilon^2} h^2 + \frac{\varepsilon_l^2 - \varepsilon^2}{2} + \beta^2(\varepsilon - \varepsilon_l) + c_{nst} \quad (10)$$

гэсэн хэлбэрт оруулъя. Илэрхийлэл тус бүрийг ε ээр дифференциальчилсны дараа A^2 ба h^2 ийн хоорондох (7)-дифференциаль холбоог ашиглахад (8) тэгшитгэл гарч ирнэ.

Ийнхүү дурдсан дөрөв үл хамаарах тэгшитгэлүүд хараахан биш болохлоор бас нэг тэгшитгэл нэмж авах хэрэгтэй болно. Энэ нэмэгдэл тэгшитгэлийг яаж гаргаж авсан бэ гэвэл.

Амплитуд ба фазыг холбосон дараах ерөнхий тэгшитгэлүүд бичье.

$$\frac{dA}{dz} = \frac{\varepsilon - \beta^2}{\varepsilon^2} h \cos \Delta \Phi_h \quad (11)$$

$$\frac{dH}{dz} = (\varepsilon - \beta^2) e_y \cos \Delta \Phi_e \quad (12)$$

Таамаглаж байгаагаар

$$\frac{dA}{dz} = \frac{dA}{d\varepsilon} \frac{d\varepsilon}{dz}, \quad \frac{dH}{dz} = \frac{dH}{d\varepsilon} \frac{d\varepsilon}{dz},$$

(11) ба (12) тэгшитгэлээс

$$\varepsilon \cdot Dd \frac{dA^2}{d\varepsilon} = - \frac{dH^2}{d\varepsilon}, \quad (13)$$

$$Dd = 1_{he} \sqrt{\frac{H^2 e_y^2 - 4c o_2^2}{A^2 h^2 - 4c o_1^2}}, \quad 1_{he} = \pm 1 \quad (14)$$

Үүнд H^2, e_y^2 нь (9), (10) ёсоор A^2, h^2 ба ε - ээр илэрхийлэгдэж байгаав. Dd -г цаашид зангилгаа гэж нэрлэе.

$$\frac{dH^2}{d\varepsilon} = \frac{\partial H^2}{\partial \varepsilon} + \frac{\partial H^2}{\partial A^2} \frac{dA^2}{d\varepsilon} + \frac{\partial H^2}{\partial h^2} \frac{dh^2}{d\varepsilon} \quad (13) \text{ тэгшитгэл тэгэхлээр}$$

$$\frac{dA^2}{d\varepsilon} = - \frac{1}{\varepsilon - 2\beta^2 + \varepsilon \cdot Dd} \frac{\partial H}{\partial \varepsilon} \quad (15)$$

гэж бичигдэнэ. (7)-ийн улмаас

$$\frac{dh^2}{d\varepsilon} = - \frac{1}{\varepsilon - 2\beta^2 + \varepsilon \cdot Dd} \frac{\varepsilon^2}{\beta^2 - \varepsilon} \frac{\partial H}{\partial \varepsilon} \quad (16)$$

(10) аас

$$\frac{\partial H^2}{\partial \varepsilon} = 2(\beta^2 - \varepsilon) \frac{\beta^2}{\varepsilon^3} h^2 + \beta^2 - \varepsilon \quad (15) \text{ ба } (16) \text{ нь}$$

$$\frac{dA^2}{d\varepsilon} = - \frac{\beta^2 - \varepsilon}{\varepsilon - 2\beta^2 + \varepsilon \cdot Dd} \left(1 + \frac{2\beta^2}{\varepsilon^3} h^2\right) \quad (17)$$

$$\frac{dh^2}{d\varepsilon} = - \frac{1}{\varepsilon - 2\beta^2 + \varepsilon \cdot Dd} \left(\varepsilon^2 + \frac{2\beta^2}{\varepsilon} h^2\right) \quad (18)$$

гэж бичигдэнэ. Энэ хоёрын баруун талд байгаа Dd нь (3) ба (4) орлуулгаар $A(\varepsilon), h(\varepsilon), \varepsilon$ -ээр илэрхийлэгдэнэ. Ийнхүү энэ хоёр нь $A(\varepsilon), h(\varepsilon)$ хоёр функц ийн хувьд

битүү систем тэгшитгэл болно. (3) ба (4) дээр энэ хоёр нэмэгдээд дөрвөн амлитуд тодорхойлоход хүрэлцэх бүрэн систем тэгшитгэл болно.

Энэ систем тэгшитгэл нь төвөгтэй тэгшитгэлүүд гэдэг нь илт. Эдгээр систем хавтгай илтэс дээр гэрэл ойх, нэвтрэх бодлогод хэрэглэгдэх боломжтой.

IV. ДҮГНЭЛТ

Эерэг керр илтэс доторх дурын туйлширалтай гэрлийн долгионы орны амплитуд бүрийг диэлектрикийн функцээс хамааруулан тодорхойлоход хүрэлцэх тооны тэгшитгэлийн систем бүрэлдүүлээ. Энэ системд анхны интегралын гурван тогтмолоос хамаарах ерөнхий хэлбэртэйгаас гадна оронгийн дөрвөн компонентийн амплитудын квадратыг язгуур дор агуулсан төвөгтэй тэгшитгэл байгаагаас аналитик шийд бий эсэх нь тун эргэлзээтэй байна .

V. ВЫВОД

Сформулировано необходимое число уравнений для определения зависимости амплитуды каждого компонента светового волнового поля произвольной поляризации в самофокусирующей плёнке. Из за наличия ,в этой системе, сложного уравнения общего вида, содержащего константы трех первых интегралов и квадраты амплитуд четырех компонентов поля. под радикалом ,весьма сомнительным выглядит существование аналитических решений задачи.

ИШЛЭЛ

1. Г. Очирбат, Шугаман бус үе орчин дахь гэрлийн стационар долгионы онол, МУИС, ФЭС, 2006, Улаанбаатар.
2. О. Нямсүрэн , Г. Очирбат, Гэрлийн дурын туйлширалтай стационар долгио эерэг керр сууь орчноос бүрэн ойх бодлого. МУИС, ФЭС, эрдэм шинжилгээний бичиг № 355(16) , 2011 , Улаанбаатар.

Сөрөг керр илтэс дэх гэрлийн дурын туйлшралтай стационар долгионы оронгийн амплитуд бүр диэлектрикийн функцээс хамаарах хамаарлыг тодорхойлох бүрэн систем тэгшитгэл

О.Нямсүрэн, Г.Очирбат*

Монгол Улс, Улаанбаатар-210646, Их сургуулийн гудамж-1, Монгол Улсын Их Сургууль,
Физик Электроникийн Сургууль, Онолын Физикийн Тэнхим

*Э-шуудан ochirbatquseelee@yahoo.com

Энэ тохиолд бүрэн систем тэгшитгэл бүрдүүлэх ажиллагаа өмнөх өгүүллээс ялгарах онцлоггүй. Иймд өмнөх өгүүллэгийн тэмдэглэлийг хэрэглэн гол дүнг шуудхан бичээд явъя.

Максвеллийн тэгшитгэлийн фаз агуулсан анхны интегралууд:

$$\frac{1}{2} A h \sin(\Phi_E - \Phi_A) = c o_1 \quad (1)$$

$$-\frac{1}{2} H e \sin(\phi_e - \phi_H) = c o_2 \quad (2)$$

Үүнд $c o_1, c o_2$ – интегралчлалын тогтмолууд нь энергийн z-дагуу урсгалуудын хэмжээг илэрхийлнэ.

Сөрөг керр орчны диэлектрикийн функц ε нь

$$\varepsilon = \varepsilon_l - A^2 - e^2 - e_y^2$$

Үүнд ε_l - диэлектрикийн тогтмол.

Максвеллийн систем тэгшитгэлийн өөр нэгэн анхны интеграл энэ тохиолд:

$$\left(\frac{\varepsilon - \beta^2}{\varepsilon} \right)^2 h^2 + H^2 = \beta^2 (e^2 + e_y^2) + \frac{\varepsilon^2 - \varepsilon_l^2}{2} + c n s t \quad (4)$$

(3), (4)-өөс e_y^2 ба H^2 -ийг бусдаар нь илэрхийлбэл

$$e_y^2 = -\varepsilon + \varepsilon_l - A^2 - \frac{\beta^2}{\varepsilon^2} h^2 \quad (5)$$

$$H^2 = -\beta^2 A^2 - \frac{(\varepsilon - \beta^2)^2}{\varepsilon^2} h^2 \quad (6)$$

$$-\frac{\varepsilon_l^2 - \varepsilon^2}{2} + \beta^2 (\varepsilon_l - \varepsilon) + c n s t$$

Дөрвөн амплитуд дараах хоёр тэгшитгэлээр холбогдоно.

$$\frac{dA^2}{d\varepsilon} = \frac{\beta^2 - \varepsilon}{\varepsilon^2} \frac{dh^2}{d\varepsilon} \quad (7)$$

$$\frac{dH^2}{d\varepsilon} = (\beta^2 - \varepsilon) \frac{de_y^2}{d\varepsilon} \quad (8)$$

Энэхүү (4)–(8) дөрвөн тэгшитгэл хоорондоо хамааралтай юм билээ. Эдгээр тэгшитгэлээс гадна дараах хоёр тэгшитгэл гарсан

$$\frac{dA^2}{d\varepsilon} = \frac{\beta^2 - \varepsilon}{\varepsilon - 2\beta^2 + \varepsilon \cdot Dd} \left(1 - \frac{2\beta^2}{\varepsilon^3} h^2 \right) \quad (9)$$

$$\frac{dh^2}{d\varepsilon} = \frac{\varepsilon^2}{\varepsilon - 2\beta^2 + \varepsilon \cdot Dd} \left(1 - \frac{2\beta^2}{\varepsilon^3} h^2 \right) \quad (10)$$

$$Dd = 1_{he} \sqrt{\frac{H^2 e_y^2 - 4c o_2^2}{A^2 h^2 - 4c o_1^2}}, \quad 1_{he} = \pm 1 \quad (11)$$

Энд e_y^2 ба H^2 -ийг (3) ба (4) өөр илэрхийлнэ. Dd -г цаашид зангилгаа гэж нэрлэе. Ингэхэд (9) ба (10) нь A^2 ба h^2 -хоёр функц тодорхойлох битүү систем тэгшитгэл болно. Энэ системээс A^2 ба h^2 -хоёр функцийг тодорхойлсон тохиолд (3) ба (4) - өөр e_y^2 ба H^2 тодорхойлогдох болно. Иймд (3), (4), (10), (11) –бол дөрвөн функц тодорхойлоход хүрэлцэх бүрэн систем тэгшитгэл мөн. Эдгээр систем сөрөг керр хавтгай илтэс дээр гэрэл ойх, нэвтрэх бодлогод хэрэглэгдэх боломжтой.

ДҮГНЭЛТ

Сарниулагч керр илтэс доторх дурын туйлширалтай гэрлийн долгионы орны амплитуд бүрийг диэлектрикийн функцээс хамааруулан тодорхойлоход хүрэлцэх тооны тэгшитгэлийн систем бүрэлдүүлээ. Энэ системд анхны интегралын гурван тогтмолоос хамаарах ерөнхий хэлбэртэйгаас гадна оронгийн дөрвөн компонентийн амплитудын квадратыг язгуур дор агуулсан төвөгтэй тэгшитгэл байгаагаас аналитик шийд бий эсэх нь тун эргэлзээтэй байна .

ВЫВОД

Сформулировано необходимое число уравнений для определения зависимости амплитуды каждого компонента светового волнового поля в дефокусирующей плёнке. Из за наличия ,в этой системе, сложного уравнения общего вида,содержащего константы трех первых интегралов и квадраты амплитуд четырех компонентов поля под радикалом, весьма сомнительным выглядит существование аналитических решений задачи.

ИШЛЭЛ

1. Г. Очирбат, Шугаман бус үе орчин дахь гэрлийн стационар долгионы онол, МУИС, ФЭС, 2006,Улаанбаатар.
2. О. Нямсүрэн , Г. Очирбат, Гэрлийн дурын туйлширалтай стационар долгио эерэг керр сууь орчноос бүрэн ойх бодлого. МУИС, ФЭС, эрдэм шинжилгээний бичиг № 355(16) , 2011 , Улаанбаатар.

Сөрөг керр суурь орчинд бүрэн ойх гэрлийн дурын туйлшралтай долгио

О. Нямсүрэн, Г. Очирбат*, Д.Улам-Оргих

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

Физик Электроникийн Сургууль, Онолын Физикийн Тэнхим

*Э-шуудан ochirbatguseelee@yahoo.com

Сөрөг керр орчинд бүрэн ойх ерөнхий туйлширалтай гэрлийн долгионы оронгийн амплитуд бүрийг диэлектрикийн функцээр илэрхийлэх бодлого тавья. Бид өмнөх [1] өгүүлэлд гаргаж авсан тэгшитгэлүүдээ хэрэглэх боломжтой. Эдгээр тэгшитгэлүүдээс дараах дөрвийг сонгож авъя.

$$e_y^2 = -\varepsilon + \varepsilon_l - A^2 - \frac{\beta^2}{\varepsilon^2} h^2 \quad (1)$$

$$\frac{dA^2}{d\varepsilon} = \frac{\beta^2 - \varepsilon}{\varepsilon^2} \frac{dh^2}{d\varepsilon} \quad (2)$$

$$\frac{dH^2}{d\varepsilon} = (\beta^2 - \varepsilon) \frac{de_y^2}{d\varepsilon} \quad (3)$$

$$\frac{dh^2}{d\varepsilon} = \frac{\varepsilon^2}{\varepsilon - 2\beta^2 + \varepsilon \cdot Dd} \left(1 - \frac{2\beta^2}{\varepsilon^3} h^2\right) \quad (4)$$

үүнд

$$Dd = 1_h 1_e \frac{e_y H}{Ah} = -\sqrt{\frac{e_y^2 H^2}{A^2 h^2}} \quad (5)$$

Хязгаарын тохиолд шилжихэд $1_h 1_e = 1$ гэж авах нь зүйтэй гэдэг нь мэдэгдэнэ, хасах тэмдэг нь $h < 0$ тай холбоотой. Энэ системийг бодоход гол бэрхшээл Dd илэрхийлэлээс үүснэ, Энэ илэрхийлэлд хандах хэрэг олон удаа гарах тул түүнд “зангилаа” гэдэг нэр өгье. Систем тэгшитгэлд ямар анхны нөхцөл тавьж болох вэ?

Орчны гүнд унтрах долгионд оронгийн аль ч компонентийн амплитуд тэг рүү тэмүүлэх болно. Иймд

$\varepsilon = \varepsilon_l$ байхад

$$A^2 = 0, h^2 = 0, e_y^2 = 0, H^2 = 0$$

болно гэсэн анхны нөхцөл авах нь боломжтой бөгөөд оновчтой мэт санагдана.

Ийм анхны нөхцөлтэй бодлогын шийдийг [2]-д боловсруулсан аргаар байгуулах ажилд шилжье.

Бид $\varepsilon = \varepsilon_l$ цэг дээр оронгийн компонент бүрийн квадратыг цуваанд задалъя. Үүнд $\varepsilon = \varepsilon_l - x, x > 0$

$$A^2 = x Aa0 + x^2 Aa1 + x^3 Aa2 + x^4 Aa3 + \dots \quad (6)$$

$$h^2 = x h0 + x^2 h1 + x^3 h2 + x^4 h3 + \dots \quad (7)$$

$$e_y^2 = x e0 + x^2 e1 + x^3 e2 + x^4 e3 + \dots \quad (8)$$

$$H^2 = x Hh0 + x^2 Hh1 + x^3 Hh2 + x^4 Hh3 + \dots \quad (9)$$

I. ТЭГ НАРИЙВЧЛАЛ

Энэ нарийвчлалд (2) тэгшитгэлээс

$$Aa0 = \frac{\beta^2 - \varepsilon_l}{\varepsilon_l^2} h0. \quad (10)$$

Тэр орчимд тэмдэг хадгалагдах тул $Aa0 > 0$, $h0 > 0$. Эндээс

$$\beta^2 > \varepsilon_l \quad (11)$$

Унтрах долгио байх нэг нөхцөл нь рефракцийн тогтмолын квадрат нь диэлектрикийн тогтмоос их байх явдал аж. (1) тэгшитгэлээс

$$e0 = 1 - Aa0 - \frac{\beta^2}{\varepsilon_l^2} h0 \quad (12)$$

Энэ тэгшитгэлд (10)аас орлуулга хийвэл

$$e0 = 1 + \frac{\varepsilon_l - 2\beta^2}{\varepsilon_l^2} h0 \quad (13)$$

Энэ бол чухал үр дүн. Утга нь түүнийг

$$e0 + \frac{2\beta^2 - \varepsilon_l}{\varepsilon_l^2} h0 = 1 \quad (14)$$

хэлбэртэй бичихэд тодорхой харагдана. Үүнийг $\varepsilon \rightarrow \varepsilon_l$ хязгаар хавьд дурын туйлширал дотор ТЕ ба ТМ хэсэг ямар харьцаатай байж болохыг харуулсан нэг ёсны хувь хэмжээний дүрэм гэж ойлгож болохоор байна. $e0$ нь дурын утга авч чадахгүй, харин тэгээс эхлэн 1 хүртэл утга авч болох бол $h0$ нь тэгээс эхлэн $\frac{\varepsilon_l^2}{\varepsilon_l - 2\beta^2}$ хүртэл утга авч болох юм. $e0 = 1$ буюу $h0 = 0$ - утга цэвэр ТЕ туйлширалд $e0 = 0$ буюу $h0 = \frac{\varepsilon_l^2}{\varepsilon_l - 2\beta^2}$ - утга цэвэр ТМ туйлширалд тус тус харгалзана. (3) тэгшитгэлээс

$$Hh0 = (\beta^2 - \varepsilon_l)e0. \quad (15)$$

(6), (7), (8), (9) ийн улмаас Dd - зангилгаа нь $Dd = Dd0 + xDd1 + x^2Dd2 + x^3Dd3 + \dots$ (16) гэж задарна. (10), (13), (15) илэрхийллүүдийг ашиглахад тэг нарийвчлалд

$$Dd0 = -\varepsilon_l \frac{e0}{h0} \quad (17)$$

гэж бичигдэнэ.

Нөгөө талаас (4) тэгшитгэлийг тэг нарийвчлалд бичвэл

$$(\varepsilon_l - 2\beta^2 + \varepsilon_l Dd0)h0 = -\varepsilon_l^2 \quad (18)$$

Энд $Dd0$ -ийн (17) илэрхийллийг орлуулан тавихад адилтгал болж хувирна. Ингэхлээр эндээс $h0$ тодорхойлогдохгүй, $h0$ - ын утга тодорхой биш үлдэнэ. Энэ нь ерөнхий тохиолд унтрах долгионы бодлого нэг сул параметртай гэсэн үг. Ийм байх нь ч аргагүй. $h0$ -г сул параметраар сонгон авбал түүний өгөдсөн утга бүр ерөнхий туйлширал дотор ТМ ба ТЕ хэсэг ямар харьцаатай байхыг харуулах болно((14)-хувь хэмжээний дүрэмээр).

II. ДАРААГИЙН НАРИЙВЧЛАЛУУД

Бид 1-рт (2) тэгшитгэлээс $Aa0, Aa1, Aa2, Aa3, \dots$ -г $h0, h1, h2, h3, \dots$ ээр илэрхийлээд 2-рт (1) тэгшитгэлээс $e0, e1, e2, e3, \dots$ -г мөн $h0, h1, h2, h3, \dots$ -ээр илэрхийлээд 3-рт (3) тэгшитгэлээс $Hh0, Hh1, Hh2, Hh3, \dots$ -г $e0, e1, e2, e3, \dots$ ээр илэрхийлээд эцэст нь (4) тэгшитгэлийг бодож $h0, h1, h2, h3, \dots$ -ыг дэс дараалан олох зорилго тавьсан. Гол нь тухайн j-р нарийвчлалд Ddj зангилааны бүтцийг шинжилж тэндээс үл мэдэгдэх- hj - г агуулсан ба агуулаагүй хэсгийг ялгах, бас сингуляр гишүүнийг ялгаж тусад нь тооцохтой холбогдсон ажил гарна. Өндөр нарийвчлалыг машингүйгээр бодох боломж үгүй. Бид Mathematic 6-ийн symbolic үйлдлийн зарим command ашиглан 6 зэргийн нарийвчлалтай олсон шийдээ appendix A- д жагсаав. Бодолтыг гүйцэтгэсэн процедурыг 3-р нарийвчлалаар жишээлэн appendix B -д харуулав. Тэнд 3-р нарийвчлалд $h3, Dd3$ -г хэрхэн олсоныг үзнэ үү. Тухайн j-р нарийвчлалд hj ийн хамт Ddj ийн илэрхийллийг олох шаардлага гардаг, учир нь, Ddj нь hj ийн хамт дараагийн нарийвчлалд хэрэглэгддэг.

Бодолтын зөв бурууг шат шатанд нь хянаад явах боломж бидэнд байсан.. Жишээлбэл, $h0$ -ийн

$$h0 = \frac{\varepsilon_l^2}{2\beta^2 - \varepsilon_l} \quad \text{-гэсэн тодорхой утгад бүх}$$

Ddj тэг болж хувирах ёстой юм. Бас hj бүрийн утга ТМ тохиолыхтой давхцаж байх ёстой. Хавсралтууд Wolfram notebook хэлбэртэй байгаа, тэнд $\beta^2 = b0$, $\varepsilon_l = ep$ эсэн тэмдэглэл хэрэглэсэн байгааг анхаарна уу

III. ДҮГНЭЛТ

Бид өөрөө сарниулагч керр орчинд ерөнхий туйлширалтай долгионы оронгийн компонент бүрийн амплитудыг диэлектрикийн функцээр илэрхийлэн тодорхойлоход хүрэлцэхүйц тооны тэгшитгэл томъёолсон юм[1].

Эдгээр тэгшитгэлээ ашиглан өөрөө сарниулагч керр орчинд бүрэн ойх, дурын

туйлширалтай гэрлийн долгионы оронгийн компонент бүрийн амплитудыг диэлектрикийн функцээр илэрхийлэх бодлогыг [2]-д боловсруулсан методикоор 6 зэргийн нарийвчлалтай бодов.

РЕЗЮМЕ

Достаточное число уравнений, для выражения амплитуды каждого компонента волнового поля произвольно поляризованного света в дефокусирующей керр среде через локальную диэлектрическую функцию, было сформулировано нами в [1]. Используя эти уравнения, с помощью метода, выработанного в [2], мы решили задачу выражения амплитуды каждого компонента волнового поля произвольно поляризованного света, полностью отраженного, в дефокусирующей керр среде, через локальную диэлектрическую функцию, с приближением до шестой степени..

ИШЛЭЛ

1. О. Нямсүрэн Г. Очирбат, Сөрөг керр илтэс дэх гэрлийн дурын туйлширалтай стационар долгионы оронгийн амплитуд бүр диэлектрикийн функцээс хамаарах хамаарлыг тодорхойлох бүрэн систем тэгшитгэл, МУИС, ФЭС, эрдэм шинжилгээний бичигийн энэ дугаарт
2. О. Нямсүрэн Г. Очирбат, Гэрлийн дурын туйлширалтай стационар долгио эерэг керр сууь орчноос бүрэн ойх бодлого.МУИС, ФЭС-ийн эрдэм шинжилгээний бичиг № 355(16), 2011, Улаанбаатар.

Appendix A

A solution of initial value problem for finding amplitude of every field component in arbitrary polarized and totally reflected light waves in self defocusing kerr media, as function of dielectric function, is given by power series accurate to the 6th order

Negative kerr media's dielectric function is

$\epsilon = \epsilon_p - x$, where $x > 0$, ϵ_p - dielectric constant, x - the term proportional to intensity, considered as independent variable

Square of amplitude of y component of the electric field is presented by power series accurate to the 6th order :

$$h^2 = h_0 x + h_1 x^2 + h_2 x^3 + h_3 x^4 + h_4 x^5 + h_5 x^6;$$

CoefficientList : $\{h_0, h_1, h_2, h_3, h_4, h_5\}$ is found with elements expressed in the term of initial value, h_0 .

$$h_1 = h_0 \left(-\frac{1}{2\epsilon_p} - \frac{2b_0 h_0}{\epsilon_p^3} \right);$$

$$h_2 = h_0 \left(\frac{b_0}{48 b_1 \epsilon_p^2} + h_0 \frac{-50 b_0^2 + 49 b_0 \epsilon_p}{48 b_1 \epsilon_p^4} + h_0^2 \frac{4 b_0^2}{\epsilon_p^6} \right);$$

$$h_3 = \frac{1}{3\epsilon_p^2} h_0 \left(\frac{-2 b_0^2 - 5 b_0 \epsilon_p}{384 (b_0 - \epsilon_p)^2 \epsilon_p} + \frac{(-1276 b_0^3 + 2440 b_0^2 \epsilon_p - 1157 b_0 \epsilon_p^2) h_0}{384 (b_0 - \epsilon_p)^2 \epsilon_p^3} + \frac{(56 b_0^3 - 55 b_0^2 \epsilon_p) h_0^2}{3 (b_0 - \epsilon_p) \epsilon_p^5} - \frac{24 b_0^3 h_0^3}{\epsilon_p^7} \right);$$

$$h_4 = \frac{(156 b_0^3 - 332 b_0^2 \epsilon_p - 13 b_0 \epsilon_p^2) h_0}{92160 \epsilon_p^4 (-b_0 + \epsilon_p)^3} + \frac{(104560 b_0^4 - 304360 b_0^3 \epsilon_p + 292162 b_0^2 \epsilon_p^2 - 92173 b_0 \epsilon_p^3) h_0^2}{92160 \epsilon_p^6 (-b_0 + \epsilon_p)^3} + \frac{(199828 b_0^4 - 388964 b_0^3 \epsilon_p + 188317 b_0^2 \epsilon_p^2) h_0^3}{23040 \epsilon_p^8 (-b_0 + \epsilon_p)^2} + \frac{(7486 b_0^4 - 7343 b_0^3 \epsilon_p) h_0^4}{360 \epsilon_p^{10} (-b_0 + \epsilon_p)} + \frac{16 b_0^4 h_0^5}{\epsilon_p^{12}};$$

$$h_5 = -\frac{(1036 b_0^4 - 3540 b_0^3 \epsilon_p + 3983 b_0^2 \epsilon_p^2 - 786 b_0 \epsilon_p^3) h_0}{921600 (b_0 - \epsilon_p)^4 \epsilon_p^5} - \frac{1}{2764800 (b_0 - \epsilon_p)^4 \epsilon_p^7} (3205904 b_0^5 - 12507352 b_0^4 \epsilon_p + 18193382 b_0^3 \epsilon_p^2 - 11656455 b_0^2 \epsilon_p^3 + 2762442 b_0 \epsilon_p^4) h_0^2 - ((-7799564 b_0^5 + 22780884 b_0^4 \epsilon_p - 22055815 b_0^3 \epsilon_p^2 + 7065480 b_0^2 \epsilon_p^3) h_0^3) /$$

$$\frac{(691200 (b_0 - ep)^3 ep^9) - \frac{(1689740 b_0^5 - 3298016 b_0^4 ep + 1602485 b_0^3 ep^2) h_0^4}{43200 (b_0 - ep)^2 ep^{11}} + \frac{(8758 b_0^5 - 8579 b_0^4 ep) h_0^5}{150 (b_0 - ep) ep^{13}} - \frac{32 b_0^5 h_0^6}{ep^{15}};$$

CoefficientList in the power series of square of amplitude of x component of the electric field is

$$\{Aa_0, Aa_1, Aa_2, Aa_3, Aa_4, Aa_5\} = \left\{ \frac{(b_0 - ep) h_0}{ep^2}, \frac{(2 b_0 - ep) h_0}{2 ep^3} + \frac{(2 b_0 ep - 2 ep^2) h_1}{2 ep^3}, \right. \\ \frac{(3 b_0 - ep) h_0}{3 ep^4} + \frac{(4 b_0 ep - 2 ep^2) h_1}{3 ep^4} + \frac{(3 b_0 ep^2 - 3 ep^3) h_2}{3 ep^4}, \\ \frac{(4 b_0 - ep) h_0}{4 ep^5} + \frac{(6 b_0 ep - 2 ep^2) h_1}{4 ep^5} + \frac{(6 b_0 ep^2 - 3 ep^3) h_2}{4 ep^5} + \frac{(4 b_0 ep^3 - 4 ep^4) h_3}{4 ep^5}, \\ \frac{(5 b_0 - ep) h_0}{5 ep^6} + \frac{(8 b_0 ep - 2 ep^2) h_1}{5 ep^6} + \frac{(9 b_0 ep^2 - 3 ep^3) h_2}{5 ep^6} + \frac{(8 b_0 ep^3 - 4 ep^4) h_3}{5 ep^6} + \\ \frac{(5 b_0 ep^4 - 5 ep^5) h_4}{5 ep^6}, \frac{(6 b_0 - ep) h_0}{6 ep^7} + \frac{(10 b_0 ep - 2 ep^2) h_1}{6 ep^7} + \frac{(12 b_0 ep^2 - 3 ep^3) h_2}{6 ep^7} + \\ \left. \frac{(12 b_0 ep^3 - 4 ep^4) h_3}{6 ep^7} + \frac{(10 b_0 ep^4 - 5 ep^5) h_4}{6 ep^7} + \frac{(6 b_0 ep^5 - 6 ep^6) h_5}{6 ep^7} \right\};$$

CoefficientList in the power series of square of amplitude of y component of the electric field is

$$\{e_0, e_1, e_2, e_3, e_4, e_5\} = \left\{ 1 + \left(-\frac{b_0}{ep^2} + \frac{-b_0 + ep}{ep^2} \right) h_0, \left(-\frac{3 b_0}{ep^3} + \frac{1}{2 ep^2} \right) h_0 + \left(-\frac{2 b_0}{ep^2} + \frac{1}{ep} \right) h_1, \right. \\ \left(-\frac{4 b_0}{ep^4} + \frac{1}{3 ep^3} \right) h_0 + \left(-\frac{10 b_0}{3 ep^3} + \frac{2}{3 ep^2} \right) h_1 + \left(-\frac{2 b_0}{ep^2} + \frac{1}{ep} \right) h_2, \\ \frac{(4 b_0 - ep) h_0}{4 ep^5} + \frac{(6 b_0 ep - 2 ep^2) h_1}{4 ep^5} + \frac{(6 b_0 ep^2 - 3 ep^3) h_2}{4 ep^5} + \frac{(4 b_0 ep^3 - 4 ep^4) h_3}{4 ep^5}, \\ \frac{(5 b_0 - ep) h_0}{5 ep^6} + \frac{(8 b_0 ep - 2 ep^2) h_1}{5 ep^6} + \frac{(9 b_0 ep^2 - 3 ep^3) h_2}{5 ep^6} + \frac{(8 b_0 ep^3 - 4 ep^4) h_3}{5 ep^6} + \\ \frac{(5 b_0 ep^4 - 5 ep^5) h_4}{5 ep^6}, \frac{(6 b_0 - ep) h_0}{6 ep^7} + \frac{(10 b_0 ep - 2 ep^2) h_1}{6 ep^7} + \frac{(12 b_0 ep^2 - 3 ep^3) h_2}{6 ep^7} + \\ \left. \frac{(12 b_0 ep^3 - 4 ep^4) h_3}{6 ep^7} + \frac{(10 b_0 ep^4 - 5 ep^5) h_4}{6 ep^7} + \frac{(6 b_0 ep^5 - 6 ep^6) h_5}{6 ep^7} \right\};$$

CoefficientList in the power series of square of amplitude of y component of the electric field is

$$\{e_0, e_1, e_2, e_3, e_4, e_5\} = \left\{ 1 + \left(-\frac{b_0}{ep^2} + \frac{-b_0 + ep}{ep^2} \right) h_0, \left(-\frac{3 b_0}{ep^3} + \frac{1}{2 ep^2} \right) h_0 + \left(-\frac{2 b_0}{ep^2} + \frac{1}{ep} \right) h_1, \right. \\ \left(-\frac{4 b_0}{ep^4} + \frac{1}{3 ep^3} \right) h_0 + \left(-\frac{10 b_0}{3 ep^3} + \frac{2}{3 ep^2} \right) h_1 + \left(-\frac{2 b_0}{ep^2} + \frac{1}{ep} \right) h_2, \\ \left(-\frac{5 b_0}{ep^5} + \frac{1}{4 ep^4} \right) h_0 + \left(-\frac{9 b_0}{2 ep^4} + \frac{1}{2 ep^3} \right) h_1 + \left(-\frac{7 b_0}{2 ep^3} + \frac{3}{4 ep^2} \right) h_2 + \left(-\frac{2 b_0}{ep^2} + \frac{1}{ep} \right) h_3, \\ \left. \left(-\frac{5 b_0}{ep^5} + \frac{1}{4 ep^4} \right) h_0 + \left(-\frac{9 b_0}{2 ep^4} + \frac{1}{2 ep^3} \right) h_1 + \left(-\frac{7 b_0}{2 ep^3} + \frac{3}{4 ep^2} \right) h_2 + \left(-\frac{2 b_0}{ep^2} + \frac{1}{ep} \right) h_3 \right\};$$

$$\begin{aligned} & \left(-\frac{6b_0}{ep^6} + \frac{1}{5ep^5} \right) h_0 + \left(-\frac{28b_0}{5ep^5} + \frac{2}{5ep^4} \right) h_1 + \left(-\frac{24b_0}{5ep^4} + \frac{3}{5ep^3} \right) h_2 + \\ & \left(-\frac{18b_0}{5ep^3} + \frac{4}{5ep^2} \right) h_3 + \left(-\frac{2b_0}{ep^2} + \frac{1}{ep} \right) h_4, \left(-\frac{7b_0}{ep^7} + \frac{1}{6ep^6} \right) h_0 + \left(-\frac{20b_0}{3ep^6} + \frac{1}{3ep^5} \right) h_1 + \\ & \left(-\frac{6b_0}{ep^5} + \frac{1}{2ep^4} \right) h_2 + \left(-\frac{5b_0}{ep^4} + \frac{2}{3ep^3} \right) h_3 + \left(-\frac{11b_0}{3ep^3} + \frac{5}{6ep^2} \right) h_4 + \left(-\frac{2b_0}{ep^2} + \frac{1}{ep} \right) h_5); \end{aligned}$$

CoefficientList in power series of square of amplitude of x component of the magnetic field is calculated through e0, e1, e2, e3, e4 and e5 .

Notation : b1 = b0 - ep;

$$\begin{aligned} \{Hh0, Hh1, Hh2, Hh3, Hh4, Hh5\} = & \{b_1 e_0, \frac{1}{2} (e_0 + 2 b_1 e_1), \\ & \frac{1}{3} (2 e_1 + 3 b_1 e_2), \frac{1}{4} (3 e_2 + 4 b_1 e_3), \frac{1}{5} (4 e_3 + 5 b_1 e_4), \frac{1}{6} (5 e_4 + 6 b_1 e_5)\}; \end{aligned}$$

CoefficientList in the power series of square of amplitude of z component of the electric field is

$$\begin{aligned} & \left\{ \frac{b_0 h_0}{ep^2}, \frac{2 b_0 h_0 + b_0 ep h_1}{ep^3}, \frac{3 b_0 h_0 + 2 b_0 ep h_1 + b_0 ep^2 h_2}{ep^4}, \right. \\ & \frac{4 b_0 h_0 + 3 b_0 ep h_1 + 2 b_0 ep^2 h_2 + b_0 ep^3 h_3}{ep^5}, \\ & \frac{5 b_0 h_0 + 4 b_0 ep h_1 + 3 b_0 ep^2 h_2 + 2 b_0 ep^3 h_3 + b_0 ep^4 h_4}{ep^6}, \\ & \left. \frac{1}{ep^7} (6 b_0 h_0 + 5 b_0 ep h_1 + 4 b_0 ep^2 h_2 + 3 b_0 ep^3 h_3 + 2 b_0 ep^4 h_4 + b_0 ep^5 h_5) \right\}; \end{aligned}$$

CoefficientList in the power series of square of amplitude of z component of the magnetic field is equal to {e0, e1, e2, e3, e4, e5} multified by b0 :

$$\{e_0, e_1, e_2, e_3, e_4, e_5\} b_0;$$

Any of coefficientLists is expressed in the term of initial value , h0, for the explicit dependence of h1, h2, h3, h4 and h5 from h0

Appendix B

How approximate solution of an initial value problem of finding square amplitude of every field component in light waves in defocused kerr media as function of dielectric function is obtained is demonstrated in the third approximation.

Seeks to determine the square amplitude of y component of magnetic field using equations formulated by us. After third approximation the expressions for square amplitude of y component of magnetic field and Dd-package will look as

$$h^2 = h_0 x + h_1 x^2 + h_2 x^3 + h_3 x^4 \text{ and } Dd = Dd_0 + Dd_1 x + Dd_2 x^2 + Dd_3 x^3,$$

(see formulas:(5)-(9) in the paper)

where h_3 and Dd_3 should be determined, in the third approximation, in the term of initial value, h_0 . we have extensively used several commands of symbolic calculus of mathematic 6 and our presentation below was given in the form of a notebook of mathematic 6

Notation: $b_0 = \beta^2$, ϵ_p = dielectric constant.

$h_1 = ; h_2 = ; h_3 = ; x_1 = ; x_2 = ; x_3 = ; b_{11} = ; b_{21} = ; b_{12} = ; b_{22} = ; b_{31} = ; b_{31} = ;$

Clear[Dd0, Dd1, Dd2, Dd3]

$h_0 = ;$

Quantities h_1, h_2 and Dd_0, Dd_1, Dd_2 have been calculated, from previous approximations, in the term of initial value, h_0 .

$$h_1 = -\frac{h_0}{2\epsilon_p} - \frac{2b_0 h_0^2}{\epsilon_p^3};$$

$$h_2 = \frac{b_0 h_0}{48(b_0 - \epsilon_p)\epsilon_p^2} + \frac{(-50b_0^2 + 49b_0\epsilon_p)h_0^2}{48(b_0 - \epsilon_p)\epsilon_p^4} + \frac{4b_0^2 h_0^3}{\epsilon_p^6};$$

$$Dd_0 = -\epsilon_p \left(\frac{1}{h_0} + \frac{\epsilon_p - 2b_0}{\epsilon_p^2} \right); Dd_1 = 0; Dd_2 = \frac{-2b_0^2 + b_0\epsilon_p}{16(b_0 - \epsilon_p)\epsilon_p^3} + \frac{b_0}{16(b_0 - \epsilon_p)\epsilon_p h_0};$$

{Aa0, Aa1, Aa2, Aa3} is coefficientList in power series of square amplitude of x - component of the electric field, A^2 . To express elements of this list in terms of h_0, h_1, h_2, h_3 we use equation :

$$\frac{d}{d\epsilon} Aa^2 = \frac{b_0 - \epsilon}{\epsilon^2} h^2.$$

$$b_1 = b_0 - \epsilon_p;$$

$$x_1 = \frac{(b_1 + x)(h_0 + 2h_1x + 3h_2x^2 + 4h_3x^3)}{(\epsilon_p - x)^2};$$

$$x_2 = \text{Normal}[\text{Series}[x_1, \{x, 0, 3\}]];$$

$$Aa = \text{CoefficientList}[x_2, x] \{1, 1/2, 1/3, 1/4\};$$

{Aa0, Aa1, Aa2, Aa3} = Collect[Aa, {h0, h3}];

To decompose Dd3 we need following list

{Aa0, Aa1, Aa2, Aa3}/Aa0;

{Aa0a, Aa1a, Aa2a, Aa3a} = Normal[Series[%, {h0, 0, 12}]];

Aa3a

$$\frac{18 b_0^2 - 17 b_0 e p}{64 e p^3 (-b_0 + e p)^2} + \frac{(-292 b_0^3 + 404 b_0^2 e p - 113 b_0 e p^2) h_0}{64 e p^5 (-b_0 + e p)^2} + \frac{3 (2 b_0^3 - b_0^2 e p) h_0^2}{(b_0 - e p) e p^7} + \frac{h_3}{h_0}$$

Discarding terms with factor h3 from this expression.

h3 = 0; Aa3a; h3 =.;

$e_y^2 = e_0 x + e_1 x^2 + e_2 x^3 + e_3 x^4$. To get {e0, e1, e2, e3} – list, in terms of h0, h1, h2, h3, we use

equation: $e_y^2 = \epsilon + e p - A^2 - \frac{b_0}{\epsilon^2} h^2$.

$x_3 = 1 - \text{Normal}[\text{Series}[\frac{b_0}{(e p - x)^2} (h_0 + h_1 x + h_2 x^2 + h_3 x^3), \{x, 0, 3\}]]$;

CoefficientList[%, x] – Aa;

{e0, e1, e2, e3} = Collect[%, {h0, h3}];

For decomposition of Dd3 we need {e0e, e1e, e2e, e3e} = {e0, e1, e2, e3}/e0 – list. let us express this list in terms of e0 and h3.

e0 =.

$h_0 = (1 - e_0) e p^2 / (2 b_0 - e p)$;

{e0, e1, e2, e3}/e0;

{e0e, e1e, e2e, e3e} = Normal[Series[%, {e0, 0, 12}]];

e3e

$$\frac{e_0^2 (14 b_0^3 - 3 b_0^2 e p)}{(2 b_0 - e p)^3 e p^3} + \frac{e_0 (-3208 b_0^4 + 1852 b_0^3 e p + 1706 b_0^2 e p^2 - 339 b_0 e p^3)}{192 (b_0 - e p) (2 b_0 - e p)^3 e p^3} + \frac{520 b_0^4 + 1796 b_0^3 e p - 2474 b_0^2 e p^2 + 147 b_0 e p^3}{192 (b_0 - e p) (2 b_0 - e p)^3 e p^3} +$$

$$\frac{-2 b_0^2 - b_0 \epsilon p - 16 b_0^4 h^3 + 32 b_0^3 \epsilon p h^3 - 24 b_0^2 \epsilon p^2 h^3 + 8 b_0 \epsilon p^3 h^3 - \epsilon p^4 h^3}{e_0 (2 b_0 - \epsilon p)^3 \epsilon p^2}$$

Discard from this expression , terms with factor h^3 and the term with pole $1/e_0$. Then

$$e_3 e = \frac{b_0^2 e_0^2 (14 b_0 - 3 \epsilon p)}{(2 b_0 - \epsilon p)^3 \epsilon p^3} + \frac{e_0 (-3208 b_0^4 + 1852 b_0^3 \epsilon p + 1706 b_0^2 \epsilon p^2 - 339 b_0 \epsilon p^3)}{192 (b_0 - \epsilon p) (2 b_0 - \epsilon p)^3 \epsilon p^3} + \frac{520 b_0^4 + 1796 b_0^3 \epsilon p - 2474 b_0^2 \epsilon p^2 + 147 b_0 \epsilon p^3}{192 (b_0 - \epsilon p) (2 b_0 - \epsilon p)^3 \epsilon p^3};$$

$$e_3 \epsilon p = \frac{-2 b_0^2 - b_0 \epsilon p}{(2 b_0 - \epsilon p)^3 \epsilon p^2};$$

$H^2 = H h_0 x + H h_1 x^2 + H h_2 x^3 + H h_3 x^4$ and $e_y^2 = e_0 x + e_1 x^2 + e_2 x^3 + e_3 x^4$. Both expansions are related each other by the following equation

$$\frac{d}{d\epsilon} H^2 = (b_0 - \epsilon) \frac{d}{d\epsilon} e_y^2$$

Clear[b1, e0, e1, e2, e3]

x1 = (b1 + x) (e0 + 2 e1 x + 3 e2 x^2 + 4 e3 x^3);

Normal[Series[x1, {x, 0, 3}]];

Geant4 багцаар нейтроны сарнилын дүрслэлт тооцоо үйлдэхүй

О. Лхагва^{1*}, М. Батмөнх², П. Батзул¹

¹Монгол Улс, Улаанбаатар-210646, Их сургуулийн гудамж-1, Монгол Улсын Их Сургууль,
Физик-электроникийн сургууль, Онолын физикийн тэнхим,

²Оросын Холбооны Улс, Дубна хот, Цөмийн Шинжилгээний Нэгдсэн Институт,
Цацрагийн биологийн лаборатори

*Э-шуудан: olhagva@yahoo.com

Сүүлийн хоёр жил олон улсын Geant4 програмын нөмөр нөөлөг дагаж, цацраг, бөөмс нано цараанд бодис болон биологи биеттэй харилцан үйлчлэлцэхүйг судлахаар боловсруулсан тооцооллын цогц хэрэглүүрүүдийг компьютерт суулгаад шинжилгээний угтвар дасгал, бодлогуудыг шийдэхэд, залуус зохих дадал чадвар эзэмшсэн юм. Энэхүү ажилд нейтрон биет- дээжтэй үйлчлэлцэх зүйг тусгалын энергээс хамааруулсан тооцооны зарим үр дүнг толиллуулав. Geant4 багцаар үйлдсэн тооцооныхоо тоон дүнг АНУ, Канадын физикчдийн бүрдүүлсэн цөмийн ENDF/B-7 баримттай жишив.

I. УЛААЧ ҮГ

Мэдээллийн технологи, хийгээд тооцоот дүрслэлийн өнөөгийн дэвшилд суурьлан атом, цөм, эгэл бөөмийн физикийн олон он жилийн туршилт болон онолын судалгаа, тооцооллын ололтыг нэгтгэснээр бодис, биологи биетийн бүтэц зүй тогтлыг хумхи цараанд туршин судлах арга зүй боловсорч, дүрслэлт тооцоогоор 3D биеж дүрсийг босгох таатай боломж[1,2] бүрдээд байна. Цацраг, туяаны нано- микрон голчтой урсгалаар бөөмс, үлэг молекул, эсийн жишиг цараатай дээжийг шарж туршилтын баримт гаргахын сацуу квант сарнил, мөргөлдөөний онолоор тооцоолж, уг хувирлын орон зайн өрнөл, мөрлөл хэмжээг нь геометр дүрслэл, 3D загварт буулган босгодог боллоо. Энэ бол нано цараанд бодис хийгээд биологи биетийн туршилт, онолын судалгааны арга зүйн нэгдлийг хангах шинэ эхлэл даруй мөн.

Geant4 хэмээн нэрлэж буй эл тооцоо дүрслэлт иж төхөөрөг нь цөмийн физикээс нано царааны бодис, биологийн бичил биет, удамшлын ДНХ, бактери, вирус хүртэлх дээжийг цацраг, туяагаар үйлчилж судлах аргыг цогц физик туршилт, тооцоо дүрслэлийн суурьтай болгоод байна. Сүүлийн жил гаруй хугацаанд Франц, Япон, Итали улс болон ЦШНИ-ийн физичдын дэмжлэг чиглүүлэлтээр Geant4 багц програмын заримыг МУИС-ийн онолын физикийн лабораторт суурьшуулж, заавал үйлдэх туршилт, шинжилгээний бодлогуудыг гүйцэтгээд судалгааны анхны үр дүнг [3,4] гаргасан юм. Мөн чиглэлээр хүнд ионоор ЦШНИ-ийн Цацрагийн биологийн лаборатортой хамтран хурдан

хүнд ионы үйлчлэлээр ДНХ молекулын бүтэцэд шингэсэн энерги болон цацрагийн тунгийн эзлэхүүнээр түгэх зүйг загварчлах[5-7], хүнд цэнэгт ионы үйлчлэлээр ДНХ-д үүсэх мөрлөлийн бүтэц, энергийн шугаман дамжууллын ойролцооллд өөр өөр төрлийн ДНХ-ийн дан болон хоймсон мушгаан дахь эвдрэлийн тоог үнэлэх, загварчлах, зөөвөрлөх донжийг боловсруулах судалгааг хамтран гүйцэтгэхэд бэлтгэлээ.

Нано хэмжээ бүхий бөөмс, цацрагийн урсгал биологийн амьд биеттэй үйлчлэлцэх судалгаа нь цаашдаа цацрагийн үйлчлэлээр ДНХ хуваагдах, бутарч бөөмнөрөх, эргэж сэргэх, мөхөх динамикийг тодруулах, цацрагийн аюулаас хамгаалах, удамшлын өвчнийг анагаах, хорт хавдрын ургацыг унтраах цацрагийн микро-нано дозиметрийн арга зүйг боловсруулах зорилготой юм. Энэ чиглэлээр эмчилгээ- оношлогоонд хэдийнэ хэрэгжсэн найдвартай баримт бол MRI, позитроны компьютер биеж дүрслүүр (томограф), хэт авиан биеж дүрслүүр мөн [6].

Сүүлийн жилд Geant4 цогцын хадрон нанобөөмийн харилцан үйлчлэлийн судалгааны хүрээнд нейтроны цацрагаар нанохэмжээтэй дээжид үйлчлэхэд үүсэх зүй тогтлыг судлах зориулалтай багц програм боловсруулахад ихээхэн анахаарал тавьж байна. Энэхүү шинэ арга барил хийгээд цогц програмыг нь эзэмших, үр дүнг их сургуулийн сургалтад нэвтрүүлэх зорилтыг эрхэмлэн энэхүү ажилд Geant4 багцын хүрээнд нейтроны урсгалыг ашиглахад чиглэсэн техник, загварчлалын шинэ зохион бүтээх ажлын өрнөлийн өнөөг

тоймлож, тооцооны анхны үр дүнг олноо толилуулж байна.

II. НЕЙТРОН

Цацраг туяагаар бодисыг тандсан мэдээллээс уг юмсын бүтэц, эвдрэх, гажих хийгээд сэргэж эдгэрэх зүй тогтлыг танин мэдэх арга барил эдүгээ нэгэн гольдрол лугаа нийлэн цэгцэрч, цаашид эрчтэй хөгжиж байгааг өмнө цухас дурьдлаа. Өнөөдөр дэлхийн 100 шахам том лабораторыг хамарсан Gean4 туршилт, тооцоо дүрслэл бүхий цогц програмын үйл ажиллагаа нь нейтроны урсгалт судалгаанд илүүтэй анхаарч байна. Ялангуяа, нейтроны цацрагийн өвөрмөц шинж төрх нь эсийн чанад хийгээд нано цараанд физик болон биологи биетийг эвдрэл нөлөө багатай судлахад илүү тохиромжтой юм. Нейтрон нь долгиолог болон бөөмлөг(квант шид) төрхтэй бас цөмийн чанга хүчээр ($R \leq 10^{-15}$ м) протон мөн хадроны төрөл бөөмстэй үйлчлэлцэн хурахад, эерэг цэнэгт цөмийг багцлан бүрэлдэнэ.

Нейтрон цахилгаан саармаг, диполийн момент бараг үгүй, хагас спинтэй, соронзон моменттэй, бодист гүн нэвтэрдэг, хурдыг нь сааруулж, долгионы уртыг нь жолоодоход дорвитой ахиц олсноор бодисын бүтэц болон соронзон орон бүрэлдэхүйн зүйг нь тандан шинжихэд шуурхайлан хэрэглэх боллоо. Сул тал гэвэл тааруухан сарнидаг, өндөр эрчимтэй урсгалыг нь үүсгэхэд ч бэрхшээл бий.

III. НЕЙТРОН САРНИХУЙ

Нейтрон талстын тороос ойж дифракцлах, бага өнцгөөр сарних түүнчлэн соронзон орноос нь ч харимхай сарниж болно. Зангилаанд суугаа цөмд шингэх буюу харимхай бус ч сарнина. Онолын судалгаанд зангилаан дахь атомын шилжилтийг сонгон тохируулсаар Брэггийн эрчмийн туршилтын дүнг нарийн тодорхойлохуйц талст бүтцийг загварчлан тогтоодог. Нейтрон болон рентген туяаны бодисоос сарних бага өнцгийн сарнилын туршилтын болон онолын тулгуур үзэл ихээхэн төстэй. Гол ялгаа нь бол рентген буюу цахилгаан соронзон цацраг нь ион тойрон дахь электрон бүрхүүлтэй мэдэгдэм үйлчлэлцдэгт оршино. Тухайн энергид атомаас сарнисан нейтроны сарнилын амплитуд тогтмол байдаг бол рентген

туяаных өнцгөөс хамааран өөрчлөгдөнө. Талстаас сарнисан нейтроны энерги болон долгионы анхны фаз нь хувираагүй байвал харимхай, харин зөвхөн фаз нь шилжиж бас энерги нь өөрчлөгдсөн бол харимхай бус сарнил явна. Нейтроны цөм дэх сарнилын огтлолыг сарнилына уртаар [8] илэрхийлнэ.

$$\sigma = 4 \cdot \pi \cdot a^2 \quad (1)$$

Сарнилын a уртыг тухайн нейтронд цөмийн “харагдах” радиус гэвэл зохиму. Харин нейтроны цөм дэх харимхай бус сарнилын (цөмийн урвал, цочирлоос үүдэн урсгал нь ширгэх, нэмэгдэх) тохиолдолд энэхүү урт нь энергээс хамаарсан комплекс тоонд хувирдаг юм. Хурдан нейтрон харимхай сарнихын сацуу энерги шилжүүлэн цөмийг цочирсон төлөвт оруулаад харимхай бус сарнина. Өнөөх цочирсон цөм γ туяа цацруулан шууд буюу завсар зуурын төлөв дайран үндсэн төлөвтөө шилжинэ. Өмнө өгүүлснээс үзэхүл, цөмийн мөргөлдөөн, харимхай болон харимхай бус сарнил бас цөмд шингэх эл гурван гол үйл хувирлаар нейтроны хурд саардаг байна. Тэгэхдээ их энергитэй (>20 МэВ) нейтроны хувьд тийм хувирал голлон тохионо. Харин нейтроны энерги 0.025эВ (дулааны нейтрон) зиндааны болоход харимхай сарнилын нөхцөл бүрэлдэнэ. Geant4 (геометр дүрслэлт мөрлөл) тооцоололт багц нь нейтроны бодис дундуур нэвтрэх дүрслэлт замнал үүсгэдэг юм.

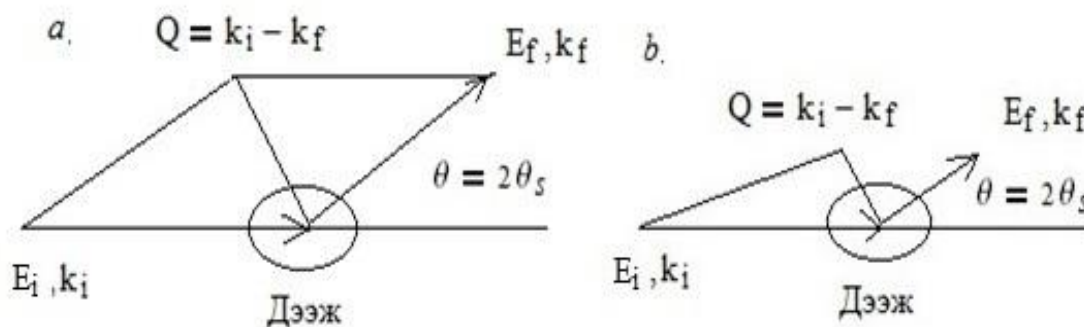
A. Бага өнцгийн сарнил

Нейтроны бага өнцгийн сарнилыг судлах туршилтын санааг тоймлон дүрслэе. Эхлээд өмнө өгүүлснийг багцлан сарнилын геометр дүрслэлт туршилтыг тоймлон өгүүлье. Тодорхой k_i импүүльстэй нейтроны I урсгалыг дээжин дээр тусгаад бага өнцгөөр чиглэсэн k_f тойрон дахь фаз огторгуйн d^3k_f төгсгөлгүй бага эзлэхүүн дундуур нэвтрэх урсгалыг бүртгээд анхны урсгалд харьцуулан диференциал огтлолыг олно. Нейтроны сарнилын давхар диференциал огтлолыг хэмжиж бас тооцоолдог:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE_f} = \frac{k_f}{k_i} \cdot S(Q, \omega) \quad (2)$$

Энд $S(Q, \omega)$ нь нейтроны сарних явцад системийн энерги нь $\hbar\omega$, импульс нь $\hbar Q$ хэмжээтэй хувирсныг илэрхийлж буй магадлал. (2) илэрхийлэл нь k_f импульсийн

тойронд $d\Omega$ биет өнцгөөр, энергийн dE_f завсарт сарнисан нейтроны сарнилын огтлолын нэгж биет өнцөг, энергийн нэгж завсарт оногдож буй хувь нь юм.



Зураг 1. Анхны k_i импульстэй E_i энергитэй нейтрон цагираг дотор ионтой үйлчлэлцээд, Q импульс шилжүүлээд бага өнцгөөр сарниж, k_f импульстэй E_f энергитэй эцсийн төлөв төрхөө олно. Үйлийн эцэст эхний төлвийн k_i, E_i нь эцсийн k_f, E_f лүгээ тэнцүү байгаа бол харимхай сарнил (a), харин өөрчлөгдсөн байвал хаимхай бус сарнил (b) болно.

Ионуд торын зангилаа орчимд температураас хамаарсан эрч бүхий хэлбэлзэл үйлдэнэ. Торын хэмжээнд нийлэлдээд ирэхээрээ өвч нүргээн(фонон)-ий хэлбэлзэл үүсгэнэ. Нүргээн хэлбэлзэл нь гармоник хууль ёсоор салангад энергийн төвшинтэй. Бага энергит нейтрон талстаас сарнихдаа нүргээн лүгээ үйлчлэлцэж $h\nu$ энерги бүхий квантыг нь шингээж бас цацруулна. Ихэнх талст биеийн фонон хэд хэдэн терагерц давтамж буюу харгалзан хэд хэдэн мэВ (~ 4.18 мэВ) энергийн завсарт багтана. Өлгөж бодвоос дулааны нейтрон сарнихад фононтой харилцсны улмаас энерги нь мөн мэВ жишиг цараанд өөрчлөгдөнө. Нейтроны энэхүү бага тун энергийг хэмжээд улмаар талстын нүргээн буюу фононы давтамжийг тодорхойлдог юм.

Нейтрон бодисын соронзон үйлчлэлцлийн потенциал:

$$V_{\mu r} = -\mu_n \cdot B(r) \quad (3)$$

Энд, $B(r)$ электроны спин болон орбитын гүйдлийн түгэлтээр үүссэн соронзон орны вектор, μ_n нь нейтроны соронзон момент бөгөөд соронзон орны вектор болон нейтроны спины чиглэлээс хамаарна:

$$\mu_n = -2 \cdot \gamma \cdot \mu_N \cdot S_n \quad (\gamma = 1.913) \quad (4)$$

μ_N нь цөмийн магнетон. Туйлширсан нейтроныг ашиглабал талстын соронзон орны янз бүрийн чиглэл дэх соронзон байгуулагчийг тэмтэрч тогтоох боломж бүрдэнэ. Диполийн ойролцооллод

туйлшраагүй нейтроны талстын соронзон бүтэц дээрх сарнилын $S(Q, \omega)$ магадлалыг хэлбэрт бичье:

$$S_M(Q) \cong C \cdot G_M^2 \cdot \delta(Q - G_M) \quad (5)$$

Энд талстын урвуу торын G_M вектороор нийлбэрлэнэ. C тогтмол коэффициент. Соронзон бүтцийн үржигдүүн:

$$F_M G = \sum_j f_j(Q) \cdot m_{i,j} \cdot e^{iG \cdot r_{i,j}} \quad (6)$$

Энд эгэл соронзон торын эрэмбэлэгдсэн моментоор нийлбэрлэнэ. Нейтроны сарнилын мэдээнээс атомын жишиг цараанд хатуу болон шингэн бодисын соронзон бүтэц хийгээд динамик шинжийг танин мэддэг байна. Өмнө дурьдсан харимхай болон харимхай бус сарнилын спектраль баримтаас спины бүтцийг нарийн тэмтэрч, соронзон цочролын спектр, фазын соронзон хувирлын торгон мэдээллийг гарган авдаг.

Туршилтын нэн найдвартай цаашид хөгжих төхөөрөг бүтээгээд байна. Нейтрон цэнэггүй учраас нейтроноор бодисын гүн дэх бүтцийг эвдэлгүй судлах, төрх хувирлыг тэмтрэх боломж ийнхүү бүрдээд байна. Цөмийн төвшинд фермион-хадрон, барион, тэртээд нь кварк бүтэц, инагшлаад амьд болон амьгүй бодис юмсын бүтэц, бүрэлдэл хийгээд хувирлын зүй тогтлыг илт эвдэлж бэртээлгүйгээр тандан судлах туршилт болонолын найдвартай арга барил нейтроны өвөрмөц физик чанар, судалгааны үр дүнд суурилан ийнхүү бүрэлдэж байна.

Үүний шинэ чиглэлийг Geant4 програмын хүрээнд хөгжиж байгааг дээр дурссан.

Эцэст хэлэхэд Geant4 програмын хүрээнд нейтроны цацраг эмчилгээний арга зүй хадрон эмчилгээний нэг эрчимтэй чиглэл болон хөгжиж байна. Ганц жишээ дурьдахад, хорт хавдрын ахны хэмжээнийх нь 0.001 жишигт хүртэл багасгахын тулд нейтроны 7 грэй, харин фотоны 28 грэй тунг тус тус залгиулдаг байна. Эндээс үзэхүл, нейтроны хавдрын эсийг мөхөөх чадвар фотоныхоос 4 дахин үр нөлөөтэй байх ажээ.

Б.Цэгнэхүй

Нейтрон бодис руу ороод сарниж бас цөмд бариулна. Нейтрон цөмийн хүчний үйлчлэлд ороод аяндаа шинэ цөм буюу цаашидзадрах зуурдын бүрэлдэл үүсгээд протон, α - бөөм, нейтрон, бусад бөөмс, γ – туяа цацруулах урвалыг өгдөөнө. Тийм урвалын магадал нь тусч буй электроны энергээс гадна цөмийн шинж төрлөөс[8,9] хамаарна. Нейтроны эл сарнил, урвалын огтлолыг $1 \text{ барн} = 10^{-28} [\text{м}^2]$ нэгжээр хэмжинэ.

В.Цөм дэх сарнилын огтлол, урвалын хурдын нягт.

Нейтрон бодис руу тусч байгаа учраас чухам цөмөөс сарних огтлолыг хэрхэн тодорхойлдог тооцооны жортой танилцах хэрэгтэй[8]. Бай бодисын нягт $\rho [\text{г}/\text{см}^3]$, атомын жин нь M бол Авогадро хуулийг хувиргаж бай дахь цөмийн нягттай холбёе:

$$N = \frac{\rho}{M} \cdot S \quad (7)$$

Урвалын R хурдыг байн тосгуур талбай S , зузаан x , цацраг дахь нейтроны хурд, нягт, болон бай дахь цөмийн нягт оролцсон дараах математик томъёогоор баримжаалдаг:

$$R \sim S \cdot x \cdot n \cdot v \cdot N \left[\frac{\text{урвалууд}}{\text{секунд}} \right] \quad (8)$$

Энд $V = S \cdot x$ болохыг анхаарч, шууд хамаарлын σ коэффициент оруулаад нэгж эзлэхүүнд явах урвалын хурдыг R тодорхойлбол:

$$R = \frac{R}{V} = nvN \cdot \sigma \cdot \left[\frac{\text{урвалууд}}{\text{секунд}} \right] \quad (9)$$

Эл илэрхийллээс шууд хамаарлын коэффициентыг нэгжтэй нь тодорхойлбёе:

$$\sigma = \frac{R}{nvN} \cdot \frac{\frac{\text{урвалууд}}{\text{м}^3 \cdot \text{сек}}}{\frac{\text{нейтрон}}{\text{м}^3} \cdot \frac{\text{м}}{\text{сек}} \cdot \frac{\text{цөм}}{\text{м}^3}} = \frac{R}{nvN} [\text{м}^2] \quad (10)$$

Энэхүү талбайн нэгж бүхий хэмжигдэхүүнийг байн нэг цөм цөмийн урвалыг илэрхийлэх магадал буюу огтлол хэмээнэ. Нэгж хугацаанд нэгж талбайгаар нэвтэрч буй бөөмийн тоог урсгалын нягт хэмээдэг учир

$$I = n \cdot v \cdot \frac{\text{нейтрон}}{\text{м}^3} \cdot \frac{\text{м}}{\text{сек}} = n \cdot v \left[\frac{\text{нейтрон}}{\text{м}^2 \cdot \text{сек}} \right] \quad (11)$$

Сүүлчийн хоёр илэрхийллээс цөм дээрх урвалын огтлол:

$$\sigma = \frac{R}{I \cdot N} \cdot \frac{\frac{\text{урвалууд}}{\text{м}^3 \cdot \text{сек}}}{\frac{\text{нейтрон}}{\text{м}^2 \cdot \text{сек}} \cdot \frac{\text{цөм}}{\text{м}^3}} = \frac{R}{IN} [\text{м}^2] \quad (12)$$

томъёогоор илэрхийлэгдэх бөгөөд чухамдаа нейтроны нэгж урсгалаар нэгж эзлэхүүн дэх цөмд явах урвалын хурдын нягтыг тодорхойлж байгаа юм. Өгүүлснийг эргэн санавал: урвалын хурдын нягт:

$$R = I \cdot N \cdot \sigma \quad (13)$$

R нягтыг олсноор урвалын огтлолын утга учрыг урсгалын нэгж эрчмээр нэгж эзлэхүүн дэх нэг цөмд үүсэх урвалын хурд мэтээр тайлбарлах боломжтой болсон юм. Цөмийн урвалын огтлол нь бага энергид цөмийн хэмжээнээс асар их байдаг. Харин нэн их энергитэй нейтроны огтлол цөмийн хэмжээ лүгээ жишихүйц болж ирнэ. Нейтроноор олон төрлийн урвал үүссэн бол тэдгээрийн огтлолуудынх нь нийлбэр бүтэн огтлол болно:

$$\sigma_0 = \sigma_{\text{хс}} + \sigma_{\text{хб}} + \sigma_{\gamma} + \sigma_f + \sigma_p + \sigma_T + \sigma_{\alpha} = \sigma_{\text{хс}} + \sigma_{\text{хб}} + \sigma_{\text{хс}} + \sigma_{\text{ур}} \quad (14)$$

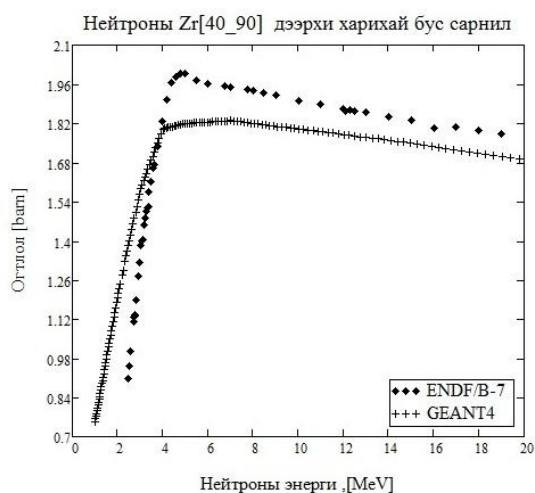
Гол урвал бол $\sigma_{\text{хс}}$ нь харимхай сарнилын огтлол, $\sigma_{\text{хб}}$ нь харимхай бус сарнилын огтлол, σ_f нь хуваагдлын огтлол, σ_p , σ_T , σ_{α} нь цацралт шингэлтийн огтлол, $\sigma_T(n, p)$ нь цацралт шингэлтийн огтлол, $\sigma_{\alpha}(n, \alpha)$ нь ацралт шингэлтийн огтлол.

IV. ТООЦООНЫ ҮР ДҮН

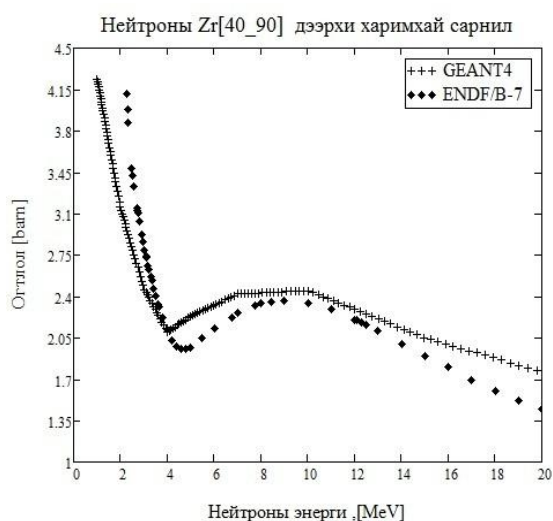
Geant4 багцыг хэрэглэн үйлдсэн анхны тооцооны зарим үр дүнг энд тавилаа. Geant4 багцын үйл ажиллагааны хүрээнд бодис цацраг, бөөмсийн харилцан үйлчлэлийн туршилтын сан, цахилгаан соронзон цацраг хийгээд хадрон, мезон, лептон зэрэг бөөмсийн бодистой харилцан

үйлчлэх хувирлын онорлын судалгааны олон дэд салбар бүхий цогц програм хангамжууд бий болжээ. Дэлхийн томоохон төвүүдэд онолын тооцоо болон туршилтын судалгааг зуун изотоп хийгээд олон төрлийн бодис дээр үйлдсэн байна. Бид үйлдсэн тооцооны үр дүнг туршилтын болон сан дахь шилмэл тооцооны үр дүнтэй харьцуулсан болно.

Судалгааны үр дүнд энэ удаа физик тайлал хийхийг урьдал болголгүй харин дүрслэлт тооцооны аргын хувьд шинжилгээний өнөөгийн төвшинд дөхөж хүрснээ толилуулахыг эрхэмлэв. Иймээс тооны үр дүнг дэлгэж үзүүлээ. Geant4 багцын тооцоолт төхөөргийг ашиглан үйлдсэн тооцооныхоо үр дүнг ENDF/B-7 буюу Америк, Канадын олон их сургууль, үндэсний лаборатор, үйлдвэрийн газрын хамтын чармайлтаар үйлдэж, бүрэлдүүлсэн “цөмийн тооцооны хуримтлал” сангаас баримтыг авсныг энд тэмдэглэе.



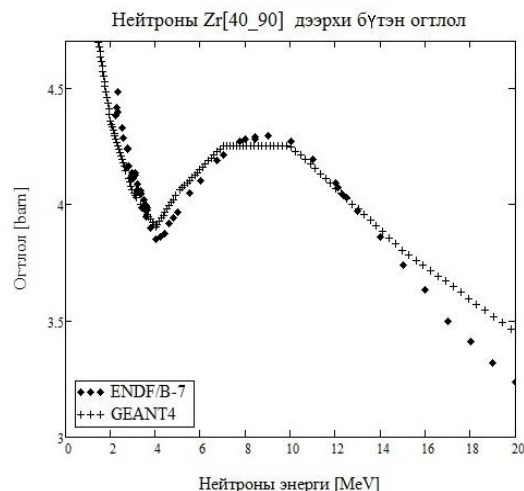
Зураг 2. Нейтроны циркон дээрх харимхай бус сарилын огтлол.



Зураг 3. Нейтроны циркон дээрх харимхай сарилын огтлол.

2-р зурагт тооцооны тоо үзүүлэлт ENDF/B-7 сангийн баримтаас бага зэрэг зөрж байгаа нь цаашид тооцооны нарийвчлалыг сайжруулах

шаардлагатайг анхааруулж буй. 3-р зураг нь тооцооны нарийвчлалыг бодолцвол Geant4 тооцоо ENDF/B-7 сангийн үр дүнтэй хангалттай таарч байгааг харуулж байна. Geant4 тооцоо ENDF/B-7 сангийн үр дүнтэй сайн таарч байгааг 4-р зурагт үзүүлэв.



Зураг 4. Циркон дээрх нейтроны сарилын бүтэн огтлол.

ИШЛЭЛ

1. S. Incerty, Physics-Biology Frontier: The GEANT4 Project, Texas AM, 10-14, Jan. 2011.
2. Geant4.9.5 Physics Reference Manual Book
3. О.Лхагва М.Батмөнх П.Батзул Нүүрсөрөгчин нанобүтцийн онолын судалгаа Нанотехнологи Үндэсний хоёрдугаар симпозиум. Илтгэлийн эмхтгэл. Улаанбаатар 2011 он. Х.39.
4. М.Батмөнх О.Белов О.Лхагва П.Батзул Хурдан ион эс ДНХ лүгээ нанотүвшинд үйлчлэлцэхүйн тооцоо дүрслэл Нанотехнологи Үндэсний хоёрдугаар симпозиум. Илтгэлийн эмхтгэл. Улаанбаатар 2011 он. Х. 41.
5. Аксенова С.В., Белов О.В., Лхагва О. Моделирование пространственного распределения объемной энергии и поглощенной дозы излучения в структуре ДНК при действии ускоренных тяжелых ионов, Препринт ОИЯИ Р19-2011-45. Дубна. 2011. 8 с.
6. Аксенова С.В., Белов О.В., Лхагва О. Моделирование пространственного распределения объемной энергии поглощенной дозы излучения в структуре ДНК при действии ускоренных тяжелых ионов, Письма в ЭЧАЯ. 2012. Т.9. No 1(171). С. 161-168.
7. Аксенова С.В., Белов О.В., Лхагва О. Моделирование Modeling the mechanism

of DNA damage induction by accelerated heavy ions, The 39th COSPAR Scientific Assembly will be held at the Global Education Centre, 2 Infosys Training Centre Mysore, Karnataka India from 14 - 22 July 2012.

8. A. Boothroyd, Concepts of Neutron Scattering, Lectures, VI Summer School on Condense Matter Research, Zuoz, August, 2007
9. О. Лхагва, Хумхи ертөнцийн квант жам. Бүлэг VIII. х. 181. Улаанбаатар, 2011.

Simulation of Neutron Scattering Cross Section using the Geant4 code

O. Lkhagva¹, M. Batmunkh², P. Batzul¹

¹*Department of Theoretical Physics, School of Physics and Electronics,
National University of Mongolia, University Street -1, Ulaanbaatar-210646, Mongolia*

²*Laboratory of Radiation Biology, Joint Institute for Nuclear Research,
Joliot-Curie 6, 141980 Dubna, Moscow region, Russia*

Last two years under the directions of International Geant4 program the complex computing tools, invented for investigation of interaction radiation and particles with material objects have been installed in PC and held scientific trainings in order to acquire an experience for carrying out research calculations. In this report some results of neutron- object interaction simulation, in dependence on incoming energy are presented. Our Geant4 simulation numbers are compared with numerical results from ENDF/B-7 nuclear data, created by US and Canada physicists.

Устөрөгчийн атомыг хүчтэй лазерын аттосекундын пульсээр өдөөх магадлалыг диполийн ойролцоололд бодох нь

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

¹ Монгол Улс, Улаанбаатар хот, Шинжлэх Ухаан Технологийн Их Сургууль, Материалын Технологийн Сургууль, Онолын физик загварчлалын баг

² Монгол Улс, Улаанбаатар-210646, Их сургуулийн гудамж-1, Монгол Улсын Их Сургууль, Физик Электроникийн Сургууль, Онолын физикийн тэнхим
*Э-шуудан: aldaraa2004@yahoo.com

Устөрөгчийн атомын S төлөвийг (n=1-6) аттосекундын лазерын хүчтэй пульсээр $6p^0$ өдөөгдөх магадлалыг диполийн ойролцоололд бодлоо. Диполийн ойролцоолол биелэхгүй мужид ч шилжилтийн магадлалын эцсийн утга нь нарийвчилсан бодолттой тохирч байна.

ТҮЛХҮҮР ҮГ: Аттосекундын пульс, диполийн ойролцоолол, уртын тохируулга, хурдны тохируулга

I.ОРШИЛ

Лазерийн техник хөгжиж хэдхэн аттосекундын хугацаанд үргэлжлэх пульсыг гарган авах болсноор атомын босгон дээрээс иончлох, атомын тогтворжих, дээд эрэмбийн гармоник үүсгэх зэрэг үзэгдлүүдийг нээж, ойлгож чадсан байна. Атомын электрон оролцсон процесс нь хугацааны аттосекунд мужид явагддаг тул атомд явагдах процессыг судлахад аттосекундын пульсыг ашиглаж байна. Лазерын богино хүчтэй пульсээр атомыг өдөөх, иончлох магадлалыг хөндөх онолын хүрээнд [1,2] болон Шредингерийн хугацаанаас хамаарсан тэгшитгэлийг бодох замаар судалж байна.

Луговской, Брэй нар $1s$ төлөвөөс np^0 төлөвт шилжих магадлалыг хөндөх онолын нэгдүгээр эрэмбээр тооцоолсон байна. Бид ns төлөвөөс $6p^0$ төлөвт шилжих шилжилтийн магадлалыг диполийн ойролцоололд уртын тохируулга (length gauge) болон хурдны тохируулгаар (velocity gauge) мөн хөндөх онолын нэгдүгээр эрэмбээр бодлоо. Энэ ажилд атомын нэгжийг ашигласан.

II. ОНОЛ

Бидний ажлын зорилго нь лазерын хүчтэй пульсын үйлчлэлээр устөрөгчийн атомыг өдөөх шилжилтийн амплитудыг хугацаанаас хамааруулан хөндөх онолын нэгдүгээр эрэмбийн дөхөлтөөр, диполийн ойролцоололд харилцан үйлчлэлийг уртын болон хурдны тохируулгаар илэрхийлж онолын хувьд тооцоолох явдал юм.

Огторгуйд тарж байгаа лазерын хүчтэй пульсийн нөлөөнд орших устөрөгчийн атомыг авч үзье. Координатын эхийг бай цөм дээр авч

x тэнхлэгийг пульсийн тарах чиглэлийн дагуу давхцуулая. Лазерын пульсын цахилгаан орны хүчлэгийг дараах хэлбэртэйгээр сонгоё.

$$E(t, x) = \begin{cases} \hat{z} E_0 \cos^2 \left(\frac{(t - \alpha \cdot x) \cdot \pi}{\tau} \right) \sin \omega \cdot (t - \alpha \cdot x) + \phi & \text{if } |t - \alpha \cdot x| \leq \frac{\tau}{2} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (1)$$

E_0 -цахилгаан орны амплитуд, ω , ϕ - тээгчийн давтамж ба фаз, Цахилгаан орны хүчлэг нь вектор потенциалтай $E(\eta) = -\frac{\partial A(\eta)}{\partial t}$ гэж холбогдоно.

Лазерын хүчтэй пульсын үйлчлэлээр атом эхний төлөвөөс эцсийн төлөвт шилжих шилжилтийн амплитуд [4]:

$$a_{fi} = - \int_{-\infty}^t V_{fi}(t) \cdot e^{i\omega_{fi}t} dt \quad (2)$$

Үүнд: $V_{fi}(t) = \langle f | \hat{V}(\eta) | i \rangle$ - өдөөлтийн матрицын элемент, $\hat{V}(\eta)$ -лазер -атомын харилцан үйлчлэл, $\omega_{fi} = \varepsilon_f - \varepsilon_i$ шилжилтийн давтамж, атомын эхний төлвийн хувьд n_i, l_i, m_i гэсэн квант тоонууд, эцсийн $|f\rangle$ төлөвт n_f, l_f, m_f гэсэн квант тоонууд тус тус харгалзана. Эхний төлөв $\varepsilon_i = -1/2n_i^2$, эцсийн төлөв $\varepsilon_f = -1/2n_f^2$ энергитэй байна. Устөрөгчийн долгион функц дараах хэлбэртэй байна[3].

$$|i\rangle = \Psi_{nlm} = Y_{lm}(\theta, \varphi) \cdot R_{nl}(r) \quad (3)$$

Лазер-атомын харилцан үйлчлэлийг дараах томъёогоор илэрхийлнэ [2].

$$\hat{V}(\eta) = -A(\eta) \cdot \hat{p} + \frac{A^2(\eta)}{2} \quad (4)$$

$A(\eta)$ – вектор потенциал, $\hat{p} = -i\nabla$ моментын оператор байна. Диполийн ойролцооллод пульсын урт атомын хэмжээнээс олон дахин их үед $l \ll d_i$, хугацааны нэг эгшинд атомын нэг захаас нөгөө зах хүртэлх пульсын орны өөрчлөлтийг тооцохгүй байж болох тул $\vec{A}(x, t) = \vec{A}(0, t)$ гэж үзэж болно. Өөрөөр хэлбэл пульсын орон зөвхөн хугацаанаас хамаарна. Энэ ойролцооллод харилцан үйлчлэлийн операторыг Уртын тохируулга (Length gauge)

$$\hat{V}(\eta) = \mathbf{r} \cdot \mathbf{E}(t) \quad (5)$$

Хурдны тохируулга (Velocity gauge)

$$\hat{V}(\eta) = \hat{p} \cdot \mathbf{A}(t) \quad (6)$$

хэлбэрээр авч болно [5].

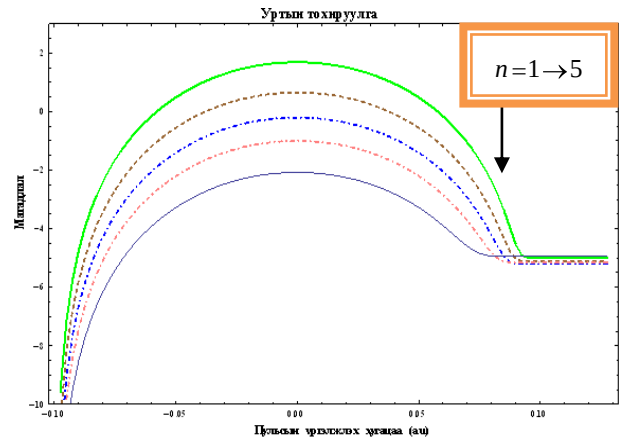
Ш.ҮР ДҮН БА ДҮГНЭЛТ

Устөрөгчийн атомын S төлөв ($n=1-6$) дээр 27 а.ц урттай, 0.2а.ц-ын мужид үргэлжлэх лазерын хүчтэй пульс тусахад атом $6p^0$ төлөвт шилжих диполийн шилжилтийн магадлалыг хөндөх онолын нэгдүгээр эрэмбээр бодлоо.

Лазер-атомын харилцан үйлчлэлийг диполийн ойролцооллод уртын болон хурдны тохируулгаар сонгон авч бодсон үр дүнг, нарийвчилсан (exact) бодолтын үр дүнтэй тулган харуулав.

А.Уртын тохируулга

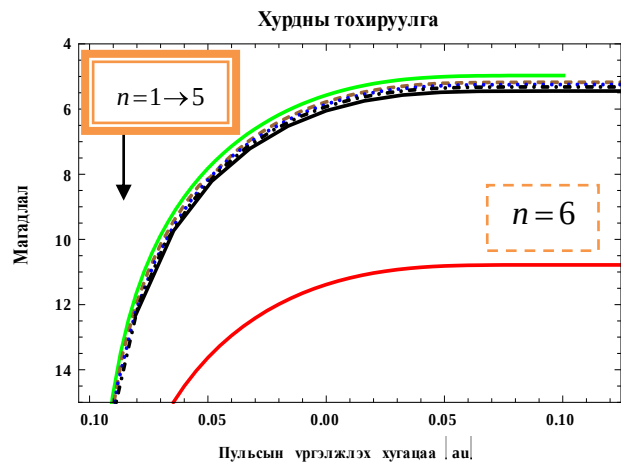
Атомын эхний төлөвийн энергис хамаарч шилжилтийн магадлал нь атомын төв, лазерын пульсын төв хоёрын давхцал хүртэл өсөж цааши хугацааны мужид багсаж шилжилтийн магадлалын эцсийн утганд хүрнэ. Шилжилт магадлалын өөрчлөгдөх муж нь лазерын пульсын үргэлжлэх хугацаагаар хязгаарлагдана. (Зураг №1).



Зураг №1. Шилжилтийн магадлал хугацаанаас хамаарах хамаарал.

Б.Хурдны тохируулга

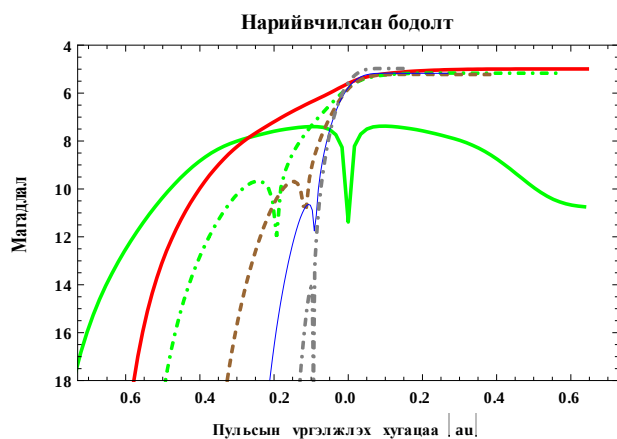
Шилжилтийн магадлал нь пульсын үргэлжлэх хугацааны туршид өссөөр шилжилтийн магадлалын эцсийн утганд хүрнэ. Магадлал нь эхний төлөвийн n-ээс бараг хамаарахгүй харин $n=6$ үед магадлал эрс багасна (Зураг №2).



Зураг №2. Шилжилтийн магадлал хугацаанаас хамаарах хамаарал.

В.Нарийвчилсан бодолт

Шилжилтийн магадлалын өөрчлөгдөх муж нь атом пульсын харилцан үйлчлэлийн хугацааны мужаар хязгаарлагдах тул эхний төлөвийн n –ээс хамаарч өргөснө. $n=6$ үеийн магадлал нь тоон утгаараа эрс багаас гадна хэлбэр нь ч өөр байна (Зураг №3).



Зураг № 3. Шилжилтийн магадлал хугацаанаас хамаарах хамаарал.

Бидний тооцоолсон $1s-6p^0$ төлөвийн шилжилтийн магадлал (Lugovskoy, Bray) нарын хийсэн ажилтай тохирч байна. Шилжилтийн магадлалын эцсийн утга нь хөндөх онолын нэгдүгээр эрэмбээр бодсон нарийвчилсан бодолт, диполийн ойролцооллод уртын болон хурдны тохируулгаар бодсон бодолтууд ойролцоо байлаа. Шилжилтийн магадлалын эцсийн үр дүнгийн дараах хүснэгтээр харуулав.

Хүснэгт №1

Шилжилт үүд	Нарийвчилсан бодолт	Диполийн ойролцоолол	
		Уртын тохируулга	Хурдны тохируулга
$1s-6p^0$	-4.97186	-4.9613	-4.97177
$2s-6p^0$	-5.17104	-5.18854	-5.17909
$3s-6p^0$	-4.9636	-4.96413	-4.97177
$4s-6p^0$	-4.99698	-5.11791	-4.98286
$5s-6p^0$	-4.99698	-4.9887	-4.98286
$6s-6p^0$	-10.7792	-29.0787	-10.7823

Диполийн ойролцоолол нь пульсын урт атомын хэмжээнээс олон дахин их $l \ll d_i$ атомын эхний төлөвийн $n < 3$ үед таарах ёстой боловч бидний хийсэн тооцооноос үзэхэд $n = 3$, $n > 3$ үед нарийвчилсан тооцоотойгоо тохирч байна. (Хүснэгт №1) Харин ижил n -тэй үед уртын тохируулгаар бодоход тохиромжгүй байна.

Талархал

Энэхүү эрдэм шинжилгээний ажлыг хийж гүйцэтгэхэд гүн туслалцаа үзүүлж зөвлөж, дэмжиж ажилласан Онолын физик загварчлалын багийн хамт олондоо талархсанаа илэрхийлэе.

НОМ ЗҮЙ

- [1] T.K. Kjeldsen and L.B.Madsen J.Phys B: At. Mol. Opt.Phys. **37** (2004) 2033-2044
- [2] A.V Lugovskoy and I Bray J.Phys B: At. Mol. Opt.Phys. **37** (2004) 3427-3434
- [3] Г.Бете и Э. Солпитер Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами 1960
- [4] Л.Д.Ландау и Е.М. Лифшиц Теоретическая физика том-III. 1974
- [5] Frank Grossman “ Theoretical Femto-second Physics ” 2008

Давхар вольфрамит $\text{NaFe}(\text{WO}_4)_2$, $\text{NaCr}(\text{WO}_4)_2$ кристалл дахь солилцлын үйлчлэл ба квант корреляц

Х.Цоохүү^{1*}, Л.Ням-Очир²

¹Монгол Улс, Улаанбаатар-210646, Монгол Улсын Их Сургууль, Физик Электроникийн Сургууль,
Онолын физикийн тэнхим

²Монгол Улс, Улаанбаатар-210646, Монгол Улсын Их Сургууль, Физик Электроникийн Сургууль,
Ерөнхий физикийн тэнхим

*Э-шуудан Tsookhuu@yahoo.com

Нам температурт орших давхар вольфрамит $\text{Na}(\text{Fe/Cr})(\text{WO}_4)_2$ кристаллд хол зайнаас антиферро соронзон үзэгдэл илэрдэг нь соронзон бүтцийн өнөөгийн онолуудаар тайлбарлагдахгүй байгаа юм. Бид энэхүү ажилд уг үзэгдлийг микроертөнцийн локаль бус чанар – квант корреляцийн үүднээс тайлбарлах таамаглал дэвшүүлсэн болно. Үүнтэй холбоотойгоор бодисын соронзны үзэгдлүүдийг квант корреляц, декогеренцийн үзэл баримтлалын үүднээс шинээр авч үзэх шаардлагатай гэж үзэж байна.

I. ОРШИЛ

Давхар вольфрамит $\text{Na}(\text{Fe/Cr})(\text{WO}_4)_2$ кристалл нь тасалгааны температурт парасоронзон шинж чанартай ба 10К-ээс доош температурт фазын хувирал явагдан антиферросоронзон шинж чанартай болж соронзон бүтэц үүсгэдэг байна [1,2]. Нейтроны дифракцын спектр дэхь соронзон бүтцэд харгалзах пикүүдийг индекслэхэд $\text{NaFe}(\text{WO}_4)_2$ кристаллд k вектор нь $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$, $\text{NaCr}(\text{WO}_4)_2$ бүтцэд $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ утгуудтай болохыг туршлагаар судалж тогтоосон [3,4]. Тус k вектор нь дифракцын спектр дэхь кристалл бүтцийн хавтгайнуудын Миллерийн индексийг ашиглан соронзон бүтцийн хавтгайг илэрхийлэхэд ашиглагддаг. Эдгээр үр дүнд үндэслэн соронзон атом хоорондын харилцан үйлчлэлийн геометрийг тогтооход $\text{NaFe}(\text{WO}_4)_2$, $\text{NaCr}(\text{WO}_4)_2$ кристаллуудад $\text{Fe}^{3+}\text{-Fe}^{3+}$ болон $\text{Cr}^{3+}\text{-Cr}^{3+}$ атомуудын хоорондын соронзон харилцан үйлчлэлийн дүнд тэдгээрийн спинүүд нь торын bc хавтгайд харилцан эсрэг чиглэхийн зэрэгцээ a тэнхлэгийн дагуу 10 Å зайд хосолсон зүй тогтол үүсгэж байгааг илрүүлсэн [3,4].

Нам температур дахь эдгээр нэгдлүүдийн $\text{Fe}^{3+}\text{-Fe}^{3+}$ болон $\text{Cr}^{3+}\text{-Cr}^{3+}$ атомуудын хоорондын соронзон харилцан үйлчлэлийн механизмийг онолын үүднээс авч үзвэл кристалл торын bc хавтгайн хувьд солилцлын харилцан үйлчлэлийн хэлбэр ашиглагдах ба харин торын a тэнхлэгийн хувьд соронзон харилцан үйлчлэл атомуудын хооронд тогтох бололцоогүй

байдалд орно.

Иймд давхар вольфрамит $\text{Na}(\text{Fe/Cr})(\text{WO}_4)_2$ кристаллын соронзон бүтцийг туршлагаар судалсан ажлын үр дүнгээс тооцсон атом хоорондын соронзон харилцан үйлчлэлийн онолын асуудлыг авч үзэх нь сонирхолтой юм.

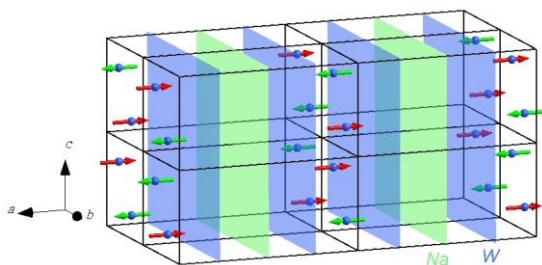
II. $\text{Na}(\text{Fe/Cr})(\text{WO}_4)_2$ КРИСТАЛЛ ДАХЬ $\text{Fe}^{3+}\text{-Fe}^{3+}$ БОЛОН $\text{Cr}^{3+}\text{-Cr}^{3+}$ АТОМУУДЫН ХООРОНДЫН СОРОНЗОН ҮЙЛЧЛЭЛ БА КВАНТ КОРРЕЛЯЦ

Нам температур дахь нейтроны дифракцын спектрээс соронзон бүтцийг $\text{NaFe}(\text{WO}_4)_2$ кристаллд k вектор нь $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$, $\text{NaCr}(\text{WO}_4)_2$ бүтцэд $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ утгуудтай гэж тогтоосон нь соронзон эгэл торын хэмжээсийг илэрхийлнэ. Тус кристаллуудын соронзон бүтцийг Зураг 1-д дүрслэв.

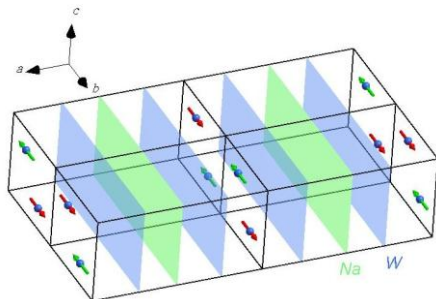
Соронзон бүтэц үүсгэж байгаа механизм нь торын bc хавтгайд хувьд Fe-Fe , Cr-Cr хооронд хүчилтөрөгчийн атомуудаар дамжсан супер солилцлын болон, супер-супер солилцлын харилцан үйлчлэл байх тухай өмнө нь тодорхойлогдсон [3]. Энэ нь вольфрамит төст бүтцүүдэд үүсэх соронзон бүтцийн судалгааны ажлуудын үр дүнтэй тохирч байгаа юм [5,6].

Харин торын a тэнхлэг дагуу соронзон атомуудын спиний хослол үүсч, соронзон эгэл торын хэмжээ уг чиглэлд кристалл торынхоос 2 дахин илүү байх үр дүн гарсан байгаа нь сонирхол татсан асуудал юм. $\text{Na}(\text{Fe/Cr})(\text{WO}_4)_2$ бүтцийн кристалл торын a

тэнхлэг нь $10 \text{ \AA}$ орчим урттай бөгөөд соронзон атомуудын хооронд диасоронзон давхаргууд байрласан байна.



Зураг 1а. $\text{NaFe(WO}_4)_2$ -ын соронзон эгэл тор. $k=(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ ба Fe^{3+} ионы соронзон моментууд нь a тэнхлэг дагуу чиглэнэ. Зурагт Fe^{3+} ионуудыг дүрсэлж бусад Na-O болон W-O холбоосуудыг хавтгайгаар тоймлон үзүүлэв.



Зураг 1б. $\text{NaCr(WO}_4)_2$ -ийн соронзон эгэл тор. $k=(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ ба Cr^{3+} ионы соронзон момент нь b тэнхлэг дагуу чиглэнэ. Зурагт Cr^{3+} ионуудыг дүрсэлж бусад Na-O болон W-O холбоосуудыг хавтгайгаар тоймлон үзүүлэв.

Ийм зайнаас, мөн хоорондоо соронзон нэвтрэх чадвар нь сөрөг утгатай байх диасоронзон давхаргаар дамжин Fe-Fe, Cr-Cr атомууд хоорондоо хэрхэн харилцан үйлчилж спиний эрэмбэ тогтсон талаар тайлбарлахад өнөөгийн соронзон харилцан үйлчлэлийн талаарх онолын загварууд хангалтгүй юм.

Алсын эрэмбийн солилцлын харилцан үйлчлэл нь зөвхөн $[\text{NaO}_6]$ -октаэдрээр соронзон үйлчлэл дамжсан тохиолдолд л боломжтой юм. Гэвч энэ нь диасоронзон шинж чанартай давхарга тул шууд солилцлын үйлчлэлийг дамжуулна гэж үзэх үндэслэл байхгүй.

Ийм учраас энэхүү ажилд уг үзэгдэлд тайлбар өгөх нэгэн таамаглалыг дэвшүүлж байна. Таамаглал квант корреляцийн үзэгдэлд тулгуурлаж байгаа юм. Квант корреляц, локаль бус чанарыг 1935 онд Эйнштейн, Подольски, Розен нар физикийн ертөнцөд “ЭПР парадокс” хэмээн алдаршсан өгүүлэлдээ анх хөндөж тавьсан байдаг [7]. Тухайн үед А.Эйнштейн, Н.Бор

хоёрын квант механикийг тойрсон халуухан маргаанаас хэн нэг нь ялагчаар тодроогүйгээс квант корреляцийн асуудал нэг үе намдуу төлөвт шилжиж орсон байсан юм. Харин 1962 онд Ирландын физикч Жон Белл классик корреляцтай холбоотой цуврал тэнцэтгэл бус бичиж квант корреляц байх эсэхийг туршлагаар шалгах боломжтойг үзүүлснээр асуудал дахин босч ирсэн түүхтэй [8].

Гэвч Беллийн санал болгосон туршлага нарийн ур дүй шаардсан, классик ба квант бодит байдлын торгон хил дээр үйлдэгдэх байсан тул Жон Беллээс хойш бараг хорин жилийн дараа тавигдсан байна. Энэ бол 1982 онд хийсэн Аспектийн туршлага бөгөөд микро ертөнцөд явагдах үзэгдлүүдийн хооронд классик корреляцаас гадна нэмэлт корреляц оршин байгааг илрүүлсэн юм [9]. Үүний дараагаар Зейлингер, Гринбергер нарын удирдсан хэд хэдэн группт уг үзэгдэл үнэхээр оршин байгааг давхар баталсан байна [10]. Ийнхүү туршлагаар шууд илрэхгүй, материаллаг ертөнцөөс далд, чанагуух ертөнцөд бидэнд хараахан таньж мэдэгдээгүй байгаа хүчний бус үйлчлэл байх боломжийг нотлон харуулжээ.

Квант корреляц, локаль бус чанарын дотоод механизм нь одоогоор тодорхойгүй байгаа ба математикийн талаас авч үзвэл системийн дэд хэсгүүдийн хооронд ороолдоон төлөв үүсдэгтэй холбоотой юм.

Авч үзэж буй давхар вольфрамитын антиферросоронзон үзэгдэл бол ЭПР туршлагын нэг хувилбар гэж үзэж байна. Юу гэвэл, ЭПР туршилтанд анхны синглет төлөв задарч спинээрээ харилцан эсрэг хос үүсгэн бие биенээсээ алслан холддог. Тэгвэл вольфрамит төст бүтцүүд анх яг л адилхан парасоронзон (синглет) төлөвт оршин байсан. Бидний таамаглалаар нам температурт фазын хувирал явагдаж парасоронзон төлвөөс антиферросоронзон төлөвт шилжин орох нь ЭПР туршилтанд гардаг спиний момент хадгалагдах хуулийн илрэл гэж үзэж болохоор байна. Түүнчлэн кристаллын a тэнхлэгийн дагуух зай $10 \text{ \AA}$ орчим байгаа нь ЭПР туршилтанд дэд хэсгүүдийн хоорондох зай хангалттай хол байх шаардлагатай нийцэж байгаа юм.

Торын хавтгайнуудын хооронд үүсэх спины корреляцийг тайлбарлах солилцол, супер солилцол, супер-супер солилцлын онолууд байсаар байтал заавал квант

корреляц, локаль бус шинж дээр тулгуурласан шинэ таамаглал дэвшүүлэх шаардлага юу вэ гэдэг асуулт тавьж болох юм. Хариулт нь квант корреляц бол орчлон ертөнцийн хаа сайгүй илрэх түгээмэл үзэгдэл гэж үзэж байгаад оршино. Хэрэв ийм бол дээр дурьдсан солилцол, супер солилцол, супер-супер солилцлын үед ч квант корреляцийн хандив байгаа бөгөөд онцлог нь нөгөөдүүл нь давамгайлж, харьцангуй сул квант корреляц “фон”-д сууж байгаад оршино. Харин хол зайд солилцлын бүх төрлийн механизм “унтарч” зөвхөн квант корреляц үлдэх учраас анх синглет (парасоронзон) байсан давхар вольфрамтийн төлөв ЭПР механизмаар антиферро болох ёстой. Энэ санал хол зайд үүссэн антиферро соронзон үзэгдэлд зарчмын тайлбар өгч байгаа бөгөөд онолын тооцоог дараагийн ажилд авч үзнэ.

Бидний таамаглалаар зохиомол туршилт (Gedanken experiment) ЭПР-ийг практикт бодитой хэрэгжүүлэх нэг хувилбар нь бодисын соронзон хувирал явуулах арга гэж үзэж байна. Ийм учраас бодисын соронзон шилжилт, спинтроникийн үзэгдэл, эффектгүйг цахилгаан харилцан үйлчлэлийн гаралтай солилцлын механизмын үүднээс авч үзэх төдийгүй хүчний бус үйлчлэл – квант корреляц, ороолдоон төлвийн үзэл баримтлалаас шинээр авч үзэх шаардлагатай гэж үзэж байна.

III. ДҮГНЭЛТ, ҮР ДҮН

Давхар вольфрамит $\text{NaFe}(\text{WO}_4)_2$ кристаллын нам температурт үүсэх соронзон бүтцийн судалгаанаас тодорхойлсон Fe – Fe болон Cr – Cr атомуудын хоорондын соронзон харилцан үйлчлэлийн хэд хэдэн хэлбэр дунд солилцлын, супер солилцлын, супер-супер солилцлын үүднээс тайлбарлах боломжгүй алсын зайн харилцан үйлчлэл илэрсэн. Тус өвөрмөц хэлбэр нь ЭПР парадоксын практикт илэрсэн нэг хэлбэр байж болох тухай таамаглалыг тус ажилд дэвшүүлсэн бөгөөд квант корреляц, локаль бус чанар тус таамаглалын үндэс болж байгаа юм. ЭПР парадоксыг практикт хэрэгжүүлэх нэг боломж нь соронзон фазын шилжилтийн судалгаа байж болох юм гэж энэхүү ажлаас дүгнэж байна.

АШИГЛАСАН НОМ, ХЭВЛЭЛ

1. J.Hanuza, M.Maczka, K.Hermanowicz, P.J.Deren, W.Strek, L.Folcik, and H.Drulis (1999). “Spectroscopic Properties and Magnetic Phase Transitions in Scheelite $\text{M}(\text{Cr}(\text{MoO}_4)_2$ and Wolframite $\text{M}(\text{Cr}(\text{WO}_4)_2$ Crystals, where $\text{M} = \text{Li}, \text{Na}, \text{K}, \text{and Cs}$. J.” Sol. St. Chem. 148, 468-478.
2. K.G.Dergachev, M.I.Kobets and E.N.Katsko (2006). “Local Modes in Low Dimensional Magnetic $\text{NaFe}(\text{WO}_4)_2$.” Ukr. J. Phys. 2006. V. 51, N 3
3. L.Nyam-Ochir, H.Ehrenberg, A.Buchsteiner, A.Senyshyn, H.Fuess, D.Sangaa. “The magnetic structures of double tungstates, $\text{NaM}(\text{WO}_4)_2$, $\text{M} = \text{Fe}, \text{Cr}$: Examples for superexchange couplings mediated by $[\text{NaO}_6]$ -octahedra.” Journal of Magnetism and Magnetic Materials (2008). Volume: 320, Issue: 23, Pages: 3251-3255
4. Л.Ням-Очир. “Давхар вольфрамитын кристалл болон соронзон бүтцийн судалгаа.” Докторын диссертаци. 2011. Улаанбаатар хот
5. H.Ehrenberg, H.Weitzel, C.Heid, H.Fuess, G.Wltschek, T.Kroener, J.Van Tol and M.Bonnet (1997). “Magnetic phase diagrams of MnWO_4 .” J. Phys. Condens. Matter 9 3189-3203
6. H. Ehrenberg, K. G. Bramnik, E. Muessig, T. Buhrmester, H. Weitzel and C. Ritter (2003). “The ferrimagnetic structure of $\text{Fe}_2(\text{MoO}_4)_3$: dependence of Fe-O-O-Fe Supersuperexchange coupling on geometry.” J. Magn. Magn. Mater. 261, 353-359.
7. A.Einstein, N.Rosen and B.Podolsky. “Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete?” Phys. Rev. 47, 777 (1935)
8. Bell, J. S. "On the Einstein-Podolsky-Rosen Paradox." Physics 1, 195-200, 1964.
9. A. Aspect, P.Grangier and G.Roger, Experimental realization of Einstein-Podolsky-Rosen-Bohm Gedankenexperiment: A new violation of Bell's inequalities, Phys. Rev. Lett 49, 91-94 (1982)
10. A.Zeilinger, Decoherence of matter waves by thermal emission of radiation , Nature 427, 711 (2004)

Quantum Correlation and Exchange Interaction in Double Tungstate $\text{NaFe}(\text{WO}_4)_2$ and $\text{NaCr}(\text{WO}_4)_2$

Kh.Tsookhuu¹ and L.Nyam-Ochir²

¹*Department of Theoretical Physics, School of Physics and Electronics,
National University of Mongolia, University Street-1, Ulaanbaatar-210646, Mongolia*

²*Department of General Physics, School of Physics and Electronics,
National University of Mongolia, University Street-1, Ulaanbaatar-210646, Mongolia*

Long-range magnetic superexchange interactions between magnetic ions in double tungstate $\text{Na}(\text{Fe/Cr})(\text{WO}_4)_2$ at low temperature are necessary to explain by theory. At present it is not clear, which mechanism is responsible for these antiferromagnetic interactions between magnetic ions with a distance of about $10\text{\AA}$ from each other. In this work, we proposed explanation using non-locality and quantum correlation for the long-range magnetic interaction.

First-principles Study of Magnetism and Electronic Structure of Li_xFePO_4

D. Odkhuu^{1*}, T. Tsevelmaa¹, N. Tsogbadrakh^{2**} and S. C. Hong¹

¹ Department of Physics and Energy Harvest-Storage Research Center, University of Ulsan, Ulsan 680-749, Republic of Korea

² Department of Theoretical Physics, School of Physics and Electronics,
National University of Mongolia, University Street-1, Ulaanbaatar-210646, Mongolia

*E- mail: odkhuu_d@yahoo.com

**E- mail: tsogbadrakh@num.edu.mn

LiFePO_4 have attracted a great interest as a cathode material for Li rechargeable batteries. In this study we evaluated the magnetism emphasizing on magnetization axes and electronic structures of the olivine phases of Li_xFePO_4 ($0 \leq x \leq 1$) by means of density-functional theory. We show that the insertion/extraction of lithium affects slightly the magnetic moment of Fe, but the spin orientations in antiferromagnetic ground state are found to be noteworthy. The easy magnetization axis of FePO_4 is along [010], whereas it is on [001] for LiFePO_4 , in consistent with an experiment. The use of exchange-correlation U parameter in the electronic structure calculations describes well the observed insulating characters of FePO_4 and LiFePO_4 .

Keywords: Li_xFePO_4 , First-principles, Magnetism, Magnetocrystalline anisotropy, Band structure, Density of states

PACS number(s): 82.47.Aa, 75.10.Dg, 75.30.Gw, 75.50.Ee

I. INTRODUCTION

The rechargeable Li-ion battery is one of the most attractive and useful technology among rechargeable batteries due to the highest energy density preserving low weight and small volume. An electric vehicle, hybrid electric vehicle, and stationary energy storage are certainly modern and future applications of the rechargeable Li-ion battery beyond its current commerce in portable electronic devices.

In recent years, lithium phosphate compounds (LiMPO_4 , M is a transition metal) have been extensively and intensively studied as promising cathode materials for Li-ion rechargeable batteries [1-7]. Among them, in particularly, the iron-based LiFePO_4 is mostly attracted because the iron is low cost natural abundance, environmentally friendliness, i.e. less toxic and safe in operation than other transition metals such as Co, Ni, and Mn. Even though its appreciable properties of a high theoretical capacity (170 mAh/g) [2], a high intercalation voltage (3.5 V) [3], long cycle life (up to 2000), good structural stability during charging/discharging, LiFePO_4 exhibits a low electronic and ionic conductivity in order of 10^{-8} - 10^{-9} Scm^{-1} [8,9,10]. This low conductivity problem has been devoted by some attempts such as a carbon coating [11,12], cation doping [13,14], and controlling particle size [6,15]. However, each of them to improve electronic conductivity or electrochemical performance has not been perfected as is expected. This has led to future extensive challenges to clarify one's inherent

features. Indeed the intrinsic magnetic properties including magnetization easy axis should be supplied in order to understand its basic physical phenomena because the electronic state is, in principle, reflected by a magnetic property, which govern the charge storage and electronic conductivity, as well as electrochemical reaction mechanism. In other words, the magnetism in such materials used in a battery technology might play a role at least in terms of microscopic origin of electronic structure.

LiMPO_4 has an antiferromagnetic (AFM) ground state. There have recently been interesting experimental studies on magnetization orientations [16-22]. The magnetic structures of LiMPO_4 (M=Mn, Ni, Co, and Fe) compounds crystallized in same olivine structure are determined to be collinear AFM state but with different spin directions. For example, in LiCoPO_4 the magnetic moments are oriented along the [010] direction [18] while they point along the [001] in LiNiPO_4 [21,22]. More interestingly, different magnetization direction on Fe atoms have been observed to be collinear AFM spin along the [010] for LiFePO_4 whereas it is turned almost along the [001] in FePO_4 by a neutron diffraction by G. Rousse *et al.* [17]. Further the AFM transitions of FePO_4 and LiFePO_4 occur at the Neel temperatures of 125 K and 50 K, respectively. Surprisingly, very few theoretical works have been considered the applicability of magnetic properties in magnetic Li-ion transition materials [23,24,25]. Very recently, Yamauchi and Picozzi performed the first-principles calculation to demonstrate the magnetic

anisotropy and magnetoelectricity of LiCoPO_4 and LiNiPO_4 [25].

In this study, we examine the influence of lithium extraction/insertion, expressed as Li_xFePO_4 ($x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$), where x is the concentration of Li ions that are extracted/inserted from/to the unit cell, on the magnetism and electronic structure from a first-principles density-functional theory. A fact that is verified that the magnetization direction can be switched with Li atoms in consistent with observations [17], where the e_g state near the Fermi level is responsible in terms of the density of states (DOS). We finally suggest that the excitation of magnetic properties, i.e. reorientation of magnetization, with respect to Li concentration may be an important associating their electronic structures for the mechanism of the Li-ion batteries.

II. COMPUTATIONAL METHOD

The density-functional theory calculations using the pseudo-potential projector-augmented wave (PAW) method were performed as implemented with the Vienna *ab initio* simulation package (VASP) code [26,27]. The exchange-correlation energy of electrons is described as the generalized gradient approximation (GGA) of Perdew, Burke, and Ernzerh (PBE) [28]. To describe Coulomb interaction among Fe-3d electrons, we have also taken into account a Hubbard model in the GGA (GGA+U) [29], which is known to be appropriate treatment for the insulating or semiconducting characters in strongly correlated materials of oxide alloys with 3d metals [29,30,31]. We have performed the test calculations with different choices of the effective U parameter (U_{eff}) values, in range of 3.5-4.5 eV. Among them, the 4.3 eV is used as U_{eff} value for the calculations of Li_xFePO_4 , which gives an appropriate solution of the band gap observed in experiments. The valence electrons are described as $2s^1$ for Li, $3d^7 4s^1$ for Fe, $3s^2 3p^3$ for P, $2s^2 2p^4$ for O atom in pseudo-potentials calculations. A cutoff energy of 500 eV was chosen for the plane wave expansion of the wave functions. The Monkhorst-Pack scheme [32] with $4 \times 6 \times 8$ k -point mesh in the Gaussian method [33] which in present systems gives quite reasonable results for total energy and magnetic configurations was used for the Brillouin zone integration, that consistent with experiments. To optimize the systems, full relaxation for both the atomic positions and lattice parameters for each

x was taken into account. At low temperature, both FePO_4 and LiFePO_4 have an orthorhombic olivine with a space group of Pnma [1,10,34], which is shown in Fig. 1. The unit cell contains four formula units with 24 atoms (four Fe and four P, and sixteen O atoms) for $x=0$ and 28 atoms for $x=1$.

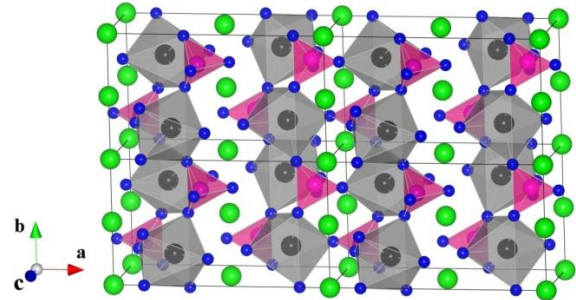


Figure 1. The $2 \times 2 \times 1$ olivine structure of LiFePO_4 . Big green and small blue balls are Li and O atoms, respectively. Fe atoms have octahedral environment with O atoms, while P do the tetrahedral

Phosphor has a tetrahedral site at the center of a 4-Oxygen cluster (PO_4) and iron occupies an octahedral site at the center of a cluster of six oxygen atoms (FeO_6) within the crystal. The coexistence of two phases of FePO_4 and LiFePO_4 , biphasic alloy as formulated $x\text{LiFePO}_4 + (1-x)\text{FePO}_4$, is observed during charging and discharging ($0 < x < 1$) at room temperature. However, the mixed valence solid solution was recently observed at high temperature above 200 °C, at the same time the structural stability is well kept through the migration of Li^+ ions and corresponding electrons between FePO_4 and LiFePO_4 [35,36]. Thus we used a single crystal structure with same unit cell of $\text{FePO}_4/\text{LiFePO}_4$ for $x=0.25, 0.5$, and 0.75 .

III. RESULTS AND DISCUSSION

In order to optimize the systems, we did systematically a series of calculations as follows: First, the four (three) different atomic structures with Li ion and Li vacancy for $x=0.25$ and 0.75 ($x=0.5$) have been calculated. Namely, Cor-, Cen-, (100)-, (010)-type structure if a Li ion places respectively at the corner site (0.0, 0.0, 0.0), at the center site (0.5, 0.5, 0.5), on the (100) plane (0.0, 0.5, 0.0), on the (010) plane (0.5, 0.0, 0.5) in $x=0.25$, whereas a Li vacancy in the case of $x=0.75$. For $x=0.5$, the same notation of $x=0.25$ is used with the fixed one Li ion at the corner. For clarifying, atomic structures of Li_xFePO_4 for (a) $x=0$, (b) $x=0.25$, (c) $x=0.5$, (d) $x=0.75$, and (e) $x=1$ are

shown in Fig. 2, where the (010)-type atomic configurations are depicted exception of the Cen-type structure of $\text{Li}_{0.75}\text{FePO}_4$. *Second*, according to possibility of the magnetic configurations in a magnetic system, for each of above atomic structure including FePO_4 and LiFePO_4 we have performed the calculations with both ferromagnetic (FM) and three AFM configurations of Fe atoms: (i) $\text{Fe1}(\uparrow)\text{Fe2}(\uparrow)\text{Fe3}(\downarrow)\text{Fe4}(\downarrow)$ (denoted as AFM-1), (ii) $\text{Fe1}(\uparrow)\text{Fe2}(\downarrow)\text{Fe3}(\uparrow)\text{Fe4}(\downarrow)$ (AFM-2), and (iii) $\text{Fe1}(\uparrow)\text{Fe2}(\downarrow)\text{Fe3}(\downarrow)\text{Fe4}(\uparrow)$ (AFM-3). The total energies for $x=0, 0.25, 0.5, 0.75$, and 1 of Li_xFePO_4 with all the possible atomic and magnetic structures are summarized in Table 1. For each value of x , the lowest energy is chosen as zero. The total energy differences, $E_{\text{tot}}(\text{AFM})-E_{\text{tot}}(\text{FM})$, between FM and AFM are also shown in Table 1 and the calculated results for all x are negative. This clearly shows that Li_xFePO_4 is low temperature AFM. The decrease of ΔE with x indicates that experimentally the Neel temperatures of 125 and 50 K are well confirmed by our theoretical trends. Calculations show that the stability of magnetic structures is rather sensitive,

but not strongly on the atomic configurations for $x=0.25$ and 0.75 . In contrast, it is a quite fluctuating from both configurations in $\text{Li}_{0.5}\text{FePO}_4$. The AFM-1 phase is energetically the most favorable compared to other AFM configurations as well as FM regardless of Li concentration, in consistent with the experimental [16,17] and other theoretical works [23,24]. As before-mentioned, there are four environmentally different Li sites in the unit cell: one, two, and three Li atoms are for $x=0.25, 0.5$, and 0.75 , respectively. When $x=0.25$ a Li atom may occupy one of the four sites, and as seen in Table I, the (010)-type structure of AFM-1 is more stable than the Cor-, Cen-, and (100)-type structure by 0.16, 0.25, and 0.03 meV/f.u., respectively. The most stable atomic structures from total energy calculation are shown as projected on 2D *ab*-plane in Fig. 2. Further insertion of Li atoms to the unit cell leads that first all possible Li atoms settle on the (010) face before the other sites are filled in the all x structures, implying that the diffusion of Li ions along the [010] calculated in previous theoretical studies [37,38].

Table 1. Total energies of different atomic and magnetic structures of Li_xFePO_4 for Li concentrations. Energy differences, $\Delta E=E_{\text{tot}}(\text{AFM})-E_{\text{tot}}(\text{FM})$, between FM and AFM for most stable configuration are also given. The unit of energy is in meV/f.u.

Li_xFePO_4	AFM-1				AFM-2				AFM-3				ΔE
	Cor	Cen	(100)	(010)	Cor	Cen	(100)	(010)	Cor	Cen	(100)	(010)	
$x=0$				0				85.67				49.01	-121.55
$x=0.25$	0.16	0.25	0.03	0	50.77	50.76	50.73	50.69	2.21	2.75	2.21	2.75	-76.18
$x=0.5$	-	7.17	89.94	0	-	58.04	119.57	47.70	-	14.65	96.02	3.81	-61.46
$x=0.75$	1.16	0	0.005	0.037	34.89	34.89	34.89	34.96	7.94	7.87	7.90	7.87	-44.39
$x=1$				0				17.24				6.20	-25.45

According to previous first-principles calculations of FePO_4 and LiFePO_4 [10], the DFT+U method usually gives qualitatively comparable results on particularly electronic structures with an experiment than GGA (LDA). Therefore, we also estimate the effect of U parameter on the GGA. With the most stable atomic and magnetic configurations, we present the optimized lattice parameters with cell volume within the GGA and GGA+U in Fig. 3. The experimental lattice parameters obtained from neutron diffraction measurement at 300 K are $a=9.7599$ Å, $b=5.7519$ Å, $c=4.7560$ Å for FePO_4 and $a=10.3377$ Å, $b=6.0112$ Å, $c=4.6950$ Å for LiFePO_4 [17]. The lattice parameters (9.9113, 5.9189, 4.8725 Å) obtained from the GGA are slightly larger as compared to those (9.8642,

5.8836, 4.8531 Å) of GGA+U method for FePO_4 , whereas it is smaller in case of LiFePO_4 (10.3944, 6.0475, 4.7315 Å for GGA and 10.4317, 6.0723, 4.7419 Å for GGA+U). At $x=0.5$, the lattice parameters for both exchange-correlation methods are almost identical. The agreement between the calculated results using the GGA and experimental ones for LiFePO_4 is greater as compared with the GGA+U, whereas the use of GGA+U leads better description for FePO_4 . Overall the calculated values of a , b , and c agree reasonably with the experimental (less than 1.5 % of deviations) and previous theoretical results. Thus we conclude that both the GGA and GGA+U allow for a good description to structural features. As seen in figure, two longer edges of a and b are extended with increasing x , whereas the shortest edge (c) is

compressed. As a result, the cell volume is found to increase by 2.5 % from FePO_4 to LiFePO_4 . This small volumetric expansion and structural stability

during Li ion insertion and extraction are suggested to be responsibility to a high cycle, as mentioned somewhere.

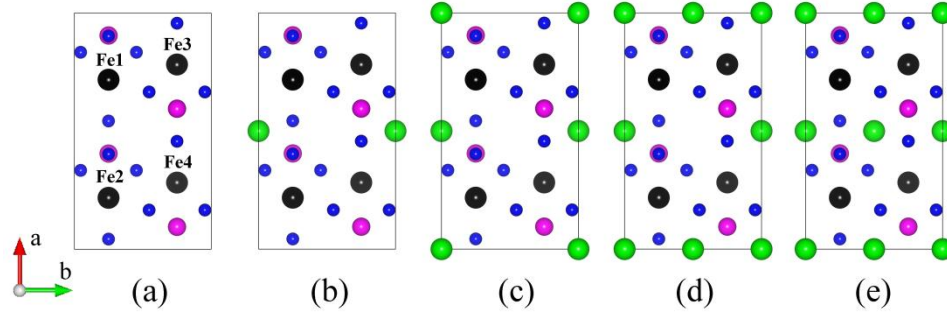


Figure 2. Top view of the optimized atomic structures of Li_xFePO_4 for (a) $x=0$, (b) $x=0.25$, (c) $x=0.5$, (d) $x=0.75$, (e) $x=1$. The optimized atomic positions of Fe sites are as follows, as an example of $x=0$: Fe1 (0.2745, 0.25, 0.9517), Fe2 (0.7747, 0.25, 0.5443), Fe3 (0.2253, 0.75, 0.4520), and Fe4 (0.7255, 0.75, 0.0446).

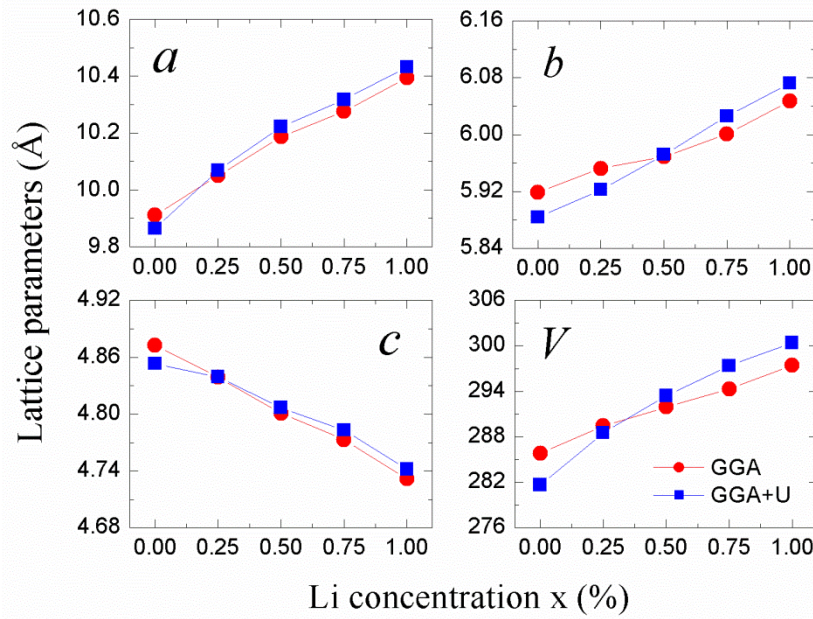


Figure 3. The optimized lattice parameters of a , b , and c (in Å), and cell volume V (in Å³) of Li_xFePO_4 as functions of Li concentrations. Circle (square) symbols denote the calculated results from GGA (GGA+U) method.

To confirm the experimentally different crystallographic antiferromagnetism of FePO_4 against LiFePO_4 [16,17], we calculated the E_{MCA} between three different axes with collinear configurations since the total energy along a , b , and c axes are distinctive in an orthorhombic structure. Table 2 shows the calculated local magnetic moment of Fe atom and E_{MCA} between the [100] and [001], and [010] of Li_xFePO_4 within two different exchange-correlation approaches. Both the GGA and GGA+U result the Neel-type AFM configurations, i.e. zero net magnetization in the unit cell, but a Hubbard correction leads to

more localized moments on Fe, increasing about 0.2-0.3 μ_B for each of x values. However, general trend of decreasing magnetic moment with increase of Li concentration is supplied by both methods, in consistent with observed moments of 4.96 μ_B for FePO_4 and 4.19 μ_B for LiFePO_4 [16,17]. The calculated spin magnetic moments are 3.96 (4.29) and 3.56 (3.77) μ_B for $x=0$ and 1 using the GGA (GGA+U), respectively. Typically the net moments are slightly underestimated in the computation, which is commonly observed in olivine structures due to the spin transfer of oxygen ions [23]. The calculated and measured magnetic moments are

also consistent with the crystal field theory for high spin states of the Fe^{2+} ($3d^6$) of LiFePO_4 and the Fe^{3+} ion ($3d^5$) of FePO_4 . The crystal field energy is lower than the pairing energy and the ground states of six orbitals of Fe^{2+} are split to three spin up paired with one spin down electron at low energy t_{2g} orbital and the higher energy e_g orbital is filled by the rest of two electrons with spin up state, ($t_{2g}^{3\uparrow} e_g^{1\uparrow}, t_{2g}^{1\downarrow}$). For the Fe^{3+} ion, each of five t_{2g} and e_g orbitals is occupied with the unpaired spin up electron, ($t_{2g}^{3\uparrow} e_g^{1\uparrow}, t_{2g}^{0\downarrow}$). Therefore, according to Hund's rule, the net moments by the unpaired

electron spin counts of Fe^{3+} and Fe^{2+} are 5 and 4 μ_B in high spin state.

The calculated E_{MCA} 's are found to be very anisotropic. The negative values of the calculated $E_{\text{MCA}}(E_{100}-E_{010})$ and $(E_{100}-E_{001})$ of FePO_4 indicate that the easy magnetization axes is along the [100]. Even though the magnetization direction of [100] is favored from [001] by energy difference of -0.86 meV/f.u. for LiFePO_4 , the larger energy difference in positive sign between the [100] and [010] express that the [010] is the easy magnetization axis, in contrast to that in FePO_4 .

Table 2. The magnetic moments (μ_B) of Fe sites and E_{MCA} (in meV/f.u.) between different crystallographic directions along the [100] and [100], [100] and [010]. The calculated results from the GGA and GGA+U are also given.

Li_xFePO_4	Fe1/Fe2		Fe3/Fe4		$E_{\text{MCA}}(E_{100}-E_{001})$		$E_{\text{MCA}}(E_{100}-E_{010})$	
	GGA	GGA+U	GGA	GGA+U	GGA	GGA+U	GGA	GGA+U
x=0	3.96	4.30	-3.96	-4.30	-0.06	-0.21	-0.18	-0.09
x=0.25	3.88	4.18	-3.88	-4.18	-0.45	-0.17	0.13	0.05
x=0.5	3.81	4.08	-3.81	4.08	-0.76	-0.15	0.46	0.94
x=0.75	3.70	3.92	-3.70	-3.92	-0.28	-0.09	0.99	0.36
x=1	3.56	3.77	-3.56	-3.77	-0.86	-0.02	1.14	0.25

Thus a rather good agreement between theory and experiment is obtained in our study. As x increases, the effect of Li ion (We have done a test calculation to clarify whether the insertion of Li ion affects to magnetization axes or it is a sensitive on a volume expansion. The calculated E_{MCA} s of FePO_4 used the lattice parameters of LiFePO_4 are -0.05 and -0.11 meV/f.u. for $E_{100}-E_{010}$ and $E_{100}-E_{001}$, respectively. The effect of volume expansion on magnetization axes is negligible.) turns out the spin direction on Fe site from [100] to [010]. There is no remarkable difference between the GGA and GGA+U on the magnetization axes, but quantitative divergences are observed, generally U decrease the E_{MCA} . This deficiency will clearly be observed in electronic structures calculation.

Our calculated band gaps are comparable to other theories, 0.1-0.5 eV for FePO_4 and 0-0.53 eV for LiFePO_4 [10,23,24,39]. Nevertheless, the experimentally energy band gaps of 1.7 and 3.7-4.0 eV are observed for FePO_4 and LiFePO_4 , respectively [5,6,10,40]. This deficiency of electronic structures was corrected by Zhou *et al.* using the GGA+U correction [10]. In this instruction, the band structures in the calculations of GGA+U have been also plotted for FePO_4 and LiFePO_4 in Fig. 5.

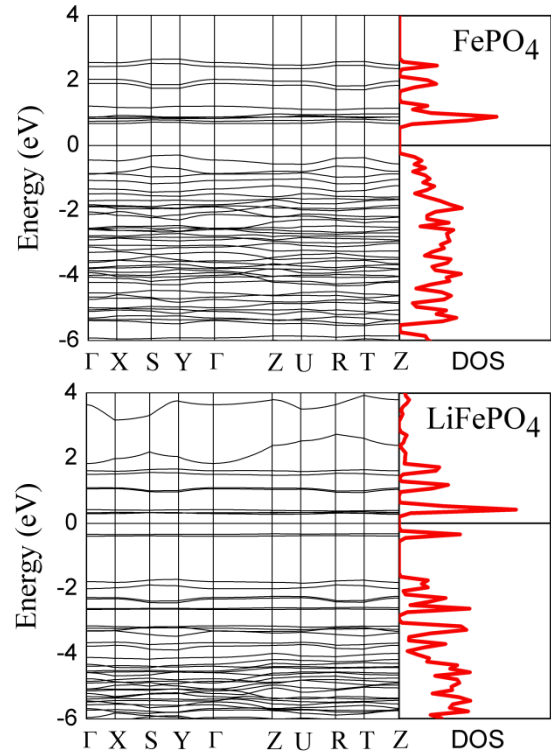


Figure 4. The electronic band structures and the density of states of FePO_4 (upper panel) and LiFePO_4 (lower panel) from the GGA calculation. The Fermi level is set to zero energy.

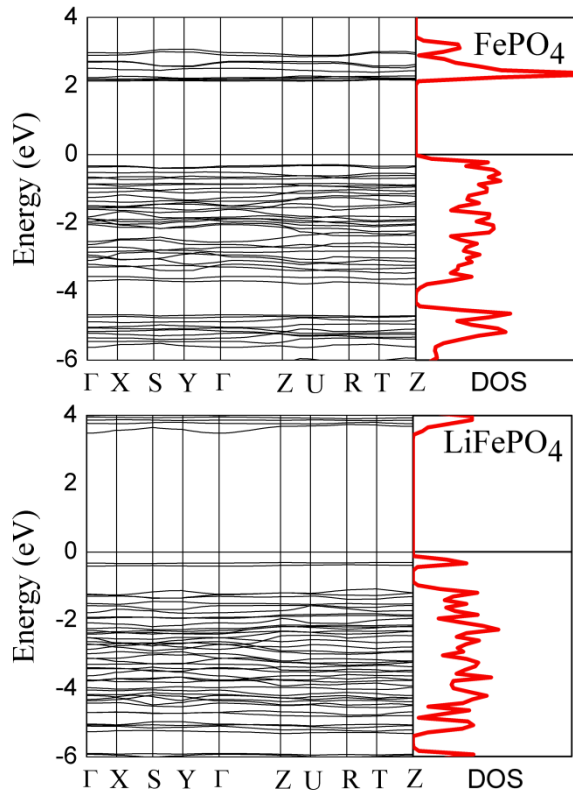


Figure 5. The band structures and the density of states of FePO_4 (upper panel) and LiFePO_4 (lower panel) from the GGA+U calculation. The energy level is set to zero energy.

Comparing with pure GGA, the electronic characteristic is very different and the conduction bands shift upward far from the Fermi level by about 1.4 eV for FePO_4 , which results opening broad band gap of 2.05 eV. Correspondingly for LiFePO_4 , a very tiny band gap of 0.42 eV in pure GGA, the use of GGA+U leads to significant enlargement to a more realistic value of 3.7 eV with U correction, in consistent with experiments. This is also in good agreement with electronic structure calculations used U as mentioned before. In conclusion to electronic structures, this study has shown that both GGA and GGA+U approaches are valid to describe the valence electronic structure, but the utilization of GGA is unable for the conduction bands, in resulting inappropriate solution for the band gap.

In order to elucidate the magnetic properties, we present the DOS of Fe atom for Li_xFePO_4 with $x=0, 0.25, 0.5, 0.75$, and 1 (from upper to lower panel) in Fig. 6. The left (right) panel in the figure shows the calculated DOS of Li_xFePO_4 from the GGA (GGA+U) method. The DOSs split to the spin-up and spin-down state, and the dotted (solid) lines represent t_{2g} (e_g) states.

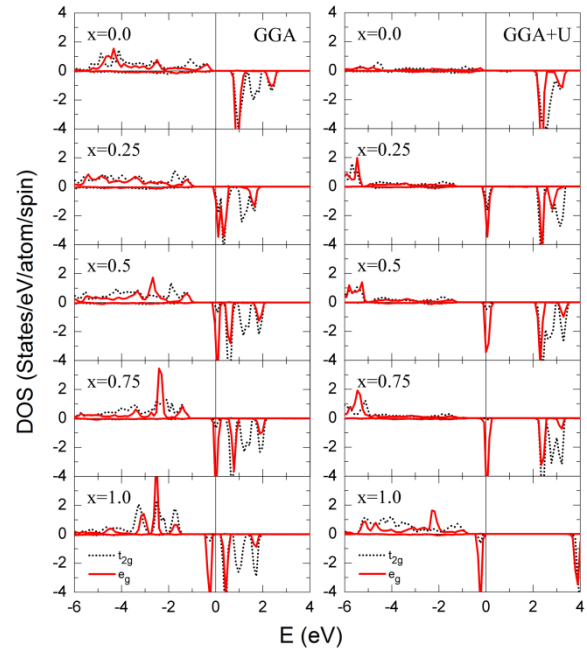


Figure 6. The local density of states of Fe atom in Li_xFePO_4 for $x=0, 0.25, 0.5, 0.75$, and 1. Left and right panel correspond to the GGA and GGA+U, respectively. The Fermi energy is set to zero energy.

With increase of x , the Fermi level shifts to the unoccupied state since the increase of the number of electrons in the unit cell. Eventually the Fermi level lies just above the new occupied valence band and below the bottom of the conduction band, creating a semiconductor band gap. The features of Fe DOS between the GGA and GGA+U are resemblance to the total DOS (Fig. 4 and 5); a localization of the valence electrons is rather than to the delocalized conduction electrons (upward shift) due to U effect. The DOS in the unoccupied band is wholly contributed by Fe 3d electrons for $x=0$ and 1, and also the occupied band near the Fermi level for $x=1$. The band gaps in Li_xFePO_4 are purely determined by Fe, indicating that for Fe site doping or substitution may alter an electronic state near the Fermi level [41,42]. The occupied spin-up Fe 3d states strongly hybridize with O 2p states, and lowest energy states are donated by the states of O atom. For LiFePO_4 , the strong magnetic exchange-splitting between the spin-up and spin-down state of FePO_4 is reduced, i.e. decreasing magnetic moment as shown in Table II, due to the sharp e_g peak just below the Fermi level. The easy magnetization axis is altered from along a - to along b -axis when Li is inserted to FePO_4 . At the same time, strong e_g and t_{2g} peaks shift to the occupied state and place near the Fermi level. But, the U correction pushes the t_{2g} state to higher energy

region and remains the e_g state at the Fermi level in Fig. 6. Due to the insensitivity of easy magnetization axes on the U parameter, the reorientation of magnetization direction is originated by the contribution of e_g state at/near the Fermi level. Furthermore, we demonstrate that partially intercalated single crystal structures are compensated half-metallic regardless of exchange-correlation approach for a given x , if the solid solution phase would be realized, in contrast to the insulating of FePO_4 and LiFePO_4 . This might be a solution to improve the electronic conductivity. The charge density counter plots on the $(0,1/4,0)$ plane for FePO_4 and LiFePO_4 are presented in Fig. 7(a) and 7(b), respectively. The charge distribution of Fe atoms is isotropic spherical in FePO_4 , while it is anisotropic distribution toward to the e_g orbital for LiFePO_4 . This suggests that the degenerated t_{2g} and e_g states of FePO_4 are strongly localized in the majority spin state and more pronounced e_g states of LiFePO_4 in the both spin channel in Fig. 6. The covalent bond between Fe and its nearest neighbor O atoms is considerably weakened, indicating that Fe loss its electrons with t_{2g} state during Li insertion. The distribution of O atoms tends to P atoms since their inter-atomic distance in tetrahedral environment is shorter than that of Fe-O with octahedron. As seen in Fig. 7(a) and (b), there is no significant difference of the distribution on P and O atoms between FePO_4 and LiFePO_4 , implying that no charge transfer between P and O atoms is occurred during charging/discharging.

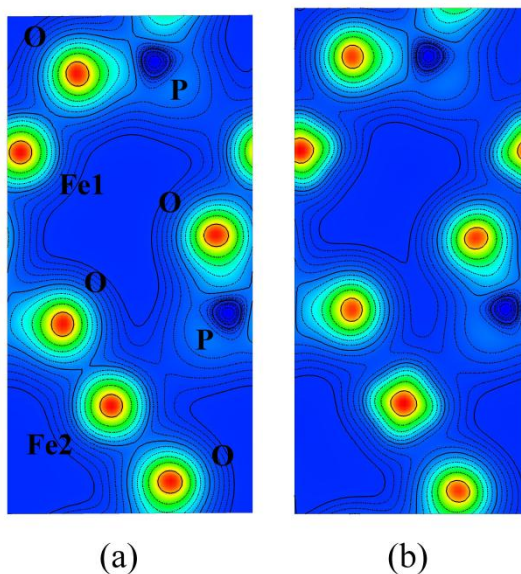


Figure 7. The charge densities of (a) FePO_4 and (b) LiFePO_4 on the $(0,1/4,0)$ plane.

IV. CONCLUSION

First-principles density-functional theory has been employed to the effect of Li on magnetic and electronic properties of the olivine phase Li_xFePO_4 . Total energy calculations show that an AFM state is more stable by the energy difference of about 0.12 ($x=0$) and 0.03 eV/f.u. ($x=1$) than a FM state, in consistent with experiments in which the AFM orderings of FePO_4 and LiFePO_4 were found at $T_N=125$ K and at $T_N=50$ K, respectively. The calculated magnetic moments of 3.56-3.96 μ_B for the GGA and 3.77-4.29 μ_B for the GGA+U are varied as functions of Li concentration. Consistent with observations, a different easy magnetization axes between $x=0$ (along a -axis) and $x=1$ (along b -axis) reflects also the differences between their electronic structures, where the e_g state is found to be a crucial. Both GGA and GGA+U approaches are valid to describe the valence electronic structure, but only the utilization of GGA+U is able for the conduction bands, in resulting appropriate solution for the band gaps. We also predict that partially intercalated single crystals ($x=0.25, 0.5$, and 0.75), which were synthesized at high temperature recently as solid solutions, are compensated half-metallic regardless of the exchange-correlation approaches.

REFERENCES

- ¹ A. K. Padhi, K. S. Nanjundaswamy, and J. B. Goodenough, *J. Electrochem. Soc.* **144**, 1188 (1997).
- ² H. Huang, S. C. Yin, and L. F. Nazar, *Electrochem. Solid-State Lett.* **4**, A170 (2001).
- ³ M. S. Islam, D. J. Driscoll, C. A. J. Fisher, and P. R. Slater, *Chem. Mater.* **17**, 5085 (2005).
- ⁴ M. Yonemura, A. Yamada, Y. Takei, N. Sonoyama, and R. Kanno, *J. Electrochem. Soc.* **151**, A1352 (2004).
- ⁵ A. Yamada and S. C. Chung, *J. Electrochem. Soc.* **148**, A960 (2001).
- ⁶ A. Yamada, S. C. Chung, and K. Hinokuma, *J. Electrochem. Soc.* **148**, A224 (2001).
- ⁷ N. Bramnik, K. Bramnik, T. Buhrmester, C. Baehtz, H. Ehrenberg, and H. Fuess, *J. Solid-State Electrochem.* **8**, 558 (2004).
- ⁸ C. Delacourt, L. Laffont, R. Bouchet, C. Wurm, J. B. Leriche, M. Morcrette, J. M. Tarascon, and C. Masquelier, *J. Electrochem. Soc.* **152**, A913 (2005).

- ⁹ B. Ellis, L. K. Perry, D. H. Ryan, and L. F. Nazar, *J. Am. Chem. Soc.* **128**, 11416 (2006).
- ¹⁰ F. Zhou, K. Kang, T. Maxisch, G. Ceder, and D. Morgan, *Solid State Commun.* **132**, 181 (2004).
- ¹¹ R. Dominko, M. Gaberscek, J. Drofenik, M. Bele, and J. Jamnik, *Electrochem. Acta* **48**, 3709 (2003).
- ¹² S. L. Bewlay, K. Konstantinov, G. X. Wang, S. X. Dou, and H. K. Liu, *Mater. Lett.* **58**, 1788 (2004).
- ¹³ S. Y. Chung, J. T. Bloking, and Y. M. Chiang, *Nat. Mater.* **1**, 123 (2002).
- ¹⁴ S. Q. Shi, L. J. Liu, C. Y. Ouyang, D. S. Wang, Z. X. Wang, L. Q. Chen, and X. J. Huang, *Phys. Rev. B* **68**, 195108 (2003).
- ¹⁵ P. S. Herle, B. Ellis, N. Coombs, and L. F. Nazar, *Nat. Mater.* **3**, 147 (2004).
- ¹⁶ R. P. Santoro and R. E. Newnham, *Acta Crystallogr.* **22**, 344 (1967).
- ¹⁷ G. Rousse, J. Rodriguez-Carvajal, S. Patoux, and C. Masquelier, *Chem. Mater.* **15**, 4082 (2003).
- ¹⁸ D. Vaknin, J. L. Zarestky, L. L. Miller, J.-P. Rivera, and H. Schmid, *Phys. Rev. B* **65**, 224414 (2002).
- ¹⁹ G. Liang, K. Park, J. Li, R. E. Benson, D. Vaknin, J. T. Markert, and M. C. Croft, *Phys. Rev. B* **77**, 064414 (2006).
- ²⁰ J. Li, V. O. Garlea, J. L. Zarestky, and D. Vaknin, *Phys. Rev. B* **73**, 024410 (2006).
- ²¹ T. B. S. Jensen, N. B. Christensen, M. Kenzelmann, H. M. Rønnow, C. Niedermayer, N. H. Andersen, K. Lefmann, M. Jiménez-Ruiz, F. Demmel, J. Li, J. L. Zarestky, and D. Vaknin, *Phys. Rev. B* **79**, 092413 (2009).
- ²² R. P. Santoro, D. J. Segal, and R. E. Newman, *J. Phys. Chem. Solids* **27**, 1192 (1966).
- ²³ S. Q. Shi, C. Y. Ouyang, Z. H. Xiong, L. J. Liu, Z. X. Wang, H. Li, D. S. Wang, L. Q. Chen, and X. J. Huang, *Phys. Rev. B* **71**, 144404 (2007).
- ²⁴ P. Tang and N. A. W. Holzwarth, *Phys. Rev. B* **68**, 165107 (2003).
- ²⁵ K. Yamauchi and S. Picozzi, *Phys. Rev. B* **81**, 024110 (2010).
- ²⁶ P. E. Blöchl, *Phys. Rev. B* **50**, 17953 (1994).
- ²⁷ G. Kresse and J. Furthmüller, *Phys. Rev. B* **54**, 11169 (1996).
- ²⁸ J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
- ²⁹ A. I. Liechtenstein, V. I. Anisimov, and J. Zaanen, *Phys. Rev. B* **52**, R5467 (1995).
- ³⁰ V. I. Anisimov, I. V. Solovyev, M. A. Korotin, M. T. Czyzyk, and G. A. Sawatzky, *Phys. Rev. B* **48**, 16929 (1993).
- ³¹ V. I. Anisimov, J. Zaanen, and O. K. Andersen, *Phys. Rev. B* **44**, 943 (1991).
- ³² H. J. Monkhorst and J. D. Pack, *Phys. Rev. B* **13**, 5188 (1976).
- ³³ M. Methfessel and A. T. Paxton, *Phys. Rev. B* **40**, 3616 (1989).
- ³⁴ V. A. Streltsov, E. L. Belokoneva, V. G. Tsirelson, N. K. Hansen, *Acta Crystallogr., Sect. B: Struct. Sci.* **49**, 147 (1993).
- ³⁵ Ch. Delacourt, Ph. Poizot, J.-M. Tarascon, Ch. Masquelier, *Nat. Mater.* **4**, 254 (2005).
- ³⁶ Ch. Delacourt, J. Rodriguez-Carvajal, B. Schmitt, J.-M. Tarascon, and Ch. Masquelier, *Solid State Sci.* **7**, 1506 (2005).
- ³⁷ G. Chen, X. Song, and T. J. Richardson, *Electrochem. Solid-State Lett.* **9**, A295 (2006).
- ³⁸ C. Y. Ouyang, S. Q. Shi, Z. X. Wang, X. J. Huang, and L. Q. Chen, *Phys. Rev. B* **69**, 104303 (2004).
- ³⁹ Y. N. Xu, S. Y. Chung, J. T. Bloking, Y. M. Chiang, and W. Y. Ching, *Electrochem. Solid-State Lett.* **7**, A131 (2004).
- ⁴⁰ A. Hunt, W. -Y. Ching, Y. -M. Chiang, and A. Moewes, *Phys. Rev. B* **73**, 205120 (2006).
- ⁴¹ D. Wang, H. Li, S. Shi, X. Huang, L. Chen, *Electrochim. Acta* **50**, 2955 (2005).
- ⁴² T. Nakamura, Y. Miwa, M. Tabuchi, and Y. Yamada, *J. Electrochem. Soc.* **153**, A1108 (2006).

First-principles Electronic Structure Calculation of Topological Insulator Bi_2Te_3

P.Taivansaikhan^{1*}, N.Tsogbadrakh^{2**} and S.C.Hong¹

¹Department of Physics and Energy Harvest-Storage Research Center, University of Ulsan, Ulsan 680-749, Republic of Korea

²Department of Theoretical Physics, School of Physics and Electronics,

National University of Mongolia, University Street-1, Ulaanbaatar-210646, Mongolia

*E-mail: p_taivansaikhan@yahoo.com **E-mail:Tsogbadrakh@num.edu.mn

Bismuth telluride (Bi_2Te_3) attracts much attention as a topological insulator. Using the first-principles density-functional calculations based on generalized gradient approximation, the structural and electronic properties of Bi_2Te_3 have been done with and without spin-orbit coupling (SOC). Total energy calculations showed that the optimized lattice parameters are $a = b = 4.44 \text{ \AA}$ and $c = 32.20 \text{ \AA}$, in consistent with an experiment. Bi_2Te_3 is calculated to be an insulating with band gap of 0.5 eV from the density of states without SOC. Finally, we found that the effect of SOC is a crucial to determine the experimentally observed very narrow band gap of 0.15 eV.

Keywords: Bi_2Te_3 , First-principles, Spin-orbit coupling, Time reversal symmetry, Band structure, Density of states

I. INTRODUCTION

One of the recent big issues in condensed matter physics is the discovery of topological insulators (TIs) [1]. TIs are electronic materials that have a bulk band gap like an ordinary insulator but have protected conducting states on their edge or surface. These states are possible due to the combination of the spin-orbit coupling interaction (SOC) and time-reversal symmetry (TRS) [2-5]. TIs are interesting not only because of their fundamental importance but also their great potential for future applications.

In early studies of TIs, due to the absence of realistic materials, most discussions were based on the model Hamiltonians [2-5]. However, within the last couple of years this field has been strongly motivated by the discovery of several real compounds.

In two dimensions, the topological insulator is a quantum spin Hall insulator [6,7], which is a close cousin of the integer quantum Hall state.

Recently, tetradymite semiconductors Bi_2Te_3 , Bi_2Se_3 , and Sb_2Te_3 have been theoretically predicted [8-10] and experimentally observed [11,12] to be three dimensional TIs with the bulk band gap.

II. COMPUTATIONAL METHOD

The bulk Bi_2Te_3 has a rhombohedral crystal structure with space group D_{3d}^5 ($R\bar{3}m$) with five atoms in a unit cell and a layered structure stacked

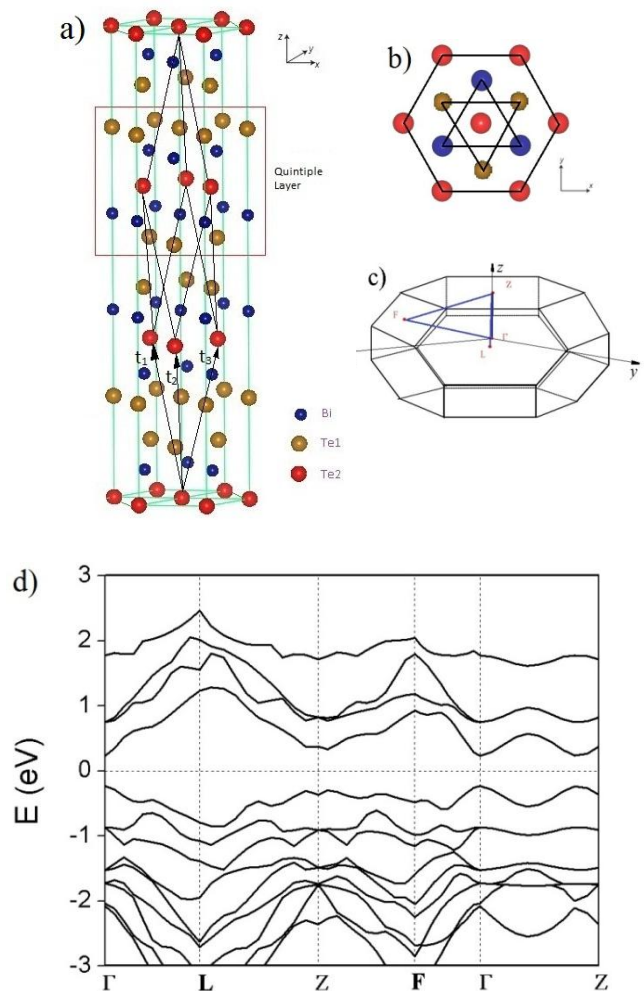


FIG. 1. (a) Crystal structure of Bi_2Te_3 with three primitive lattice vectors denoted as t_1 , t_2 , t_3 . A quintuple layer with $\text{Te}(1)\text{-Bi-Te}(2)\text{-Bi-Te}(1)$ is indicated by the red square. (b) Top view along the z -direction. The triangle lattice in one quintuple layer has three different positions. (c) Bulk rhombohedral Brillouin zone and (d) electronic band structure of Bi_2Te_3 .

long the c-axis of the hexagonal lattice. Five-layer composed of five atoms is known as a quintuple layer (QL) and the interlayer coupling is due to the van der Waals interaction. The five individual atomic layers occur in the sequence Te(1)-Bi-Te(2)-Bi-Te(1), where the Te(1) and Te(2) are nonequivalent tellurium sites as shown in Fig. 1(a).

All of our calculations, including geometry relaxation and electronic structure calculation are performed by using density functional theory (DFT) on the basis of projector augmented wave method (PAW) [13] implemented in the VASP package [14, 15]. Perdew–Burke–Ernzerhof (PBE) approximation was employed to describe the exchange-correlation interactions [16]. An energy cutoff of 350 eV is used in the plane wave basis. A $5 \times 5 \times 1$ and $9 \times 9 \times 1$ k -sampling is generated by the Monkhorst–Pack scheme [17] for the bulk including and excluding SOC, respectively.

III. RESULTS AND DISCUSSIONS

We calculated structural and electronic properties of Bi_2Te_3 including and excluding SOC. Total energy calculations showed that the optimized lattice parameters of the Bi_2Te_3 are $a=b=4.44$ Å and $c=32.20$ Å which are reasonably consistent with experiments ($a=b=4.386$ Å and $c=30.478$ Å). The band structure without SOC is given in Fig. 1(d) which shows a direct band gap at the Γ point of about 0.5 eV, whereas its stable surface exhibits metallic behavior from the electronic structure calculations (not shown here). The Fig. 2(a)-(d) shows atom- and spin- projected density of states (DOS) of Bi, Te(1), Te(2) and total DOS of Bi_2Te_3 . It is found that the DOS is comparable with other theoretical result [16]. As seen in the figures, DOS near the Fermi level are determined by solely p states while s states do low energy bands. The conduction band of Bi_2Te_3 is mainly contributed by Bi and Te1 atoms, whereas DOS of Te2 is fully occupied. As a result, a band gap of about 0.5 eV is calculated in the total DOS in Fig. 2(d), where our result is somewhat overestimated as compared with the experiments. In order to clarify a deviation between theory and experiment, we apply the SOC term in Kohn-Sham equation by means of the DFT. The calculated

DOSs with SOC are given in Fig. 2(e)-(h). DOS curves reproduced quite well with those in the previous theoretical study [18]. Main features of the valence bands are almost same, but the conduction bands are broadened to the Fermi level and higher energy region. Noting that the difference in s-DOS between with and without SOC is negligible in entire range of energy. The effect of SOC reduces significantly the band gap and very small band gap of about 0.1 eV is obtained [Fig. 2(h)]. Therefore, SOC effect should be applied to have a reliable value of band gap, i.e. narrow band gap insulator, and was found to be a decisive factor in determining of TIs.

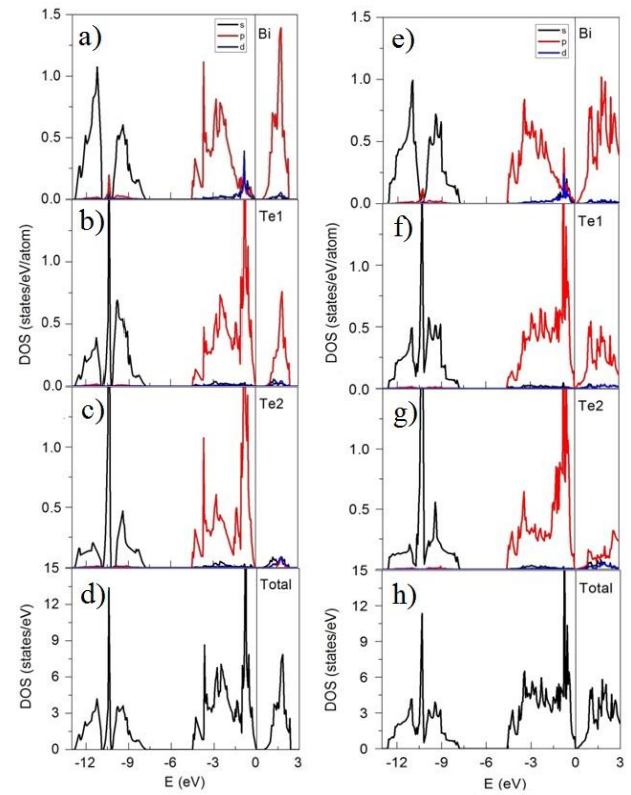


FIG. 2. The density of states (DOS) of (a) Bi (c) Te(1) (e) Te(2) atoms in Bi_2Te_3 and (g) the total density of states of Bi_2Te_3 excluding SOC, (b) Bi (d) Te(1) (f) Te(2) and (h) total DOS of Bi_2Te_3 including SOC. The solid black, red and blue lines indicate s, p, d atomic spins, respectively. The vertical line at zero energy represents the Fermi level.

IV. CONCLUSION

The effect of SOC on the electronic structure has been considered for topological insulator Bi_2Te_3 alloy in framework of the first-principles DFT. The optimized lattice parameters are in good consistent with experimental and other theoretical results. The

calculated band gaps of 0.1 eV with SOC and 0.5 eV without SOC indicate that SOC gives rather consistent results with experiments. This study can be instructive to explore further investigation on new materials.

REFERENCES

- ¹ J. E. Moore, Nature **464**, 194 (2010).
- ² J. E. Moore and L. Balents, Phys. Rev. B. **75**, 121306 (R) (2007).
- ³ L. Fu and C. L. Kane, Phys. Rev. B. **76**, 045302 (2007).
- ⁴ L. Fu, C. L. Kane, and E. J. Mele, Phys. Rev. Lett. **98**, 106803 (2007).
- ⁵ M. Z. Hasan and C. L. Kane, Rev. Mod. Phys. **82** (2010).
- ⁶ C. L. Kane and E. J. Mele Phys. Rev. Lett. **95**, 146802 (2005).
- ⁷ B. A. Bernevig and S. C. Zhang, Phys. Rev. Lett. **96**, 106802 (2006).
- ⁸ H. Zhang, C.-X. Liu, X.-L. Qi, X. Dai, Z. Fang, and S.-C. Zhang, Nature **5**, 438 (2009).
- ⁹ S. K. Mishray, S. Satpathy, and O. Jepsen, J. Phys. Condens. Matter **9**, 461–470 (1997).
- ¹⁰ S. Urazhdin, D. Bilc, S. D. Mahanti, and S. H. Tessmer, Phys. Rev. B. **69**, 085313 (2004).
- ¹¹ Y. L. Chen, et al. Science **325**, 178 (2009).
- ¹² Y. Xia, D. Qian, D. Hsieh, L. Wray, A. Pal, H. Lin, A. Bansil, D. Grauer, Y. S. Hor, R. J. Cava, and M. Z. Hasan, Nature **5**, 398 (2009).
- ¹³ G. Kresse and D. Joubert, Phys. Rev. B **59**, 1758 (1999).
- ¹⁴ G. Kresse and J. Furthmüller, Phys. Rev. B **54**, 11169 (1996).
- ¹⁵ G. Kresse and J. Furthmüller, Comput. Mater. Sci. **6**, 15 (1996).
- ¹⁶ J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996).
- ¹⁷ H. J. Monkhorst and J. D. Pack, Phys. Rev. B **13**, 5188 (1976).
- ¹⁸ P. Larson and S. D. Mahanti, Phys. Rev. B. **61**, 8162–8171 (2000)

Влияние сезонного изменения химического состава оборотной воды Горно-обогадательного комбината Эрдэнэт на обогатимость молибденита

Р. Галбадрах^{1*}, Ц. Даржаа², Д. Дорж², Н. Цогбадрах³, Т. Мянганбаатар¹, Л. Энхтөр¹,
Ж. Баатархүү⁴, Ц. Туяа⁵, С. Эрдэнэсүх⁶

¹ Монгольский Национальный Университет, Школа физики и электроники, Кафедра общей физики,

² Монгольский Национальный Университет, Школа химии и химической инженерии,
Кафедра общей и аналитической химии

³ Монгольский Национальный Университет, Школа физики и электроники, Кафедра теоретической физики

⁴ Главный обоганитель Горно-обогадательного комбината Эрдэнэт, г. Эрдэнэт, Монголия

⁵ Начальник Центральной исследовательской лаборатории
Горно-обогадательного комбината Эрдэнэт, г. Эрдэнэт, Монголия

⁶ Монгольский Национальный Университет, Школа геологии и географии, Кафедра метеорологии

*Э- почта: rgalaa@yahoo.com, и galbadrakh@num.edu.mn

В работе проведен первичный корреляционный анализ сезонного изменения физико-химических показателей оборотной воды Горно-обогадательного комбината Эрдэнэт (ГОК) за последние годы на основе данных Центральной исследовательской лабораторий (ЦИЛ) ГОК-а. Изучена корреляция концентрации солеобразующих доминантных ионов SO_4^{2-} , HCO_3^{1-} и металлов Мо, Са, Мг в оборотной воде ГОК-а со среднемесячными температурой, влажностью воздуха, скоростью ветра и осадком в городе Эрдэнэт за последние годы. Показаны уменьшение концентраций основных ионов в оборотной воде в период растаяния снега и ледяного покрова (март-апрель) и их рост в последующий наиболее сухой период года май-июнь. Показан механизм влияния сезонного изменения химического состава оборотной воды на обогатимость молибденита. Предложены методы устранения отрицательного сезонного влияния химического состава оборотной воды на обогатимость молибденита.

Ключевые слова: Горно обогадательный комбинат Эрдэнэт, извлекаемость молибденита

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧ

Как показывает производственная практика ГОК-а, извлекаемость молибденита из руды значительно ухудшается в каждом году с конца мая до конца июня на постоянной основе и спорадически в течении всего лета и начала осени. В зимний период извлекаемость молибденита высока и стабильна, что обеспечивает в целом рентабельность производства молибденового концентрата на ГОК-е. Наблюдаемая устойчивая сезонная зависимость извлекаемости молибденита на ГОК-е может быть связана с сезонным изменением химического состава воды используемой для флотационного извлечения из руды сульфидов меди и молибдена.

Обогадательная фабрика (ОФ) ГОК-а использует в среднем за сутки 200 тысяч тонн оборотной воды из открытого водоёма, 18-20 тысяч тонн пресной воды реки Сэлэнгэ, и около 2 тысяч тонн рудничной воды для переработки руды до медного и молибденового концентратов. Обратная

вода поступает на ОФ из открытого водоёма, представляющего собой искусственный пруд с площадью водного зеркала около 5,4 км² и с общим объёмом воды 24,6 млн м³ [1]. Поскольку обратная вода аккумулируется и осветляется в пруде с большой удельной поверхностью, её физические свойства и химический состав зависит не только от всех поверхностных и подземных стоков но и от таких местных климатических условий, как температура и влажность воздуха, суммарный осадок за определенный промежуток времени, скорость ветра и т.д. [2].

В данной работе проведен первичный корреляционный анализ данных химического состава оборотной воды за 2009 - 2010 годы с учетом ежемесячной средней температуры, влажности воздуха, скорости ветра и ежемесячного суммарного осадка в городе Эрдэнэт за тот же период.

В завершении работы, на основе анализа доступных нам данных, предложен механизм влияния сезонного изменения химического состава оборотной воды на обогатимость молибденита и предложены методы

устранения отрицательного сезонного влияния химического состава оборотной воды на обогатимость молибденита.

II. ОБРАБОТКА ДАННЫХ

ЦИЛ ГОК-а с периодичностью раз в месяц анализирует пробу оборотной воды поступающую на ОФ на содержания в ней элементов Cu, Fe, Ca, Mg, Mo, солеобразующих ионов SO_4^{2-} , HCO_3^{-} , CO_3^{2-} и определяет также pH и жесткость оборотной воды. Данные ЦИЛ за годы 2009 и 2010 представлены в виде нижеследующей таблицы (таблица 1). К сожалению, эти данные не являются исчерпывающими и не отражают полностью химическое “лицо” оборотной воды. Так, например, данные о количестве растворенных солей хлоридов,

фосфатов и кислорода и углекислого газа, которые очень важны при рассмотрении химического баланса в оборотной воде, отсутствуют вовсе или крайне скудны. В последних колонках таблицы приведены среднемесячные температура, влажность воздуха, скорость ветра и ежемесячный суммарный осадок в городе Эрдэнэт за тот же период. Климатические данные были любезно представлены и обработаны Кафедрой метеорологии Монгольского национального университета.

С целью выявления взаимной корреляции данных, каждое числовое значение в любой колонке (кроме первой) приведенной таблицы нормировалось делением на максимальное значение наблюдаемое в данной колонке. Коэффициенты линейной корреляции были рассчитаны по стандартной методике [3].

Таблица 1

Месяцы (2009, 2010 годы)	Mo (мг/л)	Cu (мг/л)	Ca (мг/л)	Mg (мг/л)	Fe (мг/л)	SO4 (мг/л)	HCO3 (мг/л)	CO3 (мг/л)	Сухой остаток (мг/л)	pH	Твердость (мг-экв/л)	Осадок, мм	Относ. Влажн., %	Темп., °C	Скорость ветра, м/с
1	2,20	0,06	175,75	10,42	0,18	896,88	95,50		1570	7,870	9,63	3,3	58	-15,9	2,12
2	0,055	0,13	170,62	19,26	0,42	866,83	104,74	4,39	1478	8,390	10,10	2,8	52	-15	2,85
3	3,05	0,05	184,91	19,26	0,16	906,34	109,80	1,20	1574	8,260	10,81	13,6	52	-7,1	2,83
4	2,36	0,18	157,13	36,11	0,53	742,44	122,00		1312	8,000	10,81	2,6	36	6,2	3,02
5	3,00	0,03	159,39	11,79	0,13	826,08	50,75	8,42	1360	8,750	8,92	25	35	11,9	3,48
6	2,80	0,07	182,72	24,77	0,26	900,10	92,99		1425	7,920	11,12	165,5	52	14,4	2,9
7	2,97	0,08	181,17	11,79	0,63	820,73	64,69	4,24	1588	8,840	10,01	87,3	65	16,8	2,7
8	3,70	0,45	180,78	7,07	1,01	956,97	50,52	3,94	1560	9,370	9,60	110,7	66	14,7	2,52
9	0,257	0,34	163,91	31,52	0,94	817,03	148,96		1520	7,920	10,77	23,8	57	8,5	2,61
10	3,87	0,03	186,61	4,67	0,60	989,89	60,94		1560	8,030	9,69	3,9	62	0,6	2,58
11	3,97	0,03	194,30	9,34	0,00	996,48	56,12		1601	8,020	10,46	6,1	63	-10,8	2,2
12	3,32	1,73	189,69	19,14	0,33	919,93	97,60		1604	7,910	11,04	4,4	61	-16,6	2,21
1	2,89	0,02	223,93	12,97	0,06	1067,28	103,70		1750	7,557	12,24	3,3	60	-21,3	2,38
2	3,15	0,04	196,62	12,84		931,45	122,00		1648	7,689	10,87	6,7	59	-19,4	1,93
3	3,87	0,04	214,83	14,59	0,57	1045,88	102,66		1774	7,938	11,92	9,9	58	-11	2,72
4	3,72	0,09	220,44	18,24	0,20	1088,68	87,56	2,97	1730	9,078	12,50	20,1	50	-1,9	2,75
5	3,75	0,05	200,38	7,22		1033,11	49,39	1,52	1618	8,673	10,59	10,7	39	10	3,23
6	2,89	0,05	212,68	7,22	0,04	916,63	67,91	1,51	1652	8,204	11,21	24,6	52	16,7	2,93
7	3,98	0,08	219,64	2,84	0,36	1093,62	29,89	4,12	1757	9,660	11,19	80,9	62	18,4	2,69

8	1,73	0,54	204,74	31,95	0,44	944,21	50,81		1462	6,681	12,84	111,6	68	13,9	2,48
9	3,34	0,02	204,82	16,56	0,09	1008,83	62,77		1604	8,024	11,58	12,1	56	10,4	2,52
10	2,51	0,11	200,84	17,75	0,61	935,98	106,29		1578	7,794	11,48	10,8	57	1,3	2,59
11	2,81	0,05	202,16	18,87	0,34	928,57	114,74		1598	7,531	11,64	4,3	56	-6	2,53
12	2,69	0,04	220,05	21,23	0,15	1004,30	99,64		1620	7,497	12,73	14,3	59	-16,8	2,56

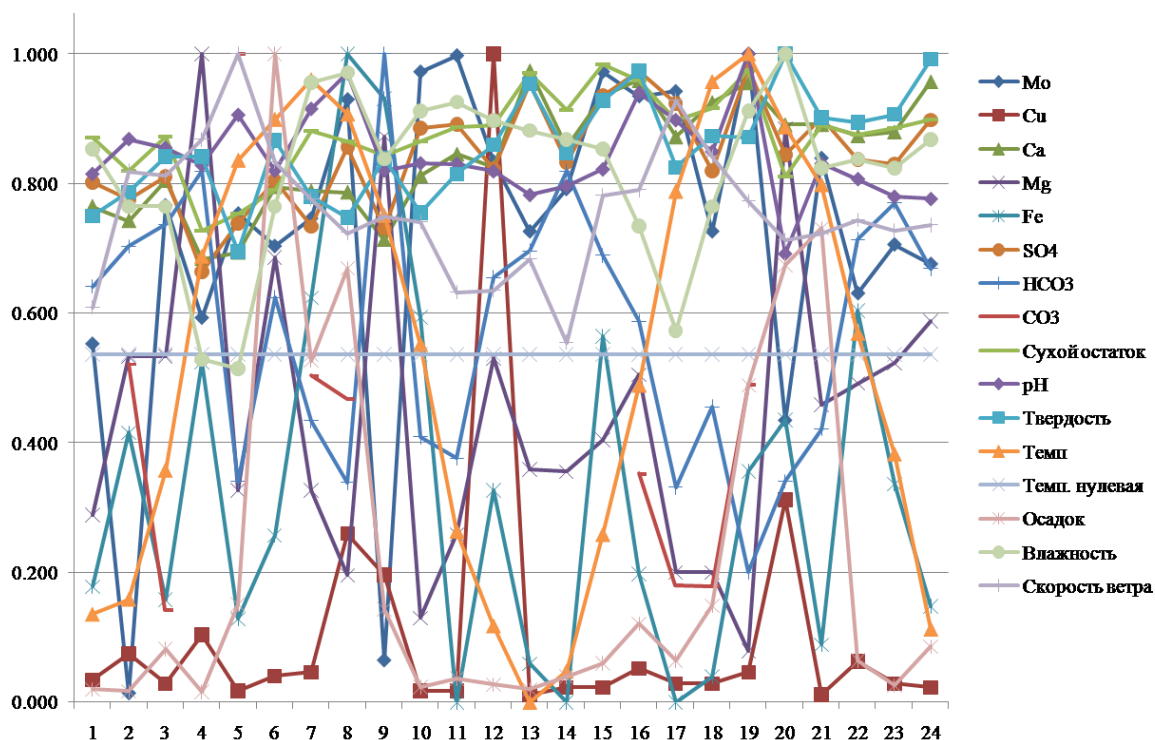


Рисунок 1. Графическое представление данных таблицы. Для удобства сравнения по вертикали отложены нормированные к единице величины каждого из показателей, а по горизонтали отложены в единой нумерации месяца 2009 и 2010 год, считая с января 2009 года.

III. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ АНАЛИЗА

Как видно из таблицы, оборотная вода является сильно минерализованной, жесткой, средне щелочной водой во все сезоны года. Растворенными доминантными катионами в оборотной воде являются ионы Ca^{2+} , Mg^{2+} , а доминантными анионами-сульфат ионы SO_4^{2-} и гидрокарбонат ионы HCO_3^{1-} . Относительные изменения анализируемых данных за 2009-2010 годы представлены в едином графическом виде на Рис. 1. Из графиков на Рис. 1 были выделены положительно или отрицательно коррелирующие группы величин.

На наш взгляд, положительно коррелирующими являются, во первых, группа величин включая Ca , Mo , SO_4^{2-} , pH , и сухой остаток (Рис.2), во вторых, группа состоящая из

Mg и HCO_3^{1-} (Рис. 3а). В первой группе в течении двух лет, за исключением января месяца 2010 года наблюдается уверенная положительная корреляция между Ca , Mo , SO_4^{2-} и сухим остатком. Так, например, расчет корреляционного коэффициента между Ca и SO_4^{2-} дает для 2009 года значение +0,69 а для 2010 года - значение +0,84. Эти же значения для пары Mo и SO_4^{2-} оказываются равными +0,68 и +0,55.

Положительно коррелирующая группа Ca – Mo – SO_4^{2-} – сухой остаток отрицательно коррелирует с другой положительно коррелирующей группой Mg – HCO_3^{1-} – твердость (Рис.3а). К примеру, коэффициент корреляции между Mo и Mg за 2009-2010 годы имеет значение -0,61 (Рис.3б), между SO_4^{2-} и HCO_3^{1-} - значение - 0,38.

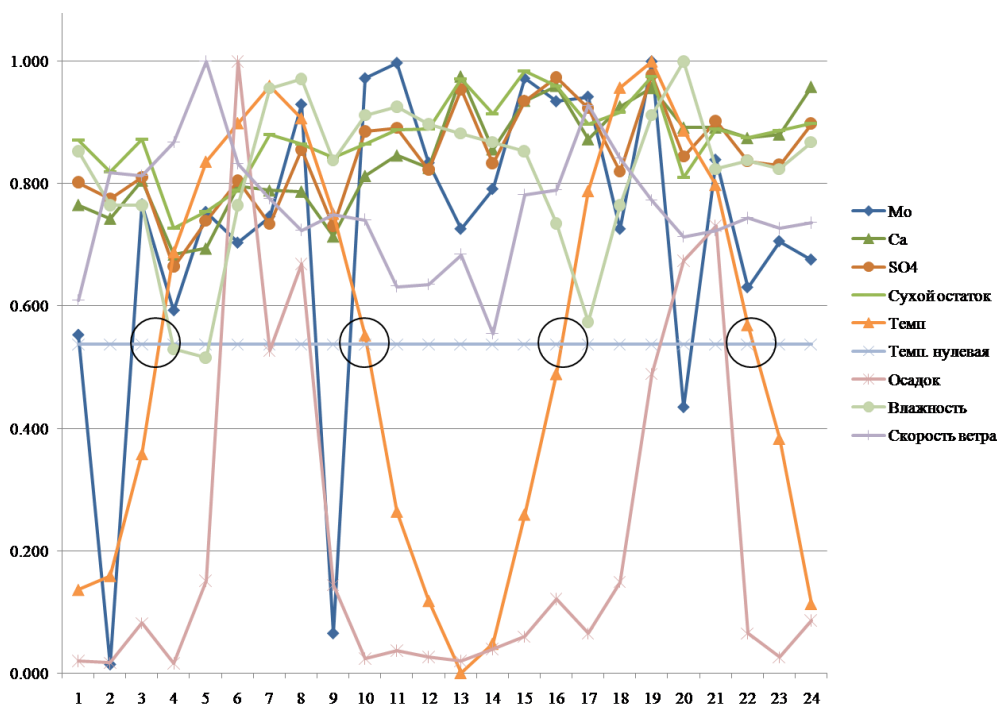


Рисунок 2. Положительная корреляция между Ca , Mo , SO_4^{2-} и сухим остатком. Чёрными кружками отмечены переход среднемесячной температуры воздуха в городе Эрдэнэте через нуль.

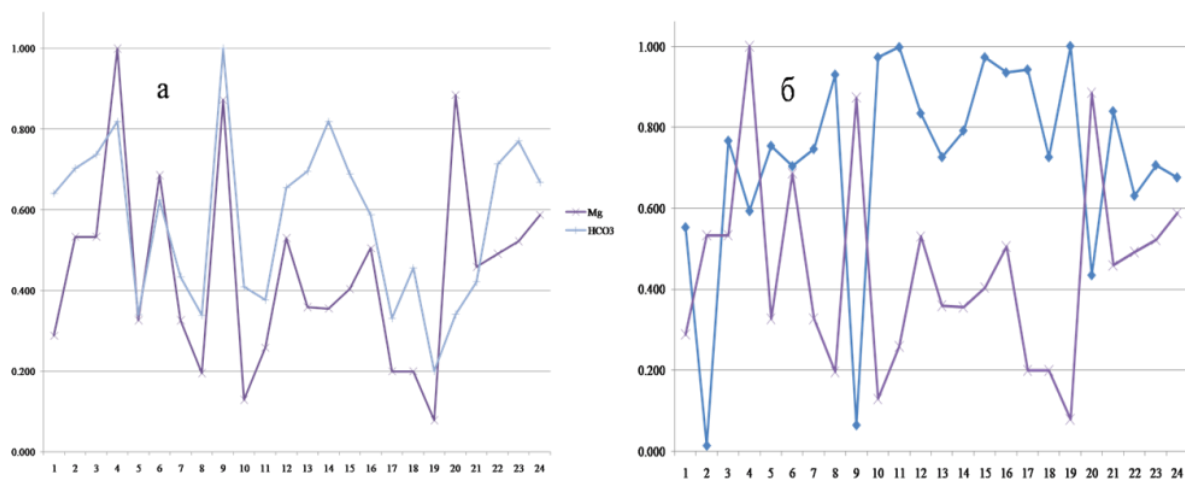


Рисунок 3. Корреляций магния с гидрокарбонатом (а) и молибденом (б). Как видно, за исключением зимнего периода (конец 2009 - начало 2010 года) магний в оборотной воде коррелирует положительно с гидрокарбонатом и отрицательно с молибденом.

Как видно из Рис. 2, весенний переход температуры от отрицательной в положительную приходится на март-апрель, и как раз в это время вода в пруде становится мягче чем зимой за счет интенсивного пополнения и разбавления пресной талой водой. В этот период, например, концентрация сульфат ионов в оборотной воде уменьшается на 10-15% от её зимних значений. После этого, так сказать, периода “естественного разбавления” пруда наступает период его “естественного сгущения” - май-июнь. Многолетние метеорологические наблюдения показывают что эти два месяца начала лета

являются наиболее сухими и ветряными в Монголии, в частности, в городе Эрдэнэте. В мае месяце средняя скорость ветра в Эрдэнэте достигает годового максимума (Рис. 2). В течение этих двух сухих, ветряных, и достаточно теплых месяцев, вода в пруде интенсивно испаряется и насыщается атмосферным кислородом за счет активной циркуляции воды в пруде порывистыми ветрами. Как следствие, концентраций основных ионов Ca^{2+} и SO_4^{2-} в ней растут и к концу июня оборотная вода становится густой как в разгар зимы (январь-февраль), что и очевидно из Рис. 2. Ввиду отсутствия

систематических данных, содержание кислорода не показано на Рис.2, но по выборочным данным ЦИЛ-а за 2010 год и по нашим данным за 2011 год, количество растворенного кислорода в оборотной воде меняется от 2-4 мг/л (январь-февраль) до 7-12 мг/л (май-июнь).

Как видно из Рис.2, почти весь годовой осадок приходится на два летние месяца: июль-август. В этот период дождевой активности концентрации ионов и растворенного кислорода в оборотной воде быстро меняются в соответствии с количеством и частотой выпавшего осадка (дождя), и в среднем оборотная вода тем разбавленнее, чем больше дождей. При этом дожди двояко, или даже тройко влияют на химический состав оборотной воды. С одной стороны, пресная дождевая вода разбавляет воду в пруде, уменьшая концентрацию растворенных минералов и солей, с другой стороны, дожди эффективно насыщают пруд кислородом и углекислым газом [4,5], поскольку, как известно, дождевые капли падая через толщу воздуха поглощают до насыщения атмосферный кислород и углекислый газ. Порывистые ветры перед и во время дождей также способствуют насыщению пруда этими газами. После сильного продолжительного ветра или обильных дождей оборотная вода насыщается кислородом и за счет повышенного поглощения атмосферного углекислого газа становится более кислой [5], с меньшим значением pH. Такое ветро-дождевое, временное падение pH среды создает благоприятное условие для растворимости ионов Mg^{2+} которые связываются с дополнительно внесенными гидрокарбонат анионами HCO_3^{1-} , приводя росту их концентраций (Рис. 3а) одновременно с уменьшением концентраций пары ионов Ca^{2+} и SO_4^{2-} . Хотя отрицательная корреляция гидрокарбоната магния с сульфатом кальция слабо выражена (что и должно быть), яркая отрицательная корреляция пары Mg-Mo (Рис.3б) может служить надежным подтверждением сказанного.

Осенний переход температуры от положительной в отрицательную приходится на месяцы октябрь-ноябрь. Начиная с этого момента до наступления весны все атмосферные, поверхностные и подземные стоки вод питающие пруд, иссякают. В зимнее время пруд покрывается льдом и доступ атмосферного кислорода и углекислого газа в оборотную воду прекращается. В этот осенне-зимний период относительного затишья

естественного водо- и кислородо-оборота химический состав оборотной воды более или менее стабилизируется, сгущаясь лишь незначительно до появления талых вод. Описанный сезонный цикл изменения химического состава оборотной воды косвенно подтверждается аналогичным и более ярко выраженным сезонным циклическим поведением химического состава рудничной воды.

В итоге мы рассмотрим связь сезонной циклической обогатимости молибденита наблюдаемой на ГОК-е за последние годы с аналогичной циклическостью изменения химического состава оборотной воды. Как уже упоминалось в самом начале, извлекаемость молибденита значительно падает с конца мая до конца июня месяца постоянно и периодически в течении всего последующего лета и начала осени. Такое сезонное поведение извлекаемости молибденита можно связать с сезонным поведением растворенного кислорода и магния в оборотной воде. Ветро-дождевой рост концентрации кислорода и магния в оборотной воде подавляет флотуруемость, а значит извлекаемость молибденита.

Эту связь можно обосновать следующим образом. Раскрытая поверхность измельченных зёрен молибденита реагирует с растворенным свободным кислородом образуя на поверхности комплексный анион SO_4^{2-} вместо S^{2-} . Такое замещение более агрессивного иона менее агрессивным ионом одинаковой валентности может и должно иметь место, поскольку энергетический коэффициент аниона SO_4^{2-} равен 0,68 что в 2 раза ниже по сравнению с аналогичным коэффициентом аниона S^{2+} [6]. Часть образовавшихся SO_4^{2-} анионов уходит в раствор пульпы под действием доминантных катионов Ca^{2+} и Mg^{2+} , тем самым давая доступ избыточному кислороду к приповерхностным ионам молибдена в молибдените. Поверхность зерна молибденита частично или полностью покрывается слоем молибдат аниона, или другими словами, окисляется двухэтапно до MoO_4^{2-} . При этом большинство образовавшихся молибдат анионов MoO_4^{2-} так и остается прикрепленными к поверхности, частично обволакивая зерно молибденита крепкой гидрофильной водной шубой. Зерны молибденита одетые в гидрофильную шубу плохо флотируют независимо от типа применяемого собирателя, что в результате приводит к плохой извлекаемости молибденита. Как уже упоминалось, приповерхностные ионы SO_4^{2-} образовавшиеся в результате первичного окисления могут уходить в раствор под

действием катионов Ca^{2+} или Mg^{2+} . Этот процесс идет тем активнее, чем больше концентрация Mg^{2+} ионов, поскольку во первых, энергетический коэффициент у иона Mg^{2+} (2,1 [6]) больше чем у иона Ca^{2+} (1,75 [6]), и во вторых, растворимость MgSO_4 намного больше растворимости CaSO_4 .

Поэтому в пользу описанного механизма влияния растворенного кислорода на извлекаемость молибденита говорит тот факт, что извлекаемость молибденита ухудшается каждый раз когда в оборотной воде поступающей на ОФ концентрация магния высока.

IV. ВЫВОДЫ

1. Химический состав оборотной воды ГОК-а имеет выраженный сезонный характер:
 - В осенне-зимний период (конец октября-начало марта) химический состав оборотной воды стабилизируется, поскольку пруд покрывается льдом и вода в нём не доступна атмосферному влиянию. Кроме того, в этот период естественные поверхностные стоки питающие пруд замерзают и подземные стоки также почти прекращаются.
 - В весенний период (март-апрель) пруд пополняется и разбавляется пресной талой водой и при этом концентрация основных (доминантных) ионов в оборотной воде уменьшается на 10-15% относительно её зимних значений.
 - Весенне-летний переходной период (май-июнь) является наиболее сухим, ветряным, и достаточно теплым. В этот период вода в пруде интенсивно испаряется и насыщается атмосферным кислородом за счет активной циркуляции воды в пруде порывистыми ветрами. В следствие чего, концентраций основных ионов в ней растут и к концу июня месяца оборотная вода становится густой как в разгар зимы (январь-февраль).
 - В летний период дождевой активности (июль-сентябрь) концентраций основных ионов, растворенного кислорода и углекислого газа в оборотной воде быстро меняются в соответствии с количеством и частотой выпавшего осадка (дождя), и в среднем оборотная вода тем разбавленнее, чем больше дождей.
2. В весенне-летний переходной период (май-июнь) за счет повышенного содержания

кислорода и магния в оборотной воде поверхность зерён молибденита в пульпе частично окисляется двухэтапно, как описано выше, что и приводит к плохой флотуемости и извлекаемости молибденита.

V. РЕКОМЕНДАЦИЙ

1. Из изложенного следует что для увеличения и стабилизации извлекаемости молибденита в весенне-летний переходной период (май-июнь) нужно принять меры по уменьшению растворенного кислорода в оборотной воде.
2. Речь не идет о тотальном возврате к пропарочной технологии, а идет лишь о частичной замене оборотной воды предварительно обескислороженной водой [7,8,9] непосредственно перед подачи в первые флотомашин в первом цикле основной коллективной флотации. Для обескислороживания можно применять традиционно используемый реагент Na_2S ($2 \text{Na}_2\text{S} + 3 \text{O}_2 + 2 \text{CO}_2 \rightarrow 2 \text{Na}_2\text{CO}_3 + 2 \text{SO}_2$) или более мягкий, но нетоксичный реагент Na_2SO_3 ($2 \text{Na}_2\text{SO}_3 + \text{O}_2 \rightarrow 2 \text{Na}_2\text{SO}_4$). Для пенообразования в флотомашин первого цикла вместо воздуха нужно подавать азот.
3. Для оперативного контроля кислородного состояния оборотной воды следует видимо установить на пруде автоматическую плавучую метео-гидрологическую станцию буйного типа LOBO[10].

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Технологическая инструкция по обогащению медно-молибденовых руд месторождения Эрдэнэтийн овоо на обогатительной фабрике КОО “Предприятие Эрдэнэт”, г. Эрдэнэт, Монголия, 2008 г.,
2. Alessandro LUDOVISI and Elda GAINO, Meteorological and water quality changes in Lake Trasimeno (Umbria, Italy) during the last fifty years, J. Limnol., 69(1): 174-188, 2010 DOI: 10.3274/JL10-69-1-16,
3. Hideo NISHIDA, Нацагдорж НАРАНЦОГТ, Хүрээлэн буй орчны өгөгдөл боловсруулалт хийх аргачлал, Битпресс хэвлэлийн газар, Улаанбаатар, 2010,
4. Yalçın Tepe, Aysun Türkmen, Ekrem Mutlu, Alpaslan Ates, Some Physicochemical Characteristics of Yarseli Lake, Hatay, Turkey,

- Turkish Journal of Fisheries and Aquatic Sciences, 5: pages 35-42 (2005)
5. http://www.eoearth.org/article/Abiotic_factor?topic=49461
 6. Ж. Баатархуу, Технология обогащения медно-порфировых руд на основе изучения их генетико-морфологических особенностей, 182стр., г. Эрдэнэт, 2006
 7. <http://www.ngpedia.ru/id341785p1.html>
 8. <http://www.onlinewatertreatment.com/literature/Nalco/docs/B-116.pdf>
 9. <http://www.arkemainc.com/literature/pdf/346.pdf>
 10. <http://columbia.loboviz.com/loboviz/>

Нүүрстөрөгчийн нано хоолойгуураас суулгах химийн арга болон нуман цахилалтын аргаар гарган авах боломж

Р.Галбадрах^{1*}, Э.Тэмүжин¹, Тон Ён Ли¹, Л.Энхтөр¹, Г.Шилагарди¹, Н.Төвжаргал¹, Б.Батцэнгэл²

¹Монгол Улс, Улаанбаатар-210646, Монгол Улсын Их Сургууль, Физик Электроникийн Сургууль, Ерөнхий Физикийн Тэнхим

²Монгол Улс, Улаанбаатар-210646, Монгол Улсын Их Сургууль, Хими Химийн Инженерчлэлийн Сургууль, Хими Технологийн Тэнхим

*Э-уудан: r.qalaa@yahoo.com

Нүүрстөрөгчийн Нано Хоолой(ННХ)-ийг уураас суулгах химийн(CVD) арга болон нуман цахилалтын(AD) аргаар гарган авсан. Уураас суулгах химийн CVD реактор болон нуман цахилалтын AD реакторуудыг өөрсдөө зохион бүтээв. CVD аргын хувьд CoO/Mg нано нунтгийг ННХ ургуулах пиролиз урвалын катализатороор, шатах хий бутаныг нүүрстөрөгч агуулсан хийгээр сонгон авав. Харин AD аргын хувьд Монгол орны Алагтолгойн нүүрсийг нунтаглаж толуюл битумын уусмалаар зууран зуурмаг хэлбэрт оруулан, түүнийгээ өөрсдийн зохион бүтээсэн тусгай шахагчаар пресслэж цилиндр хэлбэрийн шахмал нүүрсэн электродуудыг бэлдэв. Дараа нь шахмал нүүрсэн электродуудыг мөн өөрсдийн зохион бүтээсэн бичил зууханд оруулан инерт хийн орчинд, 862⁰С температурт, дулааны боловсруулалт хийж электродуудыг бэлтгэв. Хоёр аргаар гарган авсан дээжүүдийн SEM дүрсүүд нь тэдгээрт ННХ-ийн багцууд байгааг харуулсан болно.

Түлхүүр үг: Нүүрстөрөгчийн Нано Хоолой (ННХ), Уураас суулгах химийн CVD реактор, Нуман цахилалтын AD реактор, Шахмал нүүрсэн электрод, Бичил зуух

I. ОРШИЛ

Нүүрстөрөгчийн Нано Хоолой (ННХ) нь 1991 онд анх нээгдсэнээсээ хойш шинжлэх ухааны болоод үйлдвэрлэлийн салбарын хүрээнд судлаачдын анхаарлыг ихээр татах болсон[1]. ННХ нь хамгийн бөх гангаас 100 дахин бөх (1 мм² хөндлөн огтлолын талбайтай ННХ тросс 6,3 тонн ачаа даана), цахилгаан дамжуулах чадвараараа зэсээс 1000 дахин илүү (хайлах хүртлээ дааж чадах гүйдлийн нягт 10⁷ А/см²), дулаан дамжуулал нь зэсээс 10 дахин их, вакуумд 2800⁰С температур даадаг гэх зэрэг олон гайхамшигт шинж чанарууд нь түүнийг 21-р зууны суурь судалгааны материал болоход хүргээд байна. ННХ-ийг хольсон металл материалуудыг нано механикт нано утсанцар хэлбэрээр нь, электроникт нано мэдрүүл, компьютерийн чип хэлбэрээр ашиглаж байна[2]. Манай улсын нүүрсний геологийн нөөц 150 тэрбум тонноос багагүй үнэлэгдэж байгаа бөгөөд нүүрсний энэхүү арвин их нөөц нь зөвхөн түлш, эрчим хүчний төдийгүй нийт боловсруулах аж үйлдвэрийн бодлогод томоохон байр эзлэх үнэмлэхүй хүчин зүйлийн нэг юм. Нүүрсийг гүн боловсруулж нүүрстөрөгчийн төрөл бүрийн нанонунтаг бүтээгдэхүүн үйлдвэрлэх нь нүүрсэнд хамгийн их нэмүү өртөг шингээх боломжит аргын нэг юм. Энэхүү судалгааны ажлаар бид Монгол

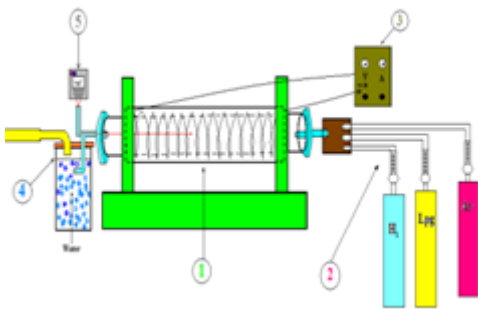
орны нүүрснээс ННХ агуулсан бүтээгдэхүүн гарган авах зорилтыг тавьж ажилласан юм.

II. НҮҮРСТӨРӨГЧИЙН НАНО ХООЛОЙГ ГАРГАХ АРГУУД

Нунтаг ННХ үйлдвэрлэх Нуман цахилалтын (Arc Discharge, AD), Уураас суулгах химийн (Chemical Vapor Deposition, CVD), Лазерийн (Laser Ablation, LA) гэсэн гурван үндсэн арга байдаг.

A. Уураас суулгах химийн CVD реактор

Манай улсын хувьд CVD аргаар ННХ үйлдвэрлэхэд шаардлагатай нүүрстөрөгчөөр баялаг хийг нүүрснээс хямд аргаар гаргах боломжтойг харгалзан бид эхлээд CVD урвалын бэсрэг реактор зохион бүтээж, олон давхар ханатай ННХ-ийг граммын хэмжээгээр үйлдвэрлэж эхлэх зорилго тавьсан юм. Бидний бүтээсэн CVD реактор нь хэвтээ болор хоолой хэлбэрийн зуух бөгөөд түүний нэг талаас аргон ба нүүрстөрөгч агуулсан хийг (угаарын хий, пропан, бутан, ацетилен гэх мэт) хольж оруулна. Хоолой дотор нано нунтаг катализатор бүхий шаазан завийг байрлуулсан байна. Холимог хий хоолойгоор урсан гарах замдаа өндөр температурт байгаа нано нунтаг катализатортай пиролиз урвалд орж катализаторын нано ширхгүүд дээр ННХ ургадаг[3].



Зураг 1а. Уураас суулгах химийн CVD реакторын бүдүүвч.



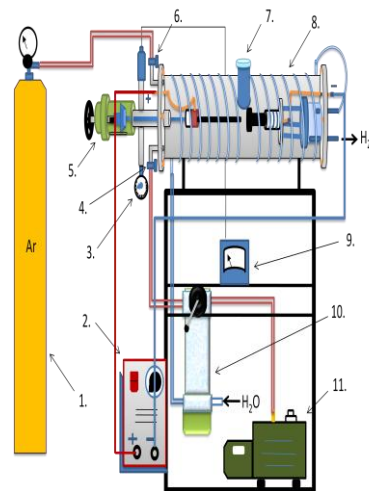
Зураг 1б. Уураас суулгах химийн CVD реакторын харагдах байдал: 1-халаагч утсаар ороогдсон хэвтээ болор хоолой, 2-аргон, устөрөгч, пропан-бутан хийнүүдийн урсгалыг тохируулж холин болор хоолойд оруулах хэсэг, 3- болор хоолойг халаах цахилгаан тэжээл, 4-хоолойгоос гарах халуун хийг тэсрэх аюулгүй зайлуулах хэсэг, 5-болор хоолой доторх орчны температурыг хянах термoxосын дижитал термометр, 6-болор хоолойноос гарган авсан урвалын бүтээгдэхүүн бүхий шаазан завь.

Олон давхар хана бүхий нунтаг ННХ гарган авах CVD процессийг явуулахдаа бид 100 мг хэмжээний CoO/Mg(Bayreuth University, Germany) нано нунтаг катализаторыг сонгон авч аргон ба бутан хийн 100 см³/минут орчим хурдтай 1:1 холимог урсгал доор 750⁰ C температурт нэг цаг байлган, нүүрстөрөгчийн пиролиз урвалыг явуулахад 500 мг хэмжээний урвалын бүтээгдэхүүн үүсэж байв.

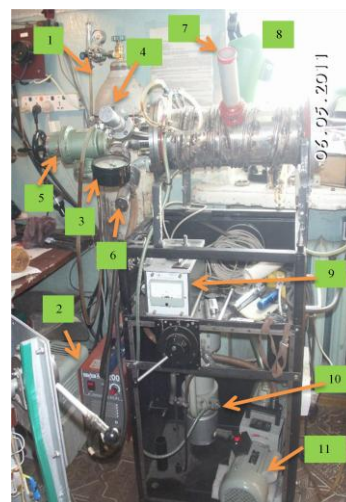
Б.Нуман цахилгалтын AD реактор

Аргон, гелий гэх мэт инерт хийн нам даралттай орчинд нүүрс-нүүрс эсвэл нүүрс-бал чулуун хос электродын хооронд 40-100A гүйдлийн хүчтэй тогтмол гүйдлийн цахилгаан нум үүсгэхэд катод дээр массын 50 хувь хүртэл ННХ агуулсан бүтээгдэхүүн үүсдэг. Манай улсад шөнийн цагаар цахилгаан эрчим хүчний үнэ хямд байдгийг харгалзан үзвэл ННХ-ийг цахилгаан нумын AD аргаар үйлдвэрлэх нь эдийн засгийн хувьд үр ашигтай байж болохыг

урдчилсан тооцоо харуулж байгаа учраас бид Нуман цахилгалтын AD реакторыг зохион бүтээсэн юм.

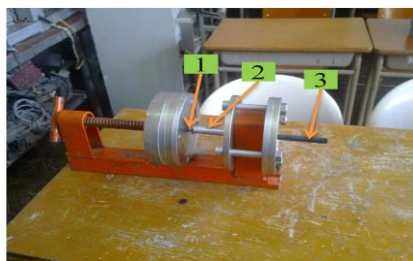


Зураг 2а. Нуман цахилгалтын AD реакторын бүдүүвч.



Зураг 2б. Нуман цахилгалтын AD реактор: 1- өндөр цэвэршилттэй аргон хий бүхий баллон, 2- 200 A хүртэл цахилгаан нум тэжээх гүйдлийн үүсгүүр, 3-манометр, 4-хийн 1-р хавхлаг, 5- анод электродыг шилжүүлэгч механизм, 6-хийн 2-р хавхлаг, 7-AD камерийн цонх, 8- AD камер, 9-термoxос бүхий вакуумметр, 10- диффузын насос, 11-форвакуумын насос.

AD процесст ашиглах анод электродыг бид эх орныхоо Алаг Толгойн нүүрсний уурхайгаас олборлон гаргасан нүүрсийг бутлуураар нунтаглаж, нунтаг нүүрсээ битумийг уусгасан толуолын уусмалтай 2:1 харьцаагаар холин зуурч зуурмаг бэлтгээд, уг зуурмагаа өөрсдийн зохион бүтээсэн тусгай шахагчийн тусламжтайгаар шахаж бэлдсэн юм.



Зураг 3. Электрод шахан хэвлэгч төхөөрөг: 1- 1см-ийн диаметртай төмөр саваа, 2- Дотоод диаметр нь 1см бүхий төмөр хоолой, 3-Шахагдан гарч буй нүүрсэн электрод.

Харин AD процессийн катод электродоор 99,9%-н цэвэршилттэй бал чулуун савааг сонгон авсан. Шахмал нүүрсэн электрод 12,5см урттай, 10 мм диаметртай, 10,8 г жинтэй байв. Уг шахмал электродын цахилгаан эсэргүүцэл нь хязгааргүй байсан учраас түүнийг инерт хийн орчинд дулааны боловсруулалтад оруулж түүнээс органик дэгдэмхий нэгдлүүдийг нь зайлуулан цахилгаан эсэргүүцлийг нь бууруулах шаардлагатай тулгарсан юм. Иймээс бид 900°C хүртэл халах чадвартай бичил зуухыг зохион бүтээж, шахмал нүүрсэн электродоо аргон хийн орчинд 862°C температур хүртэл шат дараалалтайгаар 6-8 цаг халаан дулааны бэхжүүлэлт хийсэн.



Зураг 4. Бичил зуух: 1- Зуухны их бие, 2- Зуухны температурыг хэмжигч дижитал термометр, 3- Аргон хийг халаагч дэн, 4-Аргон хийн урсгалыг хянах блок, 5- Зуухны цахилгаан тэжээл.

Дулааны бэхжүүлэлтийн дараа нүүрсэн электродын эсэргүүцэл 7 Ом, урт 10,5 см, диаметр 9 мм, жин 6,6 грамм болж өөрчлөгдсөн байв.



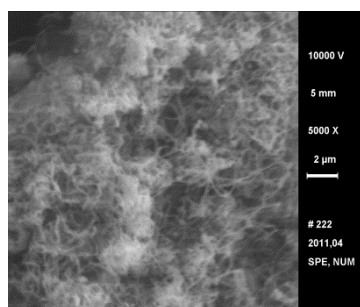
Зураг 5. Дулааны бэхжүүлэлтийн дараах шахмал нүүрсэн электрод.

Дулааны бэхжүүлэлтээр бэлтгэсэн шахмал нүүрсэн электродыг ашиглан 1 цагийн турш AD процессийг явуулахад 4 грамм орчим урвалын бүтээгдэхүүн үүсэж байв. AD процессийн үед электродууд хоорондох гүйдэл дундажаар 40А, хүчдэл дундажаар 37.3В, нуман цахилгалтын камерийн доторхи аргоны даралт дундажаар 445 Торр байв.

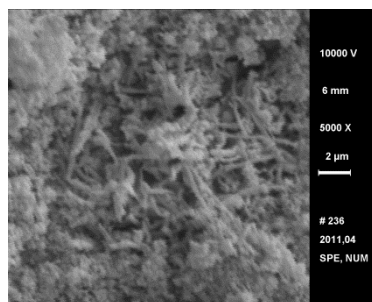
Ш.ҮР ДҮН

CVD болоод AD аргаар гарган авсан урвалын бүтээгдэхүүнүүдэд ННХ агуулагдаж байгаа эсэхийг тогтоох энгийн аргууд нь бүтээгдэхүүний SEM дүрсийг нь гаргах, ЭПР спектрийг нь хэмжих явдал юм.

Нэн түрүүнд бид урвалын бүтээгдэхүүнүүдийн бүтэц, морфологийг DSM 940-Carl Zeiss маркийн SEM-ээр хэмжсэн юм.

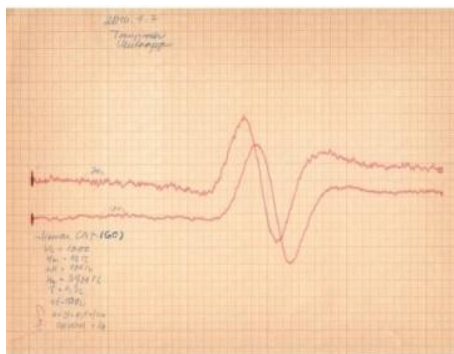


Зураг 6. CVD аргаар гарган авсан дээжийн SEM дүрс.



Зураг 7. AD аргаар гарган авсан дээжийн SEM дүрс.

Зураг 6-аас үзвэл ННХ-ийн нарийн утаслаг бүтэц, CoO/Mg катализаторын арал мэт бүтэц, харин зураг 7 дээр ННХ-ийн бүдүүн багц хэсгүүд болон нүүрстөрөгчийн бусад аморф бүтцүүд нарийн тод харагдаж байв. Дээжүүдийн SEM дүрсийг гарган авсаны дараагаар бид хоёроор гарган авсан дээжүүдийн ЭПР спектрийг СЭПР12 багажаар хэмжсэн юм.



Зураг 8. CVD аргаар CoO/Mg катализаторыг ашиглан гаргаж авсан дээжийн ЭПР спектр (ЭПР спектр дэх дээд ба доод муруйнуудын хувьд ЭПР дохио цуглуулах хугацаа харгалзан 30 ба 100 секунд байв).

Олон ханатай, цэвэршүүлээгүй ННХ-ийн ЭПР спектр бараг Лоренц хэлбэрийн $g = 2.014 \pm 0.002$ фактор бүхий $\Delta B = (50 \pm 5)$ Г хагас өргөнтэй шугам өгдөг [4]. Бидний гарган авсан бүтээгдэхүүний ЭПР спектрийн параметруудэнэ хязгаарт байсан ба олон ханатай цэвэршүүлсэн ННХ-ийн ЭПР спектрийг хэмжин харьцуулахад мөн ойролцоо байв. CVD аргаар гарган авсан дээжийн ЭПР спектрт ННХ-ийн шугам эрчим ихтэй байсан бол AD аргаар гарган авсан дээжийн ЭПР спектрт ННХ-ийн шугам сул, балархай байв. Энэ нь CVD аргаар гарган авсан дээж нь AD аргаар гарган авсан дээжээс ННХ-ийн агууламжаараа дор хаяж нэг эрэмбээр илүү байгааг харуулсан.

IV. ДҮГНЭЛТ

1. CVD болон AD аргаар ННХ гарган авах зорилго бүхий бэсрэг реакторуудыг зохион бүтээв.

2. 12,5 см урттай, 1 см диаметртэй цахилгаан дамжуулал бүхий шахмал нүүрсэн электродуудыг бэлтгэх пресслэгч төхөөрөг зохион бүтээв.

3. Шахмал нүүрсэн электродыг инерт хийн орчинд өндөр температурт (862°C) дулааны бэхжүүлэлт хийхийн тулд бичил халаагч зуухыг зохион бүтээв.

4. CVD төхөөргөөр ННХ гарган авах туршилтуудыг удаа дараалан гүйцэтгэж ННХ үүсэж байгааг SEM дүрс, ЭПР спектрийн хэмжилтээр харуулав.

5. CVD аргын хувьд катализаторын сонголтшийдвэрлэх үүрэгтэй нь харагдав.

6. Монгол орны Алагтолгойн чулуун нүүрсээр нуман цахилалтын аргад тохирсон нүүрсэн электродууд бэлтгэх аргыг боловсруулав.

7. Бэлтгэсэн нүүрсэн электродуудаа ашиглан нуман цахилалтын аргаар ННХ гарган авах цуврал туршилтуудыг удаа дараалан гүйцэтгэж, ННХ үүсэж буйг SEM дүрсээр харуулав.

8. CVD төхөөргөөр ажлын 8 цагт 2грамм ННХ агуулсан урвалын бүтээгдэхүүн, AD төхөөргөөр 4грамм урвалын бүтээгдэхүүн гарган авах бололцоотой байв.

АШИГЛАСАН НОМ, ХЭВЛЭЛ

1. Iijima, S., Helical microtubules of graphitic carbon. *Nature* (London, United Kingdom), 1991.354(6348): p. 56-8.
2. Ajayan, P. M., and Ebbesen, T. W. (1997). Nanometre-size tubes of carbon. *Rep. Prog. Phys.* 60, 1025-62.
3. M. Endo, K. Takeuchi, S. Igarashi, K. Kobori, M. Shiraishi and H. W. Kroto; The production and structure of pyrolytic carbon nanotubes (PCNTs), *Journal of Physical Chemistry Solids*, Vol.54, No.12, pp.1841-1848, (1993).
4. V. Djordjevic, J. Djutebek, J. Cveticanin, S. Velickovic, M. Veljkovic, M. Veljkovic, M. Bokorov, B. BabicStojic, O. Neškovic, Methods of purification and characterization of carbon nanotubes, *Journal of Optoelectronics and Advanced Materials*, Vol. 8, No. 4, August 2006, p. 1631 - 1634

Улаанбаатар хотод борлуулагдаж буй барилга ба тавилгын будгийн хар тугалга, кадмий, хром, селен, хүнцэл зэрэг хүнд элементүүдийг шинжилсэн дүнгээс

М. Мөнгөншагай, Т. Мянганбаатар, Ч. Дашжаргал, Х. Балт-Эрдэнэ,
Л. Ням-Очир, Л. Энхтөр, Р. Галбадрах*

Монгол Улс, Улаанбаатар-210646, Их Сургуулийн гудамж-1, Монгол Улсын Их Сургууль,
Физик электроникийн сургууль, Ерөнхий физикийн тэнхим,
*E-mail: rgalaa@yahoo.com

Энэ ажилд атомын шингээлтийн спектрийн аргаар Улаанбаатар хотод хамгийн ихээр борлуулагдаж буй 4 төрлийн 15 нэрийн тосон будаг, барилгын гадаад заслын 8 өнгийн усан охра будаг дахь хар тугалга, кадмий, хром, селен, хүнцлийн агууламжийг тодорхойлж, БНХАУ-д үйлдвэрлэгдсэн 3 төрлийн шар ба улаан өнгийн тосон будагт хар тугалгын агуулга 300-25000 мг/кг, хромын агуулга 1280-2820 мг/кг, хүнцлийн агуулга улбар улаан өнгийн охра будагт 740 мг/кг хүрч байгааг тогтоов.

PACS: 32.30.-r

І. БАРИЛГА, ТАВИЛГЫН БУДАГ ХҮНИЙ ЭРҮҮЛ МЭНДЭД НӨЛӨӨЛӨХ НЬ

Барилгын дотоод засал ба тавилгын тосон будаг нь уусгагч, хатууруулагч, өнгө оруулагч (пигмент) гэсэн үндсэн 3 хольцоос тогтсон өтгөн зурамтгай шингэн юм. Будгийн уусгагч ба тогтворжуулагч нь ацетон, формальдегид мэтийн ууршилттай органик нэгдлүүд бөгөөд будах явцад ба будаг хатах үед ууршин агаарт их хэмжээгээр тархан амьсгалын замаар хүний биед орж толгой эргэх, дотор муухайрах зэрэг химийн хордлогын анхдагч шинж тэмдгийг өгдөг. Иймээс хатаж амжаагүй будаг бүхий өрөөний цонхыг онгойлгож орчны агааржуулалтыг сайжруулах, агаар шүүгч маск өмсөж ажиллах зэрэг энэхүү түр зуурын хордолтын аюулаас бүрэн сэргийлж болдог. Будгийн хатууруулагч олиф, лак нь дэгдэмхий биш, өнгөгүй, хоргүй органик нэгдэл юм. Харин будгийн өнгө оруулагч нь ихэвчлэн ямар нэг тод өнгөтэй эрдэс буюу чулуулгийг буталж тээрэмдэн гурил мэт нарийн ширхэгтэй болгосон нунтаг хольц байдаг. Энэхүү эрдэс, чулуулгийн гаралтай пигментүүдийн найрлагад хүний эрүүл мэндэд хортой хүнд металлын нэгдлүүд, давснууд байх нь олонтаа бөгөөд барилгын хана, шалны будаг элэгдэж халцрахын хирээр хүмүүсийн ажил, амьдралын орчинд бичил тоосонцор хэлбэрээр тархан химийн хордолтын ямар нэг онцлох хурц шинж тэмдэг дагуулалгүйгээр он удаан жилээр аажим хордуулж архаг суурь өвчин ба хорт хавдрын эх үүсвэрийг бий болгодог.

Эрдсийн гаралтай органик биш пигментүүд нь чихрийн манжингийн улаан, нэрсний хөх гэх мэт байгалийн гаралтай органик пигментүүдээс илүү бөх бат чанартай бөгөөд нарны хэт ягаан

туяа, чийг, температурын өөрчлөлтөөс болж задран өнгөө алдаж ганддаггүй тул барилгын дотоод, гадаад засал чимэглэл, гэр ахуйн тавилгын үйлдвэрлэл, уран зургийн салбарт эрт дээр үеэс хэрэглэж ирсэн юм. Хүний эрүүл мэндэд онц хөнөөлтэй хар тугалга (Pb), хром (Cr), кадмий (Cd), хүнцэл (As) зэрэг хүнд элементүүдийн [1] нэгдлүүдийг одоо хир нь будгийн пигмент болгон ашигласаар байна. Жишээ нь хромын шар (хар тугалгын хромат, $PbCrO_4$), тугалаган цагаан (хар тугалгын карбонат, $PbCO_3$), кадмийн шар (кадмийн сульфид, CdS), кадмийн улаан (кадмийн сульфоселенид, $CdS \cdot CdSe$), кадмийн ногоон (кадмийн сульфохромат $CdS \cdot Cr_2O_3$), хүнцлийн улаан (хүнцлийн сульфид, As_4S_4) зэрэг нь хүчиллэг ба шүлтлэг химийн түрэмгий орчин, гэрэл, чийг, температурын өөрчлөлтөд тэсвэртэй тул зам, гүүр, барилгын гадна тал, үйлдвэр, уул уурхайн тоног төхөөрөмж, агаарын ба усан онгоцны гадна тал зэргийг будахад хэрэглэдэг.

Манай улс нь хэрэгцээнийхээ бүх будгийг импортоор авдаг ба үүний дийлэнх нь БНХАУ - аас орж ирдэг. 2010 онд хилээр зөвхөн бөөнөөр орж ирж гаалийн бүрдүүлэлт хийгдсэн будгийн хэмжээ 70 гаруй тонн болсон бол хувь хүмүүс, жижиг компаниудын бага хэмжээгээр оруулж ирж байгаа будгийн хэмжээ гаалийн бүртгэл мэдээлэлд бараг өртдөггүй. “Барилгын тухай” Монгол Улсын хуулийн [2] 11.1.2-д “барилгын материал, бүтээгдэхүүн нь хүний амь нас, эрүүл мэнд, байгаль орчинд сөрөг нөлөөгүй байх” шаардлагыг хангасан байх тухай заасан байдаг хэдий ч Улаанбаатар хотын Сүхбаатар дүүргийн 10 дугаар хорооны нутаг дэвсгэрт буюу бидний хэлж заншсанаар 100 айл орчимд төвлөрсөн барилгын материалын

жигжлэнгийн ба бөөний худалдааны дэлгүүрүүдэд борлуулагдаж буй ямар ч будагт манай улсын харгалзах хууль ба стандарт шаардлагыг хангасан эсэх тухай ямар нэг дагалдах нотлох баримт бичиг байдаггүй. Иймээс манай худалдан авагч нар зөвхөн тухайн будаг үйлдвэрлэгчийн өөрийн үнэлгээ, чанарын баталгаа дээр тулгуурлан сонголтоо хийхэд хүрдэг байна. Бид энэ ажилдаа БНХАУ-аас улсаас импортоор орж ирдэг хамгийн их борлуулалттай 3 брэндийн (Honglian, Chulei, Shunshiyouqi) улаан, шар, ногоон, цэнхэр үндсэн 4 өнгийн 12 ширхэг барилгын дотор заслын тосон будаг, мөн ОХУ-ын “Ленинградские краски” брэндийн 3 өнгийн эмаль будаг, барилгын гадна өнгө заслын усан буюу охра будгийн (БНХАУ-ын үйлдвэрлэгч нь тодорхойгүй, задгай зарагддаг) 8 өнгийн дээжийг Улаанбаатар хотын 100 айл орчмын барилгын материалын дэлгүүрүүдээс худалдан авч тэдгээрт агуулагдах хар тугалга, кадмий, хром, селен, хүнцлийн хэмжээг атом шингээлтийн спектрийн (АШС) аргаар шинжлэн тодорхойлох, эдгээрт пигмент болгож хольсон эрдсийн талст бүтэц, нэршлийг рентген дифракцийн спектрийн (РДС) аргаар тогтоох зорилт тавьсан болно. Мөн МУИС-ийн төв байрны хойд жигүүрийн нөөц хаалганы хонгилын баруун хананы будгийн хуучин хөх ба шар давхрагуудыг $10 \times 10 \text{ см}^2$ орчим хэмжээтэй хусан авч шинжилсэн болно (Зур.1).

II. БУДГИЙН ДЭЭЖИЙГ ШИНЖИЛГЭЭНД БЭЛТГЭХ БА ШИНЖЛЭХ АРГА АЖИЛЛАГАА

Шинжилгээнд сонгон авсан будгийн дээж бүрээс бид 50-50,50 гр хэмжээтэй сорьцуудыг 0,1 мг-ын нарийвчлалтай аналитик жингээр (LC 3200D, Sartorius) жигнэн авч хатаагч шүүгээнд (Т6200, Heraeus) 200°C температурт 48 цаг хатаахад шинэ тосон будгийн жингийн алдагдал 75-50 % байв. Дараа нь сорьцуудыг шатаах зууханд (K1253F, Heraeus) хийж 600°C температурт 6 цаг шатааж органик хольцуудыг бүрэн зайлуулахад тосон будгийн жингийн алдагдал 10-20% байв. Шатааж үнсжүүлсэн эдгээр сорьцуудаас РДС -ийн шинжилгээнд (рентген дифрактометр PW 1800, Philips) 5-10 граммыг, АШС -ийн шинжилгээнд (атом шингээлтийн спектрометр Solaar 5M, Thermo Elemental) 100- 500 миллиграммыг тус тус жигнэн тасалж авсан болно. Үнсжүүлсэн сорьцыг цаашид боловсруулж баяжуулалгүйгээр РДС-ийн шинжилгээ хийсэн

бол АШС-ийн шинжилгээ хийх сорьцыг нойтон химийн аргаар задалж шингэрүүлсэн болно. Үнсэн сорьцыг бүрэн задалж шингэрүүлэхийн тулд сорьцыг бат бөх савд хүчилтэй хамт хийж битүүмжлэн гаднаас нь микро долгионоор үйлчлэн уусгаж задлах арга хэрэглэсэн болно. Ингэхдээ сорьцыг хүчил, шүлт, даралт, өндөр температурт тэсвэртэй тефлон бөмбөгт хийж дээр нь сулруулаагүй азотын хүчил (HNO_3) 4 мл, устөрөгчийн хэт исэл (H_2O_2) 1 мл, хлорлог хүчил (HClO_4) 1 мл тус тус нэмж хийгээд тефлон бөмбөгийг тусгай таглагчаар битүүмжлэнэ. Битүүмжилсэн тефлон бөмбөгүүдийг микро долгионоор задлагч (MLS 1200, Milestone) дотор байрлуулан 3 алхамт программын дагуу задаргааг гүйцэтгэсэн болно.



Зураг 1. Шинжилгээнд сонгон авсан тосон (а) ба усан охра (б) будгийн дээжүүд, МУИС-ийн төв байрны хананаас хуучин будгийн давхрагуудыг хусаж авсан байдал (в).

Сорьцуудыг 250Вт*5мин - 400Вт*8мин - 800Вт*10мин - 000Вт*60мин алхмаар задласны дараа бүрэн хөрж шингэрсэн сорьцыг 50 мл-ийн колбонд шүүгч цаасаар шүүн юүлж дээрээс нь 0,5М азотын хүчлийг

зурааст хэмжээнд хүртэл нэмж дүүргэсэн болно. Тундасгүй шахам тунгалаг уусмал болтлоо задарсан сорьцууд дахь кадмий, хар тугалга, хром, селен, хүнцлийн агуулгыг атом шингээлтийн Solaar 5M спектрометрээр эдгээр элементийн 0.05мг/л, 0.1мг/л, 0.2 мг/л, 0.5 мг/л, 1 мг/л, 2 мг/л (Cd, Se, As, Cr), 5 мг/л, 10 мг/л, 20 мг/л, 60мг/л (Pb) стандарт уусмалуудын атом шингээлттэй жишин хэмжих замаар тодорхойлов. Стандарт уусмалуудыг 100 мг/л стандарт эх уусмалуудаас (Merck, Геологийн төв лаборатори) 1микролитр нарийвчлалтай микропипеткээр тунлан авч 0.5М азотын хүчлийн усан уусмалтай тухайн харьцаагаар хольж сулруулах аргаар бэлтгэсэн болно. Хэмжилтийн параметруудийг Solaar 5M спектрометрийн програм хангамжийн өөрийн үндсэн сонголтын дагуу авсан ба атом шингээлт агуулгаас хамаарах муруй буюу жиших муруйнууд нь бидний өмнөх ажилд [3] харуулсантай төстэй байсан тул энд дахин үзүүлээгүй болно.

Будгийг 600 °C хүртэл өндөр температурт шатаах явцад пигментийн нэгдлүүд ууршин ба исэлдэн алдагдах боломжтой байдаг. Иймээс дээр өгүүлсэн шатааж үнсжүүлэх шатыг алгасан сорьцуудыг задлаж шингэн хэлбэрт оруулан АШС шинжилгээг хоёр дахь бүлэг сорьц дээр давхар хийсэн болно. Шатаалгүй

задлахаар жинлэж авсан хоёр дахь сорьцуудын анхны жин 0.49 - 0.57 гр байсан болно. АШС аргаар Cd, Se, As, Cr, Pb элементүүдийн агуулгыг тодорхойлоход шатаалгүй задласан сорьцууд дахь агуулга шатаасан сорьцуудын харгалзах агуулгаас 0-50% илүү байсан нь шатаалтын алдагдал мэдэгдэхүйц байсны илрэл юм. Сорьцууд дахь Cd, Se, As, Cr, Pb элементийн агуулга их байсан тул сорьцуудыг HNO_3 – ийн 0.5 М цэвэр усан уусмалаар 1-100 дахин шингэлэн хэмжих арга хэрэглэсэн болно. АШС хэмжилтийн харьцангуй алдаа $\pm 15\%$ -аас ихгүй болно. Будгийн стандарт дээж бидэнд олдоогүй тул хэмжилтийн абсолют алдааг үнэлэх боломжгүй байв. Гэхдээ бид АШС-ийн түгээмэл хэрэглэгддэг стандарт аргачлалаар[4] хэмжилтүүдийг хийсэн тул абсолют алдаа нь тохиолдлын харьцангуй алдаанаас хэтрэхгүй гэж үзэх үндэслэлтэй юм.

III. ШИНЖИЛГЭЭНИЙ ҮР ДҮН БА ХЭЛЭЛЦҮҮЛЭГ

Шатаалгүй задласан сорьцууд дахь Cd, Se, As, Cr, Pb элементүүдийн АШС хэмжилтээр олдсон агуулгуудыг сорьцуудын анхны жингийн (нойтон тосон будаг, хуурай охра) кг тутамд ноогдох мг-аар илэрхийлэн доор хүснэгтэд нэгтгэв.

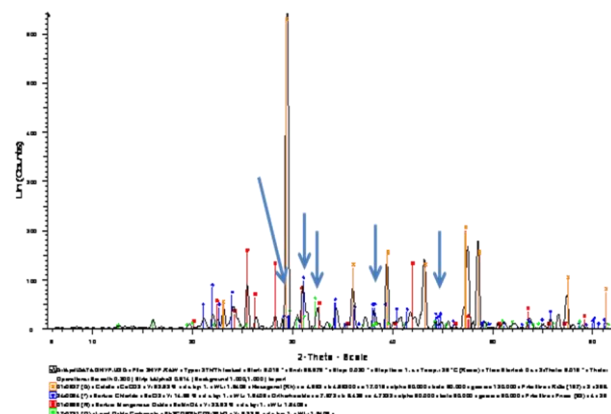
Сорьцын дугаар	Сорьцын нэр	Элементийн агуулга, мг/кг				
		Cd	Pb	Se	Cr	As
1	Honglian Улаан	1.1	314	50	68	0.0
2	Honglian Шар	1.1	13240	30	2170	0.0
3	Honglian Хөх	1.1	13.3	65	47	16
4	Honglian Ногоон	0.0	4760	0.0	1175	37
5	Chulei Шар	1.0	25480	26	2334	74
6	Chulei Хөх	1.1	5.8	38	16	7.2
7	Chulei Ногоон	1.1	0.2	51	2.9	29
8	Chulei Улаан	1.4	3571	88	93	57
9	Shunshiyuqi Шар	1.2	8826	28	1873	54
10	Shunshiyuqi Улаан	2.0	985	27	249	43
11	Shunshiyuqi Хөх	2.0	35	27	3.4	111
12	Shunshiyuqi Ногоон	1.8	6752	50	1657	0.0
13	Ленинградские эмали Улаан	1.2	1251	20	2.5	32
14	Ленинградские эмали Ногоон	1.5	838	1.0	3.5	35
15	Ленинградские эмали Хөх	1.7	1086	0.0	3.0	9.3
16	МУИС-ийн хананы будаг, Хөх	20	238	26	365	82
17	МУИС-ийн хананы будаг, Шар	12	1979	46	1277	110
18	Охра_ Ногоон_1	0.2	65	9.1	64	28
19	Охра_ Ногоон_2	0.3	151	23	33	26
20	Охра_ Ногоон_3	1.3	102	23	169	36

21	Охра_Гүн Хөх	< 0.05	8.9	20	13	35
22	Охра_Цайвар Цэнхэр	0.4	16	63	21	23
23	Охра_Шар	0.2	9086	56	2820	33
24	Охра_Улбар Улаан	2.1	2997	214	79	743
25	Охра_Хүрэн Улаан	< 0.05	723	172	218	18

Хүснэгт дэх өгөгдлүүдээс үзвэл 16 ба 17 дугаар сорьцонд (МУИС-ийн төв байрны хананы хөх ба шар будаг) кадмийн агуулга харгалзан 20 ба 12 мг/кг, бусад будгийн дээжинд 2 мг/кг-аас хэтрэхгүй байна. Кадмий ба түүний нэгдлүүд нь хавдар үүсгэгч В1 ангиллын маш хортой бодисууд юм [3]. Иймээс АНУ-ын Байгаль Орчныг Хамгаалах Агентлагийн (EPA, Environmental Protection Agency) тогтоосноор ажил, амьдралын орчны агаар дахь кадмийн хүлцэх агуулга (ХА) $0.06 \mu\text{g}/\text{m}^3$ буюу агаарын нэг метр кубд ноогдох кадмийн хэмжээ 0,06 микрограммаас хэтрэхгүй байх ёстой байдаг. Мөн хоол хүнсний хамт авч болох кадмийн хоногийн дээд тунг (ХДТ) 0.001 мг/кг гэж тогтоосон байдаг [5]. МУИС-ийн төв байрны хананы хуучин будгийн давхрага дахь кадмийн агуулга ХДТ-гээс хэдэн мянга дахин их байгаа нь хуучин будган давхрагыг хусах, зайлуулах ажиллагааны үед кадмийн өндөр агуулгатай тоосонцроор амьсгалах, хордох эрсдэлтэйг харуулж байна.

Хар тугалгын агуулга хятадын шар, улаан будагт маш их (300-25000 мг/кг), хөх будгуудад бага буюу 40 мг/кг - аас ихгүй байна. Хүний биед агуулагдах хар тугалгын хэмжээ ихсэхэд бага насны хүүхдийн тархи, мэдрэлийн систем, бөөрний хөгжил саатаж бие ба оюуны хомсдолд хүргэдэг бол насанд хүрэгсэдийн нөхөн үржихүйг саатуулж, цусны даралт ихсэх, ой тогтоомж муудах, үе мөч, мэдрэлийн өвчин тусах шалтаг болдог [6]. Иймээс 1978 онд АНУ-ын Хэрэглээний Бүтээгдэхүүний Аюулгүй Байдлын Комисс (CPSC, [Consumer Product Safety Commission](#)) хар тугалгын нэгдлүүдийг ахуй зориулалттай барилгын дотор тал, тавилга, хүүхдийн тоглоом зэргийг будах бүх төрлийн будагт хэрэглэхийг хорьсон юм. Бидний шинжилсэн шар, улаан өнгийн хятад тосон будагт хар тугалга ихээр агуулагдаж буй тул эдгээр будгаар зөвхөн барилга байгууламжийн гадна талыг будах боломжтой нь харагдаж байна. PW 1800 (Philips) рентген дифрактометрээр хийсэн талст фазын РДС шинжилгээний дүнгээс үзвэл (Зур.2) хар тугалга цэвэр карбонат биш исэлдсэн карбонат $\text{Pb}_3\text{CO}_5 \cdot 2\text{PbO}$ ба $\text{PbCO}_3 \cdot 2\text{PbO}$ хэлбэрээр

илэрч байгаа нь будгийн сорьцуудыг өндөр температурт шатааж үнсжүүлэх үед карбонатуудын зарим хэсэг исэл хэлбэрт шилжсэнтэй холбоотой юм.



Зураг 2. Сорьц 2 буюу Honglian (Шар) будгийн рентген дифракцийн спектр. Сумаар тэмдэглэсэн ногоон шугамууд нь хар тугалгын карбонатуудын $\text{Pb}_3\text{CO}_5 \cdot 2\text{PbO}$ ба $\text{PbCO}_3 \cdot 2\text{PbO}$ хэлбэрийн комплекс ислүүдийн шугамууд болно.

Хүснэгтээс үзвэл селений агуулга тосон будгийн сорьцуудад 90 мг/кг – аас ихгүй бол 24 ба 25 дүгээр сорьцонд (улбар улаан ба хүрэн улаан охра) тус тус 214 ба 172 мг/кг хэмжээтэй байна. Селен нь хүний биед бага хэмжээгээр агуулагдаж байх ёстой биологийн идэвхт элемент хэдий ч удаан хугацааны турш агаар, ус, хоол хүнс, эмээр авах хоногийн дундаж хэмжээ 0,4 мг - аас их үед үс, хумс унах, гар, хөлийн хуруунууд мэдээгүй болох зэрэг эмгэг үүсгэдэг [7]. Иймээс охра будаг байнга зарж борлуулдаг ба охра будгийн ажил хийдэг хүмүүсийн хувьд багагүй эрсдэл байгааг анхаарах ёстой.

Хромын агуулга шар ба ногоон тосон будаг, шар усан охра будагт (сорьц 2,4,5,9,12,23) 1175-2820 мг/кг хэмжээтэй илрэв. Зургаан валентат хромын (Cr(VI) буюу Cr^{6+}) нэгдлүүд нь эсийг генийн өөрчлөлтөд оруулж организмд олон төрлийн хорт хавдар үүсгэх аюултай тул 6 валентат хромын ХДТ нь АНУ-д насанд хүрсэн эрэгтэй хүний хувьд 35 μg , эмэгтэй хүний хувьд 25 μg гэж тогтоогдсон байдаг [8] EPA-гийн стандартаар ундны усан дах хромын нийт агуулга 0,1 мг/л –ээс хэтрэх ёсгүй [9] бол АНУ-ын

Хөдөлмөрийн Яамны Ажлын Байрны Эрүүл Ахуй, Аюулгүй Байдлын Захиргааны (OSHA, Occupational Safety and Health Administration) тогтоосноор ажлын байрны агаарт хромын агуулга $5 \text{ } \mu\text{g}/\text{m}^3$ –ээс ихгүй байх ёстой [10] байдаг болно.

Эндээс үзвэл гэр, байшингийн шалыг шар тосон будгаар будах уламжлалт хэвшлийн улмаас ахуйн нөхцөлд хромын хордолтын тодорхой төвшин бий болох бүрэн боломжтой гэдэг нь харагдаж байна. Жишээ нь сургуулийн ангийн шалны будгийг зуны амралтын үеэр жил бүр буддаг ба жилийн турш сурагчдын хөлөөр халцарч бичил тоосонцор хэлбэрээр ангид тархсан будгийн хэмжээг 1 кг гэж үзвэл энэ нь $1,28 - 2,82 \text{ г}$ хром агуулахаар байна. Энэ нь хромын хувьд АНУ-ын ХДТ ($35 \text{ } \mu\text{g}$) – аас $36600 - 80500$ дахин их гэсэн үг юм. Ангид хичээлтэй өдрийн тоо жилд 180 , нэг анги 40 сурагчтай гэвэл шалны будгийн элэгдэл халцралын улмаас хөдөлгөөнт хэлбэрт шилжиж байгаа хромын хоногийн дундаж хэмжээ дээрх ХДТ- гаас $200 - 450$ дахин их буюу нэг сурагчид $5-11$ дахин их ноогдоно гэсэн үг юм.

Хүнцлийн агуулга шинэ тосон будагт 111 мг/кг хүртэл (дундаж агуулга $33,6 \text{ мг/кг}$), улбар улаан охра будагт 740 мг/кг (сорьц 24) хүртэл байгаа нь их хэмжээний агуулга юм. Хүнцэл ба түүний органик биш нэгдлүүд нь маш хортой тул биеийн жингийн кг тутам $0,6 \text{ мг}$ нэг удаагийн тун авахад шууд үхэлд хүргэдэг, үүнээс бага тунгаар удаан хугацаанд хордвол арьс ба дотоод эрхтэний хорт хавдар үүсгэдэг, А ангиллын хор тул ЕРА нь ХДТ-гийн зорилтот утгыг тэг гэж тодорхойлсон байдаг [11]. Гэхдээ хүнцэл ба түүний нэгдлүүдийг электроник ба хагас дамжуулагчийн технологи, мод боловсруулалт, будгийн пигмент зэрэгт өргөн хэрэглэсээр байна. Үүнээс гадна хүнцэл нь уг элементийг агуулсан хөрс, чулуулгийн элэгдэл, угаагдал, галт уулын дэлбэрэлт, нүүрсний үнс, уул уурхай, металл хайлуулах үйлдвэрүүдээс тархаж агаар ба гадаргуугийн усанд байнга агуулагдаж байдаг. ЕРА нь ундны усны хувьд хүнцлийн хүлцэх агууламжийг $10 \text{ } \mu\text{g}/\text{литр}$ гэж тодорхойлсон бол $2 \text{ } \mu\text{g}/\text{м}^3$ хүнцэл агуулсан агаараар байнга амьсгалахад $1/100$ магадлалтайгаар хорт хавдарт хүргэнэ гэж тодорхойлсон байдаг. Бидний шинжилсэн тосон будгийн сорьцуудад хүнцлийн агуулга их, улбар улаан өнгийн охра будагт маш их буюу 700 мг/кг гаруй байгаа нь түгшүүр төрүүлэхүйц байна. Иймээс юуны түрүүнд эдгээр будгийн

хэрэглээг багасгах, ялангуяа байр, гэрийн шалыг шар, улаан өнгийн тосон будгаар буддаг хэвшлээс татгалзах, байшингийн гадна талын өнгө будагт улбар улаан охра хэрэглэхгүй байх, энэ талаар олон нийтэд ухуулан таниулах ажил хийх шаардлагатай юм.

ДҮГНЭЛТ

АШС ба РДС шинжилгээний дүнгээс үзвэл БНХАУ-ын нэр бүхий брэндийн шар ба улаан өнгийн тосон будагт агуулагдах хар тугалгын агуулга $300-25000 \text{ мг/кг}$, хромын агуулга $1280-2820 \text{ мг/кг}$, хүнцлийн агуулга 74 мг/кг хүрч байгаа нь эдгээр будгийг барилга, орон сууцны дотор талын өнгө будгийн ажил, тавилга будах зэргээр ашиглах нь хүнд элементүүдийн хордолтын байнгын тодорхой төвшин бүхий эрүүл ахуйн хувьд эрсдэлтэй орчин үүсгэхээр байна.

Цаашид эдгээр будагт агуулагдаж буй хар тугалга, хром, хүнцлийн хэмжээг бүр нарийвчлан тогтоож баталгаажуулах, хром нь хор ихтэй 6 валентат хэлбэрт байгаа эсэхийг, хүнцэл мөн хор ихтэй органик биш нэгдлийн хэлбэрт байгаа эсэхийг тус тус шинжилж тодорхойлох шаардлагатай байна. Эдгээр будгийн хэрэглээг багасгах арга хэмжээ авах, ялангуяа байр, гэрийн шалыг шар, улаан өнгийн тосон будгаар буддаг хэвшлээс татгалзах, энэ талаар олон нийтэд ухуулан таниулах ажил хийх шаардлагатай юм.

АШИГЛАСАН МАТЕРИАЛ, МЭДЭЭЛЛИЙН ЭХ ҮҮСВЭРҮҮД

1. <http://www.inchem.org/pages/icsc.html>
2. <http://lc.gov.mn/law/class/101/detail/1003230002/>
3. Т. Мянганбаатар, Л. Даваасүрэн, Б. Үлэмжсонин, Л. Энхтөр, Barbara Wick, Р. Галбадрах, Улаанбаатар хотод хамгийн их борлуулагдаж байгаа тамхины бүтээгдэхүүн дэх зэс, цайр, хар тугалга, кадмийн агуулгыг атомын шингээлтийн спектрийн аргаар тодорхойлсон дүн, МУИС-ийн ЭШБ (Физик) № 355 (16), хуу. 30-35, 2011
4. Analytical Methods for Atomic Absorption Spectroscopy, p. 310, Copyright © 1996, the Perkin Elmer Inc.
5. <http://www.epa.gov/ttn/atw/hlthef/cadmium.html>
6. <http://www.epa.gov/lead/pubs/leadinfo.htm>

7. <http://water.epa.gov/drink/contaminants/basicinformation/selenium.cfm>
8. Vincent, J. B., Recent advances in the nutritional biochemistry of trivalent chromium, Proceedings of the Nutrition Society, **63** (1), pp 41-47, 2007
9. <http://water.epa.gov/drink/info/chromium/index.cfm>
10. http://www.osha.gov/pls/oshaweb/owadisp.show_document?p_table=STANDARDS&p_id=13216

11. <http://www.epa.gov/ttn/atw/hlthef/arsenic.html>

Талархал

This work has been done within the framework of the project №7 (2011) supported by the Asia Research Center, Mongolia and Korea Foundation for Advanced Studies, Korea.

Determination Results of Heavy Contaminant Elements Lead, Cadmium, Chromium, Selenium, and Arsenic in Samples of Oil and Ochre Paint Brands Best Selling in Ulaanbaatar City Market Places

**M.Mungunshagai, T.Myanganbaatar, Ch.Dashjargal, Kh. Balt-Erdene,
L. Nyam-Ochir, L. Enkhtur, R. Galbadrakh**

*General Physics Department, School of Physics and Electronics, National University of Mongolia,
University street 1, Ulaanbaatar-210646, Mongolia,*

In this paper results of atomic absorption determination of heavy toxic elements Pb, Cd, Cr, Se, and As in 23 samples of best selling brands of oil and ochre paints in the Ulaanbaatar city are presented. High level of concentration 300-25000 mg/kg for lead, 1280-2820 mg/kg for chromium, up to 74 mg/kg for arsenic are detected in all samples of yellow and red color oil paints of 3 selected China's origin brands. Alarming high concentration of arsenic -740 mg/kg - is detected in yellowish red color ochre paint.

Электрофизические свойства полупроводниковых структур $n\text{-InSb}_{1-x}\text{Bi}_x\text{-i-GaAs}$ и $n\text{-InSb}_{1-x}\text{Bi}_x\text{-i-GaAs/Te}$

Шилагарди Г.^{1*}, Ярмолевич В.А.^{2**}, Прокошин В.И.³, Төмөрбаатар Д.⁴, Цооху Х.⁵,
Эрдэнэбаатар Д.¹, Хандма.Ц.¹

¹Монгольский Национальный Университет, Школа физики и электроники, Кафедра общей физики

² Республика Беларусь, Белорусский государственный университет,

³ Республика Беларусь, Белорусский республиканский фонд фундаментальных исследований,

⁴Монгольский Национальный Университет, Школа биологии, Кафедра биофизики,

⁵Монгольский Национальный Университет, Школа физики и электроники, Кафедра теоретической физики

*Э-почта: gshilagardi@yahoo.com

**Э-почта: mail.ru@vgs-05

I. ВВЕДЕНИЕ

Гетероструктуры $n\text{-InSb}_{1-x}\text{Bi}_x\text{-i-GaAs}$ приемлемого качества были получены более 30 лет назад японскими исследователями J.L. Zilko, J.E. Greene в работах [1,2]. При этом использовался метод эпитаксиального выращивания пленок в установке молекулярной эпитаксии в условиях бомбардировки низкоэнергетическими ионами висмута.

Нами был реализован метод получения тонких монокристаллических слоев твердых растворов InSb-InBi [3] и InSb-InBi/Te [4] на полуизолирующем арсениде галлия, который не требовал использования уникальной и дорогостоящей аппаратуры, такой как, установка молекулярной эпитаксии.

Гетероэпитаксальные структуры $n\text{-InSb}_{1-x}\text{Bi}_x\text{-i-GaAs}$, в том числе легированные теллуром, обладают высокой временной и температурной стабильностью. Они перспективны для изготовления первичных миниатюрных магниточувствительных преобразователей Холла с улучшенными характеристиками [5].

II. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЯ

В настоящей работе проведены электрофизические исследования процессов переноса заряда в условиях комплексного воздействия магнитных и температурных полей в гетероструктурах $n\text{-InSb}_{1-x}\text{Bi}_x\text{-i-GaAs}$ при ($0 \leq x \leq 0.013$), в том числе гетероструктурах легированных теллуром до концентраций $n = (0.7 \cdot 10^{18} - 9 \cdot 10^{18}) \text{ см}^{-3}$. Изучены температурные зависимости коэффициента Холла, электросопротивления и дифференциальной термо-эдс в указанных полупроводниковых гетероструктурах.

Процессы электропереноса заряда в гетероэпитаксиальных структурах узкозонных полупроводников имеют ряд особенностей, которые и были установлены. На рис.1 приведены температурные зависимости коэффициента Холла R_x . При низких температурах коэффициент Холла практически постоянен для легированных теллуром образцов, а его незначительное изменение с ростом температуры обуславливается вкладом собственных носителей заряда (линия 6). С ростом уровня легирования концентрация носителей заряда постоянна во всей температурной области (линии 7 и 8).

Температурные зависимости коэффициента Холла для образцов, содержащих висмут, имеют более сложный характер чем для InSb . Уже при $x = 0.2$ ат. % Bi проявляется тенденция к росту модуля коэффициента Холла с повышением температуры, а с увеличением концентрации висмута она становится более выраженной. Вероятней всего, что это связано с донорным характером примесных атомов висмута при их расположении в междоузлиях. Повышение температуры способствует переходу в узлы кристаллической решетки, где они не создают донорных уровней, будучи изовалентны с сурьмой. В результате концентрация носителей заряда уменьшается, а коэффициент Холла растет. Некоторое уменьшение R_x при температурах выше 100°C обусловлено увеличивающимся вкладом тепловой генерации собственных носителей заряда.

Более сложная зависимость удельного электросопротивления ρ от температуры представлена на рис. 2. Она обуславливается температурными изменениями как концентрации электронов $n = -(eR_x)^{-1}$, так и изменениями их подвижностей μ . С увеличением температуры подвижность

носителей заряда снижается из-за возрастания рассеяния электронов на фононах. Увеличение удельного электросопротивления с ростом концентрации висмута (линии 1 и 2) обусловлено преимущественно падением подвижности электронов, а не повышением концентрации носителей заряда. В то же время уменьшение удельного электросопротивления для образцов легированных теллуром в основном обусловлено ростом концентрации носителей заряда из-за донорных свойств атомов теллура (линии 3 и 4). Т.к. удельное электросопротивление $\rho = (en \cdot \mu)^{-1}$, то все особенности поведения концентрации n и подвижности μ проявляются и в зависимостях ρ от температуры.

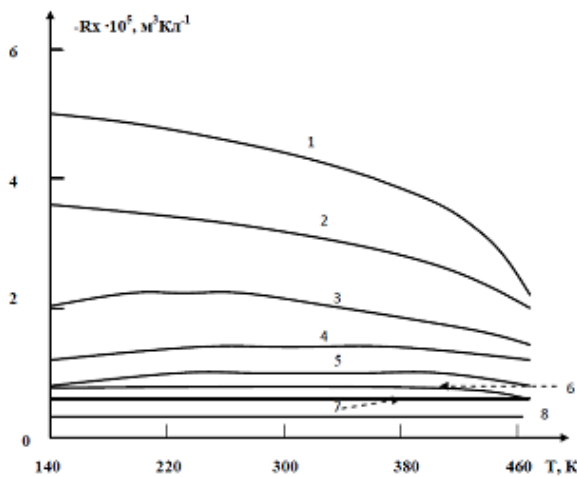


Рисунок 1 – Зависимость коэффициента Холла от температуры для структур $n\text{-InSb}_{1-x}\text{Bi}_x\text{-i-GaAs}$, в том числе легированных Те

1- $x=0,0$ ат.% Bi, 2- $x=0,1$ ат.% Bi, 3- $x=0,2$ ат.% Bi
4- $x=0,35$ ат.% Bi, 5- $x=1,2$ ат.% Bi, 6 и 7, а так же 8 – легированные Те до $n=7,68 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ и $n=1,02 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$; $n=5,1 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ соответственно.

На рис. 3 представлены зависимости подвижности электронов μ . С увеличением концентрации висмута наблюдается уменьшение подвижности, что связано с дополнительным рассеянием электронов на искажениях решетки, которые вносятся атомами висмута, растягивающие решетку InSb. Незначительное увеличение подвижности электронов с ростом температуры для образцов $n\text{-InSb}_{1-x}\text{Bi}_x\text{-i-GaAs}$ является результатом преимущественного рассеяния носителей на ионизированных примесях. Этими примесями могут быть ионы висмута, находящиеся в тетраэдрических порах InSb,

т.е. в междоузлиях, которые и образуют дополнительные донорные уровни. Для легированных теллуром образцов подвижность практически не зависит от температуры, что обуславливается вероятнее всего конкуренцией двух процессов: противоположными тенденциями в изменении подвижности, вызванными рассеяниями носителей заряда на фононах решетки и ионизированных примесях соответственно. А поскольку вклад в концентрацию носителей заряда из-за генерации собственных носителей заряда является несущественным, то и удельное электросопротивление образцов, легированных теллуром, практически не изменяется с температурой.

Одним из параметров, чувствительных к концентрации висмута, является коэффициент термо-э.д.с. α , что представлено на рис. 4. В области температур (77 – 200) К наблюдается близкая к линейной зависимость термо-э.д.с. от температуры, что согласуется с электронной теорией. С повышением температуры до 300К функция $\alpha(T)$ стремится к насыщению из-за тепловой генерации электронов. С ростом концентрации висмута образуется дополнительное количество донорных уровней, что и приводит к уменьшению модуля коэффициента дифференциальной термо-э.д.с. Температурные изменения коэффициента дифференциальной термо-э.д.с. образцов гетероструктур легированных теллуром аналогичны изменениям в нелегированных образцах.

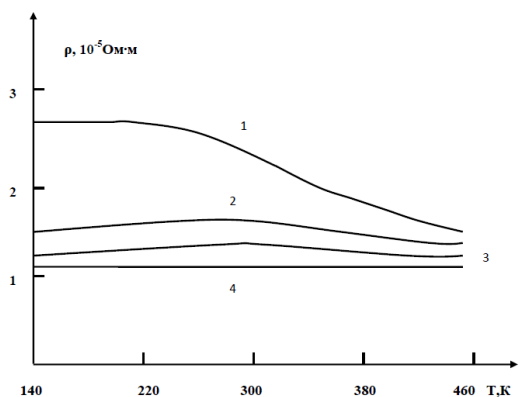


Рисунок 2 – Зависимость удельного электросопротивления от температуры для структур $n\text{-InSb}_{1-x}\text{Bi}_x\text{-i-GaAs}$, в том числе легированных Те

1- $x=1,2$ ат.% Bi, 2- $x=0,2$ ат.% Bi,
3 и 4 – легированные Те до $n=7,68 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ и $n=1,02 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ соответственно

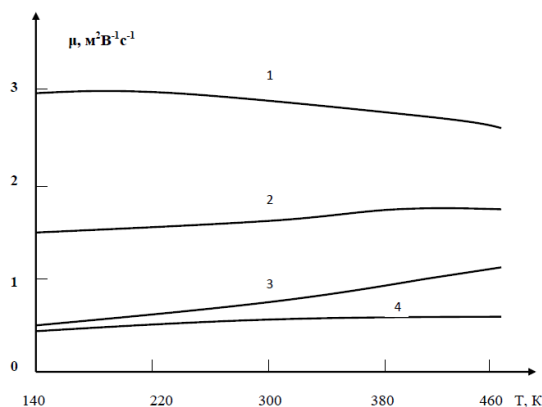


Рисунок 3 – Зависимость подвижности электронов от температуры для структур $n\text{-InSb}_{1-x}\text{Bi}_x\text{-i-GaAs}$, в том числе легированных Te

1- $x=0,0$ ат.% Bi, 2- $x=0,2$ ат.% Bi, 3- $x=1,2$ ат.% Bi
4- легированные Te до $n=1,02 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$

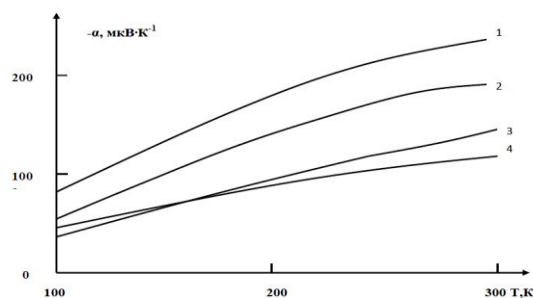


Рисунок 4 – Зависимость коэффициента дифференциальной термо-э.д.с. от температуры для структур $n\text{-InSb}_{1-x}\text{Bi}_x\text{-i-GaAs}$, в том числе легированных Te

1- $x=0,0$ ат.% Bi, $n=1,05 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$
2- $x=0,35$ ат.% Bi
3- $x=1,25$ ат.% Bi
4- легированные Te до $n=7,68 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$

СПИСОК ЦИТИРУЕМЫХ

ИСТОЧНИКОВ

1. Zilko J.L., Greene J.E. Growth and phase stability of epitaxial metastable $\text{InSb}_{1-x}\text{Bi}_x$ films on GaAs I. Crystal growth. *J. Appl.Phys.*, Vol 51.№3, (1980), p. 1549-1559.
2. Zilko J.L., Greene J.E. Growth and phase stability of epitaxial metastable $\text{InSb}_{1-x}\text{Bi}_x$ films on GaAs II. Phase stability, *J. Appl.Phys.*, Vol 51.№3, (1980), pp. 1589 – 1584.
3. Прокошин В.И., Драпезо А.П., Шилагарди Г., Х. Цооху, Ярмолевич В.А. Синтез и исследование свойств полупроводниковых структур $n\text{-InSb}_{1-x}\text{Bi}_x\text{-i-GaAs}$, перспективных для изготовления миниатюрных элементов Холла повышенной стабильности, *Наноструктуры в конденсированных средах. Сборник научных статей*, Минск, Изд. Центр БГУ, 2011, стр. 141-146.
4. Прокошин В.И., Ярмолевич В.А. Драпезо А.П., Шилагарди Г. Синтез и исследование свойств полупроводниковых структур $n\text{-InSb}_{1-x}\text{Bi}_x\text{-i-GaAs}$, в том числе легированных теллуром, перспективных для изготовления высокостабильных миниатюрных элементов Холла, *Сборник докладов Международной научн. конференции «Актуальные проблемы физики твердого тела», 18-21 октября 2011 г., Минск, в трех том. А.Н. Вркисин, Том 3, стр. 208-210*.
5. Прокошин В.И., Ярмолевич В.А., Драпезо А.П. Исследование стабильности датчиков Холла, изготовленных из полупроводниковых структур $n\text{-InSb}_{1-x}\text{Bi}_x\text{-i-GaAs}$. Материалы 4-й Международной научно технической конференции “Приборостроение 2011”, Минск, 2011, стр. 387-389

Метод синтеза полупроводниковых структур $n\text{-InSb}_{1-x}\text{Bi}_x\text{-i-GaAs}$, $n\text{-InSb}_{1-x}\text{Bi}_x\text{-i-GaAs/Te}$, перспективных для изготовления высокостабильных элементов холла

Шилагарди Г.^{1*}, Ярмолович В.А.^{2**}, Прокошин В.И.³, Төмөрбаатар Д.⁴, Цооху Х.⁵,
Эрдэнэбаатар.Д¹, Хандма.Ц¹

¹Монгольский Национальный Университет, Школа физики и электроники, Кафедра общей физики

² Республика Беларусь, Белорусский государственный университет,

³ Республика Беларусь, Белорусский республиканский фонд фундаментальных исследований,

⁴Монгольский Национальный Университет, Школа биологии, Кафедра биофизики,

⁵Монгольский Национальный Университет, Школа физики и электроники, Кафедра теоретической физики

*Э-почта: gshilagardi@yahoo.com

**Э-почта: mail.ru@vgs-05

I. ВВЕДЕНИЕ

Полупроводниковые твердые растворы InSb-InBi привлекают исследователей возможностью плавного изменения ширины запрещенной зоны E_g вплоть до нуля. Первыми структуры $n\text{-InSb}_{1-x}\text{Bi}_x\text{-i-GaAs}$ получили J. L. Zilko, J. E. Greene, используя метод эпитаксиального выращивания пленок в установке молекулярной эпитаксии в условиях бомбардировки низкоэнергетическими ионами висмута. Исследования пленок, полученных с помощью этого метода, показали присутствие метастабильных фаз, что резко сужает область практического использования этих гетероструктур. Кроме того в переходном (буферном) слое «пленка-подложка» возникают значительные механические напряжения, которые вызывают образование дислокаций, что значительно ухудшает структуру и уменьшает подвижность носителей заряда. В работе [1] использовался метод диффузионного насыщения висмутом заготовок $n\text{-InSb-i-GaAs}$ в вакуумированной кварцевой ампуле. При этом висмут распределялся неравномерно с убыванием к подложке. Наибольшее распространение получил метод жидкофазной эпитаксии [2], но при этом получают многослойные упругонапряженные гетерокомпозиции, а также более поздние его модификации. Гетероструктуры $n\text{-InSb-i-GaAs}$, в том числе легированные оловом, с приемлемыми

параметрами и перспективные для изготовления датчиков Холла были получены вакуумным напылением в [3]. Характеристики миниатюрных первичных преобразователей Холла на основе $n\text{-InSb-i-GaAs}$ (без висмута при толщине пленки InSb в 2–4 мкм) приведены в [4].

II. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ

Главная цель настоящих исследований – разработать метод получения гетероэпитаксиальных структур $n\text{-InSb}_{1-x}\text{Bi}_x\text{-i-GaAs}$, в том числе легированных теллуром, обладающих высокой подвижностью носителей заряда и высокой временной и температурной стабильностью и разработать лабораторную технологию группового изготовления первичных миниатюрных магниточувствительных преобразователей с улучшенными характеристиками и новыми функциональными возможностями.

Реализованный метод получения тонких монокристаллических слоев твердых растворов InSb-InBi [5] и InSb-InBi/Te [6] на полуизолирующем арсениде галлия не требовал использования уникальной и дорогостоящей аппаратуры, например, установки молекулярной эпитаксии. Формирование классического элемента Холла из указанных гетероструктур производилось стандартными методами микроэлектроники средней точности [7].

Таблица 1. Последовательность основных технологических операций была следующей,

При изготовлении миниатюрных элементов Холла из $n\text{-InSb}_{1-x}\text{Bi}_x\text{-i-GaAs}$	При изготовлении миниатюрных элементов Холла из $n\text{-InSb}_{1-x}\text{Bi}_x\text{-i-GaAs /Te}$
1	2
Реализация в три стадии, а именно: на первой стадии термическим напылением в вакууме изготавливаются гетероэпитаксиальные структуры $n\text{-InSb-i-GaAs}$, на второй стадии заготовки $n\text{-InSb-i-GaAs}$ вакуумируются в кварцевой ампуле вместе с навеской висмута и подвергаются термическому отжигу, при котором происходит процесс диффузионного насыщения висмутом и образуется пленочный сэндвич $n\text{-InSb}_{1-x}\text{Bi}_x \dots n\text{-InSb -i-GaAs}$ (пленочные образцы с неравномерным распределением висмута по глубине). На третьей стадии сэндвич подвергается длительному изотермическому отжигу в стандартной вакуумной камере при давлении $3 \cdot 10^{-4}$ Па с последующим медленным охлаждением. В результате термообработки происходит разгонка висмута практически на всю глубину пленки InSb вплоть до подложки из GaAs. При этом висмут распределяется практически равномерно по глубине с образованием твердых растворов $\text{InSb}_{1-x}\text{Bi}_x$ стехиометрического состава с электронным типом проводимости и величиной x, зависящей от температуры термообработки. Проведение экспресс-методики определения концентрации висмута в пленочных образцах, которая базирующаяся на изменении оптической ширины запрещенной зоны. Для этого снимались спектры ИК – поглощения при комнатной температуре. Формирование классического элемента Холла производится стандартными методами микроэлектроники средней точности. Выполняются следующие технологические циклы: - контактная фотолитография, включающая следующие основные операции: нанесение фоторезиста ФН-11 или ФН-15 на поверхность пленки InSb-InBi (установка фотолитографии и фотогравировки ЛФ-3, режимы - 200 об/мин, 20 секунд, транспортировка в светонепроницаемом контейнере), сушка фоторезиста	На первой стадии термическим напылением в вакууме изготавливаются гетероэпитаксиальные структуры $n\text{-InSb-i-GaAs}$ легированные теллуром в диапазоне концентраций носителей заряда $(0,7 \cdot 10^{18} - 9 \cdot 10^{18})\text{см}^{-3}$. На второй стадии заготовки $n\text{-InSb-i-GaAs}$, легированные теллуром вакуумируются в кварцевой ампуле вместе с навеской висмута и подвергаются термическому отжигу, при котором происходит процесс диффузионного насыщения висмутом и образуется пленочный сэндвич $n\text{-InSb}_{1-x}\text{Bi}_x \dots n\text{-InSb -i-GaAs}$, легированный теллуром. На третьей стадии сэндвич подвергается длительному изотермическому отжигу в стандартной вакуумной камере при давлении $3 \cdot 10^{-4}$ Па с последующим медленным охлаждением. В результате термообработки происходит разгонка висмута практически на всю глубину пленки InSb вплоть до подложки из GaAs. При этом висмут распределяется практически равномерно по глубине с образованием твердых растворов $\text{InSb}_{1-x}\text{Bi}_x$, легированных теллуром, стехиометрического состава с электронным типом проводимости и величиной x, зависящей от температуры термообработки. Проведение экспресс-методики определения концентрации висмута в пленочных образцах, которая базирующаяся на изменении оптической ширины запрещенной зоны. Для этого снимались спектры ИК – поглощения при комнатной температуре. Измерение коэффициента термо-э.д.с. α. Определение содержания висмута, по результатам обсчета рентгеновских дифрактограмм. Выполняются следующие технологические циклы (стандартными методами микроэлектроники средней точности): контактная фотолитография, включающая следующие основные операции: нанесение фоторезиста ФН-11 или ФН-15 на поверхность пленки InSb-InBi/Te (установка фотолитографии и фотогравировки ЛФ-3, режимы - 200 об/мин, 20 секунд, транспортировка в светонепроницаемом контейнере), сушка фоторезиста (сушильный шкаф, режимы - $90 \pm 5^\circ\text{C}$, 15 минут), экспонирование с хромовым шаблоном для

(сушильный шкаф, режимы - $90 \pm 5^\circ\text{C}$, 15 минут), экспонирование с хромовым шаблоном для миниатюрных элементов (4000 люкс, 1 минута) на установке средней точности ЭМ 526, проявление (толуол, 80 секунд), задубливание (не более 150°C, 30 минут), химическое травление при комнатной температуре под микроскопом МБС-3 в растворе винной кислоты или в СР4, промывка в трижды дистиллированной воде; - групповая резка миниатюрных магниточувствительных элементов на установке скрайбирования "Алмаз-1" (размер одного электронного элемента 0,5 x 0,5 мм, максимальная плотность элементов 400 см^{-2}); - приварка микроконтактов на установке сварки расщепленным электродом "Контакт -3А" (золотой микропровод, диаметром до 20 мкм, два токовых и два потенциальных вывода на каждом элементе, сварка 20-40 миллисекунд при электрическом напряжении на электроде 70-90 В). Элемент располагался на плоском специальном держателе (приклеивался каплей клея БФ-2), состоящем из четырех проводов марки ПЭЛШО в шелковой изоляции, диаметром 0.2мм, скрепленных эпоксидным универсальным клеем "ЭДП" ТУ 6-15-1070-02 и залуженных до образования плоских дорожек. - подгонка начального напряжения смещения (выходного напряжения в отсутствии магнитного поля) по мере необходимости осуществлялась механическим воздействием в области перехода пленки к контактным площадкам при включенном состоянии магниточувствительного элемента до величины менее 10 мкВ; - герметизация элемента Холла из $n\text{-InSb}_{1-x}\text{Bi}_x\text{-i-GaAs}$ осуществлялась двумя компаундами- первоначально "Эластосилом", затем смесью эпоксидного клея универсального типа "ЭДП" в соотношении 50% и талька - 50%.	миниатюрных элементов (4000 люкс, 1 минута) на установке средней точности ЭМ 526, проявление (толуол, 80 секунд), задубливание (не более 150°C, 30 минут), химическое травление при комнатной температуре под микроскопом МБС-3 в растворе винной кислоты или в СР4, промывка в трижды дистиллированной воде; групповая резка миниатюрных магниточувствительных элементов на установке скрайбирования "Алмаз-1" (размер одного электронного элемента 0,5 x 0,5 мм, максимальная плотность элементов 400 см^{-2}); - приварка микроконтактов на установке сварки расщепленным электродом "Контакт -3А" (золотой микропровод, диаметром до 20 мкм, два токовых и два потенциальных вывода на каждом элементе, сварка 20-40 миллисекунд при электрическом напряжении на электроде 70-90 В). Элемент располагался на плоском специальном держателе (приклеивался каплей клея БФ-2), состоящем из четырех проводов марки ПЭЛШО в шелковой изоляции, диаметром 0.2 мм, скрепленных эпоксидным универсальным клеем "ЭДП" ТУ 6-15-1070-02 и залуженных до образования плоских дорожек. -подгонка начального напряжения смещения (выходного напряжения в отсутствии магнитного поля) по мере необходимости осуществлялась механическим воздействием в области перехода пленки к контактным площадкам при включенном состоянии магниточувствительного элемента до величины менее 10 мкВ; - герметизация элемента Холла из $n\text{-InSb}_{1-x}\text{Bi}_x\text{-i-GaAs/Te}$ осуществлялась двумя компаундами- первоначально "Эластосилом", затем смесью эпоксидного клея универсального типа "ЭДП" в соотношении 50% и талька - 50%.
--	--

III. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЯ

Исследование временной стабильности магнитной чувствительности, механизмов деградации и статистики отказов миниатюрных элементов Холла проводились при повышенных температурах,

электрических и механических воздействиях. Использовалась методика ускоренных испытаний на надежность. Для испытаний был выбран диапазон температур, при котором соблюдается автомодельность процессов старения [7].

Установлено, что деградация пленочных элементов Холла является термоактивационным процессом. Это позволяет рассматривать температуру активной зоны элементов в качестве основного фактора, задающего темп их деградации. Накопленные отказы представительных выборок элементов Холла подчиняются логарифмически-нормальному распределению по времени наработки, что обусловлено исходной дисперсией распределения дефектов, ответственных за деградацию, а также

дисперсиями распределения температур и механических напряжений в активных зонах элементов Холла испытываемых выборок. Получено, что логарифмически-нормальное распределение не является достаточным основанием для вывода о единственности термоактивационной реакции, лимитирующей скорость деградации. Все признаки единственности могут выполняться только потому, что ускоренные испытания на долговечность реально проводятся в узком интервале повышенных температур $T = (50-80)^{\circ}\text{C}$, ограниченном сверху предельно допустимыми режимами и условиями ускоренных испытаний, а снизу предельным временем, реально отводимым на такие испытания. Вероятно, что только параллельные, или только последовательные ускоренные испытания недостаточны для достоверного установления коэффициентов форсирования (K_f), а, следовательно, для прогноза гамма-процентного ресурса элементов Холла на нормальные условия эксплуатации. Отсюда вытекает, что для повышения достоверности такого прогноза необходимо сочетание параллельных и последовательных ускоренных испытаний.

В процессе изотермических отжигов полупроводниковые элементы Холла деградируют монотонно. Монотонная деградация выражается в росте коэффициента расходимости, т.е. зависимости выходного сигнала от изменения направления магнитного поля на противоположное.

Квазистатические электровоздействия (плотности прямых токов меньше 10^4 A/cm^2) не изменяют термический характер монотонной деградации элементов. Этот результат согласуется с известными экспериментальными данными о том, что электровоздействия малого и среднего уровня мощности не влияют на термический характер деградации (ускорение деградации

вызывается только дополнительным разогревом элементов рассеиваемой электрической мощностью). Напротив, в процессе мощных импульсных электровоздействий коэффициент расходимости почти не изменяется, что говорит о слабой деградации периферии контактов. Вследствие неоднородного импульсного разогрева приборного кристалла температура центра магниточувствительного элемента оказывается на сотню градусов выше температуры его периферии. При этом вся пленка полупроводника на подложке попадает в зону действия термомеханических напряжений сжатия, не влияющих на скорость деградации. В итоге причиной «выгорания» элемента становится тепловая деградация центра, перерастающая в развитие электротепловой неустойчивости. Этот вывод подтверждается исследованиями по деградации центральных участков под микроскопом, отказавших при испытаниях на «выгорание».

Дисперсия распределения отказов классических элементов Холла по времени наработки связана с разбросами среди элементов выборки собственных механических напряжений.

Последовательный анализ процессов монотонной деградации и катастрофических отказов показывает, что увеличение электросопротивлений при наработке обусловлено ростом электрической неоднородности n-слоя из-за проникновения в него дефектов извне. Можно предположить, что такими дефектами являются дислокации. Источниками испускания дислокаций являются зародышевые микротрещины и скопления поверхностных дислокаций, внесенные в приборный кристалл при его скрайбировании и при сборке элемента. Высокая подвижность дислокаций обеспечивается, по-видимому, известным для ряда полупроводников электропластическим эффектом.

Измерены параметры тензочувствительности $n\text{-InSb}_{1-x}\text{Bi}_x\text{-i-GaAs}$ при $x=0$ в зависимости от концентрации носителей заряда, полученные в условиях упругих деформаций (растяжения – сжатия) подложки из $i\text{-GaAs}$ и коэффициенты аномального тензоэлектрического эффекта (необратимого), при которых начинаются отказы элементов Холла (таблица 2).

Зависимость электрических характеристик полупроводниковых элементов Холла от

внешних механических воздействий (аномальный тензoeлектрический эффект) вероятно, обусловлена пластическими деформациями золотого микропровода на контакте с InSb и (или) микропластическими деформациями полупроводника InSb на

неоднородностях структуры кристалла i-GaAs. Элементы, склонные к демонстрации аномальных тензoeлектрических эффектов, склонны также к ранним отказам при наработке.

Таблица 2. Тензoeлектрические параметры элементов Холла n-InSb на i-GaAs

Концентрация электронов, см^{-3}	Коэффициент тензочувствительности, минус S	Аномальный тензoeффект, диапазон S
$1,0 \cdot 10^{17} - 1,1 \cdot 10^{17}$	9,4 – 7,3	25 - 45
$1,3 \cdot 10^{17} - 1,5 \cdot 10^{17}$	6,0 – 5,6	
$1,8 \cdot 10^{17}$	4,8	20 - 28
$15 \cdot 10^{17} - 20 \cdot 10^{17}$	2,1- 1,8	12 - 15

Структурные неоднородности, вызывающие аномальные тензoeлектрические эффекты и провоцирующие ранние отказы, могут не присутствовать в элементе исходно, а развиться в процессе его наработки. Такому развитию способствуют электрические неоднородности активной зоны элемента Холла, локализуящие рассеиваемую электрическую мощность.

Опробована методика позволяющая выявлять потенциальные отказы полупроводниковых преобразователей Холла. В ее основе лежит проявления нестабильности нулевого сигнала полупроводниковых преобразователей Холла в процессе изготовления и испытаний, т.е. U_c при $B=0$ (внешнее магнитное поле отсутствует). Показано, что контроль нестабильности нулевого сигнала позволил реально прогнозировать возможные эксплуатационные отказы. Причина дрейфа нулевого сигнала полупроводниковых преобразователей Холла была установлена в процессе электротермотренировки. Дрейф $U_c(0)$ в 90% случаев обусловлен миграцией поверхностных ионов загрязнений.

ЛИТЕРАТУРА

1. Прокошин В.И., Шепелевич В.Г., Ярмолович В.А., Игнатенко Е.А. Распределение висмута в пленках InSb-InBi // Доклады АН БССР 1989 . Т. 32, №12. С. 1090–1092.

2. Акчурин Р.Х., Комаров В.В. Формирование многослойных упругонапряженных гетерокомпозиций методом жидкофазной эпитаксии. //Журнал технической Физики. 1997. Т. 67, №7. С.50–56.

3. Mironov O.A., Durov S., Igumenov V.T., Konstantinov V.M., Paramonov V.V., Zhang T., Cohen L.F. The sub-micrometer thickness n-insb/i-gaas epilayers for magnetoresistor applications at room temperatures of operation //Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, 2004. V20, No. 3–4. Pp. 523–526.

4. Прокошин В.И., Драпезо А.П., Ярмолович В.А. Новые методы контроля с помощью прецизионных механоэлектрических микропреобразователей //Наука и инновации. Научно-практический журнал 2008. №11. С. 69–71.

5. Прокошин В.И., Драпезо А.П., Шилагарди Г., Х. Цооху, Ярмолович В.А. Синтез и исследование свойств полупроводниковых структур n-InSb_{1-x}Bi_x-i-GaAs, перспективных для изготовления миниатюрных элементов Холла повышенной стабильности // Наноструктуры в конденсированных средах. Сборник научных статей, Минск, Изд. Центр БГУ, 2011 , С. 141-146.

6. Прокошин В.И. , Ярмолович В.А. Драпезо А.П., Шилагарди Г. Синтез и исследование свойств полупроводниковых структур n-InSb_{1-x}Bi_x-i-GaAs, в том числе

легированных теллуrom, перспективных для изготовления высокостабильных миниатюрных элементов Холла // Сборник докладов Международной научн. конференции «Актуальные проблемы физики твердого тела», 18-21 октября 2011 г., Минск, в трех том. А.Н. Вркисин ,Том 3, С.208-210 .

7. Прокошин В.И. , Ярмолович В.А., Драпезо А.П. Исследование стабильности датчиков Холла, изготовленных из полупроводниковых структур $p\text{-InSb}_{1-x}\text{Bi}_x\text{-i-GaAs}$.//Материалы 4-й Международной научно технической конференции «Приборостроение 2011». 16-18 ноября 2011, Минск, Республика Беларусь, БНТУ, С. 387-389.

Нейтронографические исследования внутренних деформаций, текстуры и свойств горных пород

Т.И.Иванкина¹, Т. Локаичек², А.Н.Никитин¹, Д. Сангаа^{1,3*}

¹Лаборатория нейтронной физики им.И.М.Франка,Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

²Институт геологии Академии наук Чешской Республики, г. Прага, Чехия

³Институт Физики и Технологии Академии наук Монголии, г. Улан-Батор, Монголия

*Э-почта sangaa@nf.jinr.ru

В работе анализируются принципиальные преимущества нейтронных методов, основанных на феноменальных свойствах нейтрона, позволяющие расширить круг решаемых проблем физики твердого тела, геологии и геофизики. В обзоре приведены результаты изучения особенностей текстурного строения горных пород и обусловленных ими физических свойств, например, анизотропии скоростей упругих волн при высоких гидростатических давлениях, пьезоэлектрических свойств некоторых горных пород, а так же магнитных и тепловых свойств.

Обсуждаются результаты исследования аномальных свойств некоторых горных пород, проявляющихся при повышенных температурах и давлениях и их возможное применение для физики разрушения и для развития моделей очагов землетрясений.

1.ВВЕДЕНИЕ

Задачи, решаемые методами нейтронографии, во многом аналогичны тем, которые решаются с помощью хорошо развитой и более доступной рентгенографии. Принципиальные преимущества нейтронных методов, основанных на феноменальных свойствах нейтрона, позволяют расширить круг решаемых проблем физики конденсированного состояния. Длина волны тепловых нейтронов соответствует типичным межатомным расстояниям в твердых телах. Это свойство нейтронов дает возможность исследовать структуру и кристаллографическую текстуру твердых тел, минералов и минеральных ассоциаций и их изменений под влиянием внешних воздействий. Благодаря высокой проникающей способности нейтронов могут быть исследованы большие по размерам образцы и получена информация о текстуре больших объемов в отличие от текстур локальных поверхностей, измеряемых рентгеновским методом.

В последнее десятилетие произошел выход на новый уровень нейтронографического текстурного анализа, применяемого в комплексе с другими физическими методами в отношении исследования свойств геологических материалов с целью решения фундаментальных задач геологии и геофизики [1].

Фундаментальной проблемой геологии является изучение на разных масштабных уровнях строения, закономерностей формирования и преобразования горных

пород литосферы в процессе ее эволюции. Изучение закономерностей и механизмов образования текстур формы и кристаллографических текстур в горных породах в ходе магматических, тектонических и метаморфических процессов при изменяющихся термодинамических условиях в литосфере составляет одну из основных задач в рамках данного направления.

Исследование связей между особенностями текстур разных минеральных фаз в породах и физико-химическими механизмами метаморфизма и других эволюционных процессов позволит подойти к пониманию явлений, которые с одной стороны видоизменяют состав, свойства, состояние пород, а с другой обеспечивают поразительную сохранность их отдельных свойств. Существенное продвижение при решении подобных задач произошло в результате активного использования в разных странах нейтронографического текстурного анализа, применяемого в комплексе с другими физическими и петрофизическими методами [1].

В настоящее время в геофизике сложилось представление о том, что кристаллографическая текстура является одним из основных факторов, контролирующих анизотропию горных пород [2-5]. Причем контрастность анизотропии находится в зависимости от степени упорядоченности кристаллитов, слагающих поликристаллический агрегат. Влияние кристаллографической текстуры на анизотропию физических свойств тем больше, чем ниже симметрия образующих материал

кристаллов и чем контрастнее их собственная анизотропия. Наиболее чувствительны к текстуре упругие свойства материалов (в первую очередь упругие постоянные) и магнитные свойства ферромагнетиков. Текстуры материалов, образованных кристаллитами с некубической решеткой, обуславливают проявление анизотропии теплопроводности, термического расширения, электропроводности и других характеристик.

II. ДИФРАКТОМЕТРЫ НА ИМПУЛЬСНОМ ИСТОЧНИКЕ НЕЙТРОНОВ ИБР-2 (ДУБНА, РОССИЯ)

К особенностям, определяющим методику и схему дифракционного эксперимента на импульсных источниках, можно отнести то, что реакторный импульс тепловых нейтронов имеет непрерывный спектр, скорость тепловых нейтронов невелика и есть возможность осуществить анализ энергии (или длины волны) нейтрона по времени пролета (Time-Of-Flight или просто TOF эксперимент).

Текстурный дифрактометр СКАТ [6] действует на пучке реактора ИБР-2 (ОИЯИ, Дубна, Россия). Вся его детекторная система, содержащая девятнадцать детекторов, расположена на монтажном кольце диаметром 2 м, аксиально симметрично нейтронному пучку. Результирующая времяпролетная база (расстояние между замедлителем и детектором) составляет 103.8 метра. Детекторы могут фиксироваться в любой позиции углового интервала 2π , охватываемого детекторным кольцом. Угол рассеяния для всех детекторов одинаковый ($2\theta = 90^\circ$). Исследуемый образец помещается в центре кольца и вращается в гониометре, который выдерживает вес аппаратуры до 30 кг, вокруг горизонтальной оси Z, расположенной под углом 45° к падающему нейтронному пучку.

Спектрометр СКАТ по сравнению с другими подобными приборами имеет ряд преимуществ:

- дифракционные пики, соответствующие конкретному значению d_{hkl} , регистрируются всеми детекторами в одинаковом положении (времяпролетных каналах) на всех дифракционных спектрах, полученных от измеряемого образца. Поэтому нет необходимости вводить поправки, зависящие от угла рассеяния и длины волны;
- поскольку угловой диапазон установки детекторов 180° , то для измерения полной

полюсной фигуры достаточно произвести однократное вращение образца в гониометре;

- важно то, что в центре детекторного кольца СКАТ образец можно окружать различными системами воздействий, например, нагревателями, камерами высокого давления, устройствами, создающими электрические и магнитные поля, и т. д.

Главным преимуществом текстурных TOF-дифрактометров, и СКАТа в том числе, состоит в одновременной регистрации различных полюсных фигур в доступное измерительное время. Это особенно важно для текстурных измерений низкосимметричных и многофазных геологических материалов [7,8]. Спектрометр СКАТ построен и введен в эксплуатацию взамен демонтированного дифрактометра НСВР, функционировавшего с 1988 по 1998 года [9].

В Лаборатории нейтронной физики им. И.М.Франка ОИЯИ (Дубна, Россия), начиная с 1997 года, на канале 7А ИБР-2 действует установка EPSILON для исследования локальных деформаций и напряжений. Благодаря длинной времяпролетной базе (около 102 м), на спектрометре достигается хорошее спектральное разрешение.

Работа дифрактометра EPSILON была протестирована на цилиндрическом образце мелового песчаника (кварц), который был продавлен через стальную трубу в течение 20 часов после извлечения, что позволило исследовать деформированные и релаксирующие части одного и того же образца [10]. Для двух взаимно перпендикулярных радиальных направлений цилиндра объем кристаллической решетки оказался значительно меньше в зажатой части образца, чем в свободной. Несмотря на то, что результаты не имеют окончательной интерпретации, влияние и важность текстуры для поведения деформаций/напряжений в горных породах является очевидным.

В настоящее время дифрактометр EPSILON проходит стадию модернизации, целью которой является оптимизация нейтроннодифракционных измерений для получения полного тензора деформации. Модернизированный Epsilon-MDS [11] включает девятно шесть детекторов, расположенных по кольцу, причем угол рассеяния для всех детекторов $2\theta = 90^\circ$. Это значит, что на дифракционных картинах от

каждого детектора все брэгговские рефлексы расположены в одинаковом положении, что является преимуществом новой детекторной системы. При этом достигается лучшее спектральное разрешение $3 \cdot 10^{-3}$.

III. КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ ТЕКСТУРЫ И УПРУГИЕ СВОЙСТВА ГОРНЫХ ПОРОД

Количественная информация о кристаллографической текстуре в виде функции распределения кристаллитов по ориентациям их кристаллографических осей (ФРО), восстановленных из дифракционных данных, позволяет провести моделирование скоростей упругих волн в поликристаллических текстурированных образцах. Оно предполагает вычисление компонент тензора упругих постоянных поликристаллических образцов известными методами усреднения на основе ФРО и упругих модулей порообразующих минералов и построение карт изолиний, отражающих распределение скоростей P -волн на сфере.

Результаты моделирования анизотропии упругих свойств можно показать на примере оливиносодержащих ксенолитов [12]. Рассчитанные карты изолиний пространственного распределения скоростей P -волн в системе координат, соответствующей положению образца в дифракционном эксперименте, показаны на рис.1. Табличные значения компонент тензора упругих постоянных оливина взяты из [13].

Для тех же образцов с помощью ультразвукового метода [14] были измерены скорости продольных упругих волн при различных всесторонних давлениях. Метод состоит в том, что в различных направлениях вдоль диаметра сферического образца осуществляется излучение и прием

ультразвуковых импульсов двумя пьезоакустическими преобразователями, имеющими точечный контакт с поверхностью. Электроакустические преобразователи движутся в плоскости, проходящей через ось вращения. Предложенная система позволяет измерять время пробега упругого импульса в любом направлении и вычислять значения скоростей. При вращении образца дискретно с шагом 15° получают совокупность данных из 150 точек, которые наносятся на стереографическую сетку, связанную с системой координат сферического образца. Следует заметить, что в одной системе координат построены модельные карты изолиний скоростей упругих волн и полюсные фигуры из дифракционного эксперимента.

Измерения скоростей распространения продольных упругих волн производились циклически, сначала при атмосферном давлении, затем при давлениях 10, 20, 50, 100, 200, 400 МПа.

В таблице 1 содержатся значения максимальных и минимальных скоростей продольных волн в образцах, а также значения коэффициентов анизотропии, которые рассчитывались по формуле

$$k = (V_{Pmax} - V_{Pmin}) / V_{Pmin} \times 100 \% . \quad (1)$$

Из таблицы 1 видно, что при атмосферном давлении все исследуемые образцы характеризуются высокой анизотропией скоростей P -волн.

На рисунке 2 представлены карты изолиний скоростей P -волн, построенные по экспериментальным данным, полученным при давлениях 0.1, 100 и 400 МПа для этих же образцов, которые отражают характер пространственного изменения упругой анизотропии породы с ростом давления.

Таблица 1. Экспериментальные значения скоростей продольных упругих волн и их анизотропия при различных всесторонних давлениях

Образец	Давление, МПа	$V_{p \max}$, км/с	$V_{p \min}$, км/с	k, %
9721	0.1	8.0	7.0	14
	100	8.2	7.3	12
	400	8.3	7.5	11
9722	0.1	9.4	7.6	24
	100	9.4	7.8	21
	400	9.6	7.8	23
	0.1	8.2	6.9	19

BQ4	100	8.8	7.9	11
	400	8.9	8.0	11
SEM1	0.1	6.5	6.0	8
	100	7.4	7.1	4
	400	7.9	7.5	5
ZB1	0.1	5.8	4.7	23
	100	7.8	7.3	7
	400	8.3	7.6	9

Образцы дунитов 9721 и 9722 обладают стабильными картинами распределения скоростей P -волн во всем диапазоне гидростатических давлений.

Для образца BQ4 конфигурация изолиний скоростей продольных упругих волн с ростом давления меняется, положения максимума и минимума (в большей степени) скоростей на стереографической проекции смещаются, но, начиная с давления 100 МПа и выше, картина, в основном, стабилизируется. При атмосферном давлении у образцов ксенолитов ZB1 и SEM1 (рис.2) на картах изолиний отсутствует закономерный характер распределений. С ростом давления изолинии приобретают более правильную, симметричную конфигурацию. Положения максимумов и минимумов скоростей смещаются, а в случае образца ZB1 даже меняются местами. С дальнейшим ростом величины всестороннего давления от 100 до 400 МПа карты пространственного распределения скоростей становятся более сглаженными.

Сравнение модельных распределений V_p (рис.1) с экспериментальными, полученными из ультразвукового эксперимента при давлении 400 МПа (рис.2), показывает их практическое совпадение, что является доказательством того, что упругая анизотропия этих пород при высоких давлениях обусловлена кристаллографической текстурой оливина. Некоторые отличия модельных и экспериментальных карт изолиний упругих волн, величин максимальных, минимальных скоростей и рассчитанных коэффициентов упругой анизотропии k можно объяснить следующей причиной. При моделировании скоростей P -волн в расчет принимался только один фактор, влияющий на упругую анизотропию объемного образца дунита или ксенолита, - кристаллографическая текстура. По-видимому, влияние текстуры формы или, наоборот, наличие беспорядочно

ориентированных дефектов даже при высоком всестороннем давлении может привести как к усилению анизотропии, обусловленной главным образом кристаллографической текстурой, так и к ее ослаблению.

IV. НЕЙТРОНОГРАФИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ЛОКАЛЬНЫХ И ОСТАТОЧНЫХ ДЕФОРМАЦИЙ И НАПРЯЖЕНИЙ В ГОРНЫХ ПОРОДАХ

Достижения физики разрушения и, особенно, целенаправленный лабораторный эксперимент сейсмологического типа уже сейчас позволяют качественно объяснить полученные полевые результаты и открывают новые возможности для прогностических исследований. В целом, уровень развития теории разрушения и представления об очаге землетрясения, современные лабораторные эксперименты и полевые наблюдения позволяют начать создание теории подготовки процессов землетрясений [15,16].

Для понимания физики разрушения таких неоднородных и анизотропных материалов, какими являются горные породы, необходимо тщательно исследовать закономерности появления трещин, начиная с масштабного уровня кристаллических решеток минералов и разрыва межатомных связей в зернограницном материале [17].

Применение рассеяния нейтронов позволяет измерить микродеформации и напряжения в локальных объемах, а также исследовать напряженно-деформированное состояние внутри образца в трех измерениях.

Измерения внутренних напряжений основываются на определении расстояния d между атомными плоскостями кристаллической решетки исследуемого материала по положению соответствующего брэгговского пика на спектре. Деформация решетки под воздействием напряжения приводит к сдвигу пика. Относительная

величина сдвига (относительная деформация)
 $\varepsilon = (d - d_0) / d_0$, где d_0 - межплоскостное

расстояние в образце без внутренних

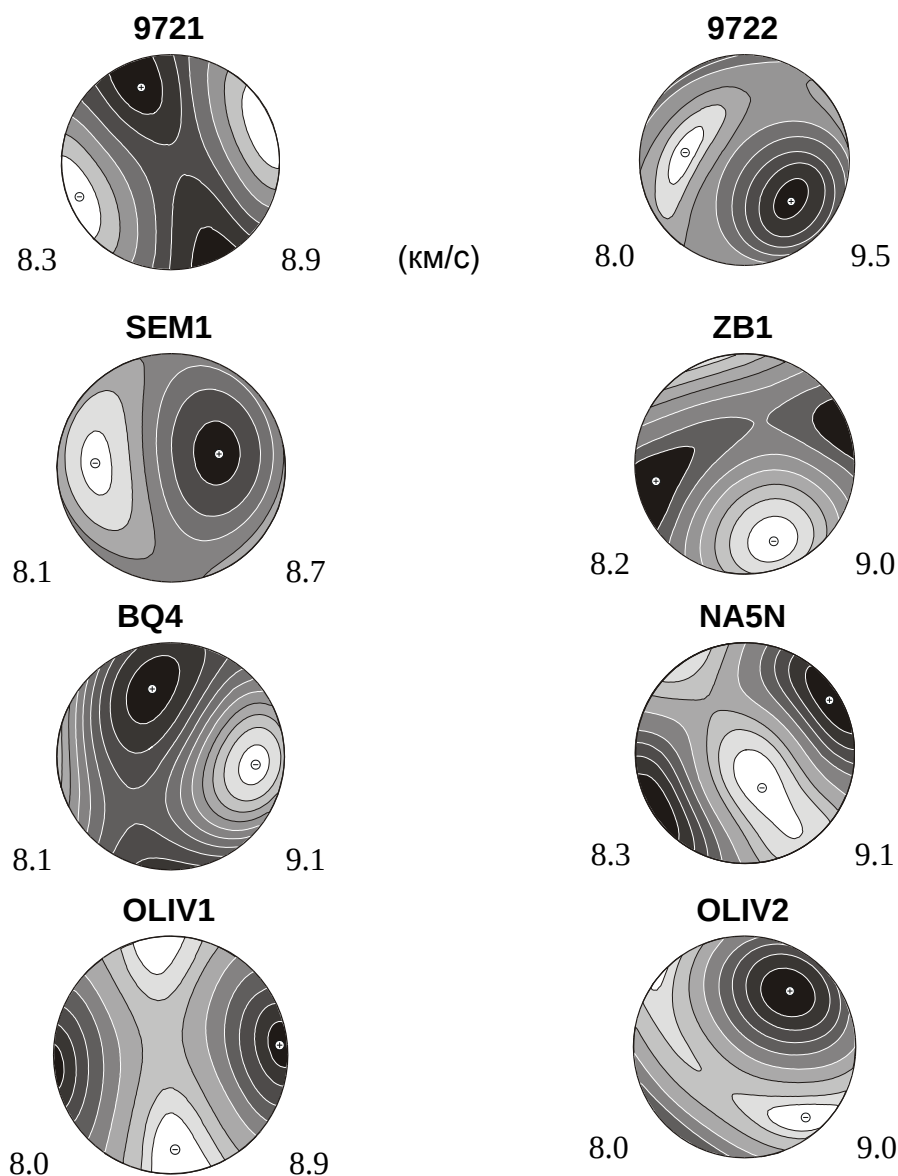


Рис.1. Карты изолиний скоростей продольных упругих волн исследованных оливинитов, рассчитанные с помощью ФРО.

механических напряжений, характеризует макроскопическую решёточную деформацию в направлении вектора рассеяния $\mathbf{Q}$ нейтронов, перпендикулярного к плоскости (hkl).

Наиболее перспективным направлением применения рассеянных нейтронов для исследования свойств геоматериалов является комбинирование текстурного анализа и измерений остаточных и решёточных деформаций в образцах. Значение таких измерений для решения геофизических проблем тем более возрастает, если они проводятся при разных (высоких) давлениях, температурах и внешних нагрузках.

Авторами [18] приводятся первые результаты измерений решёточных деформаций кристаллитов кальцита у образца мрамора, выполненные в ОИЯИ на специальной установке ТКОС (термоуправляемая камера одноосного сжатия) [19]. Камера ТКОС помещается в центре монтажного кольца спектрометра СКАТ таким образом, чтобы образец, подвергаемый нагреву и сжимающему усилию, был одновременно "видим" всеми девятнадцатью детекторами дифрактометра. Предельная температура для измерений в настоящее время составляет 650 °C. Существенной особенностью конструкции является возможность изменения

температуры и деформирующего усилия (измерения этих параметров) на образце непосредственно в нейтронном пучке. Нейтронные измерения решеточных деформаций на одном и том же образце мрамора при воздействии только одноосного сжимающего усилия и при одновременном воздействии одноосного сжатия и температуры обнаружили разные картины изменения решеточных деформаций и напряжений [20].

Времяпролетные нейтронодифракционные спектры регистрировались на установке EPSILON при разных внешних напряжениях в 25 МПа, 32 МПа и 77 МПа без нагрева образца и на экспериментальном комплексе СКАТ-ТКОС при температурах 120°C, 220°C и таких же по величине внешних напряжениях.

На рис. 3 представлены зависимости решеточных напряжений $\sigma_{lattice}$ в образце мрамора от внешней сжимающей нагрузки σ_{macro} , рассчитанные для трех кристаллографических направлений $(11\bar{2}3)$,

$(10\bar{1}4)$ и $(21\bar{3}1)$. При внешних сжимающих напряжениях -25, -32 и -77 МПа и комнатной и сжимающем напряжении -32 МПа достигает значения 162.4 МПа, что соизмеримо с пределом прочности мрамора (для разных мраморов предел прочности на сжатие σ_c лежит в интервале 180-300 МПа). В

направлении $(11\bar{2}3)$ напряжение $\sigma_{lattice}$ с

температуре величины решеточных напряжений зависят от кристаллографического направления, и во всех случаях они меньше внешних напряжений, прикладываемых к образцу. Это может быть объяснено тем, что мрамор является пористой горной породой, и что при небольших нагрузках, действовавших в опыте, деформация материала складывается из линейной составляющей кристаллической компоненты образца и нелинейной составляющей пористого пространства.

Другая картина наблюдается при одновременном воздействии механической нагрузки и тепла. Для тех же

кристаллографических направлений $(11\bar{2}3)$,

$(10\bar{1}4)$, $(21\bar{3}1)$. решеточные напряжения сильно различаются и существенно превосходят напряжения, приложенные к торцам образца. Это различие увеличивается с ростом температуры.

Решеточное напряжение в направлении $(10\bar{1}4)$ при температуре 220°C

ростом сжимающей нагрузки и температуры меняет знак при 220°C, а в направлении

$(10\bar{1}4)$ это происходит при более низкой температуре 120°C.

Таблица 2. Оценочные значения решеточных напряжений $\sigma_{lattice}$ и зафиксированных макронапряжений σ_{macro}

(hkl)	T, °C	$\Delta d \cdot d^{-1} \cdot 10^3$	E, ГПа	$\sigma_{lattice}$, МПа	σ_{macro} , МПа
$(10\bar{1}1)$	540	0.72	79.0	56.9	-25
	580	1.23	87.5	63.0	-25
	620	0.85	74.0	91.0	-26
	650	0.37	82.0	100.9	-26
$(10\bar{2}0)$	540	0.60	106.5	90.5	-27
	580	0.83	112.0	95.2	-27
	620	1.01	114.0	42.2	-27
	650		121.5	45.0	-27
$(10\bar{2}0)$	540	0.60	79.0	47.4	-25
	580	0.83	87.5	52.5	-25
	620	1.01	74.0	61.4	-26
	650		82.0	68.1	-26
$(10\bar{2}0)$	540	0.60	106.5	107.6	-27
	580	0.83	112.0	113.1	-27
	620	1.01			-27
	650				-27

	650	0.16	114.0 121.5	18.2 19.4	-27
--	-----	------	----------------	--------------	-----

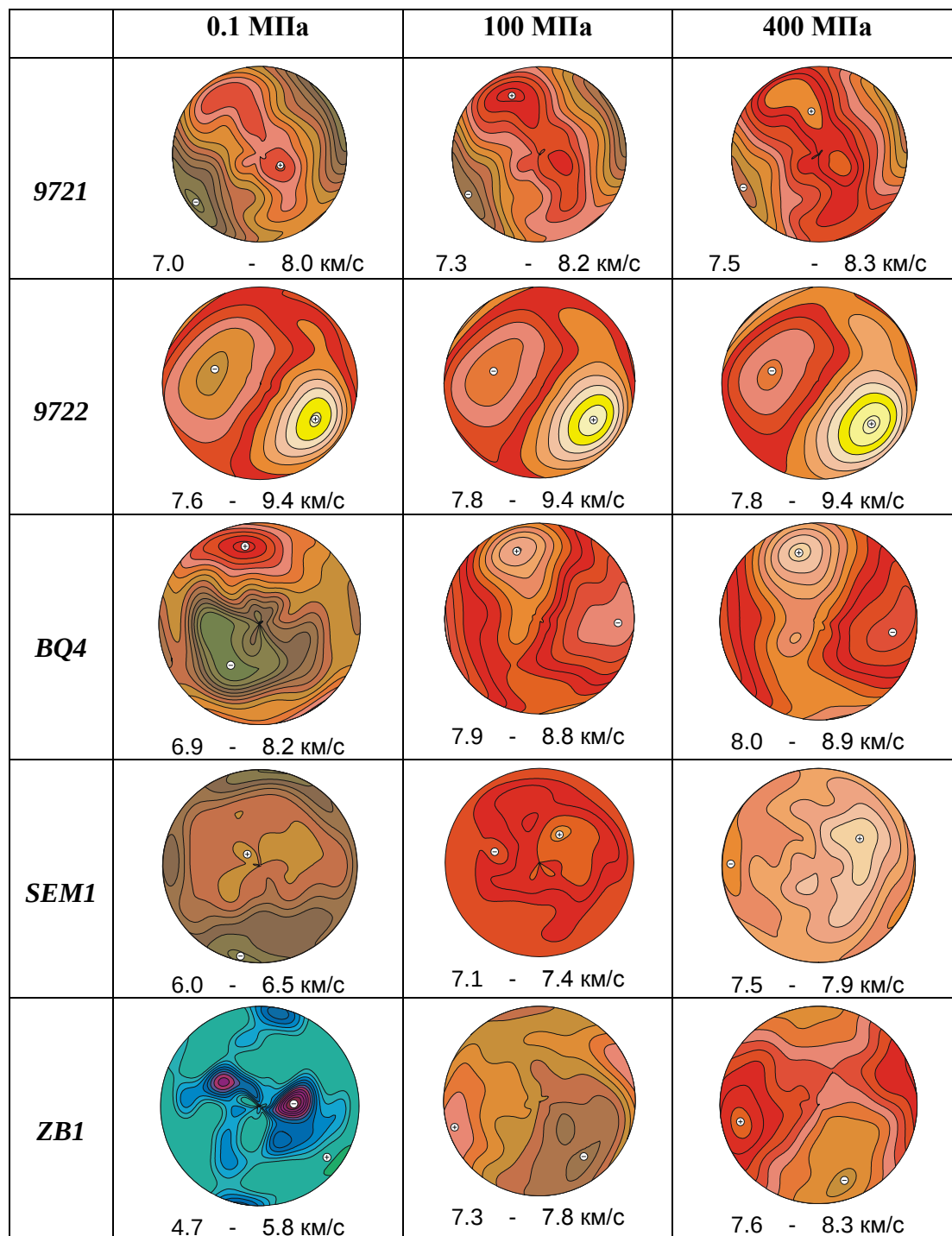


Рис.2. Карты изолиний скоростей продольных упругих волн образцов оливинитов при атмосферном давлении, а также 100 и 400 МПа.

Смену знака решеточных напряжений при непрерывном росте внешнего сжимающего усилия и повышении температуры можно объяснить разными знаками компонент тензора коэффициента теплового расширения кальцита, т.е. тепловое

расширение обуславливает деформацию со знаком "плюс" для некоторых кристаллографических направлений.

И, как видно из эксперимента, в кристаллитах возникает деформация

растяжения, противодействующая внешнему сжимающему усилию.

В работе [1] обсуждались причины и условия, при которых возможно возникновение больших локальных и решеточных напряжений в кристаллитах горной породы (мрамора). В проведенных опытах большие решеточные деформации не привели к тем напряжениям, которые рассчитаны по закону Гука, вследствие значительной концентрации пор. Тектурный эффект не играл здесь решающей роли, так как проведенный нейтронографический текстурный анализ образца выявил весьма слабую текстуру.

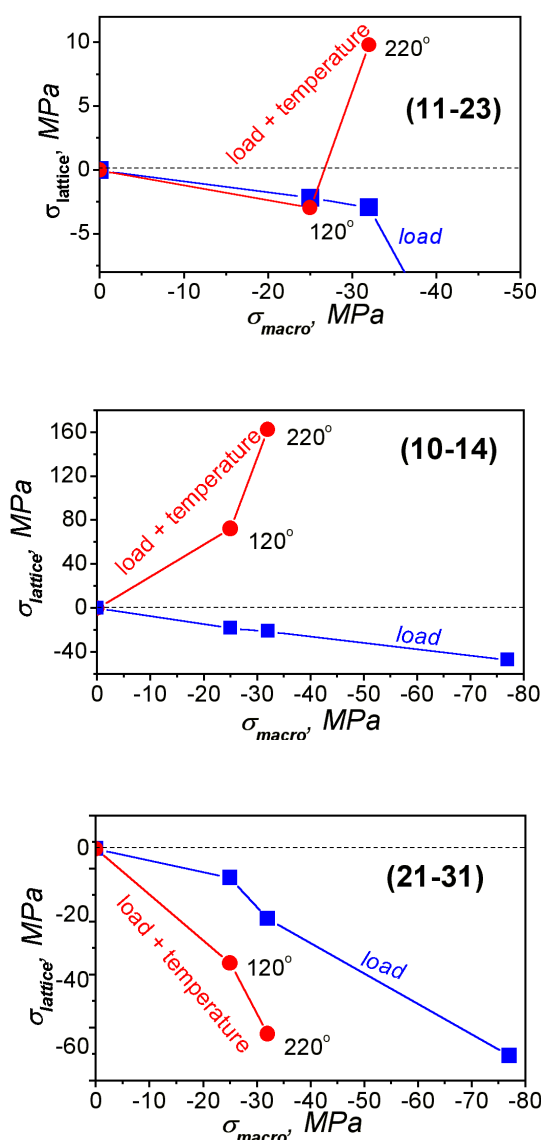


Рис.3. Зависимости решеточных напряжений $\sigma_{lattice}$ в мраморе от внешней сжимающей нагрузки σ_{macro} : прямоугольниками отмечены значения сжимающих напряжений при комнатной температуре, кругами – значения напряжений разного знака, возникающие при

одновременном воздействии механической нагрузки и повышенных температурах

В ЛНФ ОИЯИ (г. Дубна) на измерительном комплексе СКАТ-ТКОС были проведены нейтронографические исследования образцов Шокшинского кварцита с целью изучения аномального поведения поликристаллического кварца при термодинамических условиях α - β перехода.

В ходе эксперимента температура повышалась от комнатной до 540 °С, затем после стабилизации происходил ее циклический подъем до 650 °С, при этом проводилась регистрация дифракционных спектров (в течение одного часа) для значений температуры 540, 580, 620 и 650 °С. По данным дифракционных спектров рассчитаны зависимости смещения дифракционных максимумов на спектрах, их интенсивности и ширины от температуры и внешней нагрузки. Получены также значения коэффициентов теплового расширения и решеточных напряжений для различных кристаллографических направлений (таблица 2).

Из эксперимента, проведенного на поликристаллическом кварце, следует, что фазовый переход в нем происходит плавно, без скачка, в температурном интервале 560-620 °С. Температурная зависимость интенсивности и ширины нейтронных дифракционных спектров при фазовом переходе в образце поликристаллического кварца отличается от предсказанной для монокристалла. Значения и поведение коэффициента теплового расширения указывает на существенное влияние температурного режима фазового перехода на физические характеристики кварцита. Оцененные значения решеточных напряжений при температурах фазового перехода значительно (2-7 раз) превосходят макронапряжения от приложенной к образцу механической нагрузки, однако сильно снижаются после полного перехода кварцита в β -фазу.

Результаты нейтронного дифракционного эксперимента на образце кварцита, проводившегося в интервале температур, близких к температуре фазового α – β перехода в кварце, содержат выводы о резком уменьшении интенсивности рассеяния нейтронов и об аномальном изменении коэффициента теплового расширения и других физических свойств кварца. Высказано предположение о том, что

подобное аномальное поведение горных пород в условиях относительно невысоких давлений и температур может быть источником сильных концентраций локальных напряжений, приводящих к возникновению локальных деформаций и микротрещин.

V.ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Методы нейтронной физики открывают недоступные ранее возможности в лабораторных исследованиях геологических материалов, поскольку позволяют моделировать поведение горных пород в широком интервале температур и давлений, развивая междисциплинарные связи таких направлений в науках о Земле, как тектоника, петрология, теория сейсмической анизотропии, физика очага землетрясений и др. При этом прослеживается взаимосвязь между исследованиями по физике конденсированного состояния с актуальными исследованиями горных пород, минералов, осколков метеоритов и льдов, проводимыми методами нейтронографии.

Работы, относящиеся к исследованию зарождения разрушения в геоматериалах, можно считать теоретическим обоснованием нейтронографических исследований локальных деформаций и микронапряжений в горных породах. Экспериментально проверяемым может быть теоретическое представление, что в упруго-пластических геоматериалах при стеснении локализационная неустойчивость является одной из возможных форм первичной неустойчивости, и что она отличается от традиционной локализации сдвига-растяжения в тонких слоях.

Существенно, что нейтронно-дифракционные эксперименты с одновременной регистрацией акустической эмиссии позволяют наблюдать развитие процессов деформирования и трещинообразования на разных масштабных уровнях: от искажений кристаллической структуры до разрушения в масштабах образца. Эта особенность расширяет возможности для совершенствования уже известных моделей очага землетрясения и для формулирования принципиально новых представлений [21,22].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] *Соболев Г.А., Никитин А.Н.* // ЭЧАЯ. 32, 6, 1359(2001)
- [2] *Kocks U.F., Tomé C.N., Wenk H.-R.* Texture and anisotropy. Cambridge university press. 676 p.(1998)
- [3] *Баяк Е.И., Воларович М.П., Левитова Ф.М.* Упругая анизотропия горных пород при высоких давлениях. М: Наука. 169 с. (1982)
- [4] *Karato S.-I.* // in: Research in Mineral Physics. Orlando. FL: Academic Press. 455(1987)
- [5] *Александров К.С., Продайвода Г.П.* Анизотропия упругих свойств минералов и горных пород. Новосибирск. Изд-во СО РАН. 354с.(2000)
- [6] *Ullemeyer K., Spalthoff P., Heinitz J. et al.* // Nucl.Instrument Meth.Phys.Res. A. 412, 1, 80(1998)
- [7] *Feldmann K., Betzl M., Kleinsteinuber W. et al.* // Textures & Microstructures, 14-18, 59(1991)
- [8] *Ivankina T.I., Nikitin A.N., Locajicek T. et al.* // in : "Proc. ICOTOM-12", J.A.Szpunar, Ed. NRC Research Press, Ottawa, Canada. 2, 1587(1999)
- [9] *Вальтер К., Исаков Н.Н., Никитин А.Н. и др.* // Физика Земли. 6, 37(1993)
- [10] *Scheffzük Ch., Frischbutter A., Walther K.* // Schr. f. Geowiss. 6, 39(1998)
- [11] *Walther K., Frischbutter A., Scheffzük Ch.* // II German- Russian User Meeting "Condensed Matter Physics with Neutrons at IBR-2". Dubna, April 21-25. 6(2001)
- [12] *Никитин А.Н., Иванкина Т.И., Буриличев Д.Е. и др.* // Физика Земли. 1, 64(2001)
- [13] *Simmons G., Wang H.* Single crystal elastic constants and calculated aggregate properties: a handbook. Cambridge. Massachusetts. 370 p.(1971)
- [14] *Pros Z.* // in: High pressure and temperature studies of physical properties of rocks and minerals.Kiev: Naukova Dumka. 56 p.(1977)
- [15] *Райс Дж.* Механика очага землетрясения. М:Мир. 217 с.(1982)
- [16] *Касахара К.* Механика землетрясений. М:Мир. 263 с.(1985)
- [17] *Соболев Г.А., Никитин А.Н., Савелова Т.И. и др.* // Физика Земли. 1, 6(2001)
- [18] *Ivankina T.I., Nikitin A.N., Telepnev A.S. et al.* // High Pressure Research. 17, 335(2000)
- [19] *Widhalm C., Tshegg E., Eppensteiner W.* // J. Perform. Const. Facilit. ASCE. 10, 5(1996)
- [20] *Ivankina T.I., Nikitin A.N., Ullemeyer K. et al.* // Schr. f. Geowiss. 6, 49(1998)

[21] Никитин А.Н., Васин Р.Н., Балагуров А.М. др. Исследование тепловых и деформационных свойств кварцита в температурной области полиморфного α - β перехода методами нейтронной дифрактометрии и акустической эмиссии. Письма в журнал «Физика элементарных

частиц и атомного ядра», том 3, № 1(130) (2006)

[22] Родкин М.В., Никитин А.Н., Васин Р.Н. Сейсмоструктурные эффекты твердотельных превращений в геоматериалах. М.: Геос, 198 с. (2009)

Studies of Intracrystalline Strain, Texture and Properties of Rocks using Neutron Diffraction

T.I.Ivankina¹, T. Lokcajicek², A.N.Nikitin¹, D. Sangaa^{1,3}

¹Frank Laboratory of Neutron Physics, Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia

²Institute of Geology, Czech Academy of Sciences, Prague, Czech Republic

³Institute of Physics and Technology of Mongolian Academy of Sciences, Ulaan-Baatar, Mongolia

The principle advantages of neutron diffraction based on phenomenal properties of neutron which permit to extend a range of solid-state physics problem are analyzed in the paper in detail. The basic part of the review contains results of study of texture regularities of rocks and physical property peculiarities caused by them, for example, the behavior of elastic wave velocity at high hydrostatic pressures, the investigation of piezoelectric properties of rocks as well as magnetic and thermal properties. Results of study of anisotropic rock properties appeared at high temperatures and high pressures and their possible applications to physics of failure and to development of model of earthquake source are discussed.

Современная структурная нейтронография на импульсных источниках нейтронов

А.М. Балагуров¹, Д. Сангаа^{1,2*}

¹Лаборатория нейтронной физики им.И.М.Франка, Объединенный институт ядерных исследований, г. Дубна, Россия

²Институт Физики и Технологии Академии наук Монголии, г. Улан-Батор, Монголия

*Э-почта: sangaa@nf.jinr.ru

Рассмотрена ситуация с нейтронными дифракционными исследованиями кристаллов на импульсных источниках нейтронов. После изложения общих вопросов структурной нейтронографии с использованием метода времени пролета, рассмотрены особенности экспериментов с высоким разрешением на поликристаллических веществах, структурный анализ и специальные эксперименты на монокристаллах, исследования необратимых переходных процессов малой длительности и микрообразцов при высоких давлениях, а также использование дифракции нейтронов для решения прикладных задач.

1. ВВЕДЕНИЕ

Современная физика твердого тела это в основном физика кристаллов. Рассмотрение любых вопросов, связанных со свойствами кристаллов, начинается с рассмотрения их структуры. Соответственно, знание структуры кристаллов часто является определяющим моментом успешного решения многих фундаментальных и прикладных задач.

В структурном анализе кристаллов существуют задачи, решение которых рентгеновскими методами связано с большими трудностями, а иногда вообще невозможно на современном уровне техники эксперимента. В первую очередь к ним относятся определение положений легких атомов в окружении тяжелых, изучение структур, содержащих элементы с близкими атомными номерами, анализ магнитной структуры кристаллов, исследование теплового движения атомов и магнитных моментов в кристаллах. В этих случаях (и ряде других) наиболее эффективным экспериментальным методом оказывается рассеяние нейтронов низких энергий (их обычно называют “медленными”), взаимодействие которых с веществом имеет другую, нежели в случае рентгеновских лучей, природу. Нейтроны в веществе взаимодействуют как с ядрами, так и с электронами атомов. Амплитуда ядерного рассеяния определяется свойствами ядерных сил; она не спадает с увеличением переданного импульса и не зависит от атомного номера таким регулярным образом, как для рентгеновских лучей. Магнитное взаимодействие нейтрона с магнитными моментами атомов в настоящее время служит

основным источником информации о магнитных структурах.

Исключительно удачным обстоятельством является то, что для медленных нейтронов длина волны де Бройля по величине близка к межатомным расстояниям в кристаллах или жидкостях, а их энергия близка к кинетической энергии типичных атомных движений. Эти соответствия позволяют с помощью дифракции нейтронов определять атомную структуру вещества, а с помощью неупругого рассеяния нейтронов получать сведения о динамике атомов и магнитных моментов. Еще одним важным обстоятельством является то, что взаимодействие медленных нейтронов с веществом, как ядерное, так и магнитное, относительно слабо. Как следствие, в ходе экспериментов нейтроны не нарушают структуру и не изменяют химические свойства вещества. Кроме того, результаты нейтронных экспериментов поддаются сравнительно простой интерпретации, т.к. при вычислении сечения рассеяния достаточно ограничиться первым порядком теории возмущений. Слабое взаимодействие обуславливает и большую глубину проникновения нейтронов в образец, что позволяет исследовать объемные эффекты.

Отмеченные особенности взаимодействия нейтронов с веществом послужили основой для оформления нейтронографии (neutron scattering) как исключительно эффективного экспериментального метода исследования конденсированных сред. Традиционно в нейтронографии принято выделять (см., например, [1]) структурную нейтронографию (определение атомной или молекулярной структуры кристаллов), магнитную нейтронографию (определение магнитной структуры кристаллов) и нейтронную

спектроскопию (анализ атомной или магнитной динамики кристаллов). В настоящем обзоре рассмотрено современной состоянии структурной (и, в некоторой степени, магнитной) нейтронографии на импульсных источниках нейтронов. Примеры, которыми иллюстрируется изложение, взяты, в основном, из публикаций сотрудников Лаборатории нейтронной физики имени И.М.Франка, работающих на одном из лучших исследовательских нейтронных источников в мире – на импульсном реакторе ИБР-2 в ОИЯИ (Дубна).

II. СОВРЕМЕННЫЕ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЕ ИСТОЧНИКИ НЕЙТРОНОВ И НЕЙТРОННЫЕ ДИФРАКТОМЕТРЫ

Современные исследовательские нейтронные источники можно разделить на два принципиально разных типа – стационарные и импульсные. К первым относятся многочисленные ядерные реакторы, ко вторым – пока еще немногочисленные источники на основе протонных ускорителей (Spallation Neutron Source, далее SNS). И те, и другие в нейтронных лабораториях мира уже давно используются как стандартные источники: реакторы с 1950-х годов, SNS – со середины 1980-х. Из нестандартных источников следует упомянуть SINQ в PSI (Швейцария), который является SNS источником, но непрерывного действия [2], и ИБР-2 в ОИЯИ (Россия), который является ядерным реактором, но импульсным [3].

Среди импульсных источников нейтронов в настоящее время выделяют источники с коротким (ориентировочно с $\Delta t_0 < 50$ мкс) и с длинным импульсом (с $\Delta t_0 > 300$ мкс). Необходимость такого разделения связана с тем, что ширина импульса источника оказывает решающее влияние на разрешающую способность дифрактометра и соответственно на возможность проведения тех или иных экспериментов. К первому типу (их называют SPS – short pulse source) относятся все ныне действующие SNS (два в США, по одному в Великобритании и в Японии). Пока единственным действующим источником с длинным импульсом (LPS – long pulse source) является реактор ИБР-2, но уже обоснованы планы создания SNS с длинным импульсом, в частности, нового общеевропейского источника ESS (European Spallation Source), который начал сооружаться в Швеции [4]. Расчеты показали, что экономически это намного более выгодный

вариант, чем SPS, а формирование нейтронных импульсов с необходимой для экспериментов шириной можно реализовать с помощью механического прерывателя.

Схема экспериментальных залов на импульсном реакторе ИБР-2 приведена на рис. 1, где показаны расположенные вокруг реактора нейтронные спектрометры для различных типов исследований. Общее число спектрометров на импульсных источниках может достигать до нескольких десятков (около 30 на ISIS), причем при работе источника эксперименты ведутся одновременно на всех нейтронных спектрометрах.

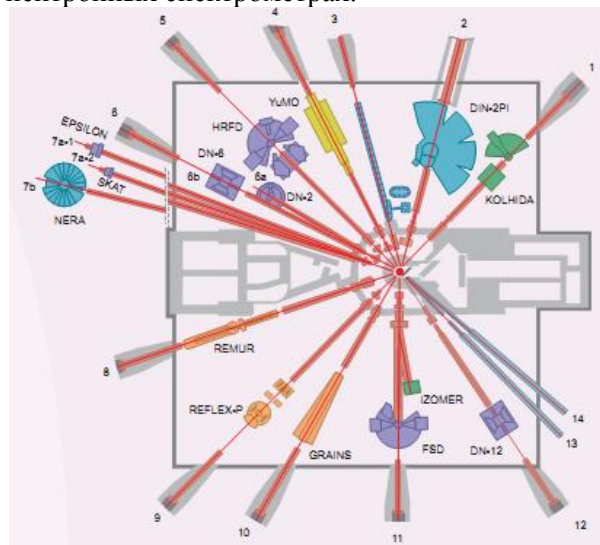


Рис. 1. Схема импульсного нейтронного источника ИБР-2, действующего в ЛНФ ОИЯИ (Россия). Реактор находится в центре, вылетающие из него нейтроны замедляются водяными или метановыми замедлителями до тепловых энергий и через каналы в защите попадают на спектрометры, расположенные вокруг мишени [3].

Тепловая мощность импульсных источников и, следовательно, выход нейтронов на них постоянно растут. Первые ускорительные импульсные источники нейтронов, созданные в начале 1980-х годов, работали при средней тепловой мощности всего несколько киловатт. На импульсном реакторе ИБР-2 ее удалось поднять до 2 МВт. Созданные в последние годы SNS в США и Японии действуют на мощности около 1 МВт, тогда как ESS планируется на среднюю мощность 5 МВт.

Известно, что нейтронные дифрактометры на стационарных реакторах фактически копируют схему рентгеновского дифрактометра: монохроматор посылает на образец узкую ($\Delta\lambda/\lambda \approx 0.01$) линию с длиной волны λ_0 , развертка дифракционного спектра ведется по углу рассеяния и осуществляется либо многосчетчиковыми, либо позиционно-чувствительными детекторами. Нейтронные

дифрактометры такого типа стали называть двусносными или “ λ_0 -дифрактометрами”.

Причинами, позволяющими организовать нейтронный дифракционный эксперимент существенно иначе, чем рентгеновский, является то, что энергетический спектр тепловых нейтронов из реактора имеет непрерывный (максвелловский) характер, скорость тепловых нейтронов невелика и есть возможность осуществить анализ энергии (или длины волны) нейтрона по времени пролета. В середине 50-х годов эти факторы были осознаны, что привело впоследствии к созданию нейтронных дифрактометров по времени пролета или “TOF-дифрактометров” (от термина Time-Of-Flight). Степень монохроматизации в этом случае зависит от ширины импульса источника и пролетного расстояния и может составлять $\sim 3 \cdot 10^{-4}$.

III. СПЕЦИФИКА НЕЙТРОНОГРАФИИ ПО ВРЕМЕНИ ПРОЛЕТА

Функциональная схема TOF-дифрактометра стандартна для нейтронных спектрометров, действующих по методу времени пролета: нейтроны от импульсного источника после замедления до тепловых энергий пролетают первичную базу, на которой происходит их коллимация и монохроматизация, рассеиваются на образце и под некоторыми фиксированными направлениями регистрируются детекторами (рис. 2). Устройство анализа записывает в оперативную память дифракционный спектр с разверткой по времени пролета нейтронов от замедлителя (или от дополнительного прерывателя) до детектора. Спектры от последовательных импульсов источника суммируются для накопления необходимой статистики.

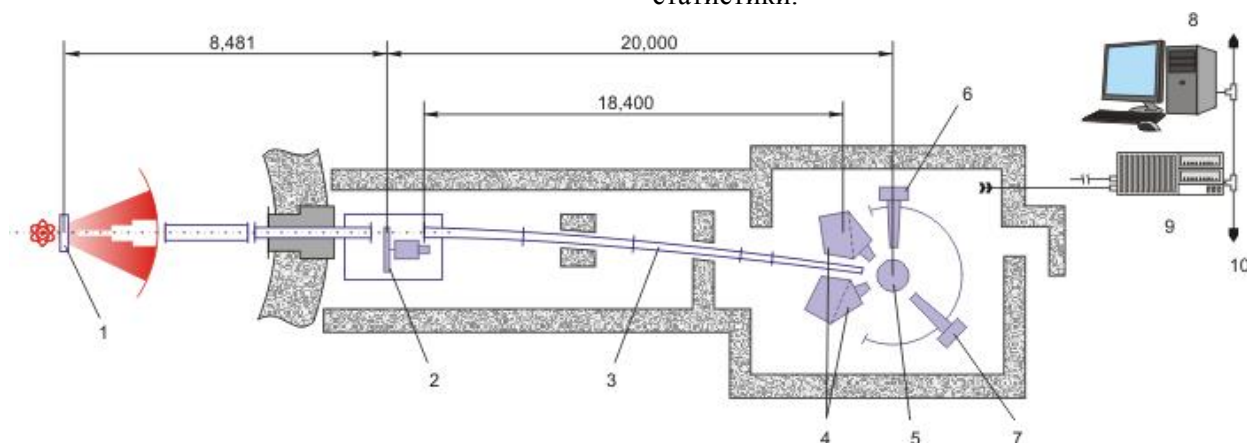


Рис. 2. Схема TOF-дифрактометра HRFD на импульсном реакторе ИБР-2 (ЛНФ ОИЯИ, Дубна). Указаны: замедлитель нейтронов рядом с активной зоной реактора (1), фурье-прерыватель, служащий для дополнительного сокращения ширины импульса (2), зеркальный нейтронотвод, формирующий пучок нейтронов на образце (3), детекторы обратного рассеяния (4), место расположения образца для исследований (5), дополнительные детекторы на средних и малых углах рассеяния (6, 7), электроника контроля эксперимента (8), накопления данных (9) и их передачи (10). Расстояния указаны в миллиметрах.

Наиболее важным следствием перехода к непрерывному спектру и применения метода времени пролета для развертки дифракционной картины является многократное увеличение коэффициента использования нейтронов от источника. В результате, несмотря на то, что средний по времени поток нейтронов на существующих импульсных источниках значительно меньше, чем на стационарных – $\Phi = 1 \cdot 10^{13}$ для ИБР-2 (ОИЯИ) и $\Phi = 1.5 \cdot 10^{15}$ н/см²/с для HFR (ILL, Гренобль) – скорость накопления дифракционных данных оказывается сравнимой, а для некоторых специальных типов экспериментов она может быть во много раз выше на TOF-дифрактометре.

Диапазон используемых на TOF-дифрактометре длин волн может быть очень широким. Обычно это 0.9-8 Å, хотя реально используются как очень малые, до 0.3 Å, так и очень большие, вплоть до 20 Å, длины волн. Это позволяет с помощью небольшого числа детекторов перекрыть широкий диапазон по межплоскостным расстояниям, как правило, от 0.5 до 30 Å.

На TOF-дифрактометре легко реализуется параллельная одно-, двух- или трехмерная дифрактометрия обратного пространства кристалла. Время пролета дает развертку вдоль радиуса-вектора обратной решетки, а позиционные группы одно или двухкоординатного позиционно-чувствительного детектора – в поперечных

направлениях (рис. 3). Информация обо всей наблюдаемой области обратного пространства накапливается одновременно, что позволяет резко сократить время и упростить проведение эксперимента.

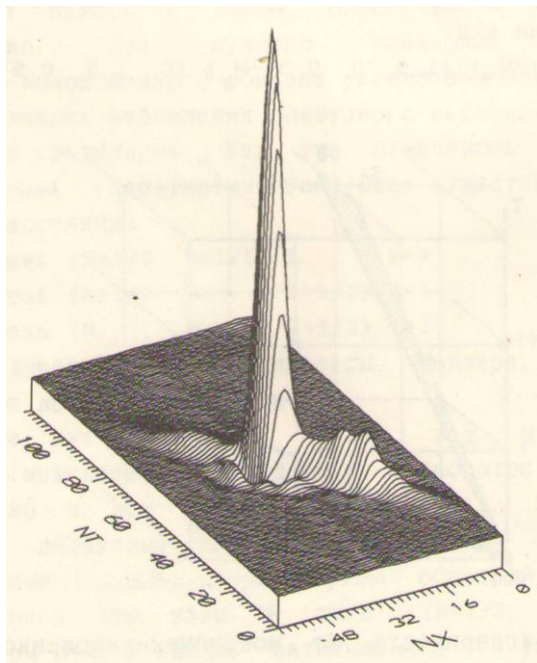


Рис. 3. Измеренное на TOF-дифрактометре двумерное распределение интенсивности от кристалла $(\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5})\text{TiO}_3$ возле точки $(1.5 \ 0.5 \ 0.5)$ обратной решетки. Видны главный и сателлитный (справа) пики. Развертка спектра по времени пролета (NT) и по углу рассеяния (NX) соответствует сканированию вдоль и поперек радиуса-вектора обратной решетки. Рисунок из работы [5].

Разрешающая способность TOF-дифрактометра для поликристаллов легко может быть доведена до $\Delta d/d=0.003$, в специальных случаях - до 0.0005 причем она слабо зависит от d_{hkl} , как правило, улучшаясь с ростом d_{hkl} .

Традиционно отмечаемой особенностью TOF-дифрактометра является также возможность вести измерения в фиксированной геометрии, что важно, например, при работе с камерами высокого давления.

Уже в первых исследованиях, выполненных на TOF-дифрактометрах, были подтверждены многие из предсказывавшихся их достоинств и, прежде всего, большая скорость набора информации. Кроме того, особо отмечался импульсный характер облучения образца пучком нейтронов, что позволяет и внешнее воздействие на образец реализовать в импульсном режиме, резко увеличить амплитуду этого воздействия и достичь величины, например, магнитного поля, не

достижимой в стационарном режиме. Как весьма перспективное направление на импульсном источнике нейтронов назывались исследования необратимых переходных и релаксационных процессов.

Дальнейшее развитие дифракции на импульсных источниках нейтронов подтвердило высказанные прогнозы, а в некоторых отношениях и превзошло их.

IV. СТРУКТУРНЫЕ ЗАДАЧИ, РЕШАЕМЫЕ НА СОВРЕМЕННЫХ TOF-ДИФРАКТОМЕТРАХ

Многочисленные и разнообразные нейтронографические исследования, ведущиеся в настоящее время на TOF-дифрактометрах, можно условно разбить на несколько типов, каждый из которых требует специального подхода к организации эксперимента. Например, современные требования к дифрактометру, на котором ведутся исследования монокристаллов, предполагают наличие двухкоординатного позиционно-чувствительного детектора (2D ПЧД) с хорошим ~ 0.2 см пространственным разрешением, причем высокое разрешение по переданному импульсу, как правило, не обязательно. Наоборот, при структурном исследовании поликристаллов необходимо высокое разрешение по межплоскостному расстоянию ($\Delta d/d \approx 0.001$).

A. Исследования монокристаллов

Основной упор в исследованиях монокристаллов на TOF-дифрактометрах делается на эксперименты, в которых реализуется основное их достоинство - возможность одновременного наблюдения большого объема обратного пространства при фиксированной геометрии. Для этого применяются позиционно-чувствительные или много-детекторные системы.

В ЛНФ ОИЯИ такой метод регистрации использовался начиная с 1980 года в основном для изучения доменных структур сегнетоэлектрических (KD_2PO_4 , LiKSO_4) и сегнетоэластических ($\text{KD}_3(\text{SeO}_3)_2$, K_2ZnCl_4) кристаллов и их поведения при внешних воздействиях. Непрерывное сканирование обратного пространства необходимо и при изучении модулированных структур (атомных или магнитных) и переходов между соразмерной и несоизмерной фазами кристалла.

Типичным примером таких работ являются эксперименты с кристаллами $\text{Sr}_{1-x}\text{Ba}_x\text{Nb}_2\text{O}_6$ (SBN) в которых наблюдается размытый фазовый переход в сегнетоэлектрическую фазу ($T_C = 350$ К при $x = 0.7$), что отражает релаксационный механизм фазового перехода. Дифракционные спектры имели весьма сложный характер (рис. 4) – наблюдалось расщепление позиций, спутники и сильное диффузное рассеяние [6].

Очевидно, что столь сложное распределение интенсивности полноценно может быть изучено только на TOF-дифрактометре, обеспечивающим непрерывное сканирование обратного пространства кристалла. Сильное влияние на интенсивности как дифракционных пиков, так и диффузного рассеяния оказывает электр

рефлексов типа (001) и (002) от кристалла SBN, прошедшего тепловую деполяризацию, сильно возрастает при воздействии электрических полей. В серии экспериментов по непрерывному сканированию обратного пространства кристалла SBN были наблюдаемы закономерности изменений интенсивности диффузного рассеяния, в частности, под действием электрического поля при комнатной температуре происходит уменьшение интенсивности диффузного рассеяния, причем начальный высокий уровень интенсивности резко уменьшается уже при небольших полях (рис. 5).

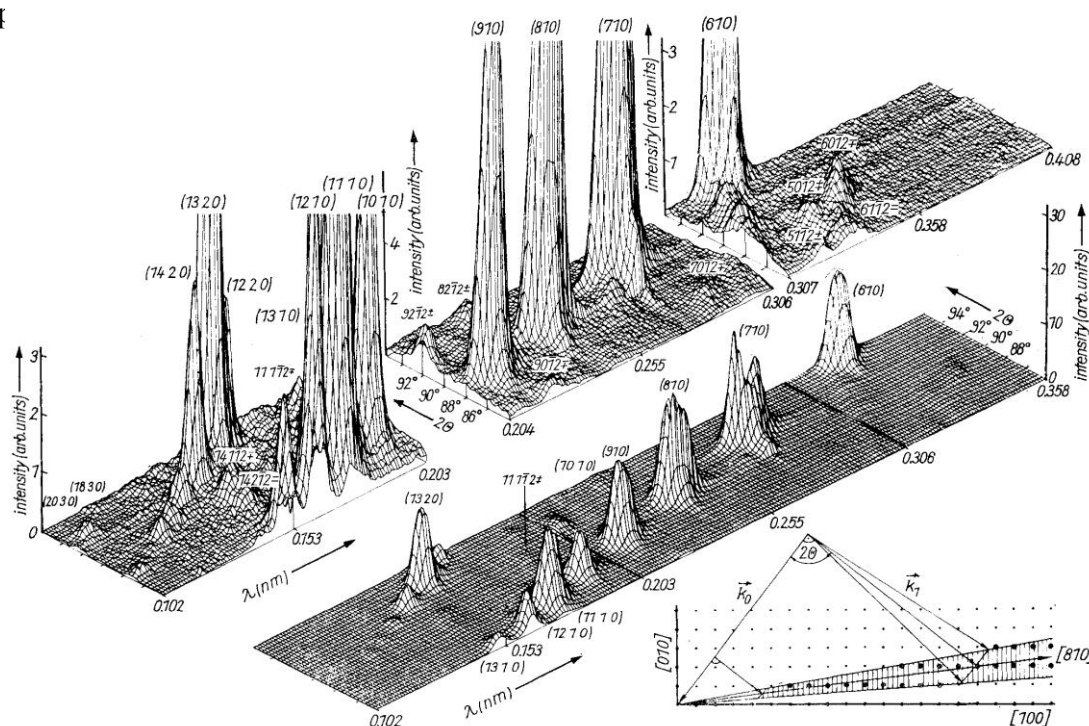


Рис. 4. Участок дифракционного спектра кристалла SBN, измеренный на TOF-дифрактометре с 1D ПЧД в сечении $[hk0]$. Вверху спектр представлен в увеличенном масштабе. Внизу справа показана ориентация сектора в направлении узла (810), ограниченного пределами $\pm 2.5^\circ$ по углу Брэгга. Индексы Миллера основных пиков указаны в скобках, начиная от (6 1 0) до (14 1 0). Индексы спутников указаны без скобок, например, 5 0 1 2, со знаками, указывающими смещение вдоль a^* и b^* . Рисунок из работы [6].

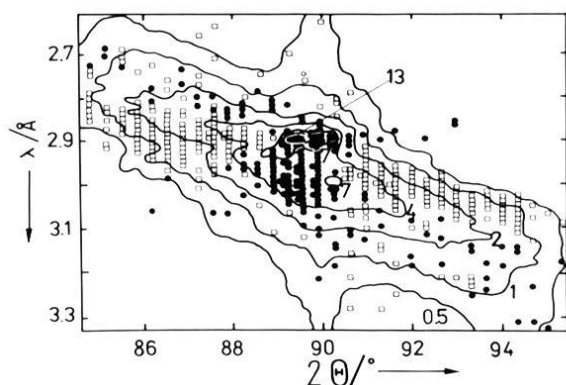


Рис.5 Изменения интенсивности диффузного рассеяния нейтронов в окрестности пика (002) кристалла SBN при включении ($E = 3$ кВ/см) и выключении электрического поля. Рисунок из работы [7].

Анализ диффузного рассеяния показал, что существование малых полярных областей в матрице неполярной параэлектрической фазы и увеличение при охлаждении как их числа, так и объема отдельной области являются наиболее важной характеристикой процесса охлаждения кристалла при выключенном поле[7].

Б.Исследования поликристаллов с высоким разрешением.

На импульсных источниках с коротким импульсом удовлетворительного уровня ($\Delta d/d \approx 0.003$) разрешающей способности по межплоскостному расстоянию можно добиться уже при пролетной базе порядка 40 м. Для достижения разрешения порядка $\Delta d/d \approx 0.001$ и лучше пролетное расстояние должно быть увеличено до 100 и более метров. Хорошо известным примером TOF-дифрактометра с такой разрешающей способностью является HRPD на источнике ISIS [8].

На источниках с длинным импульсом удлинение пролетной базы для достижения высокого разрешения практически невозможно, т.к. требуемые расстояния составляют слишком большую величину. На реакторе ИБР-2 для улучшения разрешающей способности дифрактометра для поликристаллов используется корреляционная фурье-дифрактометрия [9], которая позволила достичь разрешения по межплоскостному расстоянию $\Delta d/d \approx 0.0009$ и сохранить достаточно высокую светосилу.

Одним из примеров успешного применения дифракции нейтронов высокого разрешения к изучению структуры поликристаллов и к анализу корреляций между структурой и

свойствами могут служить работы по выявлению структурных причин гигантского кислородного $^{16}\text{O} \rightarrow ^{18}\text{O}$ изотопического эффекта в CMR-манганите $(\text{La}_{0.25}\text{Pr}_{0.75})_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$ (LPCM-75). Этот состав при низких температурах является АФМ диэлектриком, если используется изотоп ^{18}O , тогда как состав с ^{16}O при $T < 110$ К становится металлом и около 85% объема образца упорядочено ферромагнитно [10]. Температурные зависимости структурных параметров образцов с ^{16}O и ^{18}O измерялись на фурье-дифрактометре HRFD (пример измеренного дифракционного спектра приведен на рис. 6).

На рис. 7 показаны температурные зависимости средней длины связи Mn-O и средних валентных углов Mn-O-Mn. В образце с ^{18}O изменения этих величин с температурой очень небольшие и плавные, тогда как в образце с ^{16}O при температуре ферромагнитного перехода ($T_{\text{FM}} \approx 110$ К) они изменяются скачкообразно.

Следует подчеркнуть, что, несмотря на малую величину различий структурных характеристик образцов, высокое качество экспериментальных данных позволило их надежно зафиксировать.

В настоящее время в нейтронных лабораториях мира существуют несколько TOF-дифрактометров, обладающих разрешением на уровне одной десятой доли процента, которые открывают широкие перспективы для структурных исследований в физике, химии, биологии, материаловедении.

В.Дифракционные эксперименты в реальном времени

Специфические особенности нейтронографии делают ее исключительно мощным методом изучения переходных процессов в конденсированных средах в реальном времени, т.е. с почти непрерывным слежением за происходящими в среде структурными изменениями. В случае необратимого процесса, например, такого, как химическая реакция, его наблюдаемость определяется условием $t_s \leq \tau$, где τ - характерное время процесса, t_s - время измерения одного дифракционного спектра с достаточным для целей эксперимента уровнем статистики. Величина t_s зависит от потока нейтронов в первичном пучке, площади и рассеивающей способности образца, телесного угла детекторной системы и для наиболее

светосильных нейтронных дифрактометров на стационарных реакторах составляет 1-10 мин. На некоторых импульсных источниках нейтронов (ISIS, LANSCE) достигнуты примерно такие же времена. На реакторе ИБР-2 имеются возможности для анализа необратимых процессов в кристаллах с

временным разрешением около 1 мин, отдельные эксперименты были выполнены с разрешением 20 с и даже 2 с [11]. Пример эволюции дифракционных спектров в ходе фазового перехода в соединении $\text{CuLi}_{0.1}\text{V}_{0.1}\text{Fe}_{1.8}\text{O}_4$ показан на рис.8.

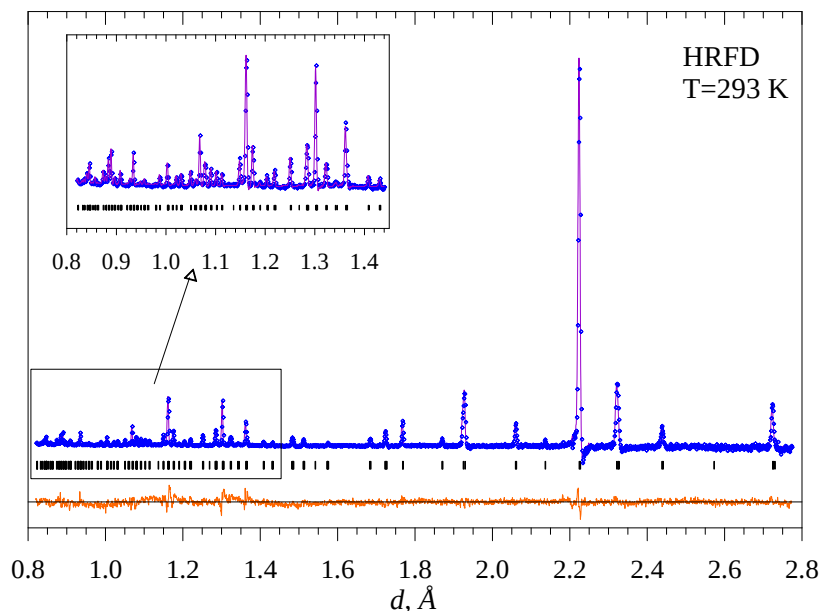


Рис. 6. Дифракционный спектр LPCM-75 с ^{18}O , измеренный на HRFD при комнатной температуре и обработанный по методу Ритвельда. Показаны экспериментальные точки, рассчитанный профиль и разностная кривая, нормированная на среднеквадратичное отклонение в каждой точке. Штрихи под графиком указывают рассчитанные положения ядерных пиков. Рисунок из работы [10].

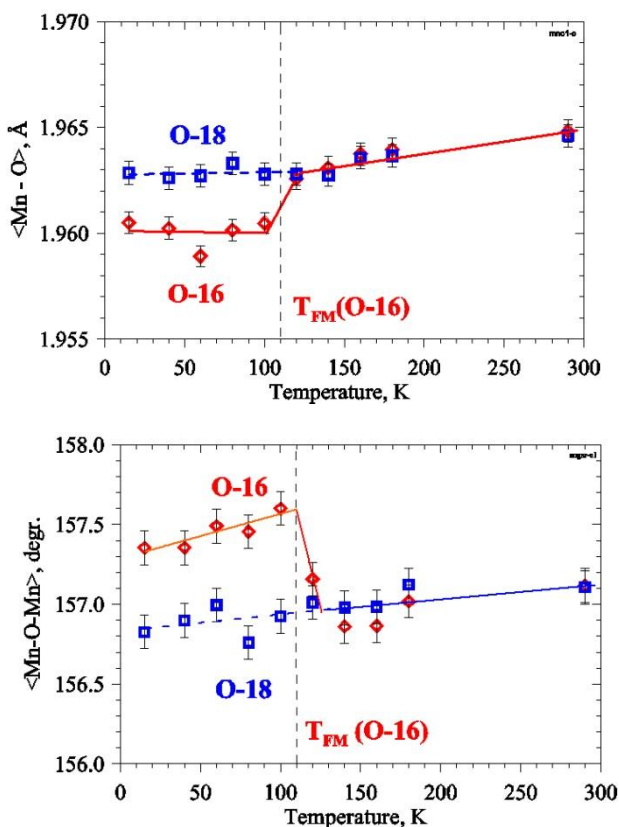


Рис. 7. Сравнение температурных зависимостей для средних расстояний Mn-O (слева) и среднего валентного угла Mn-O-Mn (справа) образцов LPCM-75 с ^{16}O и ^{18}O . Указана температура перехода образца с ^{16}O в FM-состояние. Рисунок из работы [10].

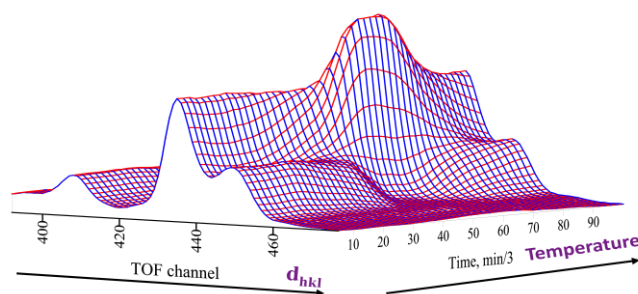


Рис. 8. Дифракционные спектры (регистрация каждые 80 сек) от замещенного феррита меди ($\text{CuLi}_{0.1}\text{V}_{0.1}\text{Fe}_{1.8}\text{O}_4$) в характерном интервале межплоскостных расстояний при непрерывном нагревании от 400 K до 800 K с последующим охлаждением до 400 K со скоростью изменения температуры около 5 град./мин. Выше 740 K соединение находится в высокосимметричной кубической фазе, ниже этой температуры симметрия структуры становится тетрагональной. Рисунок из работы [12].

Последующий анализ совокупности спектров методом Ритвельда позволил определить зависимости от времени (т.е. от температуры) всех структурных характеристик кристалла [12].

Г. Исследования микрообразцов при высоких давлениях

До последнего времени область применения нейтронных методов при исследовании поведения вещества при высоких давлениях, как правило, ограничивалась диапазоном до нескольких ГПа, что было связано с необходимостью использовать относительно большие объемы образца ($\sim 1 \text{ см}^3$). В последнее

время появилась возможность расширить диапазон давлений до нескольких десятков ГПа, сочетая технику алмазных и сапфировых наковален и светосильную низкофоновую нейтронную дифрактометрию. На ИБР-2 такие работы начались сравнительно недавно, но уже первые эксперименты показали перспективность этого направления. Тщательная проводка нейтронного пучка, оригинальная конструкция детекторной системы позволили получить результаты близкие к рекордным в мире по минимальному объему образца и уровню достижимых давлений [13]. На рис.9 показан один из измеренных дифракционных спектров от образца, объем которого составлял около 5 мм^3 .

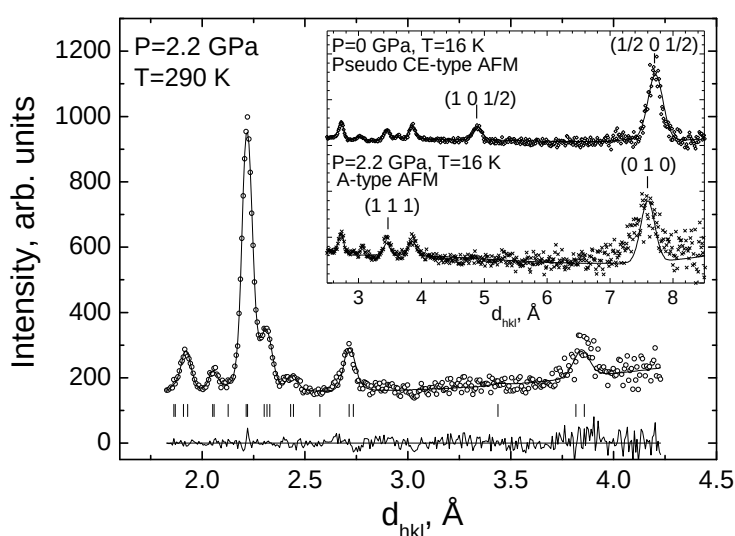


Рис. 9. Дифракционные спектры $\text{Pr}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$, измеренные при $P = 2.2 \text{ ГПа}$ и $T = 290 \text{ К}$ (угол рассеяния $2\theta = 92^\circ$), $P = 0$ и 2.2 ГПа , $T = 16 \text{ К}$ (угол рассеяния $2\theta = 45.9^\circ$, вставка), обработанные по методу Ритвельда. Показаны экспериментальные точки, вычисленный профиль и разностная кривая. Приведены индексы Миллера для наиболее интенсивных антиферромагнитных рефлексов. Рисунок из работы [13].

При увеличении давления до 2.2. ГПа наблюдаются четкие изменения дифракционных спектров, что свидетельствует о возникновении в кристалле АФМ состояния А-типа.

Д. Прикладные исследования на TOF-дифрактометрах

В последние годы на TOF-дифрактометрах обязательной областью применения дифракции нейтронов стали прикладные исследования, под которыми понимаются задачи важные с инженерной точки зрения. Типичным примером является определение с помощью дифракции нейтронов внутренних напряжений в объемных материалах, изделиях или деталях машин.

Основным достоинством дифракции тепловых нейтронов при изучении внутренних напряжений является их большая проникающая способность, позволяющей сканировать объем образца на значительной глубине (до 3 см в сталях и 10 см в Al), что особенно важно для исследования напряжений в технических конструкциях (см., например, [14]. Дифракция рентгеновских лучей, естественно, также используется для определения внутренних напряжений, но их проникновение в материал ограничивается долями миллиметра.

Остаточные или динамические механические напряжения приводят к однородному изменению параметров кристаллической решетки в сравнительно больших (на уровне долей миллиметра)

объемах материала. Соответственно дифракционные пики сдвигаются по отношению к положению пиков от недеформированного материала (рис. 10).

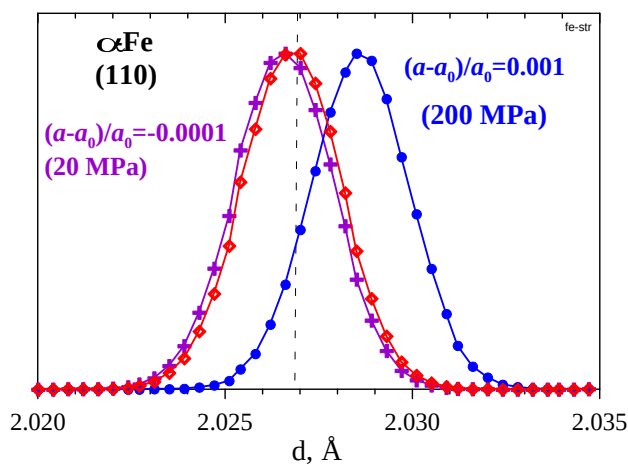


Рис. 10. Дифракционный пик (110) от недеформированного α -Fe ($d \approx 2.027 \text{ \AA}$), имеющего модуль Юнга $E = 200 \text{ ГПа}$ и его сдвиг при нагрузке 20 МПа (налево) и 200 МПа (направо). Разрешение дифрактометра, на котором проведено измерение пиков, $R \approx 0.001$.

При неоднородных, случайных по величине и направлению искажениях решетки в пределах одного кристаллита возникают микронапряжения, приводящие к дисперсии межплоскостных расстояний и, соответственно, к уширению дифракционных пиков.

Долгое время, существенным ограничением метода являлась его сравнительно малая светосила, но современные специализированные нейтронные дифрактометры позволяют определять напряжения с пространственным разрешением 0.5 мм за разумное (порядка 1 часа) время измерения. Соответственно, может быть измерена карта распределения напряжений внутри материала или изделия.

На реакторе ИБР-2 прикладные исследования материалов осуществляются по нескольким направлениям, основными из которых являются изучение внутренних напряжений и текстуры в материалах, имеющих промышленные применения (детали узлов машин, конструкционные материалы, композиты, армированные системы и т.д.) и определение структуры и текстуры геологических материалов. Описание специализированных нейтронных дифрактометров предназначенных для этих целей можно найти по ссылке [15].

За последние годы нейтронография на импульсных источниках нейтронов прошла впечатляющий путь развития, начало которому было положено еще в 1960-х годах. Ближайшие ее перспективы связаны, прежде всего, с вводом в строй новых мощных SNS, таких как ESS, а также с улучшением уже существующей техники. Это касается создания новых широкоформатных детекторов нейтронов с охватом телесного угла на уровне нескольких стерадиан и новых фокусирующих систем проводки нейтронных пучков. Ожидаются новые, более эффективные устройства, с помощью которых задаются условия на образце – камеры высокого давления, рефрижераторы замкнутого цикла, источники электрических и магнитных полей.

Можно уверенно утверждать, что комплексы дифрактометров, созданные на современных импульсных источниках, в том числе на реакторе ИБР-2, являются исключительно мощной экспериментальной базой, позволяющей решать практически любые задачи современной структурной нейтронографии.

ЛИТЕРАТУРА

1. “Нейтроны и твёрдое тело” под ред. Р.П.Озерова, в 3-х томах, М., т. 1 “Структурная нейтронография”, 1979, т. 2 “Нейтронография магнетиков”, 1981, т. 3 “Нейтронная спектроскопия”, 1983. А.В. Белушкин, Д. Сангаа “Методы нейтронных исследований наноматериалов” (на монгольском языке), Улаанбаатар, 2011.
2. <http://www.psi.ch/sing/>
3. <http://flnp.jinr.ru/5/>
4. <http://ess-scandinavia.eu/>
5. Балагуров А.М., Вахрушев С.Б., Набережнов А.А., Окунева Н.М., Савенко Б.Н., Сангаа Д. “Модуляция кристаллической решетки в кристалле $\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{TiO}_3$ ” ОИЯИ, P14-90-423, Дубна, 1990.
6. A.M. Balagurov, F. Prokert, B.N. Savenko “Phase transition effects in the incommensurate modulated single crystal of $\text{Sr}_{0.7}\text{Ba}_{0.3}\text{Nb}_2\text{O}_6$ ” phys. stat. sol. (a), 1987, v.103. pp.131-144.
7. F. Prokert, A.M. Balagurov, D. Sangaa, B.N. Savenko “Neutron diffraction study of the electric field influence on $\text{Sr}_{1-x}\text{Ba}_x\text{Nb}_2\text{O}_6$

В.ЗАКЛЮЧЕНИЕ

- mixed crystals” *Ferroelectrics*, 1991, v.124, pp.121-126.
8. <http://www.isis.stfc.ac.uk/instruments/hrpd/>
9. A.M. Balagurov “High resolution Fourier diffraction at the IBR-2 reactor” *Neutron News*, 2005, v.16, pp.8-12.
10. А.М. Балагуров, В.Ю. Помякушин “Структурные аспекты гигантского кислородного изотопического эффекта в перовскитных оксидах марганца” *Кристаллография*, 2006, т.51 (5), с.120 – 132.
11. А.М. Балагуров, Г.М. Миронова “Нейтроннографические исследования в реальном масштабе времени” *Кристаллография*, 1991, т.36, с. 314-325.
12. A.M. Balagurov et al. “Neutron diffraction study of the structural phase transition in lithium and vanadium substituted copper ferrite” *phys. stat. sol. (a)*, 1993, v.136. pp. 57-65.
13. Д.П.Козленко, Б.Н.Савенко “Влияние высокого давления на кристаллическую и магнитную структуру манганитов” *ЭЧАЯ*, 2006, т. 37, с. 5.
14. Бокучава Г.Д., Балагуров А.М., Сумин В.В., Папушкин И.В. “Нейтронный фурье-дифрактометр ФСД для исследования механических напряжений в материалах и промышленных изделиях”, *Поверхность*, 2010, т.11, стр. 9.
15. <http://flnp.jinr.ru/558/>

Advanced Neutron Diffraction at Pulsed Sources

A.M. Balagurov¹, D. Sangaa^{1,2}

¹*Frank Laboratory of Neutron Physics, Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia*

²*Institute of Physics and Technology, Mongolian Academy of Science, Ulaanbaatar, Mongolia*

The current achievements in neutron diffraction studies at pulsed neutron sources are described. After general consideration of the time-of-flight neutron diffraction, some special questions such as a high resolution powder diffractometry, single crystal structural analysis, investigations of the irreversible transition phenomena and micro-samples under high pressure, applied neutron diffraction studies are discussed.

Расчет энергии упорядочения сплава Cu_3Au по формуле Каули

В.М.Силонов¹, Л.Энхтур^{2*}, Х.Балт-Эрдэнэ², Н.Тувжаргал², Р.Галбадрах², Х.Цоохуу²

¹ Московский Государственный Университет, Физический факультет, кафедра физики твердого тела

² Монгольский Государственный Университет, Физический факультет, кафедра общей физики

*Э-почта enkhtorum@yahoo.com

С использованием спектра параметров ближнего порядка, экспериментально определенных из диффузного рассеяния рентгеновских лучей, по формулам Каули с учетом первых 11 координационных сфер рассчитаны значения энергии упорядочения сплава Cu_3Au . Результаты расчета согласуются с результатами других исследователей.

1. ВВЕДЕНИЕ

В рамках статистической теории ближнего порядка методом самосогласованного поля Ж.М.Каули вывел формулу связывающую параметры ближнего порядка со значениями энергии упорядочения [1-3]:

$$-2 \sum_n \alpha_n V_{nn'} - k_B T \ln \left(1 + \frac{\alpha_n}{c_A c_B} \right) = 0, \quad (1)$$

где α_n -параметр ближнего порядка на n -ом узле решетки по отношению к центральному атому, $\alpha_{n'}$ - параметр ближнего порядка на n' -том узле решетки, отсчитанном от n -го узла, $V_{nn'}$ -энергия упорядочения на n' -том узле решетки, также отсчитанном от n -го узла, k_B -постоянная Больцмана, c_A и c_B – концентрации компонент сплава, T - абсолютная температура. По этой формуле в [1] рассчитаны значения энергии упорядочения сплава Cu_3Au на первых трех координационных сферах: $V_1=358k_B$, $V_2=-34k_B$, $V_3=-19k_B$. В [4] формула (1) расписана для сплава Cu_3Au с учетом первых четырех координационных сфер, начиная от центрального атома. Согласно [4] с использованием значений параметров ближнего порядка на первых четырех координационных сферах методом наименьших квадратов были рассчитаны значения энергии упорядочения сплава $\text{Ni}_{40}\text{Al}_{60}$ на первых четырех координационных сферах [5], с применением которых рассчитали температуру упорядочения сплава Ni_3Al , принятую вполне разумной. Здесь же отметили, что абсолютные значения энергии упорядочения для сплава Ni-Al велики и примерно вдвое больше, чем для сплава Cu-Au .

Корреляция между Фурье-образами

параметра ближнего порядка и парного межатомного потенциала для некоторых двойных разупорядоченных сплавов была исследована в [6-8] с целью объяснения экспериментальных данных диффузного рассеяния рентгеновских лучей, тепловых нейтронов и электронов [6-8]. В [8] с целью минимизации суммы квадратов разностей между экспериментальными и теоретическими значениями параметров ближнего порядка сплавов Cu-Au на первых восьми координационных сферах варьировали отношения V_2/V_1 и V_3/V_1 , где V_1, V_2, V_3 есть значения энергии межатомного парного взаимодействия на первых трех координационных сферах. Для Cu_3Au при $V_2/V_1 = -0,230$ и $V_3/V_1 = -0,015$ теоретически получили спектр параметров ближнего порядка, хорошо описывающий экспериментальный спектр. Анализируя таким образом систему Cu-Au , авторы [8] пришли к выводу, что межатомный потенциал в этой системе имеет осциллирующий характер при учете парного взаимодействия на третьей координационной сфере.

Дальнодействующий характер межатомного парного взаимодействия в сплаве Cu_3Au был выявлен в [9] по методике схожей с [8] при использовании значений параметров ближнего порядка на первых одиннадцати координационных сферах, экспериментально измеренных в [10]. С применением спектра рассчитанных значений V_i/V_1 ($i=2, \dots, 8$) была построена кривая зависимости парного межатомного потенциала от межатомного расстояния, которая имеет осциллирующий характер [9].

Целью настоящей работы является применение формулы Каули (1) в расчете энергии упорядочения сплава Cu_3Au с учетом межатомного взаимодействия на первых

одинадцати координационных сферах.

II. МЕТОДИКА РАСЧЕТА

С целью выявления дальнедействующего характера энергии упорядочения взяли из [11] экспериментальные значения параметров ближнего порядка сплава Cu_3Au на первых одинадцати координационных сферах и расписали формулу (1) для одинадцати сфер межатомного взаимодействия:

$$\frac{kT}{2} \ln 1 + \frac{\alpha_1}{c_A c_B 1 - \alpha_1} = V_1(1 + 4\alpha_1 + 2\alpha_2 + 4\alpha_3 + 4\alpha_4) + V_2(2\alpha_1 + 2\alpha_3 + 2\alpha_5) + V_3(4\alpha_1 + 2\alpha_2 + 4\alpha_3 + 4\alpha_4 + 4\alpha_5 + 2\alpha_6 + 4\alpha_7) + V_4(\alpha_1 + 4\alpha_3 + 2\alpha_5 + 4\alpha_7 + \alpha_9) + V_5(2\alpha_2 + 4\alpha_3 + 2\alpha_4 + 4\alpha_5 + 4\alpha_7 + 2\alpha_8 + 4\alpha_{10} + 2\alpha_{11}) + V_6(2\alpha_3 + 4\alpha_7) + V_7(4\alpha_3 + 4\alpha_4 + 4\alpha_5 + 4\alpha_6 + 8\alpha_7 + 4\alpha_9 + 4\alpha_{10} + 4\alpha_{11}) + V_8(2\alpha_5 + 2\alpha_{10}) + V_9(\alpha_4 + 4\alpha_7 + 2\alpha_{11}) + V_{10}(4\alpha_5 + 4\alpha_7 + 2\alpha_8 + 4\alpha_{11}) + V_{11}(2\alpha_5 + 4\alpha_7 + 2\alpha_9 + 4\alpha_{10});$$

$$\frac{kT}{2} \ln 1 + \frac{\alpha_2}{c_A c_B 1 - \alpha_2} = V_1(4\alpha_1 + 4\alpha_3 + 4\alpha_5) + V_2(1 + 4\alpha_4 + \alpha_8) + V_3(4\alpha_1 + 8\alpha_3 + 8\alpha_7 + 4\alpha_{10}) + V_4(4\alpha_2 + 4\alpha_6 + 4\alpha_{11}) + V_5(4\alpha_1 + 4\alpha_5 + 8\alpha_7 + 4\alpha_9) + 4\alpha_4 V_6 + V_7(8\alpha_3 + 8\alpha_5 + 8\alpha_7) + V_8(\alpha_2 + 4\alpha_{11}) + 4\alpha_5 V_9 + V_{10}(4\alpha_3 + 8\alpha_{10}) + V_{11}(4\alpha_4 + 4\alpha_8);$$

$$\frac{kT}{2} \ln 1 + \frac{\alpha_3}{c_A c_B 1 - \alpha_3} = V_1(2\alpha_1 + \alpha_2 + 2\alpha_3 + 2\alpha_4 + 2\alpha_5 + \alpha_6 + 2\alpha_7) + V_2(\alpha_1 + 2\alpha_3 + 2\alpha_7 + \alpha_{10}) + V_3(1 + 2\alpha_1 + 2\alpha_2 + 2\alpha_3 + \alpha_4 + 4\alpha_5 + 4\alpha_7 + \alpha_8 + 2\alpha_9 + 2\alpha_{11}) + V_4(2\alpha_1 + \alpha_3 + 2\alpha_5 + 2\alpha_7 + 2\alpha_{11}) + V_5(2\alpha_1 + 4\alpha_3 + 2\alpha_4 + 2\alpha_6 + 2\alpha_7 + 2\alpha_{10} + 2\alpha_{11}) + V_6(\alpha_1 + 2\alpha_5 + \alpha_9 + \alpha_{10}) + V_7(2\alpha_1 + 2\alpha_2 + 4\alpha_3 + 2\alpha_4 + 2\alpha_5 + 6\alpha_7 + 2\alpha_8 + 2\alpha_{10} + 4\alpha_{11}) + V_8(\alpha_3 + 2\alpha_7) + V_9(2\alpha_3 + \alpha_6 + 2\alpha_{10}) + V_{10}(\alpha_2 + 2\alpha_4 + 2\alpha_5 + \alpha_6 + 2\alpha_7 + 2\alpha_9) + V_{11}(2\alpha_3 + 2\alpha_5 + 4\alpha_7);$$

$$\frac{kT}{2} \ln 1 + \frac{\alpha_4}{c_A c_B 1 - \alpha_4} = V_1(\alpha_1 + 4\alpha_3 + 2\alpha_5 + 4\alpha_7 + \alpha_9) + V_2(2\alpha_2 + 2\alpha_6 + 2\alpha_{11}) + V_3(4\alpha_1 + 2\alpha_3 + 4\alpha_5 + 4\alpha_7 + 4\alpha_{10}) + V_4(1 + 4\alpha_4 + 2\alpha_8) + V_5(2\alpha_1 + 4\alpha_3 + 2\alpha_5 + 4\alpha_7) + V_6(2\alpha_2 + 4\alpha_{11}) + V_7(4\alpha_1 + 4\alpha_3 + 4\alpha_5 + 4\alpha_7 + 4\alpha_9 + 4\alpha_{10}) + 2V_8\alpha_4 + V_9(\alpha_1 + 4\alpha_7) + V_{10}(4\alpha_3 + 4\alpha_7 + 2\alpha_{10}) + V_{11}(2\alpha_2 + 4\alpha_6 + 6\alpha_{11});$$

$$\frac{kT}{2} \ln 1 + \frac{\alpha_5}{c_A c_B 1 - \alpha_5} = V_1(\alpha_2 + 2\alpha_3 + \alpha_4 + 2\alpha_5 + 2\alpha_7 + \alpha_8 + 2\alpha_{10} + \alpha_{11}) + V_2(\alpha_1 + \alpha_5 + 2\alpha_7 + \alpha_9) + V_3(2\alpha_1 + 4\alpha_3 + 2\alpha_4 + 2\alpha_6 + 2\alpha_7 + 2\alpha_{10} + 2\alpha_{11}) + V_4(\alpha_1 + 2\alpha_3 + \alpha_5 + 2\alpha_7) + V_5(1 + 2\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_4 + 4\alpha_7 + 2\alpha_9 + 2\alpha_{11}) + V_6(2\alpha_3 + 2\alpha_7) + V_7(2\alpha_1 + 2\alpha_2 + 2\alpha_3 + 2\alpha_4 + 4\alpha_5 + 2\alpha_6 + 4\alpha_7 + 2\alpha_{10}) + V_8(\alpha_1 + \alpha_9) + V_9(\alpha_2 + 2\alpha_5 + \alpha_8) + V_{10}(2\alpha_1 + 2\alpha_3 + 2\alpha_7 + 2\alpha_{11}) + V_{11}(\alpha_1 + 2\alpha_3 + 2\alpha_5 + 2\alpha_{10});$$

$$\frac{kT}{2} \ln 1 + \frac{\alpha_6}{c_A c_B 1 - \alpha_6} = V_1(3\alpha_3 + 6\alpha_7) + 3\alpha_4 V_2 + V_3(3\alpha_1 + 6\alpha_5 + 3\alpha_9 + 3\alpha_{10}) + V_4(3\alpha_2 + 6\alpha_{11}) + V_5(6\alpha_3 + 6\alpha_7) + V_6(1 + 3\alpha_8) + V_7(6\alpha_1 + 6\alpha_5 + 6\alpha_{10}) + 3\alpha_6 V_8 + 3\alpha_3 V_9 + V_{10}(3\alpha_3 + 6\alpha_7) + 6\alpha_4 V_{11};$$

$$\frac{kT}{2} \ln 1 + \frac{\alpha_7}{c_A c_B 1 - \alpha_7} = V_1(\alpha_3 + \alpha_4 + \alpha_5 + \alpha_6 + 2\alpha_7 + \alpha_9 + \alpha_{10} + \alpha_{11}) + V_2(\alpha_3 + \alpha_5 + \alpha_7) + V_3(\alpha_1 + \alpha_2 + 2\alpha_3 + \alpha_4 + \alpha_5 + 3\alpha_7 + \alpha_8 + \alpha_{10} + 2\alpha_{11}) + V_4(\alpha_1 + \alpha_3 + \alpha_5 + \alpha_7 + \alpha_9 + \alpha_{10}) + V_5(\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 + \alpha_4 + 2\alpha_5 + \alpha_6 + 2\alpha_7 + \alpha_{10}) + V_6(\alpha_1 + \alpha_5 + \alpha_{10}) + V_7(1 + 2\alpha_1 + \alpha_2 + 3\alpha_3 + \alpha_4 + 2\alpha_5 + 2\alpha_7 + \alpha_8 + \alpha_9 + 2\alpha_{10} + 3\alpha_{11}) + V_8(\alpha_3 + \alpha_7) + V_9(\alpha_1 + \alpha_4 + \alpha_7 + \alpha_{11}) + V_{10}(\alpha_1 + \alpha_3 + \alpha_4 + \alpha_5 + \alpha_6 + 2\alpha_7 + \alpha_{11}) + V_{11}(\alpha_1 + 2\alpha_3 + 3\alpha_7 + \alpha_9 + \alpha_{10});$$

$$\frac{kT}{2} \ln 1 + \frac{\alpha_8}{c_A c_B 1 - \alpha_8} = V_1(4\alpha_5 + 4\alpha_{10} + 4\alpha_{14}) + V_2(\alpha_2 + 4\alpha_{11}) + V_3(4\alpha_3 + 8\alpha_7) + 4\alpha_4 V_4 + V_5(4\alpha_1 + 4\alpha_9) + 4\alpha_6 V_6 + V_7(8\alpha_3 + 8\alpha_7) + V_8(1 + 4\alpha_{16}) + 4\alpha_5 V_9 + 4\alpha_1 V_{10} + V_{11}(4\alpha_2 + 4\alpha_{11});$$

$$\frac{kT}{2} \ln 1 + \frac{\alpha_9}{c_A c_B 1 - \alpha_9} = V_1(\alpha_4 + 7\alpha_7 + 2\alpha_{11}) + 2\alpha_5 V_2 + V_3(4\alpha_3 + 2\alpha_6 + 4\alpha_{10}) + V_4(\alpha_1 + 4\alpha_7) + V_5(2\alpha_2 + 4\alpha_5 + 2\alpha_8) + 2\alpha_3 V_6 + V_7(4\alpha_1 + 4\alpha_4 + 4\alpha_7 + 4\alpha_{11}) + 2\alpha_5 V_8 + V_9(1 + 4\alpha_9) + V_{10}(4\alpha_3 + 4\alpha_{10}) + V_{11}(2\alpha_1 + 4\alpha_7);$$

$$\frac{kT}{2} \ln 1 + \frac{\alpha_{10}}{c_A c_B 1 - \alpha_{10}} = V_1(2\alpha_5 + 2\alpha_7 + \alpha_8 + 2\alpha_{11}) + V_2(\alpha_3 + 2\alpha_{10}) + V_3(\alpha_2 + 2\alpha_4 + 2\alpha_5 + \alpha_6 + 2\alpha_7 + 2\alpha_9) + V_4(2\alpha_3 + 2\alpha_7 + \alpha_{10}) + V_5(2\alpha_1 + 2\alpha_3 + 2\alpha_7 + 2\alpha_{11}) + V_6(\alpha_3 + 2\alpha_7) + V_7(2\alpha_1 + 2\alpha_3 + 2\alpha_4 + 2\alpha_5 + 2\alpha_6 + 4\alpha_7 + 2\alpha_{11}) + V_8(\alpha_1 + 2\alpha_{14} + 2\alpha_{21} + \alpha_{33}) + V_9(2\alpha_3 + 2\alpha_{10}) + V_{10}(1 + 2\alpha_2 + \alpha_4 + 4\alpha_9) + V_{11}(2\alpha_1 + 2\alpha_5 + 2\alpha_7);$$

$$\frac{kT}{2} \ln 1 + \frac{\alpha_{11}}{c_A c_B 1 - \alpha_{11}} = V_1(\alpha_5 + 2\alpha_7 + \alpha_9 + 2\alpha_{10}) + V_2(\alpha_4 + \alpha_8) + V_3(2\alpha_3 + 2\alpha_5 + 4\alpha_7) + V_4(\alpha_2 + 2\alpha_6 + 3\alpha_{11}) + V_5(\alpha_1 + \alpha_3 + 2\alpha_5 + 2\alpha_{10}) + 2\alpha_4 V_6 + V_7(2\alpha_1 + 4\alpha_3 + 6\alpha_7 + 2\alpha_9 + 2\alpha_{10}) + V_8(\alpha_2 + \alpha_{11}) + V_9(\alpha_1 + 2\alpha_7) + V_{10}(2\alpha_1 + 2\alpha_5 + 2\alpha_7) + V_{11}(1 + 3\alpha_4 + \alpha_8). \quad (2)$$

Расчеты энергии упорядочения на первых одинадцати координационных сферах проводили подобно [5] методом наименьших квадратов. Значения параметров ближнего порядка α_i и результаты расчетов энергии упорядочения V_i сплава Cu_3Au , соответствующие температуре $T = 678\text{K}$ приведены в Таблице 1. Из данных таблицы видно, что наши значения энергии упорядочения на первых трех сферах похожи с вышеприведенными результатами [1]. Отношения $V_2/V_1 = -0.027$ и $V_3/V_1 = -0.111$

лишь по знаку соответствуют отношениям из [8].

Таблица 1. Значения параметров ближнего порядка α_i и энергии упорядочения V_i сплава Cu_3Au , соответствующие $T = 678\text{K}$.

I	lmn	α_i	V_i/k_B
1	110	-0,152	326,20
2	200	0,186	-8,65
3	211	0,009	-36,36
4	220	0,095	-52,66
5	310	-0,053	17,36
6	222	0,025	-10,38
7	321	-0,016	2,71
8	400	0,048	-1,48
9	330	-0,026	-10,25
10	411	0,011	10,74
11	420	0,026	8,55

Из Таблицы 1 видно, что значения энергии упорядочения на первых восьми сферах по знаку противоположны значениям параметров ближнего порядка, что свидетельствует о стабилизирующей роли ближнего порядка для сплава Cu_3Au .

III. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Применение формулы Каули (1) позволяет рассчитать спектр энергии упорядочения V_i , между тем по методике предложенной в работах [6-9] можно рассчитать отношения V_i/V_1 ($i = 2, \dots, 8$). Судя спектру энергии упорядочения на 11 координационных сферах, можно сделать вывод о дальнем действии межатомного потенциала.

Результаты расчетов, проведенных в данной работе указывают на возможность применения формул Каули для исследования упорядочения в двойных сплавах.

Благодарность

Авторы выражают благодарность Фонду Науки и Технологии Монголии при Правительстве Монголии и Монголо-Беларускому совместному проекту “Физико-химический, мультифрактальный и микроструктурный анализ углеродных материалов для их рационального использования в промышленности” за финансовую поддержку.

ЛИТЕРАТУРА

1. J.M.Cowley, Phys.Rev. **77**, 669(1950)
2. J.M.Cowley, Phys.Rev. **120**, 1648 (1960)
3. J.M.Cowley, Phys.Rev. A **138**, 1384 (1965)
4. В.И.Иверонова, А.А.Кацнельсон, Ближний порядок в твердых растворах, М.1977.
5. А.А.Кацнельсон, Дажаев П.Ш. ФММ, т.37, вып.3, стр.625 (1974)
6. P.C.Clapp, S.C.Moss, Phys.Rev. **142**, N2, 418 (1966)
7. P.C.Clapp, S.C.Moss, Phys.Rev. **171**, N3, 754 (1968)
8. P.C.Clapp, S.C.Moss, Phys.Rev. **171**, N3, 764 (1968)
9. S. Wilkins, Phys.Rev. B **2**, N10, 3935 (1970)
10. S.C.Moss, J.Appl.Phys. **35**, 3547 (1964)
11. J.M.Cowley, J.Appl.Phys. **21**, 24 (1950)

Cu_3Au хайлшийн эрэмблэлтийн энергийг Каулийн томъёогоор тооцоох нь

В.М.Силонов¹, Л.Энхтөр², Х.Балт-Эрдэнэ², Н.Төвжаргал², Р.Галбадрах², Х.Цоохүү²

¹ Москвагийн Их Сургууль, Физикийн факультет, Хатуу биеийн физикийн тэнхим

² Монгол Улс, Улаанбаатар-210646, Их сургуулийн гудамж-1, Монгол Улсын Их Сургууль, Физик электроникийн сургууль, Ерөнхий физикийн тэнхим

Рентген цацрагийн диффузийн сарнилын туршилтаар тодорхойлсон ойрын эрэмбийн параметрийн утгуудыг ашиглан 11 сферийн хувьд бичсэн Каулийн томъёоны дагуу хамгийн бага квадратын аргаар Cu_3Au хайлшийн эрэмблэлтийн энергийг тооцоолсон нь бусад судлаачдын үр дүнтэй нийцэж байна.

The calculation of ordering energy on Cu₃Au alloy by Cowley formula

V.M.Silinov¹, L.Enkhtur², Kh.Balt-Erdene², N.Tuvjargal², R.Galbadrakh², Kh.Tsookhuu²

¹ *Department of Solid State Physics, Faculty of Physics, Moscow State University,*

² *Department of General Physics, School of Physics and Electronics, National University of Mongolia,
University Street-1, Ulaanbaatar-210646, Mongolia*

Using the Cowley formula written for 11 coordination spheres by least square method we calculated ordering energy on Cu₃Au alloy via the short range order parameters defined from X-ray diffuse scattering. Our results are in agreement with results of other authors.

α -NPD нимгэн хальсны талсжилт ба бүтцийн эвдрэл

Х. Балт-Эрдэнэ^{1*}, Р. Галбадрах², Л. Энхтөр², Д. Амгаланбаатар²

¹Монгол Улс, Улаанбаатар, Шинжлэх Ухаан Технологийн Их Сургууль, Материал Технологийн Сургууль

²Монгол Улс, Улаанбаатар, Монгол Улсын Их Сургууль, Физик Электроникийн Сургууль, Ерөнхий физикийн тэнхим

*Э-шуудан hbalt_erdene@yahoo.com

Бид энэ ажлаар органик хагас дамжуулагч α -NPD-ийн шилэн дээр суулгасан нимгэн хальс нь дулааны бэхжүүлэлт болон орчны нөхцлөөс хэрхэн хамаарахыг судаллаа.

Түлхүүр үгс: дулааны бэхжүүлэлт, талсжилт, α -NPD, шингээлтийн спектр

1. ОРШИЛ

Шингэн ба хатуу төлөвт органик хагас-дамжуулагч бодисууд, тэдгээрийн физик-химийн шинж чанар, оптик ба цахилгаан дамжуулалтын төрхийг тогтоох онолын болон туршлагын судалгаа сүүлийн жилүүдэд эрдэмтэн судлаачдын анхаарлыг ихээхэн татаж байгаа билээ.

Хүн төрөлхтний хөгжилтөд шинжлэх ухаан, техник технологийн дэвшлийн шаардлагаар гарч ирсэн молекулын дан болон нимгэн үеийн судалгааны ажлууд маш эрчимтэй хийгдэж, тэдгээрийн ололт амжилтуудыг практикт хэрэглэх болсноор микро-электроник, компьютер, ахуйн хэрэглээний цахилгаан барааны үйлдвэрлэл хөгжлийн цоо шинэ шатанд хүрч байна. Ялангуяа сүүлийн 20-иод жилийн дотор аморф органик хагас-дамжуулагч бодисуудыг цахилгаанлюминесценц төхөөрөмжид хэрэглэснээр өнгөт дэлгэцийн шинэ чиглэлийг хөгжүүлэхэд чухал нэмэр оруулж байна. Органик хагас-дамжуулагч нимгэн үеүүдийн хоорондын заагт явагдах оптик, цахилгаан болон молекуляр процессыг судлах, улмаар явагдаж байгаа физик болон химийн үзэгдлүүдийг бүрэн ойлгох явдал нэн чухал байна [1].

Органик хагас дамжуулагчид нь гэрлийн шингээлт болон цацаргалт өндөртэй, химийн аргаар синтезлэн гарган авахад хялбар, бүтээгдэхүүн үйлдвэрлэхэд технологи энгийн, мөн үйлдвэрийн өртөг багатай байдгаараа органик биш хагас-дамжуулагчдыг бодвол олон давуу талтай юм. 1986 онд Eastman-Kodak компаний судлаач Танг электрон ба нүхэн дамжуулалттай анхны органик нарны зай OSC (Organic Solar Cells) үүсгүүрийн ашигт үйлийн коэффициент (а.ү.к) буюу квант ашигт гарц 0.95% байгааг туршлагаар тогтоосон байдаг. 2001 онд Америкийн Нэгдсэн Улсын Принстон Их Сургуулийн профессор Форрест болон түүний судалгааны баг а.ү.к -ийг 3 %-д

хүргэснээр органик нарны зайн судалгааг цаашид хөгжихөд томоохон түлхэц өгсөн. 2007 оны байдлаар органик нарны зайн үүсгүүрийн а.ү.к нь 5 % байгаа бөгөөд цаашид эрчмийг сайжруулахаар ажиллаж байна. 2020 он гэхэд органик нарны зайн үүсгүүрийн а.ү.к 10 %-аас дээш байх боломжтой гэж судлаачид үзэж байна. Энэ тохиолдолд органик нарны зайн үүсгүүр нь практик хэрэглээнд шилжиж, сэргээгдэх эрчим хүчний зах зээлд тодорхой байр суурь эзэлж, өрсөлдөх бодит чадвартай болох юм. Одоогоор дэлхий нийтээр түгээмэл хэрэглэж буй цахиуран (Si) нарны зайн үүсгүүрийг бодвол органик нарны зайн үйлдвэрлэлийн өртөг нь их байгаа хэдий ч цаашид органик нимгэн хальсыг гарган авах технологи сайжирсанаар үйлдвэрлэлийн өртөг нь буурч OSC бүхий нарны зайн систем хийх боломжтой юм.

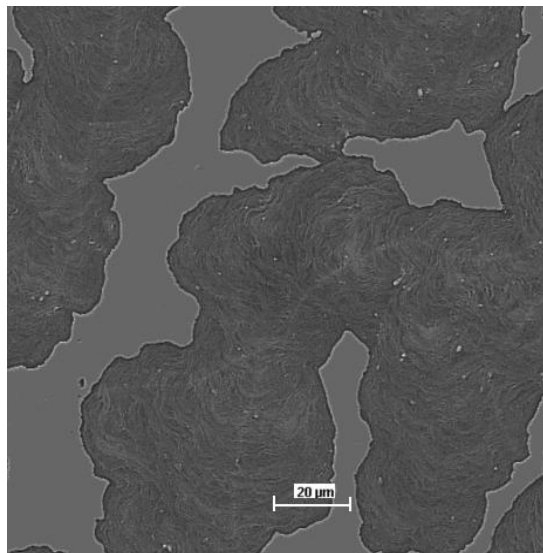
OSC нь 100 нанометр (нм)-ээс ихгүй зузаантай халуун ба хүйтэнд тэсвэртэй органик хагас дамжуулагчын хоёр ба түүнээс дээш үелсэн нимгэн давхаргуудаас тогтох ба суурь гадаргуу нь уян пластик материал байж болно. Иймээс OSC нь эвхэж хуйлдаг эсвэл гадаргуугийн (дээврийн) хэлбэрийг дагуулан нааж болох нарны зайн үүсгүүрийг үйлдвэрлэх замыг нээж байгаа юм [1].

OLED дэлгэц нь гэрэлтэлт хурц, нимгэн, уян хатан, хажуугаас харагдах өнцөг их, өнгөний ялгарал маш тод, бага энерги ашигладаг гэх мэт давуу талуудтай.

OLED дэлгэц бүхий гар утас, зурагт, нотбүүк зэрэг бүтээгдэхүүнүүд зах зээлд хэдийн гараад байна. Samsung корпораци дэлхийн зах зээл дэх OLED дэлгэцийн 40 гаруй хувийг нийлүүлж буй бөгөөд тэдний сүүлийн бүтээгдэхүүн нь Galaxy Nexus хэмээх 4,65 инчийн OLED дэлгэц бүхий ухаалаг гар утас юм [2].

Дэлгэцийн технологид амьдрах нас доод тал нь 30000 цаг байж өрсөлдөх боломжтой байдаг. Гэтэл OLED дэлгэц нь орчны дулаан, агаар

болон чийгийн нөлөөгөөр бүтэц нь аморф байснаа талст болон өөрчлөгдсөний улмаас дэлгэц дээр талстын хар толбууд үүсэн амьдрах насыг нь богиносгодог байна. Одоогийн байдлаар OLED дэлгэцийн амьдрах нас нь 20000 цаг байна.



Зураг 1. Талсжилтын улмаас дэлгэц дээр хар толбууд үүссэн байдал. [6]

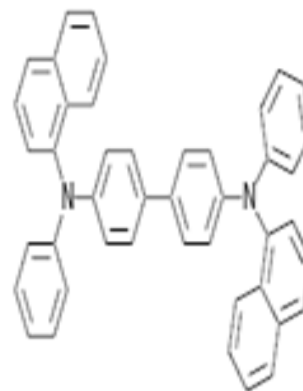
OLED дээр тулгуурласан бүтээгдэхүүнүүд зах зээлд гарч эхэлсэн хэдий ч OLED-ийн ажиллах зарчимтай холбоотой олон асуудал шийдэгдээгүй хэвээр байгаа билээ. Тухайлбал OLED-ийн цацаргалтын механизм ба цацаргагч давхрагын бүтцийн деградацийн процессийг молекулын түвшинд судалж ойлгосноор төхөөрөмжийн ажиллах хугацааг уртасгах, цацаргалтын квант гаралт, чадал зэрэг гол үзүүлэлтүүдийг цаашид улам сайжруулах боломж нээгдэх юм. OLED дэлгэцний доройтол нь орчноос бүрэн тусгаарлагдсан битүү биш, агаар болон усны хамгаалалтгүйгээс үүсч байна. OLED дэлгэцний энгийн хамгаалах арга нь металл ба шилэн давхаргаар бүрж, инертийн хийтэй чийгийг хатаадаг тагаар таглах явдал юм.

Бид энэ ажлаараа шилэн дээр α -NPD бодис суулгасан органик нимгэн хальснуудыг вакуумд ууршуулан суулгах аргаар гарган авч, вакуум болон агаарт 100°C -д 5-8 цаг дулааны бэхжүүлэлт хийсэн. Дулааны бэхжүүлэлт хийсэн ба хийгээгүй 2 дээжийн алинд нь талсжилт илүү явагдах, юунаас болж талсжилт үүсч байгааг судлахыг зорилоо.

α -NPD нь OLED болон OSC хийхэд өргөн хэрэглэгддэг p төрлийн органик хагас дамжуулагч юм.

II. ТУРШИЛТЫН ХЭСЭГ

Урьдчилан цэвэрлэж бэлтгэсэн 2 шилэн ялтас дээр $4 \cdot 10^{-4}$ мм м.у.б.-д α -NPD бодисыг $0.2-1.2 \text{ \AA}/\text{с}$ хурдтайгаар 50-150 нм зузаантай суулгаж дээжээ бэлтгэсэн. Ууршуулах тогооны гүйдлийн хүч 5,8-12А байсан. Шилэн ялтас дээр суух бодисын зузаан болон уурших хурдыг зузаан хэмжигч кварц кристал бүхий тоолуур SQM-160-аар хянасан. Шилэн ялтсыг ультрасоник багажаар 5 үе шаттайгаар угааж бэлтгэнэ. Үүнд: нэрмэл усаар 5 минут, изопропилийн спиртээр 10 минут, ацетонор 20 минут, нэрмэл усаар 5 минут, этилийн спиртээр цэвэрлэж вакуум төхөөрөгт байрлуулах хүртэл этилийн спирттэй саванд хадгална.



Зураг 2. α -NPD

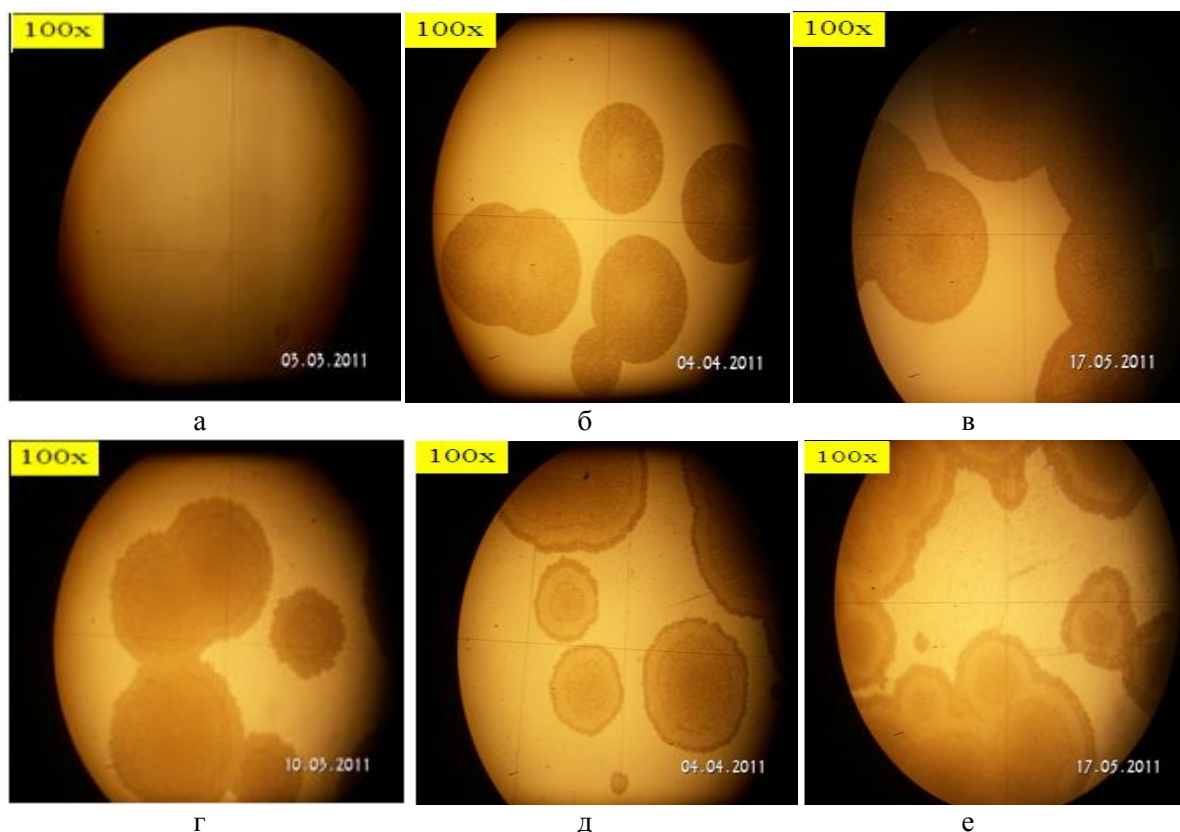
Бид гаргаж авсан 113 нм зузаан дээжнийхээ нэгийг 100°C (вакуумд) 5 цаг дулааны бэхжүүлэлт хийсэн. Мөн 150 нм зузаан дээжнийхээ нэгийг 100°C (агаарт) 8 цаг дулааны бэхжүүлэлт хийсэн.

Бэлтгэж авсан дулаан боловсруулалт хийсэн ба хийгээгүй хоёр нимгэн хальсныхаа оптик шингээлтийн спектрийг Shimadzu фирмийн UV-2401PC маркийн шингээлтийн спектрометр дээр 300-800 нм мужид бодисын оптик шингээлтийг хэмжсэн. Гадаргуугын зургийг Olympus микроскоп дээр 100, 500, 1000 дахин өсгөлттэйгээр фотоаппарат хэрэглэн авсан.

III. ҮР ДҮН

A. Шилэн дээр α -NPD бодисыг 113nm зузаантай суулгасан 2 нимгэн хальс

Гадаргуугын зургийг 100 болон 1000 дахин өсгөлттэйгээр дээжийг дөнгөж бэлтгэсэний дараа болон 30, 74 хоногийн дараа авсан.



Зураг 3. Шилэн дээр α -NPD бодисыг 113nm зузаантай суулгаж авсан нимгэн хальсны гадаргуугын зураг. а-Дулааны бэхжүүлэлт хийгээгүй хальс **дөнгөж суулгасаны дараа**, б-Дулааны бэхжүүлэлт хийгээгүй хальс **30 хоногийн дараа**, в-Дулааны бэхжүүлэлт хийгээгүй хальс **74 хоногийн дараа**, г-Дулааны бэхжүүлэлт хийсэн хальс **дөнгөж суулгасаны дараа**, д- Дулааны бэхжүүлэлт хийсэн хальс **30 хоногийн дараа**, е- Дулааны бэхжүүлэлт хийсэн хальс **74 хоногийн дараа**

3-р зургаас харахад дулааны бэхжүүлэлт хийсэн нимгэн хальс маань талсжсан байсан. Сарын дараах зургаас харахад 2 дээжид хоёуланд нь талсжилт ажиглагдсан бөгөөд дулааны бэхжүүлэлт хийгээгүй дээж дулааны бэхжүүлэлт хийснээсээ илүү эрчимтэй талсжсан байна. 74 хоногийн дараах гадаргуугын зургаас харахад гадаргуу дээр суусан бодис маань ойр байгаа бодисуудтайгаа нэгдэж талсжилтыг улам нэмэгдүүлж байна. Дулааны бэхжүүлэлт хийсэн дээжийн талсжиж байгаа хэсгийн гадаргуугын зургийг өмнөхөөс 10 дахин их өсгөж буюу 1000х дахин өсгөлттөйгөөр авсан. (Зураг 4)



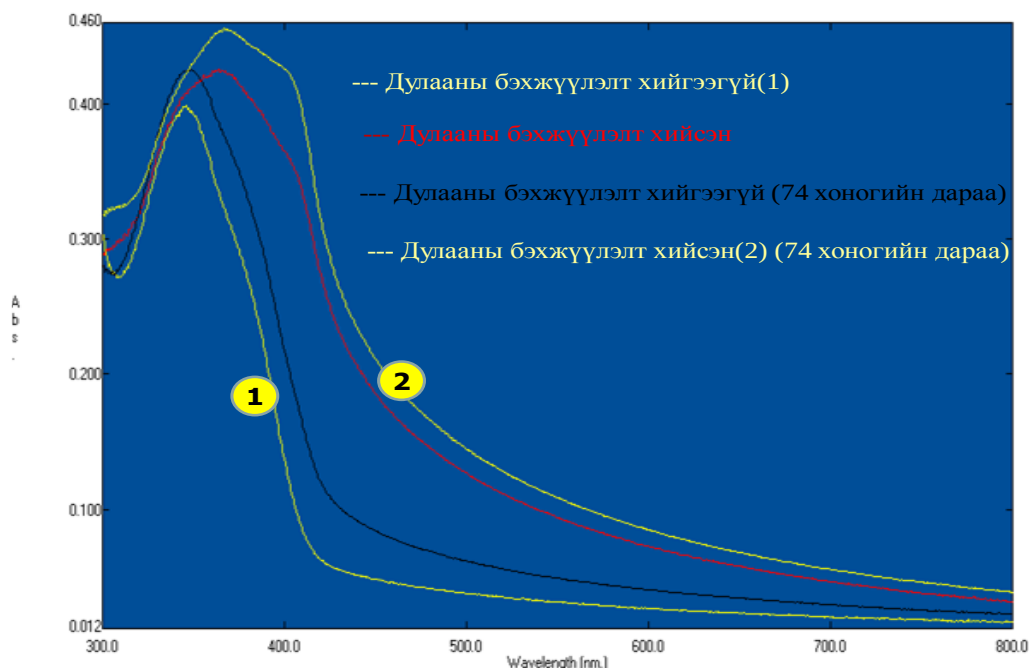
Зураг 4. Нимгэн хальсны талсжилт

Зургаас харахад хальсны нэг хэсгийн бодис маань өөр нэгэн хэсэг рүү татагдан очсоноор уг

хальс маань α -NPD бодис байхгүй болсон хэсэг буюу шилэн гадаргуу, α -NPD бодис төвлөрч буй хэсэг буюу талсжиж буй хэсэг гэсэн нэгэн төрөл биш хэсгүүдээс тогтоно.

Дулааны бэхжүүлэлт хийсэн нимгэн хальсны оптик шингээлтийн спектр (зурагт улаанаар тэмдэглэсэн) нь дулааны бэхжүүлэлт хийгээгүйгийнхтэй (зурагт 1 гэсэн шараар тэмдэглэсэн) харьцуулахад оптик шингээлтийн хэмжээ өсч мөн долгионы урт ихтэй тал руу шилжсэн байна (Зураг 5). Энэ нь дулаан бэхжүүлэлт хийснээр нимгэн хальсанд талсжих үзэгдэл явагдсанаар хальс нэгэн төрөл биш болж Мигийн сарнилаас болж шингээлтийн спектр шилжинэ. Мөн шингээлтийн максимумд харгалзах долгионы урт нь долгион ихсэх тал руу шилжсэн байгаа нь дулааны бэхжүүлэлт хийгээгүй болон хийсэн 2 төлөв нь уг бодисын 2 өөр фаз байж болохыг харуулж байна [3].

74 хоногийн дараа уг 2 дээжийнхээ оптик шингээлтийн спектрийг хэмжихэд дээж тус бүрийн оптик шингээлтийн хэмжээ өссөн ба шингээлтийн максимумд харгалзах долгионы урт нь өөрчлөгдөөгүй байна. Энэ нь ердийн нөхцөлд ч дээжүүд нь үргэлжлүүлэн талсжиж байгааг харуулж байна.



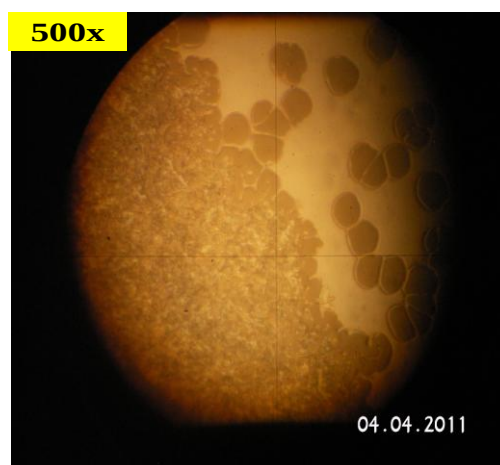
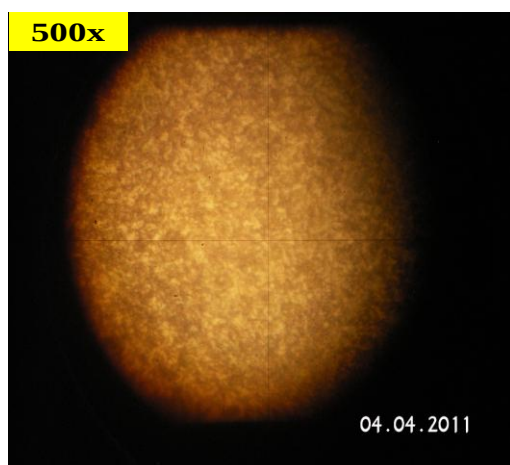
Зураг 5. Шилэн дээр α -NPD бодисыг 113nm зузаантай суулгаж авсан 2 нимгэн хальсны оптик шингээлтийн спектрууд

В. Шилэн дээр α -NPD бодисыг 150nm зузаантай суулгаж авсан 2 нимгэн хальс

Энэ дээжийн хувьд ч дулааны бэхжүүлэлт хийсний дараа талсжиж байгаа нь 6-р зургаас харахад харагдаж байна. Мөн оптик шингээлтийн спектрийн зургаас харахад дулаан бэхжүүлэлт хийснийх бэхжүүлэлт хийгээгүйнхтэй харьцуулахад нь оптик шингээлтийн хэмжээ нь өссөн байсан. Гэхдээ энэ нь 113 нм зузаантай дээжийг бодвол илүү

хурдан талсжиж байгаа нь 3-р зургийн г болон 6-р зургийн б-г харьцуулан харахад харагдаж байна.

Эндээс нь нимгэн хальсны зузаан ихсэх тусам талсжилт илүү хурдан явагдана гэсэн дүгнэлт хийж болно. Талсжилт ердийн нөхцөлд ч эрчимтэй явагдсанаар энгийн нүдээр харахад ч харагдахуйц болсоныг 7-р зургаас харж болно.



Зураг 6. Шилэн дээр α -NPD бодисыг 150nm зузаантай суулгаж авсан нимгэн хальсны гадаргуугын зураг. а-Дулааны бэхжүүлэлт хийгээгүй б-Дулааны бэхжүүлэлт хийсэн



Зураг 7. Бэлтгэж авсан нимгэн хальсны гадаргуугын зураг өсгөлтгүйгээр авсан нь (40 хоногийн дараа)

IV. ДҮГНЭЛТ

Дулааны бэхжүүлэлт нь сүвэрхэг бүтэцтэй [4] суусан бодисуудыг нягтаршуулж өгдөг. Ингэснээр энэ нь бусад хэсгүүдийг өөртөө татаж талстжих төв болно. Иймд дулаан бэхжүүлэлт хийснээр талсжилтийг хурдасгаж өгдөг байна. Өөрөөр хэлбэл α -NPD бодис бүхий нимгэн хальс нь дулаанд тэсвэр муутайг тогтоосон. Иймд α -NPD бодис бүхий нимгэн хальстай төхөөрөмжийг хэт халаах ба хөргөхгүй байх шаардлагатай.

Мөн α -NPD бодис бүхий нимгэн хальс нь ердийн нөхцөлд ч талсждаг болох нь зургаас болон оптик шингээлтийн спектрийн хэмжилтээс харагдаж байна. Ердийн нөхцөлд талсжилт явагдаж байгаа учир нь агаарын чийгийн нөлөөгөөр талсжих төв үүсэх мөн агаарын найрлага дахь зарим хийтэй химийн урвалд орсоноос нимгэн хальсны бүтэц эвдэрч талстжих боломжтой болж байгаатай холбоотой. Энэ нь α -NPD бодис бүхий нимгэн хальс нь нь агаар болон чийгт тэсвэр муутайг харуулж байна. Иймд α -NPD нимгэн хальс бүхий төхөөрөмжийг орчны нөлөөнөөс тусгаарлахын тулд битүүмжлэх шаардлагатай бөгөөд химийн идэвхгүй орчин үүсгэхийн тулд инертийн хий хийдэг.

Талархал

Энэхүү ажлыг Монгол Улсын Засгийн Газрын Инновацийг хөгжүүлэх программын Н.1.7.2 болон Н.2.6.2 төслүүдийн санхүүжилтээр хийж гүйцэтгэсэн болно.

НОМ ЗҮЙ

- [1]. Б.Дэлгэрцэцэг, “Органик хагас дамжуулагчдын оптик шинж чанарын судалгаа”, Магистрын дипломын ажил, МУИС, Улаанбаатар 2007он.
- [2]. www.oled-info.com
- [3]. A.Babajanyan, L.Enkhtur, Kh.Balt-Erdene, H.Melikyan, Y.Yoon, S.Kim, H.Lee, T.Kim, K.Lee, B.Friedman. Anisotropic electric properties of Copper-(II)-Phthalocyanine thin films characterized by near-field microwave microscope. Cur.Appl.Phys. 11 (2011) p.166-170.
- [4]. Matthias Wuttig, Michael Heuken ‘Diplom-Intenieurin Phenwisa Niyamakom aus Bangkok/Thailand (2008)

Эрдэнэт үйлдвэрийн хүдэр болон зэс, молибдений баяжмалын рентген дифракцын судалгаа

Л.Ням-Очир^{1*}, Ч.Дашжаргал¹, Р.Галбадрах¹, Н.Цогбадрах¹, Ц.Даржаа², Д.Дорж²

¹Монгол Улс, Улаанбаатар-210646, Монгол Улсын Их Сургууль, Физик Электроникийн Сургууль
Ерөнхий физикийн тэнхим

²Монгол Улс, Улаанбаатар-210646, Монгол Улсын Их Сургууль, Хими Хими Инженерчлэлийн Сургууль,
Ерөнхий аналитик химийн тэнхим

*Э-шуудан nyam_ochir@yahoo.com

Эрдэнэт үйлдвэрийн баяжуулалтын процессийн шат дамжлагуудаас авсан хатуу дээжүүдэд рентген дифракцын аргаар чанарын фазын анализ хийж зэс, молибден агуулсан нэгдлүүдийн кристалл бүтцийг тодорхойлон торын параметруудийг тооцов. Зэс агуулсан нэгдэл CuFeS_2 халькопиритийн эгэл тор нь тетрагональ сингонийн огторгуйн симметрийн $I -4 2 d$ групптэй ба торын параметрууд нь: $a=5.289(1) \text{ \AA}$, $c=10.423(1) \text{ \AA}$, молибден агуулсан нэгдэл MoS_2 молибденитийн эгэл тор нь гексагональ, ба симметрийн огторгуйн групп нь: $P 6_3/m m c$, торын параметр нь $a=3.14(1) \text{ \AA}$, $c=12.53(1) \text{ \AA}$ болохыг өгөгдлийн сан ашиглан тодорхойлов. Баяжмал дахь MoS_2 , CuFeS_2 нэгдлүүдийн агууламж 5,6-р саруудад буурсан байгааг дифрактограмм дахь эрчмийн уналтаар тооцсон бөгөөд баяжуулах технологид сонирхож буй нэгдлүүдийн бүтцийн өөрчлөлттэй холбоотой нөлөө байхгүй гэдэг дүгнэлтийг гаргав.

Түлхүүр үг: рентген дифракц, кристалл фазын чанарын анализ

I. ОРШИЛ

Эрдэнэт үйлдвэрийн баяжуулах процессийн явцад улирлын чанартай гардаг үр дүнгийн өөрчлөлтөнд зэс болон молибден агуулсан нэгдлүүдийн кристалл бүтцийн өөрчлөлт онолын үүднээс нөлөө үзүүлэх боломжтой юм. Иймээс тус асуудлыг туршлагаар шалгаж дүгнэлт өгөх нь тус ажлын зорилго байсан бөгөөд судалгаандаа 2011 оны 3-аас 10-р саруудад үйлдвэрийн шат дамжлагуудаас дээж авч ажилласан.

Бодисын кристалл бүтцийг тодорхойлохдоо нунтаг дээжийн рентген дифракцын аргаар [1,2] судалсан бөгөөд үр дүнг PDF-2 өгөгдлийн сан[3] ашиглаж торын симметр, параметруудийг тодорхойллоо.

II. ХЭМЖИЛТ БА ФАЗЫН АНАЛИЗ

Рентген дифракцын аргаар Эрдэнэт үйлдвэрийн шат дамжлагуудаас авсан дээжүүдийг судлахдаа МУИС-ийн ФЭС дэхь PW1800 нунтаг дээжийн дифрактометр[4] хэмжилтийг 5° - 60° өнцөгийн хооронд 0.03° алхамтайгаар гүйцэтгэв.

Хэмжилтэнд ирсэн Эрдэнэт үйлдвэрийн дээжүүд үйлдвэрийн баяжуулах шатлалын дагуу дараах байдлаар нэрлэгдсэн байна. Үүнд:

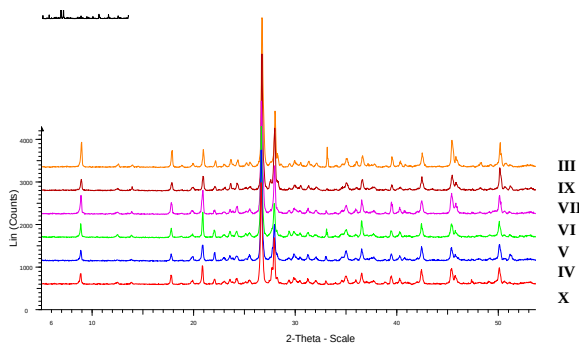
- Питани –хүдэр
- Коллек концентрат – хам баяжмал
- Cu–Mo концентрат – Cu–Mo баяжмал
- Мо концентрат – молибденит баяжмал
- Cu концентрат - зэсийн баяжмал

Эрдэнэт үйлдвэрийн 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10-р саруудын хатуу дээжүүдэд гүйцэтгэсэн рентген дифракцын хэмжилтүүд болон тэдгээрт хийсэн чанарын фазын анализын үр дүнг дээр дурьдсан нэрсийн дарааллаар авч үзье.

A. Хүдэр

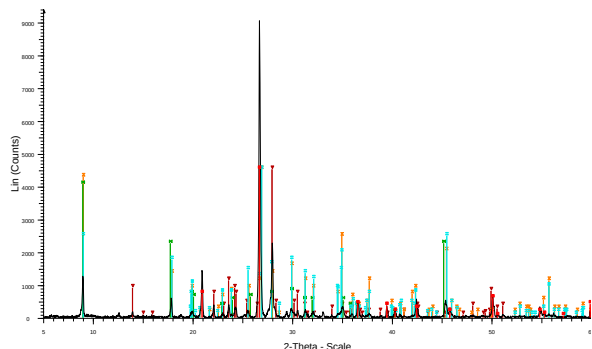
Эрдэнэт үйлдвэрийн 3, 4, 5, 6, 7, 9, 10 саруудын хүдрийн хэмжилтийн спектруудийг харьцуулан үзэхэд (зураг 1) пикүүдийн байрлал нь ижил байгаа тул аль нэг сарын дээжийг сонгон фазын анализ хийхэд хангалттай. Харин пикүүдийн эрчим нь ялгаатай байна.

Хүдэрт хийгдсэн фазын анализаас үзэхэд



Зураг 1 Хүдрийн рентгенидифракцын спектрууд. Хэвтээ тэнхлэгийн дагуу сарнилын өнцөг, босоо тэнхлэгийн дагуу эрчим. Ромбо тоогоор дээж авсан саруудыг тэмдэглэв.

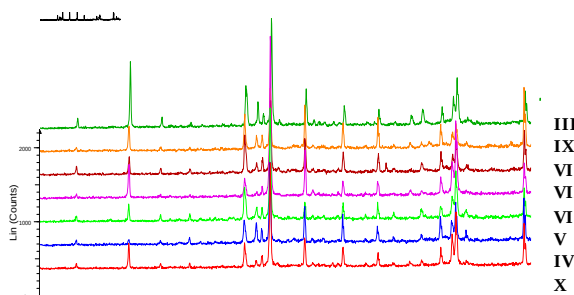
(зураг 2) кварц, албит, мусковит, иллит зэрэг кристаллууд давамгайлах агууламжтайгаар илрэв.



Зураг 2 Хүдрийн фазын чанарын анализын дүн. Кварц (SiO_2), албит ($\text{NaAlSi}_3\text{O}_8$), мусковит ($\text{KAl}_2(\text{Si}_3\text{Al})\text{O}_{10}(\text{OH},\text{F})_2$), иллит ($(\text{K},\text{H}_3\text{O})\text{Al}_2\text{Si}_3\text{AlO}_{10}(\text{OH})_2$) зэрэг кристалл бүтцүүд давамгайлах концентрацитайгаар илрэв.

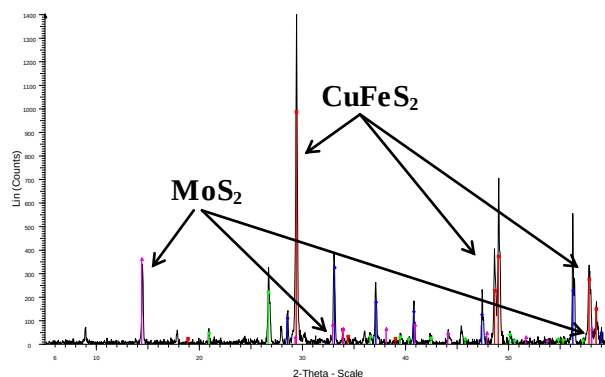
Б. Хам баяжмал

Эрдэнэт үйлдвэрийн 3-10 сарын хам баяжмалын хэмжилтийн спектруудийг



Зураг 3. Хам баяжмалын рентгенидифракцын спектрууд. Хэвтээ тэнхлэгийн дагуу сарнилын өнцөг, босоо тэнхлэгийн дагуу эрчим. Ромбо тоогоор дээж авсан саруудыг тэмдэглэв.

харьцуулан үзэхэд (зураг 3) пикүүдийн байрлал нь ижил байгаа тул аль нэг сарын дээжийг сонгон фазын анализ хийхэд бусад сарын дээжүүд мөн тайлбарлагдана.

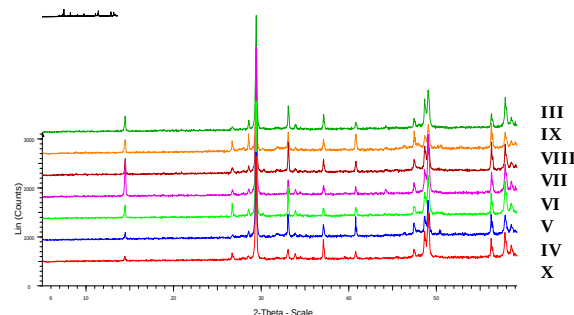


Зураг 4. Хам баяжмалын фазын чанарын анализын дүн. Халькопирит (CuFeS_2), Пирит (FeS_2), Кварц (SiO_2), Молибдений сульфид (MoS_2) зэрэг кристалл бүтцүүд илрэв.

Хам баяжмалд хийгдсэн чанарын фазын анализын дүнг үзэхэд (зураг 4) халькопирит, пирит, кварц, молибдений сульфид гэх бүтцүүд илрэв.

В. Cu–Мо баяжмал

Эрдэнэт үйлдвэрийн 3-10 сарын Cu–Мо баяжмалын хэмжилтийн спектруудийг

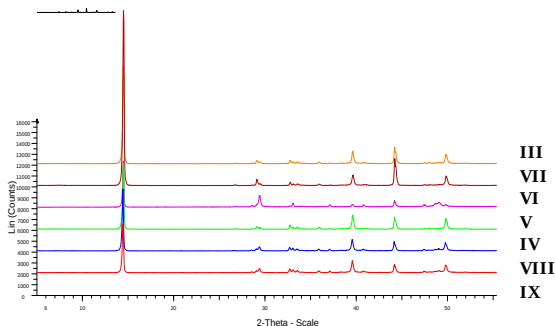


Зураг 5. Cu–Мо баяжмалын рентгенидифракцын спектрууд. Хэвтээ тэнхлэгийн дагуу сарнилын өнцөг, босоо тэнхлэгийн дагуу эрчим. Ромбо тоогоор дээж авсан саруудыг тэмдэглэв.

харьцуулан үзэхэд (зураг 5) пикүүдийн байрлал нь ижил байгаа тул аль нэг сарын дээжийг сонгон фазын анализ хийхэд бусад сарын дээжүүд мөн тайлбарлагдана. Cu–Мо баяжмалд хийсэн фазын чанарын анализын дүнд Халькопирит, Пирит, Кварц, Молибдений сульфид зэрэг кристалл бүтцүүд илрэв.

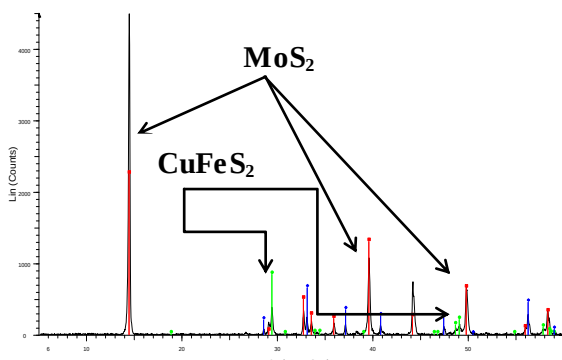
Г. Молибдений баяжмал

Эрдэнэт үйлдвэрийн 3, 4, 5, 6, 7, 8 ба 9 саруудын молибдений баяжмалын хэмжилтийн спектруудийг харьцуулан үзэхэд (зураг 6) пикүүдийн байрлал нь ижил байгаа тул аль нэг сарын дээжийг сонгон фазын анализ хийхэд бусад сарын дээжүүд мөн тайлбарлагдана. Молибдений баяжмалын фазын чанарын анализын дүнд (зураг 7) Молибденитын



Зураг.6 Молибдений баяжмалын рентгендифракцын спектрүүд. Хэвтээ тэнхлэгийн дагуу сарнилын өнцөг, босоо тэнхлэгийн дагуу эрчим. Ромбо тоогоор дээж авсан саруудыг тэмдэглэв.

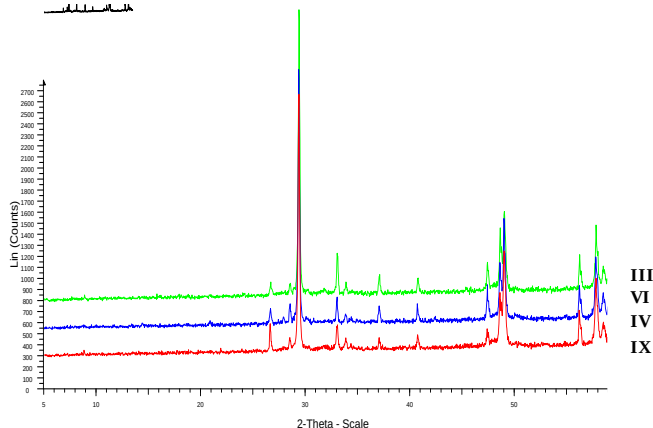
кристал бүтцийн эзлэх хувь их байгаа нь харагдаж байна.



Зураг 7. Молибдений баяжмалын хийсэн фазын чанарын анализын дүн. Молибденит (MoS_2), Халькопирит (CuFeS_2), Пирит (FeS_2) зэрэг кристалл бүтцүүд илрэв.

Д. Зэсийн баяжмал

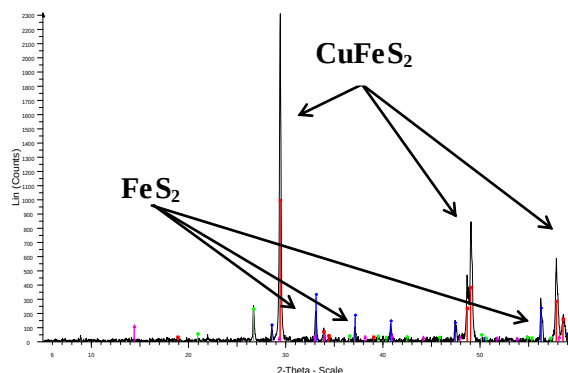
Эрдэнэт үйлдвэрийн 3, 4, 6 ба 9 саруудын зэсийн баяжмалын хэмжилтийн спектрүүдийг зураг 8-д харьцуулан үзүүлэв. Энд мөн л



Зураг 8. Зэсийн баяжмалын рентгендифракцын спектрүүд. Хэвтээ тэнхлэгийн дагуу сарнилын өнцөг, босоо тэнхлэгийн дагуу эрчим. Ромбо тоогоор дээж авсан саруудыг тэмдэглэв.

пикүүдийн байрлал нь ижил байгаа тул нэг сарын дээжийг сонгон фазын анализ хийв.

Cu концентрат дээжид хийсэн фазын чанарын анализын дүнд (зураг 9) Халькопирит, Пирит, болон Кварц илрэв.



Зураг 9. Зэсийн баяжмал фазын чанарын анализын дүн. Халькопирит (CuFeS_2), Пирит (FeS_2), Кварц (SiO_2), зэрэг кристалл бүтцүүд илрэв.

III. ҮР ДҮН ХЭЛЭЛЦҮҮЛЭГ

Эрдэнэт үйлдвэрийн шат дамжлагууд дахь сар бүрийн дээжүүдийн рентген спектрээс үзэхэд зэс агуулсан Халькопирит CuFeS_2 , молибден агуулсан Молибденит MoS_2 нэгдлүүд голлон илэрч байна.

Халькопирит CuFeS_2 -ийн кристалл бүтэц:

Тетрагональ, симметрийн огторгуйн групп нь: $I - 4 2 d$, торын параметрууд нь: $a = 5.289(1) \text{ \AA}$, $b = 5.289(1) \text{ \AA}$, $c = 10.423(1) \text{ \AA}$, $\alpha = 90^\circ$, $\beta = 90^\circ$, $\gamma = 90^\circ$

Молибденит MoS_2 -ийн кристалл бүтэц:

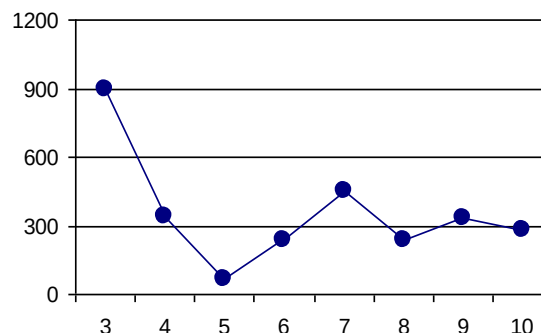
Гексагональ, симметрийн огторгуйн групп нь: $P 63/m m c$, торын параметр нь $a = 3.14 \text{ \AA}$, $b = 3.14 \text{ \AA}$, $c = 12.53 \text{ \AA}$, $\alpha = 90^\circ$, $\beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$.

Хүснэгт 1. Рентген дифракцын фазын анализын дүн

№	Дээж	Кристалл фаз	Торын сингони
1	Хүдэр	Кварц SiO_2	Гексагональ
		Альбит $\text{NaAlSi}_3\text{O}_8$	Триклин
		Мусковит $\text{KAl}_2(\text{Si}_3\text{Al})\text{O}_{10}(\text{OH},\text{F})_2$	Моноклин
		Иллит $(\text{K},\text{H}_3\text{O})\text{Al}_2\text{Si}_3\text{AlO}_{10}(\text{OH})_2$	Моноклин
		$\text{K}(\text{Mg},\text{Al})_{2.04}(\text{Si}_{3.34}\text{Al}_{0.66})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	Моноклин
		бусад	
2	Хам баяжмал	Халькопирит CuFeS_2	Тетрагональ
		Пирит FeS_2	Куб
		Кварц SiO_2	Гексагональ
		Молебденит MoS_2	Гексагональ
		$\text{K}(\text{Mg},\text{Al})_{2.04}(\text{Si}_{3.34}\text{Al}_{0.66})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	Моноклин
3	Cu-Mo баяжмал	Халькопирит CuFeS_2	Тетрагональ
		Пирит FeS_2	Куб
		Кварц SiO_2	Гексагональ
		Молебденит MoS_2	Гексагональ
4	Зэсийн баяжмал	Халькопирит CuFeS_2	Тетрагональ
		Пирит FeS_2	Куб
		Кварц SiO_2	Гексагональ
5	Молибдений баяжмал	Молебденит MoS_2	Гексагональ
		Пирит FeS_2	Куб
		Халькопирит CuFeS_2	Тетрагональ

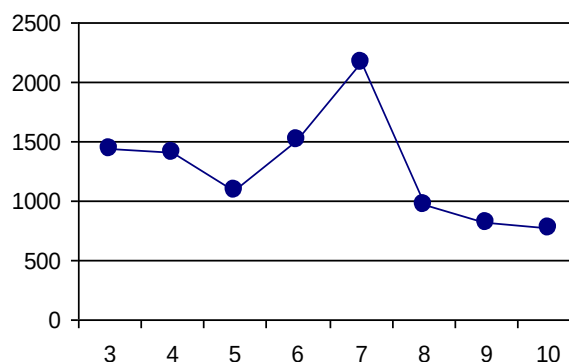
Эдгээр нэгдлүүдийн кристалл бүтцийг өгөгдлийн сантай[5] харьцуулан тодорхойлсонийг хүснэгт 1-ээр үзүүлэв.

Эдгээрээс өөр зэс, молибден агуулсан кристалл бүтэц илрээгүй бөгөөд харин сар бүрийн дээжүүдэд эрчмийн өөрчлөлт бүртгэгдсэн. Уг



Зураг 10 Хам баяжмал дахь MoS_2 -ийн дифракцын үндсэн пикийн абсолют эрчмийн өөрчлөлт. Хэвтээ тэнхлэг дагуу сарууд, босоо тэнхлэг дагуу абсолют эрчим

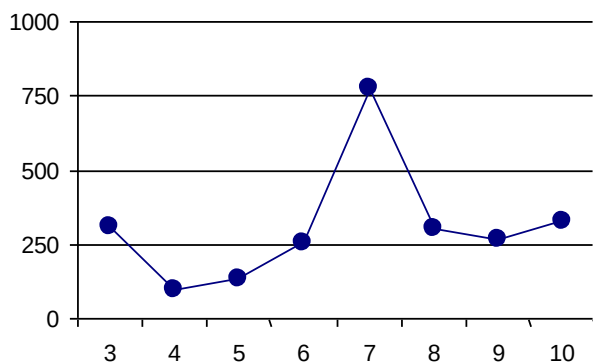
эрчмийн өөрчлөлт нь тухайн сарын дээж дэх агуулга, концентрацитай шууд пропорциональ юм. Зураг 10, 11-оос үзвэл халькопирит болон



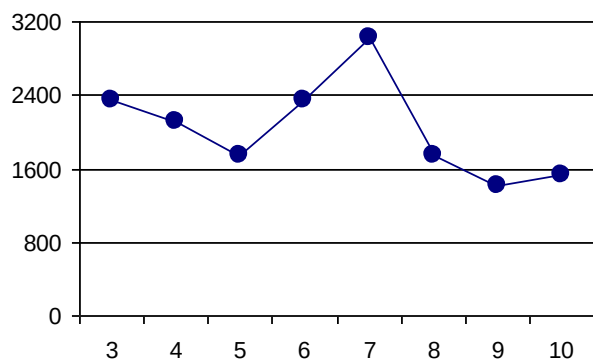
Зураг 11 Хам баяжмал дахь CuFeS_2 -ийн дифракцын үндсэн пикийн абсолют эрчмийн өөрчлөлт. Хэвтээ тэнхлэг дагуу сарууд, босоо тэнхлэг дагуу абсолют эрчим

молибденитийн агуулга 5-р сард багасч байгаа бөгөөд 7-р сард эргэж ихэссэн гэсэн дүгнэлтийг хийж болох ба өөрчлөлтийн хувиар авч үзвэл MoS_2 -ийн агуулгын хэлбэлзэл нэлээд их байна. Харин бүх саруудын рентген дифракцын спектрт пикийн байрлалын өөрчлөлт болон пикийн өргөсөлт ажиглагдахгүй байгаа нь кристалл бүтцийн симметр, параметрийн болон холбоосын өөрчлөлт байхгүй байгааг илэрхийлж байна.

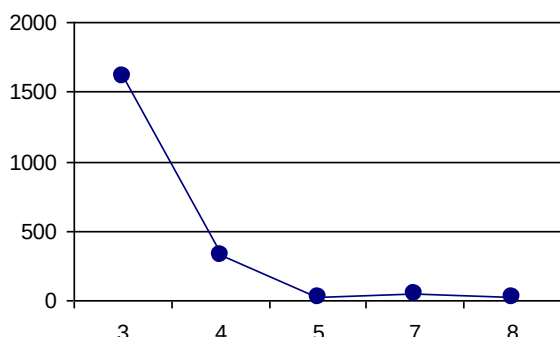
Дифракцын спектр дэхь абсолют эрчмийн сарын өөрчлөлтүүд MoS_2 , CuFeS_2 нэгдлүүдийн хувьд ямар байгааг дараах зургуудад үзүүлээ.



Зураг 12 Си-Мо баяжмал дахь MoS₂-ийн дифракцын үндсэн пикийн абсолют эрчмийн өөрчлөлт. Хэвтээ тэнхлэг дагуу сарууд, босоо тэнхлэг дагуу абсолют эрчим



Зураг 13 Си-Мо баяжмал дахь дэхь CuFeS₂-ийн дифракцын үндсэн пикийн абсолют эрчмийн өөрчлөлт. Хэвтээ тэнхлэг дагуу сарууд, босоо тэнхлэг дагуу абсолют эрчим



Зураг 14 Молибдений баяжмал дахь MoS₂-ийн дифракцын үндсэн пикийн абсолют эрчмийн өөрчлөлт. Хэвтээ тэнхлэг дагуу сарууд, босоо тэнхлэг дагуу абсолют эрчим

IV. ДҮГНЭЛТ

Эрдэнэт үйлдвэрийн шат дамжлагуудын хатуу дээжүүдэд хийсэн рентген дифракцын фазын анализын үр дүнгээс үзэхэд зэс болон молибден агуулсан гол кристалл бүтцүүд нь CuFeS₂, MoS₂ байна. Эдгээрээс өөр зэс болон молибден агуулсан кристалл бүтэц эдгээр дээжүүдэд илэрсэнгүй.

Харин дифрактограмм дахь эрчмийн өөрчлөлтүүд ажиглагдсан бөгөөд энэ нь тухайн кристалл бүтцийн агуулгыг илэрхийлдэг тул

MoS₂, CuFeS₂ кристаллуудын агуулга 5, 6-р саруудад буурсан үр дүн гарч байна

CuFeS₂-ийн кристалл бүтэц нь тетрагональ симметртэй бол MoS₂-ийн кристалл нь гексагональ эгэл тортой байгааг хэмжилтийн үр дүнг PDF-2 өгөгдлийн сантай[3] харьцуулан тодорхойллоо.

Сар бүрийн хатуу дээжүүд нь кристалл бүтцийн агуулгын хувьд хоорондоо ижил бөгөөд кристалл бүтцийн симметр, параметрийн болон холбоосын өөрчлөлт байхгүй байна. Иймээс баяжуулах технологийн үр дүнд зэс, молибден агуулсан нэгдлийн бүтцийн өөрчлөлттэй холбоотой нөлөөлөл байхгүй байна гэж дүгнэж байна.

НОМ ЗҮЙ

1. V.K. Pecharsky, Fundamentals of Powder Diffraction and Structural Characterization of Materials, Second edition, Springer, 2009
2. A.Clearfield et al, Principles and Applications of Powder Diffraction, Wiley, 2008
3. Powder diffraction database PDF-2, 2001. www.icdd.com
4. Philips users guide for PW1800 x-ray diffractometer 1999. Germany
5. Theo Hahn: International Table for Crystallography, Vol. A, Springer, 2005

Нунтаг дээжийн рентген дифрактометр D500 төхөөрөмжөөр усны бүтцийг судлах боломж

Л.Ням-Очир^{1*}, Л.Алтайбаатар¹, Ч.Дашжаргал¹, Н.Цогбадрах², Д.Сангаа³

¹Монгол Улс, Улаанбаатар-210646, Их сургуулийн гудамж-1, Монгол Улсын Их Сургууль, Физик Электроникийн Сургууль, Ерөнхий физикийн тэнхим

²Монгол Улс, Улаанбаатар-210646, Их сургуулийн гудамж-1, Монгол Улсын Их Сургууль, Физик Электроникийн Сургууль, Онолын физикийн тэнхим

³ОХУ, Дубна, Цөмийн Шинжилгээний нэгдсэн институт, И.М. Франкийн нэрэмжит нейтроны физикийн лаборатори

*Э-шуудан nyam_ochir@num.edu.mn

Хатуу биеийн кристалл бүтцийг судлахад зориулагдсан нунтаг дээжийн рентген дифрактометр D500 төхөөрөмжөөр усны бүтцийг судлахын тулд шинээр шингэн дээж хэмжих дээжийн тавиур болон нимгэн хальс бэлтгэж, усны хэд хэдэн дээжийг тусгай горимын дагуу хэмжсэн ба рентген дифракцын спектрууд дэх зөрөөнд үндэслэн усны бүтцэд орсон өөрчлөлтийг тодорхой процессийн явцад судлах бололцоотой болохыг үзүүлэв. Хэмжсэн спектруудад ойрын эрэмбэд харгалзах гурван пик бүртгэгдсэн нь хавтгай хоорондын зайн 4.8 ± 0.2 Å, 3.2 ± 0.3 Å, 2.2 ± 0.4 Å утгуудад харгалзаж байв.

I. ОРШИЛ

Усны бүтцийн судалгаа нь орчин үед нэлээд чухал судалгааны чиглэл болж байгаа бөгөөд тухайн үзэгдэл, гадны үйлчлэлийн үед усны шинж чанар өөрчлөгдөж байгааг түүний бүтцийн өөрчлөлттэй холбон тайлбарладаг [1]. Бодисын дотоод бүтэц нь түүний физик шинж чанарыг тодорхойлох ба усны хувьд маш олон төрлийн хачирхалтай шинж чанарууд бүртгэгдсэн байдаг нь усны бүтцийн судалгаа чухал ач холбогдолтой болохыг илтгэж байгаа юм.

Бодисын бүтцийн судалгааны гол арга болох рентген дифракцын аргыг шингэн төлөвт байгаа бодист хэрэглэх талаар сүүлийн үед бусад эрдэмтдийн ажлын үр дүнгүүд гарч эхэлсэн билээ [2-4].

Бид энэ ажлаар МУИС-ийн ФЭС-ийн Рентген бүтцийн судалгааны лаборатори дахь тоног төхөөрөмжийг ашиглан усны бүтцийг судлах боломжийн талаар авч үзсэн юм.

II. ХЭМЖИХ АРГАЧЛАЛ

МУИС-ийн ФЭС-ийн Рентген бүтцийн судалгааны лаборатори нь PW1800 болон D500 маркийн хоёр дифрактометртэй бөгөөд усны хэмжилтэнд D500

дифрактометрийг ашиглалаа. Siemens D500 дифрактометр нь нунтагласан хатуу дээжийн кристалл бүтцийг судлах зориулалттай бөгөөд гониометрийн хэсэг нь дээжийг гараар байрлуулах бололцоотой учир тус ажилд ашиглагдсан юм [5].

Бүтцийн судалгааны хэмжилтийн явцад Брэгтийн өнцгөөс хамааран дээжийн байрлал хэвтээ тэнхлэгт 45° хүртэлх өнцгөөр хазайдаг учир усыг хэмжихэд асгахгүй байх үүднээс тусгай тавиур шаардлагатай. Мөн шингэн бодисын хувьд шингээлтийн фактор өндөр утгатай учир хэмжилтийн нөхцөл ба дээжийн хэмжээг хатуу дээжийнхээс өөрөөр тохируулан сонгох шаардлага үүсч байгаа юм.

Иймээс усны дээжийг рентген дифрактометрт хэмжихэд зориулан $50\text{мм} \times 50\text{мм} \times 9\text{мм}$ хэмжээтэй бэлдцэнд 27мм диаметртэй, 7мм гүн бүхий нүх ухаж дээд талдаа 10 мкм зузаантай нимгэн хальстай тусгай дээжийн тавиур бэлтгэсэн. Тус нимгэн хальс нь рентген туяаны дифракцын спектрт ямар нэг нөлөө үзүүлэхгүй болохыг хэмжилтээр туршиж баталсан. Бэлтгэсэн тавиурыг ашиглан хэмжилт гүйцэтгэхэд нэг удаа 4 гр усны дээж шаардагдсан. Нийт дээжийн рентген дифракцын спектрийг Cu

анодтой рентген хоолойн хувьд Брэггийн өнцгийн 5° -аас 60° мужид 0.01° алхамтайгаар бүртгэв.

III. РЕНТГЕН ДИФРАКТОМЕТР D500 ТӨХӨӨРӨМЖӨӨР ХЭМЖСЭН УСНЫ СПЕКТР

Рентген дифрактометр D500 төхөөрөмжид хэд хэдэн төрлийн усны дээжийг хэмжихдээ тэдгээрийн спектрийг харьцуулах үүднээс нэрмэл ус болон Эрдэнэтийн Уулын Баяжуулах Үйлдвэр (УБҮ)-ийн баяжуулах процессийн шат дамжлагуудаас авсан усны дээжүүдийг сонгосон юм. Эдгээр усны дээжүүд нь баяжуулах процессийн явцад өөр өөр үйлчлэлд орсны улмаас бүтцийн өөрчлөлт бий болсон байх магадлалтай билээ. Бүх дээжийг ижил нөхцлөөр хэмжсэн бөгөөд тэдгээрийн рентген дифракцын спектрүүдийг харьцуулсныг 1,2-р зурагт үзүүлэв.

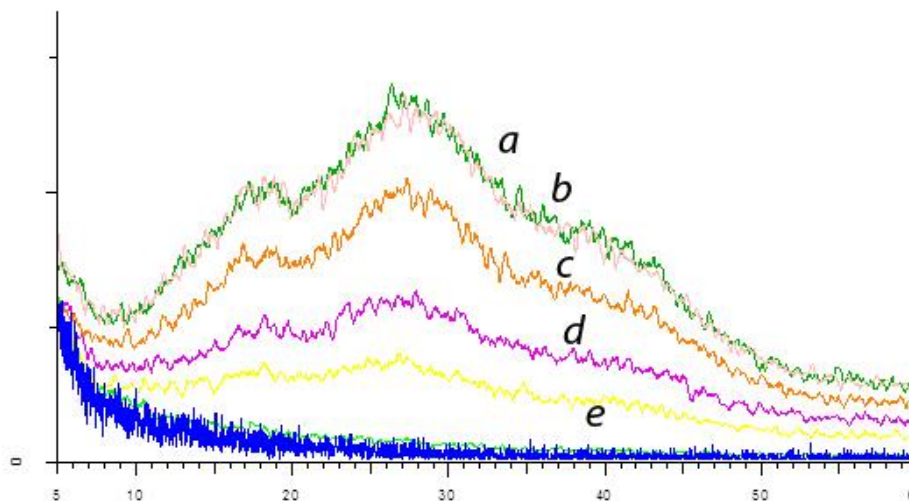
Нэрмэл усны болон Эрдэнэт үйлдвэрийн баяжуулах процессийн шат дамжлагууд дахь усны дээжүүдийн спектрийг харьцуулан авч үзэхэд Брэггийн өнцгийн 15° - 20° , 22° - 33° , 36° - 50° мужуудад бүтцийн симметрийн ойрын эрэмбэд харгалзах пикүүд бүртгэгдсэн байгаагийн зэрэгцээ эрчмийн

өөрчлөлтүүд тодоор илрэн гарсан байна. Уг үр дүн нь бидний бэлтгэсэн хэмжилтийн нөхцөл, горим нь усны бүтцийн судалгаанд ашиглаж болохуйц гэдгийг баталж байгаа юм. Спектрт бүртгэгдсэн ойрын эрэмбийг илэрхийлэх пикүүд болон эрчмийн өөрчлөлтүүд нь усны бүтэц дэхь өөрчлөлтүүдтэй холбоотой бөгөөд усанд тодорхой үйлчлэл үзүүлсний дүнд үүсэх нөлөөллийг тус үр дүнд үндэслэн судлах бололцоотой юм.

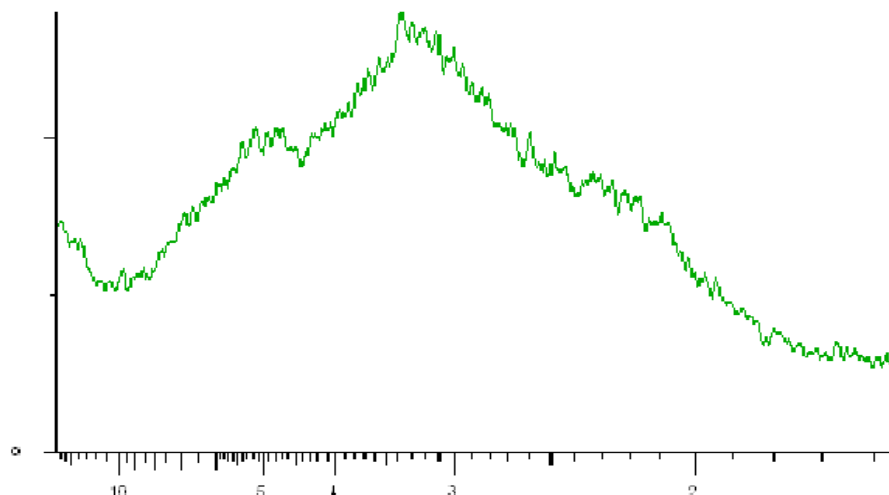
Усны рентген дифракцын спектр дэхь харьцангуй өргөн пикүүдийн байрлал нь хавтгай хоорондын зайн $8\text{-}4.4 \text{ \AA}$, $4.3 \pm 2.6 \text{ \AA}$, $2.5 \pm 1.9 \text{ \AA}$ утгуудад харгалзаж байгаа нь гадаадын эрдэмтдийн дээрх чиглэлээр хийсэн хэмжилт, судалгааны үр дүнтэй тохирч байгаа юм [2-3].

IV. ДҮГНЭЛТ

Нунтаг хатуу дээжийн кристалл бүтцийг судлахад зориулсан рентген дифрактометр Siemens D500 төхөөрөмжид шингэн төлөвт байгаа дээжийг хэмжихэд зориулсан дээжийн тавиур шинээр бэлдэж, хэмжилтийн аргачлал боловсруулав.



Зураг 1. Нэрмэл ус болон Эрдэнэт үйлдвэрийн баяжуулах процессийн шат дамжлагуудаас авсан усны дээжүүдийн рентген дифракцын спектрүүдийг харьцуулсан байдал. Босоо тэнхлэгийн дагуу эрчим, хэвтээ тэнхлэгийн дагуу Брэггийн өнцөг. a-8 сарын эргэлтийн ус, b-10 сарын эргэлтийн ус, c-Сэлэнгийн ус, d-5 сарын шүүрлийн ус, e-8 сарын шүүрлийн ус, бусад-5 сарын шүүрлийн, хүдрийн, эргэлтийн усны спектрүүд



Зураг 2. Нэрмэл усны рентген дифракцын спектр. Хэвтээ тэнхлэгийн дагуу хавтгай хоорондын зай d [Å], босоо тэнхлэгийн дагуу эрчим.

Уг аргачлалын дагуу хэмжсэн усны хэд хэдэн төрлийн дээжийн рентген дифракцын спектрт 8 ± 4.4 Å, 4.3 ± 2.6 Å, 2.5 ± 1.9 Å утгуудад харгалзах бүтцийн симметрийн ойрын эрэмбийн давтагдалтын пикүүд бүртгэгдэв. Эдгээр пикүүд нь усны өөр өөр дээжийн хувьд эрчмийн зөрөөтэй байгаа нь гадны үйлчлэлд орсны дараах бүтцийн өөрчлөлтийг илэрхийлнэ. Иймээс эдгээр пикийн эрчмийн өөрчлөлт болон байрлалаар тодорхой процессийн явц дахь усны бүтцийн өөрчлөлтийг судлах бололцоотой гэсэн дүгнэлтийг хийж байна.

АШИГЛАСАН НОМ, ХЭВЛЭЛ

1. J. L Finney, *Phil. Trans. R. Soc. Lond. B.*, Vol.359, p.1145-1165, (2004)
2. Tetsuro Yokono *et al.*, *Japanese Journal of Applied Physics*, Vol.43, p.L1436-L1438 (2004)
3. Shigezo Shimokawa *et al.*, *Japanese Journal of Applied Physics*, Vol.46, p.333-335, (2007)
4. C.Guse *et al.*, *J.Phys.: Condens.Matter*, Vol. 22, p.325105, (2010)
5. Technical description D500, Siemens, Geratewerk Karlsruhe. 1995

X-ray Diffraction Measurement to Study Water Structure at Room Temperature

L.Nyam-Ochir¹, L.Altaiabaatar¹, Ch.Dashjargal¹, N.Tsogbadrakh², D.Sangaa³

¹Department of General Physics, School of Physics and Electronics,
National University of Mongolia, University Street-1, Ulaanbaatar-210646, Mongolia

²Department of Theoretical Physics, School of Physics and Electronics,
National University of Mongolia, University Street-1, Ulaanbaatar-210646, Mongolia

³Frank Laboratory of Neutron Physics, Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia

The special sample holder with cling film was prepared to study water structure by x-ray diffractometer D500 for solid samples and some water samples were measured at room temperature. Three peaks were collected on the diffraction patterns in the range 4.8 ± 0.2 Å, 3.2 ± 0.3 Å, 2.2 ± 0.4 Å and their intensity differences can give information about water structure during the environmental change.

Халтмар эрдсийн рентген дифракц ба молекулын хэлбэлзлийн спектрийн судалгаа

Л.Алтайбаатар, Л.Ням-Очир*, Ш.Мөнхжаргал

Монгол Улс, Улаанбаатар-210646, Монгол Улсын Их Сургууль, Физик Электроникийн Сургууль,
Ерөнхий Физикийн Тэнхим

*Э-уудан: nyam_ochir@yahoo.com

Ховд аймгийн Булган сумын нутгийн турмалин буюу халтмар эрдсийг нунтаг дээжийн рентген дифракцийн арга ба молекулын нил улаан туяаны спектрийн аргуудар судалж, $\text{NaFe}_3\text{Al}_6(\text{BO}_3)_3\text{Si}_6\text{O}_{18}(\text{OH})_4$ нэгдэл агуулсан *short tourmaline* төрлийн халтмар болохыг тодорхойлсон ба OH , BO_3 , Si_6O_{18} , Si-O , Fe-O , O-Al-O холбоосуудын хэлбэлзэлд харгалзах шингээлтийн спектрийн 3547.09cm^{-1} ; 1271.09cm^{-1} ; 975.98cm^{-1} , 715.59cm^{-1} , 613.36cm^{-1} , 491.85cm^{-1} давтамжийн утгууд бүртгэгдсэн нь бусад судлаачдын ажлын үр дүнтэй тохирч байна.

I. ОРШИЛ

Халтмар буюу турмалин гэж нэрлэгдсэн эрдсийн пьезо ба пироцахилгаан шинж чанар нь сүүлийн үед материалын судалгаа ба эмчилгээ сувилгаа, барилгын материал, электроник, ус боловсруулах, гоёл чимэглэл зэрэгт өргөн ашиглагдах болжээ. Байгаль дээр халтмарын олон төрлийн эрдсүүд талст хэлбэрээр тархсан байдаг ба манай улсын Ховд, Баян-Өлгий, Дундговь, Төв зэрэг аймгийн нутагт энэхүү эрдсийн илрэлүүд бий.

Эдгээрээс Ховд аймгийн Булган сумын нутгийн олдвор болох турмалин буюу халтмар эрдсийг сонгон авч судаллаа. Учир нь тус эрдсийн усны бүтцэд нөлөөлөх асуудлыг цаашид судлахаар төлөвлөж байгаа юм. Бид сонгож авсан халтмар эрдсээ рентген дифракцийн арга, нил улаан туяаны ба раманы спектрийн аргуудаар судалж кристалл бүтэц болон молекулуудын шингээлтийн спектрийн давтамжуудыг судалсан.

II. ТУРШИЛТ

Халтмар эрдсийн химийн ерөнхий томъёо нь $\text{XY}_3\text{Z}_6(\text{BO}_3)_3\text{Si}_6\text{O}_{18}\text{W}_4$ үүний $\text{X}=\text{Na}$, Ca , K ба $\text{Y}=\text{Mg}$, Fe , Mn , Li , Cr^{+3} , V^{+3} , Ti , Al , $\text{Z}=\text{Al}$, Mg , Fe , V^{+3} , Cr^{+3} зэрэг элементүүд суусан байдаг байна. Халтмарын кристаллын симметрийн огторгуйн групп нь R3m , кристалл бүтцийн хувьд Y элемент дээр

оройтой 3 том октаэдр ба Z элемент дээр оройтой 6 жижиг октаэдр агуулсан хэлбэртэй байдаг[1,2]. Халтмар эрдсийн хувьд Si_6O_{18} -ийн тетраэдр бүхий гексагональ цагирагууд нь BO_3 -ийн 3 гурвалжинтай холбогддог ба Al , Fe , Mn -ийн катионууд Si_6O_{18} цагирагуудтай холбогдоно. Тус октаэдрууд болон холбоосын хэлбэрүүд, агуулсан элементүүдээс хамаарч нил улаан туяаны спектрийн шинж чанар өөрчлөгддөг. Халтмар эрдсийн бүтцэнд усны бүтцийн судалгаанд чухал нөлөө үзүүлэх гидроксильн бүлэг OH нь агуулагддаг ба хоёр өөр байрлалд оршдог байна [2]. Иймээс усны бүтцэд үзүүлэх нөлөөг судлахын өмнө кристалл дахь гидроксильн бүлгийн талаар судлах нь чухал ач холбогдолтой юм.

Сонгон авсан Ховд аймгийн Булган сумын нутгаас олдсон турмалин буюу халтмар эрдсийн дээжийг судлахдаа 1~10 мкм хэмжээтэй болтол нунтаглан бэлтгэж рентген дифракцийн ба молекулын спектрийн хэмжилтүүдийг гүйцэтгэв.

Рентген дифракцийн хэмжилтийг МУИС-ийн ФЭС дэхь нунтаг дээжийн рентген дифрактометр PW1800 төхөөрөмжөөр хийхдээ хэмжилтийн нөхцлийг эхлэх өнцөг 5° , дуусах өнцөг 60° , алхам 0.05° байхаар сонгосон. Чанарын фазын анализыг PDF-2 өгөгдлийн сан ашиглаж гүйцэтгэн кристалл бүтцийг DIAMOND 2.0 программаар байгуулав.

Нил улаан туяаны спектрийг IR Prestige 21 спектрометрээр хэмжиж спектрийн

боловсруулалтыг IR Solution программ ашиглан хийсэн. Тус төхөөрөмж нь 4000 см^{-1} мужид 400 см^{-1} ялгах чадвартай юм.

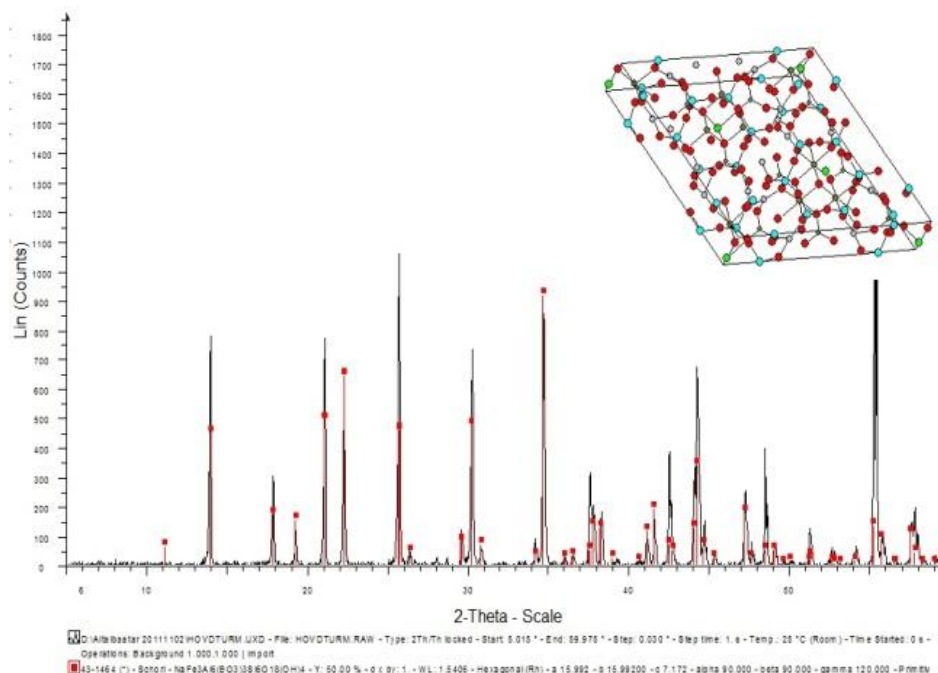
III. ҮР ДҮН, ХЭЛЭЛЦҮҮЛЭГ

Нунтаг дээжийн рентген дифракцын хэмжилтийн үр дүнд чанарын фазын анализ хийсэн үр дүнг Зураг 1-д үзүүлэв. Рентген дифракцийн спектрт чанарын фазын анализ хийхэд $\text{NaFe}_3\text{Al}_6(\text{BO}_3)_3\text{Si}_6\text{O}_{18}(\text{OH})_4$ бүхий химийн элементүүд агуулсан, кристалл бүтэцтэй хар халтмар (short tourmaline)

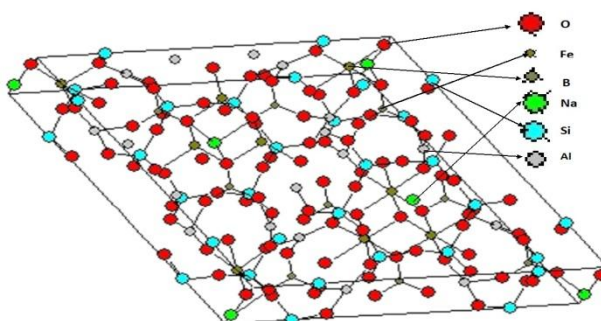
болох нь илрэв. Өөр ямар нэг кристалл бүтэц давхар илрээгүй нь тус сонгож авсан дээжийн фазын цэвэр байдлыг тодорхойлж байна.

Тус фазын анализын дүнд үндэслэн бүтцийн өгөгдлүүдийг тодорхойлон ICSD өгөгдлийн сан ашиглаж кристалл бүтцийг дүрсэлснийг Зураг 2-т үзүүлээ.

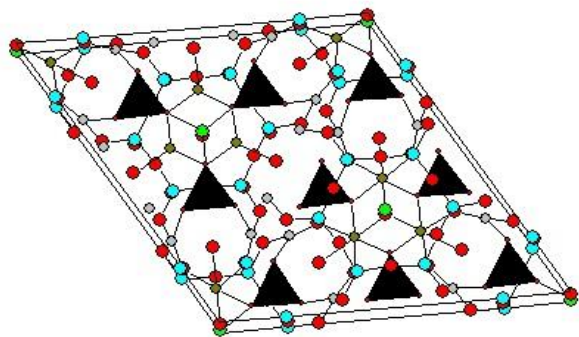
Кристалл бүтэц дэх BO_3 болон Si_6O_{18} гурвалжингуудыг бүтцээс ялган дүрсэлснийг Зураг 3, 4-т үзүүлэв. Халтмар эрдсийн нил улаан туяаны шингээлтийн спектрийг Зураг 5-д үзүүлэв.



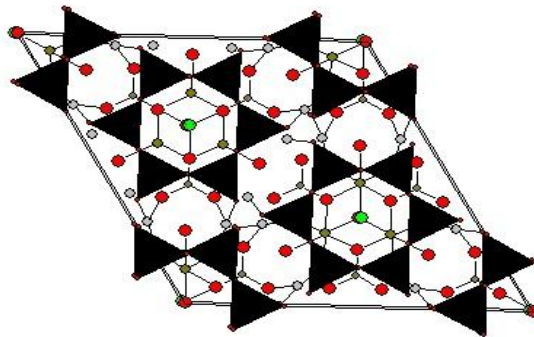
Зураг 1. Халтмар эрдсийн рентген дифракцын спектрийн чанарын фазын анализ



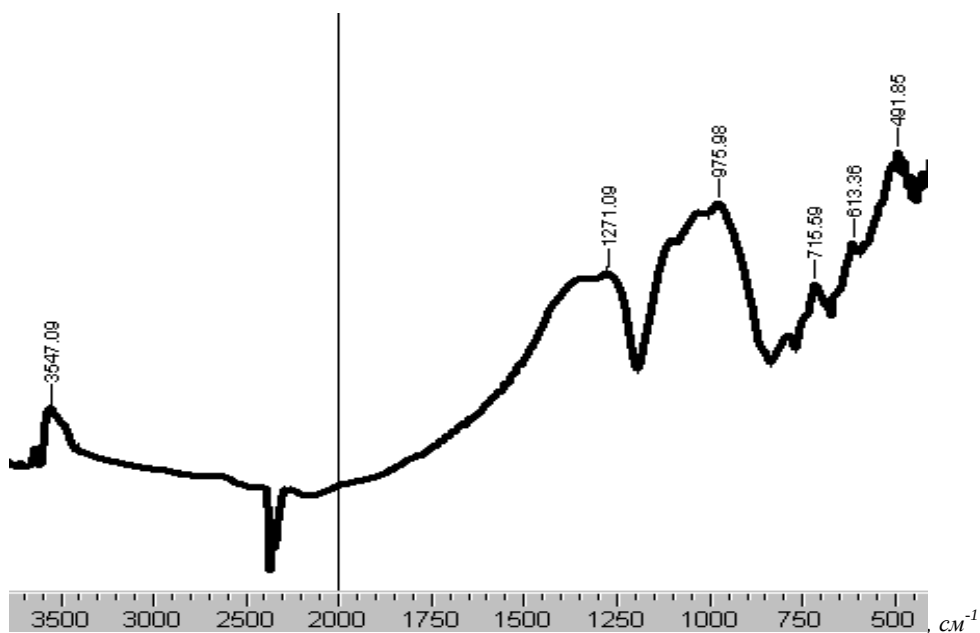
Зураг 2. кристаллын эгэл тор Улаан өнгөтэй дугуйгаар - O, ногоон - Na, жижиг саарал- B, хар ногоон- Fe, Саарал- Al, Цэнхэр - Si.



3-р зураг BO_3 (хар өнгийн гуралжин нь BO_3)



4-р зураг. BO_3 (цагаан өнгийн гуралжин дүрс нь Si_6O_{18})



5-р зураг. Халтмар эрдсийн молекулын нил улаан туяаны шингээлтийн спектр

1-р хүснэгт. Халтмар эрдсийн дээжийн нил улаан туяаны ба раманы спектрийн шингээлтийн спектрийн тайлбар

	Нил улаан туяаны спектр дэх долгион тооны утга	Раманы спектр дэх долгион тооны утга [5]	Тайлбар [6] холбоосын агшилт ба суналтын хэлбэлзэл
Долгион тоо, cm^{-1}	3547.09	3565.0	ОН, ОН-Fe
	1271.09	1340.0	(BO_3)
	975.98	1047.2	Si_6O_{18}

	715.59	772.9	Si-O ба Si-O-Si
	613.36	547.0	Fe-O
	491.85	382.2	O-Al-O

Халтмарын шёрл ба дравит эрдсүүдэд гочлон $3560-3500\text{ см}^{-1}$ мужид шингээлтийн спектр өгдөг нь ОН хэлбэлзлийн давтамжийг үзүүлэх ба $Z = \text{Al, Fe, Mn, Mg}$ –тай холбогддог байна[1,3]. Судалгаанд авсан дээжийн хувьд 3547.09 см^{-1} давтамжинд ОН хэлбэлзэл илэрч байна (Зураг 5).

Мөн дээжийн спектр дэхь 3547.09 см^{-1} давтамжийн утга ОН - Fe холбоост харгалзана [4]. 1300 см^{-1} орчмын зурвас нь BO_3 –ийн бүлэгт[4], 1000 см^{-1} орчмын зурвас нь Si_6O_{18} цагирагийн агшиж сунах хэлбэлзэлд харгалзаж буйг 1-р хүснэгтэнд үзүүлсэн нил улаан туяаны болон раманы спектрийн [5] давтамжийн утгууд харуулж байна.

IV. ДҮГНЭЛТ

Ховд аймгийн Булган сумын халтмар эрдсийн бүтцийг нунтгийн рентген дифракцийн аргаар, шингээлтийн спектрийг нил улаан туяаныг спектрийн аргуудаар тус тус судлалаа. Тус эрдэс нь $\text{NaFe}_3\text{Al}_6(\text{BO}_3)_3\text{Si}_6\text{O}_{18}(\text{OH})_4$ бүхий химийн элементүүд агуулсан, $R3m$ огторгуйн групптэй, $a=15.992$ $b=15.992$ $c=7.172$, $\alpha=90$, $\beta=90$, $\gamma=120$ торын параметртэй кристалл бүтэцтэй хар халтмар (schorl tourmaline) болохыг тодорхойллоо.

Халтмар эрдсийн $\text{NaFe}_3\text{Al}_6(\text{BO}_3)_3\text{Si}_6\text{O}_{18}(\text{OH})_4$ томъёо бүхий дээжийн нил улаан туяаны спектрт ОН, $(\text{BO}_3)_3$, Si_3O_{18} , Si-O, Si-O-Si Fe-O, BO_3 , O-Al-O зэрэг холбоосын суналт ба агшилтын хэлбэлзлийн давтамжинд харгалзах шингээлтийн спектрийн дээрх утгууд бүртгэгдэж байна.

Ховд аймгийн Булган сумаас авсан Турмалин эрдсийн дээжийн нил улаан туяаны спектрийн давтамжуудыг түүний Раманы спектрийн дүнтэй харьцуулан үзэхэд шингээлтийн давтамжийн утгууд бусад бүтээлд дурдсантай тохирч байна[1,2,4,6]. Бид цаашид тус судалгааны үр дүнд

тулгуурлан манай эх орны бусад нутгаас олдсан турмалин эрдсийн төрлүүдийн бүтэц ба тэдгээрийн устай харилцан үйлчлэх үйлчлэлийг судлах тул эдгээр үр дүнгүүд нь чухал ач холбогдолтой болсон гэж дүгнэж байна.

Талархал

Нил улаан туяаны спектрийг хэмжихэд гүн туслалцаа үзүүлсэн ШУА-ийн БНШНЛ-ийн эрдэм шинжилгээний ажилтан, доктор А.Чимэдцогзолд талархал илэрхийлье.

АШИГЛАСАН МАТЕРИАЛ

- [1] Jagannadha Reddy, Ray L. Frost, Wayde N. Martens, *Vibrational Spectroscopy* 44 (2007) 42-49
- [2] T. Gonzalez-Carreno, M. Fernandez and J. Sanz, *Phys Chem Minerals* (1988) 15 : 452-460
- [3] J.D. Grice, T.S. Erict, *Neues Jahrb. Miner. Abh.* 165 (1993) 245
- [4] David A. McKeown, *Phys. Chem. Minerals.* 35 (2008) 259-270
- [5] G.Buyantsetseg, P.Daniel, R.Galbadrakh, L.Enkhtur, Sh.Munkhjargal, *Proceedings of 1st Franco-Mongolia Workshop on Material Science: Theoretical and Experimental Aspects*, Редактор Н.Цогбадрах, p.124-127, (2010)
- [6] V.C. Farmer, *The Infrared Spectra of Minerals*, Monograph 4, Mineral Society, (1974), p.235

Li_xFePO₄ -ийн фазын салалтын кинетик болон соронзон шинж чанарын судалгаа

Н.Төвжаргал^{1*}, Б.Бат-Отгон¹, Ж.Даваасамбуу¹, Г.Еколд²

¹Монгол Улс, Улаанбаатар-210646, Монгол Улсын Их Сургууль, Физик Электроникийн Сургууль

²ХБНГУ, Гёттингений Их Сургууль, Физик Химийн Институт

*Э-шуудан: tuvjargal@num.edu.mn

Time-resolved X-ray diffraction was used to investigate the kinetics of phase separation in polycrystalline Li_xFePO₄ samples which were quenched from the homogeneous phase to lower temperatures. On quenching from 380°C (homogeneous phase) to ageing various temperatures, we observed that the structural features of the formation of the two product phases LiFePO₄ and orthorhombic FePO₄, i.e. the splitting of selected Bragg reflections, appear on a time-scale of hours. The kinetic behaviour seems to vary strongly with the ageing temperatures. In the case of quenching to temperatures lower than 50°C, no significant splitting of Bragg reflections is observed. Hence, the homogeneous phase may be stabilised by quenching to sufficiently low temperatures. We have studied the magnetic properties of the samples by SQUID-magnetometry. The partially delithiated samples show the known temperature dependence of the magnetic susceptibility with ordering temperatures of about 122K (FePO₄) and 50K (LiFePO₄). In order to create a single phase, the samples were quenched from the homogeneous phase to room temperature. Obviously, Néel temperatures of these samples were observed in between the values of pure compounds and depend on the overall composition.

I.УДИРТГАЛ

Энергийн шинэ үүсгүүр, энергийг хувиргах, хадгалах нь дэлхий нийтийн нэгэн томоохон асуудал болж байгаатай холбоотойгоор сүүлийн жилүүдэд батарейны шинэ материалын судалгаа маш эрчимтэй явагдаж байна. Дахин цэнэглэгддэг Li-ион батарейны катодын шинэ материал болох LiFePO₄ нь судлаачид төдийгүй батарей, машин үйлдвэрлэгчдийн сонирхолыг ихээр татаж байгаа материал юм[1].

LiFePO₄ нь байгаль орчинд хор нөлөөгүй, гарган авах түүхий эд хямд, температурын хувьд тогтвортой, түүнд тулгуурласан батарей олон цикл хийдэг зэрэг давуу талуудтай боловч цахилгаан дамжуулал муутай, диффузийн коэффициент бага зэрэг дутагдалтай талуудтай. Үүнийг нунтаг дээжний ширхэгийн хэмжээг багасгах, өөр элементээр хольцлох болон нүүрстөрөгчөөр бүрэх замаар сайжруулах боломжтой нь сүүлийн үеийн судалгаагаар тогтоогдсон байдаг [2-5].

Тасалгааны температурт батарей цэнэглэгдэх, цэнэгээ алдах үед LiFePO₄ болон FePO₄ нэг нь нөгөөдөө шилжих бөгөөд Li_xFePO₄ холимог систем нь 380°C

температурын орчимд нэгдэж хатуу уусмал хэлбэртэй нэг шинэ фаз үүсдэг, өндөр температураас нам температурт хатаахад фазын салалт хийдэг болох нь тогтоогдоод байна[6]. Түүнчлэн Li_xFePO₄-ийн хувьд хоёр өөр фазын диаграмм байдаг [6-7] бөгөөд эдгээр нь Li_xFePO₄-ийн фазын салалтыг нэгэн утгатай тайлбарлаагүй зөрчилтэй байдаг.

Бид энэ ажлаар Li_xFePO₄ холимог системийн фазын салалтын механизм, түүний кинетик болон соронзон шинж чанарыг судаллаа.

II.ТУРШИЛТ

Дээж: Бид LiFePO₄-ийн нунтаг дээжийг Lee [8] нарын аргыг хэрэглэн гарган авав. Дээж нь эхлээд аморф хэлбэртэй байсан бөгөөд 920°C-д хайлуулсаны дараа кристаллжиж байна. Бидний гарган авсан дээжний кристаллографийн параметрууд нь: $Pnma$ (62), $a=10.334\text{\AA}$, $b=6.008\text{\AA}$, $c=4.693\text{\AA}$, $V=291.392\text{\AA}^3$ бөгөөд эдгээр нь бусад ажлуудын үр дүнтэй сайн тохирч байна[8]. Li_xFePO₄ холимог системийг химийн исэлдэлт буюу “delithiation” аргыг[7] ашиглан янз бүрийн концентрацитайгаар гарган авсан.

Рентген дифрактометр: Температурын удирдлагатай, Мо-Ка цацрагтай Рентген

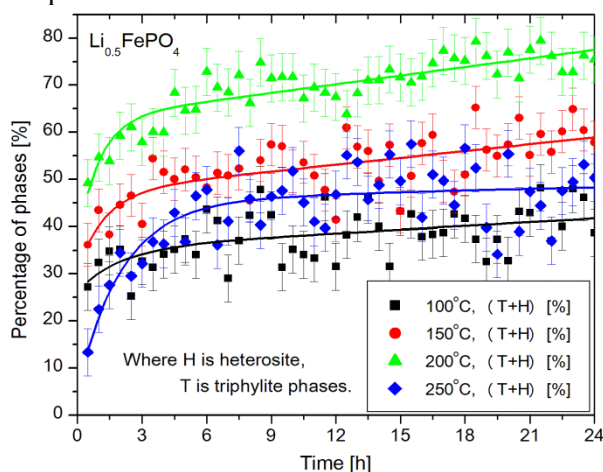
дифрактометр (Bragg-Soller system, Seifert XRD 3000) ашиглан материалын фазыг тодорхойлох болон дулаан боловсруулалтын анализуудыг хийсэн болно. Дээжийг исэлдэхээс сэргийлж өндөр вакуумын орчинд температур болон хугацаанаас хамааруулан судалсан юм.

Магнетометр: SQUID магнетометр ашиглан $H=10$ кЭ соронзон оронд Li_xFePO_4 холимог системийн соронзон мэдрэх чадварын урвууг 5K-300K температурын мужид хэмжлээ.

III. ҮР ДҮН

Li_xFePO_4 -ийн поликристалл дээжийн фазын салалтын кинетикийг тайлбарлахын тулд хугацаанаас хамаарсан рентген цацрагийн дифракцын арга ашиглан судласан. Үүний тулд янз бүрийн литийн концентрацитай Li_xFePO_4 -ийн холимог поликристаллыг 380°C хүртэл халааж нэгэн төрлийн фаз үүсгээд түүнийгээ нам температурт хатаах замаар хэмжсэн.

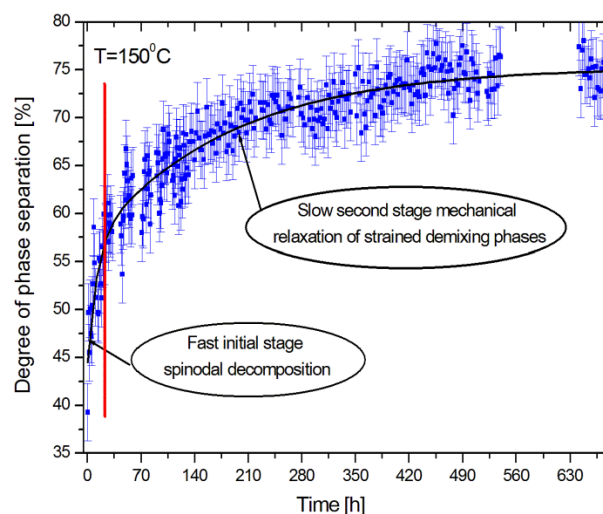
Нэгэн төрлийн фазаас 50°C -ийн алхамтайгаар янз бүрийн температурт хатааж, хугацаанаас хамааруулан хэмжихэд LiFePO_4 болон FePO_4 гэсэн хоёр фаз янз бүрийн хугацаанд үүсэн хэлбэржиж байгаа нь ажиглагдаж байна. Өөрөөр хэлбэл тодорхой Бреггийн рефлексүүдийн салалтаас үүнийг харж болно.



Зураг.1: $\text{Li}_{0.5}\text{FePO}_4$ -дээжийн хувьд температур, фазын салалт, хугацааны хамаарал

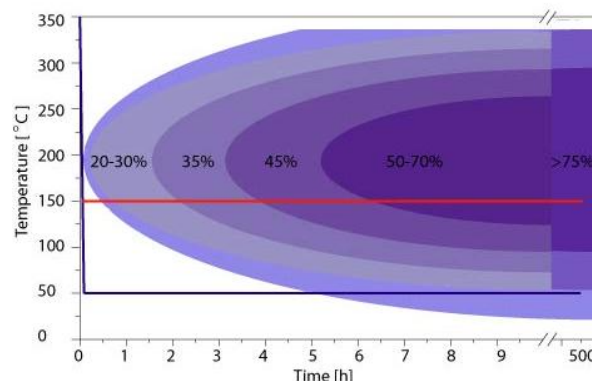
Зураг.1-т фазын салалтын кинетик хатаах температураас хэрхэн хамаарч байгааг үзүүлэв. 50°C -аас бага болон 250°C -ээс их температурт оруулан хатаасан тохиодолд Бреггийн рефлексийн салалт мэдэгдэхүйц ажиглагдахгүй байна. Иймээс нэгэн төрлийн фаз нь хангалттай бага температурт хатаахад тэр хэвээрээ тогтворжиж байна. Мөн фазын салалтын кинетик нь хатаах температураас

маш хүчтэй хамаардаг болох нь харагдаж байна. Энэ нь литийн диффузын коэффициентийн температурын хамааралтай холбоотой байж болох юм.



Зураг.2: $\text{Li}_{0.5}\text{FePO}_4$ -ийг 380°C -аас 150°C -т хатаасны дараахи фазын салалт, хугацааны хамаарал

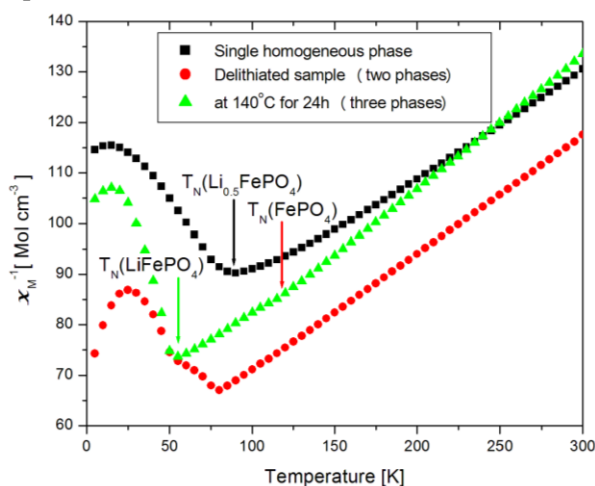
Зураг.2-т $\text{Li}_{0.5}\text{FePO}_4$ -ийг 380°C -аас 150°C -т хатаасны дараахи фазын салалтын хугацааны хамаарлыг үзүүлэв. Эндээс харахад фазын салалтын механизм нь хоёр алхамтайгаар явагдаж байгаа шинж тэмдэг ажиглагдаж байна. Үүнд эхний алхам нь спинодал салалт (spinodal decomposition) хийж жижиг LiFePO_4 болон FePO_4 -ийн арлууд үүсэх, дараагийн алхам нь өмнө үүссэн арлууд аажмаар томрох байдлаар салалт явагдаж байгаа болох нь ажиглагдаж байна. Дээрхи үр дүнгүүдэд үндэслэн бид Li_xFePO_4 -ийн фазын салалтын температур, хугацаа, фазын салалтын зэргийн хамаарлыг илэрхийлсэн диаграммыг (TTT-diagram) зураг.3-т үзүүлэв.



Зураг.3: Li_xFePO_4 -ийн фазын салалтын температур, хугацаа, фазын салалтын зэргийн хамаарлын диаграмм (TTT-diagram)

$\text{Li}_{0.5}\text{FePO}_4$ холимог системийн фазын салалт нь хатаах температур, хугацаа, литийн концентраци зэргээс маш хүчтэй хамаардаг

болох нь харагдаж байна. Нам температурт хатаахад пикийн салалт бараг ажиглагдахгүй байгааг холимог нэгэн төрлийн фаз метастабил төлөвт шилжсэнээр тайлбарлаж болох юм. Өмнө дурдсан Dodd нар[7] болон Delacourt нарын [6] тодорхойлсон фазын диаграммууд зөрүүтэй байгаа нь Li_xFePO_4 холимог системийн фазын салалтыг хэмжсэн хэмжилтийн горимоос хамааран өөр өөр гарсан байна.



Зураг.4: $H=10$ кЭ соронзон орон дахь $\text{Li}_{0.5}\text{FePO}_4$ -ийн соронзон мэдрэх чадварын урвуу, температурын хамаарал

$\text{Li}_{0.5}\text{FePO}_4$ дээжийн хувьд SQUID магнетометр ашиглан соронзон шинж чанарыг судласан. $\text{Li}_{0.5}\text{FePO}_4$ холимог системийг гарган авсаны дараа тухайн дээж антиферросоронзон фазын шилжилт нь 52К болон 125К температурт явагддаг LiFePO_4 , FePO_4 [5] гэсэн хоёр фазаас тогтож байна. Холимог системийг 400°C хүртэл халаахад нэг фазтай шинэ систем үүсдэг. Уг дээжийг тасалгааны температурт шууд хатаахад систем буцаж фазын салалт хийхгүй анхны төлвөө хадгалан үлдэж байна. Энэ холимог системийн соронзон мэдрэх чадварыг хэмжихэд соронзон фазын шилжилт хийх Неелийн температур нь 90К орчимд шилжиж байна (Зураг.4). Эндээс бид 52К-125К хооронд Li_xFePO_4 дахь литийн концентрациас хамааран янз бүрийн температурт соронзон фазын шилжилт хийх шинэ материалыг гарган авах, түүнийг удирдах боломжтой болох нь харагдаж байна. Дээрхи системд агуулагдаж байгаа LiFePO_4 болон FePO_4 системүүдийн хувьд соронзон шинж чанар нь бүрэн судлагдсан бөгөөд энэ

ажлаар түүнийг холимог нэгдсэн системийн хувьд анх удаа судлаллаа.

IV. ДҮГНЭЛТ

$\text{Li}_{0.5}\text{FePO}_4$ фазын салалтын кинетикийн судалгаанаас фазын салалтын механизм хоёр алхамтайгаар явагдаж байгааг тогтоов. Хатаах температураас хамааран завсарын “метастабил” төлөвүүд үүсэх, мөн түүнчлэн диффузын коэффициентийн температурын хамаарлын улмаас $\text{Li}_{0.5}\text{FePO}_4$ -ийн фазын салалтын кинетик янз бүр байна. Li_xFePO_4 -ийн янз бүрийн соронзон шинж чанартай дээжийг литийн концентрацаас хамааруулан гарган авах, дулааны горимоор удирдаж болохыг үзүүлэв.

Талархал

Энэхүү ажлыг хийж гүйцэтгэхэд санхүүгийн тусламж үзүүлж байгаа KFAS, Азийн Судалгааны Төв, Германы эрдэм солилцооны байгууллага (DAAD)-д талархаснаа илэрхийлье.

ИШЛЭЛ

- [1]. Padhi et al., *J. Electrochem. Soc.*, 1997, 144, 1188.
- [2]. A. Yamada, S.-C. Chung, and K. Hinokuma, *J. Electrochem. Soc.*, **148**, A224, 2001.
- [3]. H. Huang, S.-C. Yin, and L. F. Nazar, *Electrochem. Solid-State Lett.*, **4**, A170, 2001.
- [4]. Z. Chen and J. R. Dahn, *J. Electrochem. Soc.*, **149**, A1184, 2002.
- [5]. S. Y. Chung, J. T. Bloking, and Y. M. Chiang, *Nat. Mater.*, **2**, 123, 2002.
- [6]. Delacourt et al., *Nature Materials*, 2005, 4, 254.
- [7]. Dodd et al., *Electrochemical & Solid-State Letters*, 2006, 9, A151
- [8]. Lee et al., *Materials Letters*, 2006, 60, 2105.
- [9]. G. Rousse et al., *Chem. Mater.* **2003**, 15, 4082-4090

Study of Convection using the Kain-Fritsch Convective Scheme of WRF Numerical Model

L. Jambajamts^{1*}, M. Tsoozol¹, Kh. Tsookhuu²

¹ Department of Meteorology and Hydrology, School of Earth Sciences,

² Department of Theoretical Physics, School of Physics and Electronics

National University of Mongolia, University Street-1, Mongolia

*E-mail: jambajamts@num.edu.mn

We have studied a convection from a convective cloud that brought damage to people and economy on 14-15 July of 2010 in the area of Ulaanbaatar city, using ARW, the third version of the WRF simulation program. The results have been compared to meteorological observed data and the reliability was 87%.

Key words: numerical model, convection, micro physical characteristics of cloud, droplet, Doppler radar

PACS: 92.60.Wc, 92.60.Nv

I. INTRODUCTION

In a meteorological research, usage of numerical model is necessary. Using the simulation programs that compiled in the leading research centers of the world capable to calculate an atmosphere in the 3-4 dimensional space, one can save time and money in a study of physical phenomena in the atmosphere. It has been shown by many researchers that the results obtained using a computer with the high speed and accuracy are fairly good like the ones obtained in a laboratory as well as with a human hand method [3]. Studying the local convective cloud, its evolution, internal micro physical phenomena and meteorological phenomena occurring due to the convective cloud by means of the simulation has been started since 1940 [2]. Since then the method of describing convection with a simulation and the basic theoretical methods as well as the schemes have been invented and used. This work will further continue and it is clear that as the capacity of the computer has been improved the methods and the results will have been improved as well.

II. THE RESEARCH METHOD

In our research we have used the simulation program, ARW (Advanced Research WRF), which is the third version of WRF (Weather Research and Forecasting) that produced in the NOAA and NCAR.

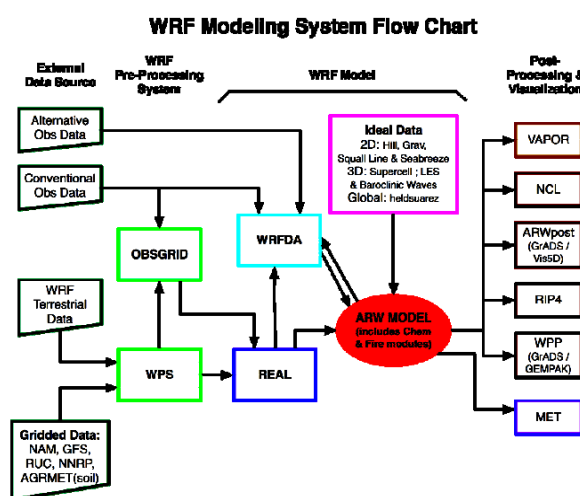


Figure.1. The block scheme of the WRF simulation program.

For now, more than 150 research centers and institutes around the world are using this system. Like the other meteorological simulation programs, the WRF requires a computer with good characteristics. In the table 1, we have listed the CPU's that the WRF simulation program can work with [5].

Table 1.

Vendor	Hardware	OS	Compiler
Cray	X1	UniCOS	vendor
Cray	AMD	Linux	PGI
IBM	Power Series	AIX	Vendor
SGI	IA64/Opteron	Linux	Intel Intel /PGI/
COTS	IA32	Linux	Intel /PGI/ gfortran /g95/

			PathScale
COTS	IA64/Opteron		Intel /PGI/ gfortran /g95/ PathScale
Mac	Power Series	Darwin	xlf / g95 / PGI /Intel
Mac	Intel	Darwin	g95 / PGI /Intel

The basic equation system of the simulation program consists of the following equations:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = -\mathbf{u} \cdot \nabla u + 2\Omega \sin \phi v - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + F_x \quad (1)$$

$$\frac{\partial v}{\partial x} = -\mathbf{u} \cdot \nabla v - 2\Omega \sin \phi u - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + F_y \quad (2)$$

$$\frac{\partial w}{\partial x} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} - g \quad (3)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\mathbf{u} \cdot \nabla p - \rho \cdot \nabla \mathbf{u} \quad (4)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = -\mathbf{u} \cdot \nabla \theta + H \quad (5)$$

$$\theta = T \left(\frac{p_s}{p} \right)^{R/c_p} \quad (6)$$

$$\frac{\partial q}{\partial t} = -\mathbf{u} \cdot \nabla q + M \quad (7)$$

$$p = \rho R T \quad (8)$$

The ARW simulation program uses the 3th order Runge-Kutta method (Figure 2) to calculate equations (1)-(8) numerically and calculates the motion by order 1, 2, 3, 4, 5 and 6 [5].

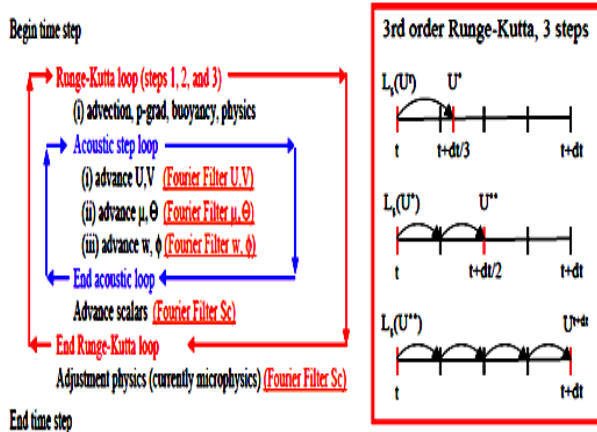


Figure 2. The 3th order Runge-Kutta method that used to integrate in the simulation program.

The basic dynamics of the simulation program is:

- Terrain representation
- Vertical coordinate
- Equations / variables
- Time integration scheme
- Grid staggering
- Advection scheme
- Time step parameters
- Filters
- Boundary conditions
- Nesting
- Map projections

III. THE KAIN-FRITSCH CONVECTIVE SCHEME

One of the widely used convective schemes since 1990 by the researchers is the Kain-Fritsch convective scheme. The main feature of the scheme is that it is considered that the convective thermic obtains the potential from the initial point of motion that is enough to pass a level not under 60 kPa in the vertical direction when it lifts off by dry adiabat till the condensation level [4]. The motion continues by an inertia of this potential

$$\delta T_{vv} = k(w_g - c(z))^{1/3} \quad (9)$$

where k is a dimension and its unit is $[s^{1/3} \cdot cm^{-1/3}]$ and w_g is a vertical velocity that varies by grid spacing and its unit is $[cm \cdot s^{-1}]$ and $c(z)$ is a threshold vertical velocity given by

$$c(z) = \begin{cases} (w_0(Z_{LCL}/2000)), & Z_{LCL} \leq 2000 \\ w_0, & Z_{LCL} > 2000 \end{cases} \quad (10)$$

where Z_{LCL} is the lifting condensation level and its unit is $[m]$, $w_0 = 2 \text{ cm} \cdot s^{-1}$.

Thus, according to the equations (9) and (10), the thermic lifts off as a dry adiabatic and as it does an exchange with a comparatively cold medium on its lifting way it reaches the bottom of the convective cloud or the condensation level. Total sweeping of the convective motion is

$$M_{ee} \geq 0.5 \cdot \delta M_e, \quad (11)$$

where δM_e is a mixing ratio and its unit is $[kg \cdot s^{-1}]$.

$$\delta M_e = M_{u0} \frac{(-0.3 \cdot \delta p)}{R}. \quad (12)$$

Here M_{u0} is a lifting mass flux and its unit is $[kg \cdot s^{-1}]$ and δp is a pressure grid spacing of the simulation model and its unit is $[Pa]$.

Here R is a radius of a cloud and is described as with the form

$$R = \begin{cases} 1000, & W_{KL} < 0 \\ 2000, & W_{KL} > 10 \\ 1000 + \frac{W_{KL}}{10}, & 0 \leq W_{KL} \leq 10 \end{cases}, \quad (13)$$

where $W_{KL} = w_g - c(z)$ and its unit is $[cm \cdot s^{-1}]$.

In the Kain-Fritsch convective scheme the possible width of a convective cloud has been described by equation (14). In generally, for the simulation model with eta vertical coordinate, it is considered the minimum width is 2 km [4].

$$D_{min} = \begin{cases} 4000, & T_{LCL} > 20^{\circ}C \\ 2000, & T_{LCL} < 0^{\circ}C \\ 2000 + 100 \cdot T_{LCL}, & 0 \leq T_{LCL} \leq 20 \end{cases}. \quad (14)$$

Here T_{LCL} is a lifting condensation level and its unit is $[^{\circ}C]$.

IV. THE RESULTS

The study has been done on the convection observed on 14-15 July of 2010 about Ulaanbaatar city. The results have been compared with those obtained by meteorological Doppler radar in the Morin-Uul. This convection process created a thunderstorm and heavy rain which caused a serious damage to people and economic entities. The thunderstorm directly influenced to the running of the research and training center located in Uvurzaian.

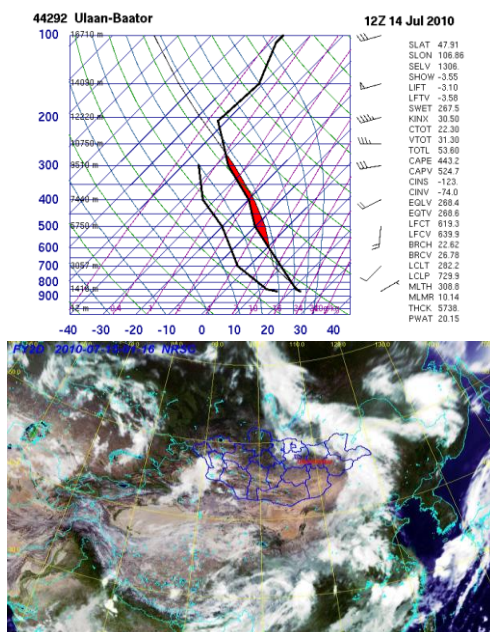


Figure 3. The aerological diagram and the satellite picture for that time [6].

By the simulation program we have calculated totally 8 convective characteristics which have the spacing of one hour and plotted them using Grid Analysis and Display System (GrADS).

A. Cloud water

Amount of water per volume of cloud is called cloud water. It has the shape of water drop and ice crystal.

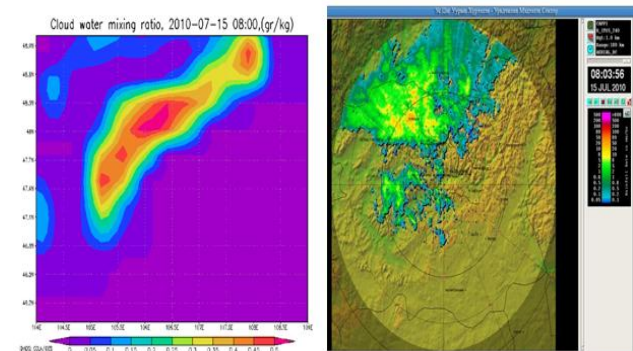


Figure 4. Comparison of the results of cloud water with the weather radar data. Left: The results obtained using by the simulation program.

B. Rain water

Amount of droplets that largened to a size of a precipitation stored in a cloud is called rain water.

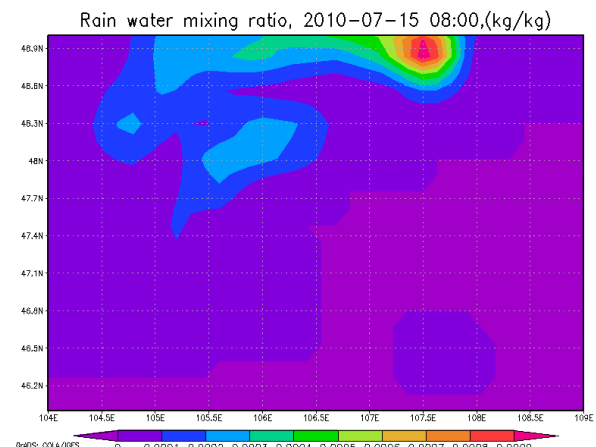


Figure 5. Rain water mixing ratio that is computed using the simulation program..

C. Amount of water vapor in the atmosphere

Amount of mass of water vapor stored per mass of the atmosphere is called individual humidity. Its physical value is the vapor mass divided by air mass, although it does not have a unit.

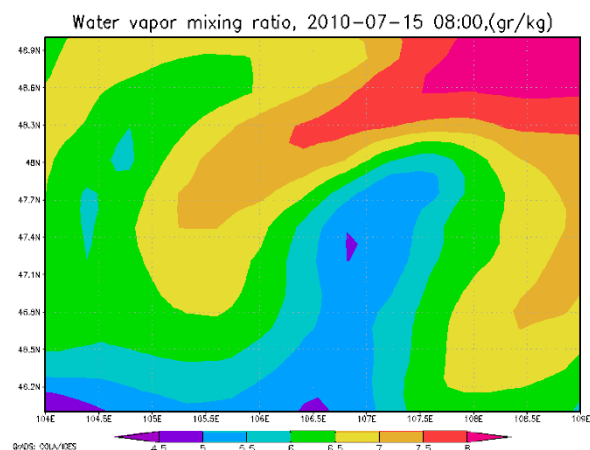


Figure 6. Water vapor mixing ratio that is computed using the simulation program.

CAPE Convective available potential energy

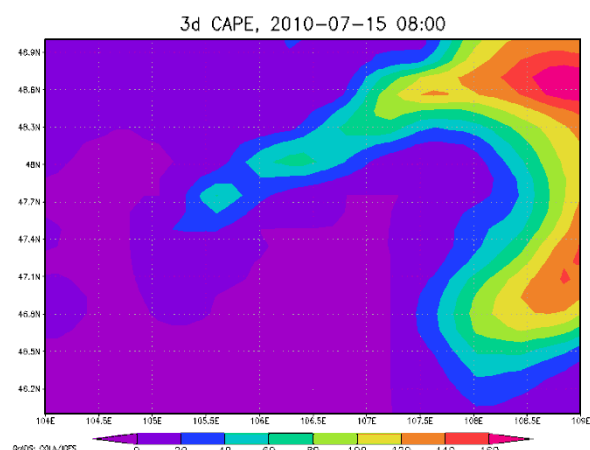


Figure 7. CAPE that is computed using the simulation program.

CIN Convective inhibition

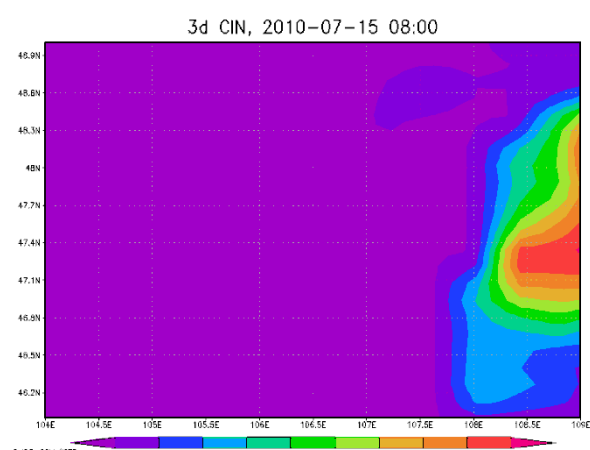


Figure 8. CIN that is computed using the simulation program.

dbz Radio echo of cloud that is calculated using the simulation program

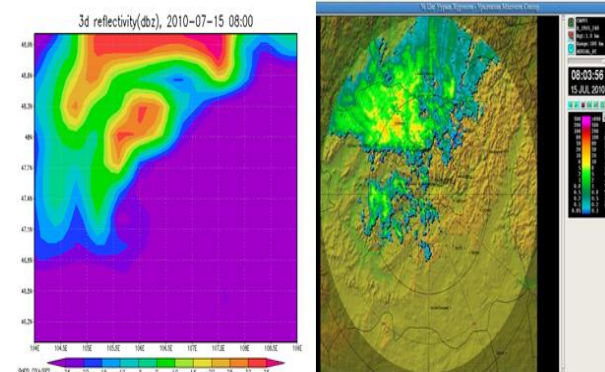


Figure 9. Comparison of cloud results with the radar data. Left: The results obtained using by the simulation program.

D. Precipitation

Liquid precipitation the radius of droplet of which is greater than 0.25 mm is called rain. It mainly consists of the droplets with the radius of 2.5-3.2 mm and forms wide-spread circles when it falls down on the ground and forms clear wet spots on a dry object [1].

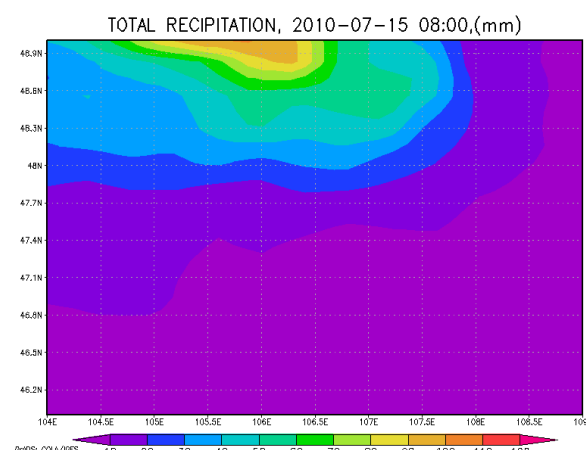


Figure 10. Precipitation that is computed by the simulation program.

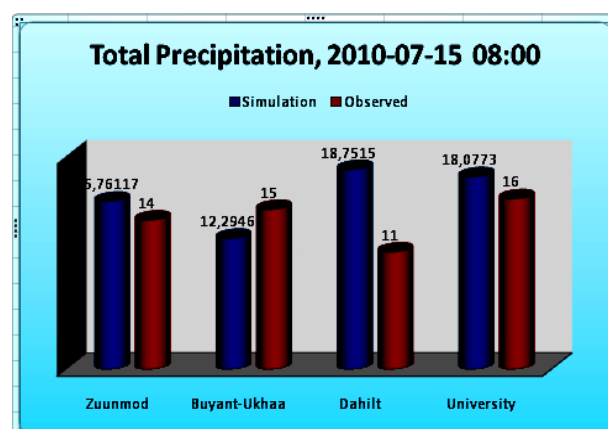


Figure 11. Comparison of the results obtained using by the simulation program with the real weather observation.

V. DISCUSSION

E. Lifting condensation level (LCL)

It is a level where a dry adiabat lifted air starts to saturate. From this point air starts to lift off by wet adiabat.

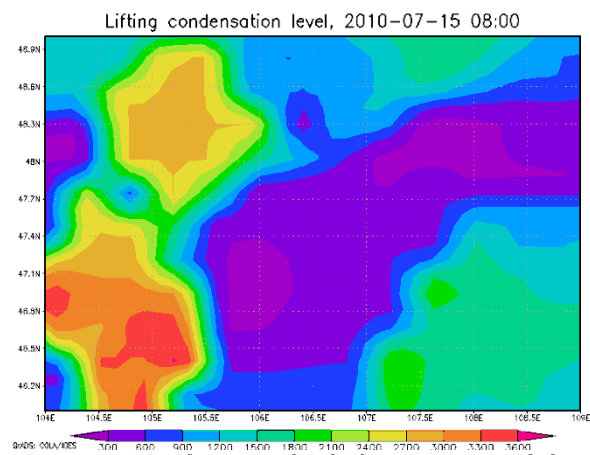


Figure 12. Condensation level that is computed by the simulation program.

F. Level of free convection (LFC)

It is a level where a wet adiabat lifting starts to saturate.

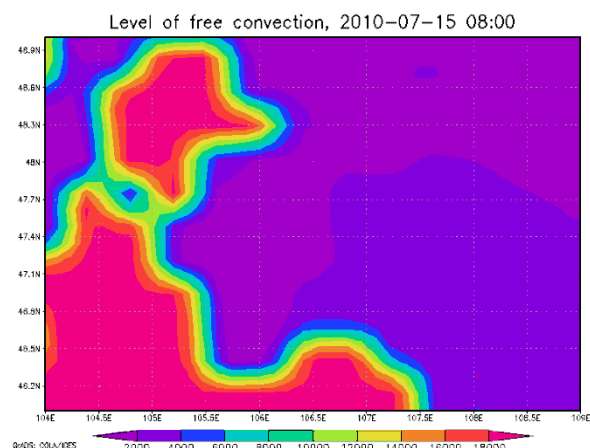


Figure 13. Level of free convection that is computed by the simulation program.

As we have seen from the study, although one can compare the results obtained using by Kain-Fritsch convective scheme of WRF numerical model with radar data, confidence level changes depending on the emergence of the numerical model. Confidence level increases when the emergence increases. That means in order to improve the confidence level we need more powerful computer.

VI. CONCLUSION

The results obtained using by the WRF numerical model match with weather Doppler radar data with the reliability more than 85%. Therefore we conclude that we can use the Kain-Fritsch convective scheme in Mongolia.

The amount of precipitation computed by the scheme matches with those of real weather observation with the reliability of 87%.

REFERENCES

1. Цоозол М., Батсүх Н., Сарантуяа Г., Энхбат Д., Эрдэнэсүх С., Жамбажамц Л., 2005, Усны уурын конденсац, Улаанбаатар, хуу.150.
2. Kalnay E., 2003, Atmospheric modeling, data assimilation and predictability, Cambridge University Press, 341 pp.
3. Lynch P., 2002, The Emergence of Scientific Weather Forecasting, Cambridge University Press, 272 pp.
4. Kain J.S. and Fritsch J.M., 1993, Convective parameterization for mesoscale models: The Kain-Fritsch scheme. The representation of cumulus convection in numerical models. Meteor. Monogr., No. 24, Amer. Meteor. Soc., 165-170.
5. <http://www.wrf-model.org>
6. <http://www.icc.mn>

Pt/PANI катализаторын XRD болон XAS судалгаа

Б.Бумаа*, Э.Уянга, Г. Сэвжидсүрэн, П.Алтанцог

Монгол Улс, Улаанбаатар, ШУА -ийн Физик Технологийн хүрээлэн,
Материал Судлал, Нанотехнологийн Салбар

*Э-уудан: bbumaa@gmail.com

Энэ ажилд ПСМТЭ –д ашиглагдах полианилинд суурилсан цагаан алтан катализаторыг синтезлэн гарган авч бүтэц шинж чанарын судалгааг XRD болон XAS–аар тодорхойллоо. Химийн синтезийг этиленгликоль болон ионгүйжүүлсэн (DI) усан орчинд гүйцэтгэсэн.

Түлхүүр үгс: Түлшний элемент, Полианилин, Цагаан алтны хлоридын давс, катализатор.

I. ОРШИЛ

Сүвэрхэг бүтэц бүхий электродын гадаргуу дээр хийн фаз (түлш болон исэлдүүлэгч), электролит болон катализаторын хооронд гурван–фазын холимог гадаргуу (ГФХГ) үүснэ. Энэхүү ГФХГ–ийн төлөв байдал, шинж чанар нь протон солилцооны мембрант түлшний элементийн цахилгаан–химийн үзүүлэлтүүдэд гол үүрэгтэй байдаг. Катализатор нь ионы болон электрон дамжуулагч орчны хоорондох тэнцвэрийг хангаж, протоныг электролит руу, электроныг электрод руу тасралтгүй зөөвөрлөж байдаг[1,2].

Бидний өмнөх ажлуудад нүүрстөрөгчийн нанохоолойд суурилсан цагаан алтан (Pt) катализаторын судалгааг хийсэн. Ийм төрлийн катализаторуудын хувьд нүүрстөрөгчийн нанохоолой нь химийн тогтворжилт муу, металлын орц харьцангуй өндөр байхаас гадна катодын урвалын дүнд нано хоолой зэврэлтэд орж ийм төрлийн үүсгүүрүүдийн ашиглалтын хугацааг богиносгодог. Тиймээс сүүлийн үед шинэ төрлийн дамжуулагч шинж чанар бүхий оксидууд, полимеруудыг катализаторын суурь материал болгон ашиглах судалгаа анхаарал татаж байна.

Энэ ажилд полианилины нанофайберт суурилсан цагаан алтан (Pt/PaniNF) катализаторыг гарган авч, бүтэц шинж чанарыг тодорхойлов. Полианилины нанофайбер нь органик хагас дамжуулагчдын ангилалд багтдаг учир цахилгаан дамжуулал маш сайн, гарган авах синтез харьцангуй хямд төсөр, хүчил, шүлтийн орчинд химийн тогтворжилт сайн, металлын партикулүүд суулгахад каталитик шинж чанар нь ихэсдэг, ашиглалтын явцад электродууд зэврэлтэнд орохгүй зэрэг давуу талуудтай. Түлшний элементийн катализаторт дамжуулагч полианилиныг (PANI) ашигласнаар электролитын протон дамжууллыг нэмэгдүүлэх боломж олгодог [1-3].

II. ТУРШИЛТ БА ХЭМЖИЛТ

A. Туршилтанд ашигласан бодис, урвалжууд

Полианилин нанофайбэр (PaniNF) (Nanopowder); идэмхий натри (NaOH 99%), концентрацитай хүхрийн хүчил (H_2SO_4 , 65%); цагаан алтны хлоридын давс ($H_2PtCl_6 \cdot 6H_2O$), органик уусгагч этиленгликоль ($C_3H_6O_2$, 99%); поликарбонатын шүүлтүүр.

Б. Урьдчилсан боловсруулалт

Туршилтанд ашигласан полианилины нанофайбэр нь цэвэршилтийн зэрэг багатай, ширхэгийн хэмжээ харьцангуй томтой байсан тул бид полианалины нанофайберийг бусад органик хольцоос цэвэрлэх, идэвхижүүлэх зорилготой урьдчилсан боловсруулалтыг гүйцэтгэсэн. Үүнд: полианилин нанофайбэр (PaniNF)–аас 2 г жигнэж аваад доор үзүүлсэн нөхцлөөр боловсруулж, хэт авиагаар 2 цаг үйлчлүүлсэн. Химийн боловсруулалтанд оруулсан полианилин нанофайбэрийг поликарбонатын шүүлтүүрээр шүүж, $60^\circ C$ -т 3 цаг, $70^\circ C$ -т 1 цаг тус тус хатаасан.

- I. 1M H_2SO_4 (95%)
- II. 1M H_2SO_4 (95%) ацетонд.
- III. 1M H_2SO_4 (95%) ионгүйжүүлсэн (D.I) усанд.

B. Pt/Pani катализатор гарган авах химийн синтез (этиленгликолийн орчинд)

140мг полианилин (PANI)–ын 20 мл этиленгликольд уусгаж, 4 цагийн турш хэт авиагаар үйлчлүүлсэн. Үүссэн уусмалд 30 мл цагаан алтны хлорид ($H_2PtCl_6 \cdot 6H_2O$)–ын уусмалыг дусал-дуслаар нэмнэ. Цагаан алтны хлорид ($H_2PtCl_6 \cdot 6H_2O$)–ын уусмалыг бэлтгэхдээ (2 мг Pt мл⁻¹ этиленгликоль) 65 мг жигнэн авч, соронзон хутгуурын үйлчлэлийн дор 30 мл этиленгликольд уусган бэлтгэсэн. Полианилин (PANI)–цагаан алтны хлорид ($H_2PtCl_6 \cdot 6H_2O$) –ын уусмал бүхий суспензийг соронзон

хутгуураар 4 цаг хутгасаны дараа суспензид 2.5 М NaOH-ыг нэмэх замаар pH-ыг 12-т хүргэсэн. Учир нь этиленгликолийн дегидротацияр суспензийн орчинд гликолат хүчил үүсэх тул ийм орчинд шүлт нэмж өгдөг. Дараа нь 140°C - т 3 цаг халааж, тасалгааны температур хүртэл хөргөж, 1М H₂SO₄-ыг нэмэх замаар pH-ыг 2-т хүргэсэн. Үүссэн суспензийг 24 цагийн турш тасалгааны температурт байлгаж суспензийг поликарбонатын шүүлтүүрээр шүүгээд 1.5л давхар нэрсэн усаар угааж, 70°C-т 8 цаг хатаасан. Энэ синтезийг зөвхөн этиленгликолийн орчинд явуулсан. Эцэст нь полианилинд суурилсан цагаан алтан (Pt/PANI) катализаторыг нунтаг хэлбэрээр гарган авлаа.

Pt/Pani (I, II, III) катализаторын жингийн 14.3% нь цагаан алт байна.

Г. Pt/Pani, Pt/CB катализатор гарган авах химийн синтез (усан орчинд)

1 гр CB болон Pani-г 50 см³ D.I усанд нэмж 15 минутын турш хэт авиагаар үйлчлүүлэн нэгэн төрлийн уусмал үүсгээд, үүссэн уусмалд 1 гр давсны бикарбонат нэмж 15 минутын турш хэт авиагаар үйлчлүүлэн, соронзон хутгуурын үйлчлэлийн дор 30 минут 80°C-т буцалгасан. 60 мл D.I усанд 1.5 гр цагаан алтны хлорид (H₂PtCl₆·6H₂O)-ыг уусгаад уусмал дээрээ нэмж өгдөг. Соронзон хутгуурын үйлчлэлийн дор 60 минут 80°C-т буцалгана. 3 см³ шоргоолжны хүчлийг 25см³ D.I. усанд уусгаад, дээр үүссэн суспенз дээр нэмж 10 минут хэт авиагаар үйлчлүүлээд үүссэн уусмалыг соронзон хутгуурын үйлчлэлийн дор 60 минут 80°C-т буцалгасан. Уусмалаа шүүж, pH 7 хүртэл D.I усаар угаасны дараа 100°C-т 60 минут хатаасан.

Д. Рентген дифрактометр

Хэмжилтийг ШУА-ийн Байгалийн Шинжлэлийн Нэгдсэн Лабораторийн Maxima_X7000 рентген дифрактометр дээр явуулав. Хэмжилтийг CuK_α (λ=1.5406 Å) анод, Ni филтэртэйгээр тасалгааны температурт гүйцэтгэв. Хэмжилтийн үр дүнг Ритвельдийн аргаар боловсруулалт хийлээ. *Хэмжилтийн нөхцөл:* Сарнилын өнцгийн муж 2θ = 10 - 90°C, өнцөг алхам 0.03°, алхам тус бүр дээр шарах хугацаа 0.9 секунд байв.

Е. Рентген шингээлтийн спектрометр

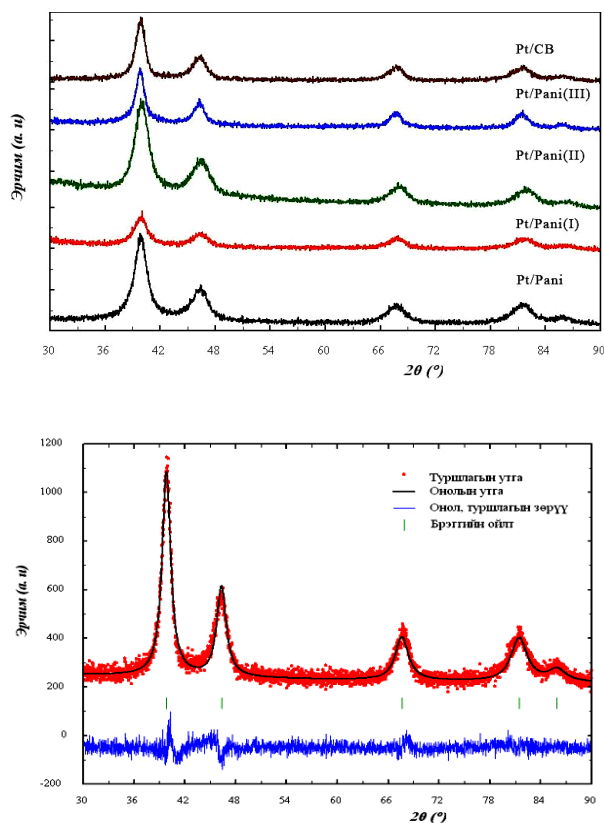
Хэмжилтийг Тайваны Үндэсний Синхротрон Цацрагийн Судалгааны Төв (National

Synchrotron Radiation Research Center–NSRRC)-д BLC07 үүсгүүр дээр тасалгааны температурт явуулав. *Хэмжилтийн нөхцөл:* Үүсгүүрийн энерги 1.5 ГэВ, гүйдэл 361.2 мА, Si (111) кристал монокроматор. Хэмжилтийн үр дүнг IFEFFIT программыг ашиглан боловсрууллаа.

Ш.ХЭЛЭЛЦҮҮЛЭГ БА ҮР ДҮН

А. Рентген дифракцийн үр дүн

ФТХ-ийн Нанобүтцэт материалын судалгааны лабораторит синтезлэн гарган авсан Pt/CB, Pt/PANI, Pt/PANI(I-III) катализаторуудын дифракцын спектруудийг Зураг 1а –д үзүүлэв. Босоо тэнхлэгийн дагуу рентген цацрагийн эрчим, хэвтээ тэнхлэгийн дагуу рентген цацрагийн сарнилын өнцөг тус тус харгалзана. Зураг 1б–д Ритвельдийн боловсруулалтын үр дүнг үзүүлэв. Дифракцын зурагт 2θ = 40.14°, 46.19°, 68.01°, 81.83°, 85.73°-н өнцгүүдэд Pt(111), Pt(200), Pt(220), Pt (311), Pt (222) хавтгайн цагаан алт (Pt) -ны пикүүд илэрсэн [4-6].



Зураг 1. Катализаторуудын рентген дифракцын спектр (дээд), Ритвельдийн боловсруулалт (доод)

Полианилины дифракцын пик нь 2θ < 35° сарнилын өнцгийн мужид ажиглагдсан. Нано бөөмийн хэмжээг Шеррерийн тэгшитгэлээр тодорхойлно [8, 9]. Хүснэгт 1 –д нано бөөмийн

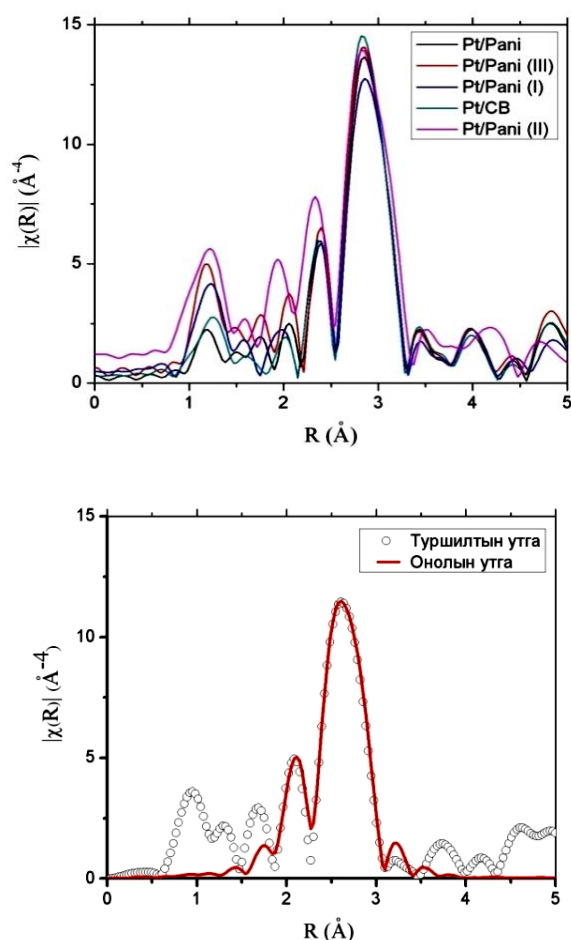
хэмжээ, Ритвельдийн боловсруулалтын Брэггийн R фактор болон χ^2 -н утгуудыг үзүүлэв.

Хүснэгт 1. Ритвельдийн боловсруулалт

Дээжүүд	Бөөмийн хэмжээ (nm)	R _B фактор (%)	χ^2 (%)
Pt/CB	5.98	2.38	1.35
Pt/Pani (III)	5.93	3.38	1.21
Pt/Pani (II)	4.36	1.09	1.35
Pt/Pani (I)	3.41	3.65	1.61
Pt/Pani	4.30	2.13	1.23

Б. Рентген шингээлтийн спектрийн үр дүн

Гарган авсан Pt/CB, Pt/PANI, Pt/PANI(I-III) катализаторуудын атомын шингээлтийн спектрүүдийг Зураг 2а-д үзүүлэв. Босоо тэнхлэгийн дагуу радиал түгэлтийн функцийг Фурье хувиргалт, хэвтээ тэнхлэгийн дагуу атом хоорондын зайг үзүүлэв. IFEFFIT программыг ашиглан 2.2–3.3 Å мужид боловсруулалтыг хийлээ.



Зураг 2. Катализаторуудын рентген шингээлтийн спектр (дээд), боловсруулалтын үр дүн (доод)

Зураг 2б-д Pt/CB дээжийн шингээлтийн спектрийн боловсруулалтын үр дүнг үзүүлэв. Атомын шингээлтийн спектрийн пикийн өндрөөс нано бөөмсийн ерөнхий хэмжээг харж болно. Зураг 2а-с үзэхэд нано бөөмийн хэмжээ Pt/CB > Pt/PANI > Pt/PANI (III) > Pt/PANI (II) > Pt/PANI > Pt/PANI (I) байна.

Хүснэгт 2. Атомын шингээлтийн спектрийн боловсруулалтын үр дүн

Дээж	Химийн холбоос	Координатын тоо	Атом хоорондын зай, (Å)	σ^2 (Å ²)	R фактор, (%)
Pt/CB	Pt – Pt	10.2	2.756	0.0036	0.07
Pt/Pani (III)	Pt – Pt	9.8	2.749	0.0096	0.003
Pt/Pani (II)	Pt – Pt	7.8	2.747	0.0017	0.002
Pt/Pani (I)	Pt – Pt	7.7	2.748	0.0037	0.0006
Pt/Pani	Pt – Pt	7.5	2.754	0.0054	0.05

σ^2 – Дебай Валлерийн фактор

Боловсруулалтын үр дүнд бид атом хоорондын зай, координацын тоог тодорхойлно (Хүснэгт 2). Боловсруулалтын фактор (R) болон Дебай Валлерийн фактор (σ^2) утгуудыг хүснэгт 2 – т үзүүлэв.

IV. ДҮГНЭЛТ

Түлшний элементэд ашиглагдах полианилинд суурилсан цагаан алтан (Pt/PANI) катализаторыг этиленгликолийн ба усан орчинд синтезлэн гарган авч, XRD болон XAS – н аргуудаар судлав. Гарган авсан катализаторуудын рентгенограммыг Ритвельдийн аргаар боловсруулж, металл нано бөөмийн хэмжээг (Pt, 3.41–5.98 нм) тодорхойллоо. Атомын шингээлтийн спектрийн боловсруулалтын үр дүнд атом хоорондын зай (2.747–2.756 Å), координацын тоог (7.5–10.2) тодорхойллоо. Катализаторуудын нано бөөмийн хэмжээг тодорхойлсон XRD –н болон XAS–н үр дүнгүүд тохирч байна. Бид цаашид Pt/PANI катализаторын синтезийг бусад химийн аргуудаар дахин гарган авч харьцуулсан судалгааг хийх болно.

НОМ ЗҮЙ

1. Juijun Zhang. *PEM Fuel Cell Electrocatalysts and Catalyst Layers*. British Press. 2008.
2. C.Rayment, S.Sherwin. *Introduction to Fuel Cell Technology*. Notre Dame. 2003.
3. Jiaying Huang. *Syntheses and applications of conducting polymer polyaniline nanofibers*. Appl.Chem., 78, 2006, p 15 -27.
4. G.A.Rimbu, C.L.Jackson, K.Scott. *Platinum / carbon / polyaniline based nanocomposites as catalysts for fuel cell technology*. J.Adv.Mat., 8, 2006, p 611 – 616.
5. M.R.Nabid, M.Golbabaee, etc., *Polyaniline/TiO₂ Nanocomposite: Enzymatic Synthesis and Electrochemical Properties*. Int .J.Electrochem.Sci., 3, 2008, p 1117 – 1126.
6. Hongwei Chen, Lianbin Xu etc., *Polyaniline nanofiber supported platinum nanoelectrocatalysts for direct methanol fuel cells*. Nanotechnology, 17, 2006, p 5254 – 5259.
7. Shimadzu X-Ray diffractometer XRD-7000 Instruction Manual
8. Vitalij K.Pecharsky and Peter Y.Zavalij. *Fundamentals of Powder Diffraction and Structural Characterization of Materials*. New York. 2009, p 524 - 542
9. Ingenieurwissenschaften.Freider Schieba, *Electrode structures of polymer-electrolyte fuel cells (PEFC)*. PhD Dissertation, Darmstadt 2008.

Улаанбаатар хотын автозамын дагуух тоосонцорын бөөмийн хэмжээ, түүний тархалтын судалгаа

Г.Оюунгэрэл¹, Г.Батдэмбэрэл², Ш.Чадраабал², П.Мөнхбаатар², П.Алтанцог³

¹Боловсролын Их Сургууль, Физик Технологийн Сургууль

²Шинжлэх Ухаан Технологийн Их Сургууль, Материал Судлалын Салбар,

Хатуу биеийн физик, нанотехнологийн профессорын баг

Улаанбаатар хотын автозамын дагуух бөөмсийн дундаж диаметр (1.1 ± 3)-ээс (2.5 ± 3) мкм, бөөмийн хувийн гадаргуугийн талбай (Sv) $2.38 \pm 5.43 [\text{м}^2/\text{см}^3]$, бөөмийн хэмжээсийн тархалтын муж $74 \text{ нм} \pm 4.0 \text{ мкм}$ гэж тус тодорхойлов. Бөөмүүд $790 \text{ нм} \pm 3.8 \text{ мкм}$ мужид 0.02 -оос 8.15 (q_3lg) хүртэл нягттайгаар гаусс тэгш хэмтэйгээр түгсэн байна. Хэмжилтийн явцад 74 нм-ээс бага хэмжээтэй бөөм бүртгэгдээгүй. Дээжүүдийн хувьд бөөмүүд 74 ± 100 нм мужид эзэлхүүний 0.02% -ийг хэт нарийн бөөм буюу нанобөөм, $100 \text{ нм} \pm 2.4 \text{ мкм}$ мужид дунджаар эзэлхүүний 83.73% -ийг нарийн ширхэгтэй бөөм (PM_{2.5}), $2.4 \pm 4.0 \text{ мкм}$ мужид эзэлхүүний 16.25% -ийг том хэмжээт бөөм (PM₁₀) тус тус эзэлж байв. Автомашины дагуух тоосонцорын дээжүүдэд PM_{2.5} бөөмүүдийн агууламж өндөр хувьтай байна.

Түлхүүр үг: тоосонцорын бөөм, бөөмийн хэмжээ, бөөмийн тархалт, суспенз, PCCS, Nanophox

I. ОРШИЛ

Тоосонцорт утаа, манан, тоос шороо зэрэг агаар дахь жигнэгдэх бөөмс ордог. Утааны бөөмүүд хүрээлэн буй орчин, уур амьсгалын нэгдмэл чанар, хүмүүсийн эрүүл мэндэд чухал үүрэгтэй. Өнөөдрийн байдлаар утаанаас гаралтай нанобөөмүүдийн физик, химийн шинж чанарын тухай ойлголт маргаантай байгаа болно [1].

Агаар мандал дахь нанобөөмийн тухай шинжлэх ухаан харьцангуй шинэ бөгөөд тэдгээр бөөмсийн хортой физик, химийн шинж чанарууд муу судлагдсан. Тухайлбал, Улаанбаатар хотын агаар мандлын орчин, ялангуяа, өвөл, хаврын улиралд дулааны цахилгаан станц, гэр хороолол, автомашины яндангаас гарах утаанаас болж хүмүүсийн эрүүл мэндэд сөрөг нөлөө үзүүлж, байгаль орчин маш ихээр бохирдож байна. Иймд тус ажлыг нэн даруй гүйцэтгэх үндэслэл бүрэн байгаа болно.

Мөн элэгдэл эвдрэлд орсон газраас боссон тоос, шороо, хуучирсан машин их нөлөөлдөг.

УБ хотын агаар SO₂ зэрэг агаарын бохирдлын түвшингээр олон улсын стандартаас өндөр байгаа боловч, тоосжилт (PM: particulate matter) нь Улаанбаатар хотын бохирдлын хамгийн гол асуудал болж байна. Агаарын тоосжилтын хувьд Улаанбаатар хот нь дэлхийн хамгийн бохирдсон хотын нэгд тооцогдож байна [2].

Агаарын бохирдлыг судлах гол ажлын нэг бол агаарыг бохирдуулагч бөөмсийн хэмжээ, түүний хэмжээний тархалт, нягт, бөөмийн хэлбэр, морфологи, элементийн

найрлага зэргийг системтэй судлах явдал бөгөөд тэр нь улмаар агаарын бохирдлыг бууруулах хөтөлбөрүүдийг ач холбогдлоор нь эрэмблэх, мөн үр дүнг нь дүгнэхэд чухал шаардлагатай.

Үүнтэй холбогдуулж энэхүү ажлын зорилго нь өвлийн улиралд Улаанбаатар хотын зарим автозамын дагуух цасанд хуримтлагдсан тоосонцор ба автомашинаас гаралтай бөөмсийн хэмжээ ба түүний тархалтыг 1 нм -ээс $10 \mu\text{м}$ -ийн мужид судлах юм.

II. ТУРШИЛТ

Судалгааны дээжүүдийг Улаанбаатар хотын автозамын дагуух дараахь 12 цэгүүдээс бэлдсэн. Үүнд: сансрын шатахууны клонк (1#), офицерын ордны дэргэдэх Петровисийн шатахууны клонк (2#), баруун дөрвөн замын дэргэдэх “Гранд Плаза” цогцолборын урд талын зам (3#), 120 мянгат (4#), яармаг (5#), сансрын хүч спорт хороо (6#), сэлбийн гол (7#), 32-ийн тойрог (8#), 28-р сургууль (9#), нисэх (10#), толгойт (11#), дэнжийн 1000 (12#).

Ялангуяа өвлийн улиралд агаарын бохирдлын хэмжээ хэт ихсэж, хүний бие организмд сөрөг нөлөө үзүүлэх болсон учраас дээжүүдийг 2011 оны 01 сарын 25 нд дээрх цэгүүдээс бэлдсэн.

Судалгааны 12 дээжүүдийг автозамын дагуух цаснаас гарган авсан. Тодорхой хэмжээгээр авсан цас хайлахдаа хар өнгийн суспензийн дээж болон хувирч байсан нь бидний судалгааны ажлыг ихээхэн хөнгөвчилж өгсөн. Учир нь автозамын дагуух бөөмсийг

цуглуулахын тулд түүнийг тусгай төхөөрөмжөөр соруулах шаардлагагүй болсон. Гарган авсан суспензийн дээж дахь том хэсгүүдийг 39мкм-ийн шүүлтүүрээр дахин шүүсэн. Дараа нь түүнээс 20мл-ийг таслан авч 80мл нэрсэн усанд хийж шингэрсэн 100мл-ийн суспензийн дээжийг гарган авсан.

Хэмжилтэнд зориулж бөөмийн тунах процессоос зайлсхийхийн тулд суспензийн дээжийг титан хэт авианы хошуу (Ultrasonic Cell Disruptor KS-900F)-гаар 15 минутийн туршид хутгаж нэгэн төрлийн тархалттай, тундасжаагүй суспензийг бэлтгэсэн (үүсгүүр 230В/50Гц, 20кГц; хэт авианы импульс 30%, далайц нь 50%). Детекторын тоолох хурдыг 100-2000cps хооронд байлгахар триггерийн нөхцлийг сонгож тухайн дээжийг бас 10мл+40мл байхаар дахин шингэрүүлдэг. Суспензийн дээжүүдийг бэлтгэх явц дахь рН-ийн хэмжээ 7.60~8.20 хооронд хэлбэлзэж байв. Иймэрхүү маягаар судалгааны бүх дээжүүдийг адилхан гарган авсан. NANOPHOX-ийн хэмжилтэнд зориулсан суспензийн дээжийг 12.5мм өргөнтэй, 12.5мм-ийн гүнтэй, 36мм-ийн өндөртэй, 50мкл-2.000мкл хүртэл дүүргэх

эзлэхүүн бүхий нэг удаагийн тунгалаг пластик уветт (Eppendorf UVette®, Sympatec Item No.NZ0020) саванд хийж бэлдсэн. Дээж бүхий уветтийг 632.8нм долгионы урттай HeNe-лазерийн цацрагийн замд ортогональ байхаар термостатийн тохируулга бүхий цэвэр устай саванд хийж төхөөрөмж дотор байрлуулдаг. Термостат бүхий савыг 0.22мкм шүүлтүүрээр шүүсэн усаар өндрийн ¼ байхаар дүүргэдэг. Эцсийн байдлаар гарган авсан суспензийн дээж дахь бөөмсийн диаметр, түүний тархалтыг Фотоны хөндлөн корреляцийн спектроскоп (NANOPHOX(NX0061), (ХБНГУ, Симпатекомпани)-оор NNLS горимд гүйцэтгэсэн. Хэмжилтийн үр дүнг боловсруулахад WINDOX 5 программыг ашигласан.

III. СУДАЛГААНЫ ҮР ДҮН

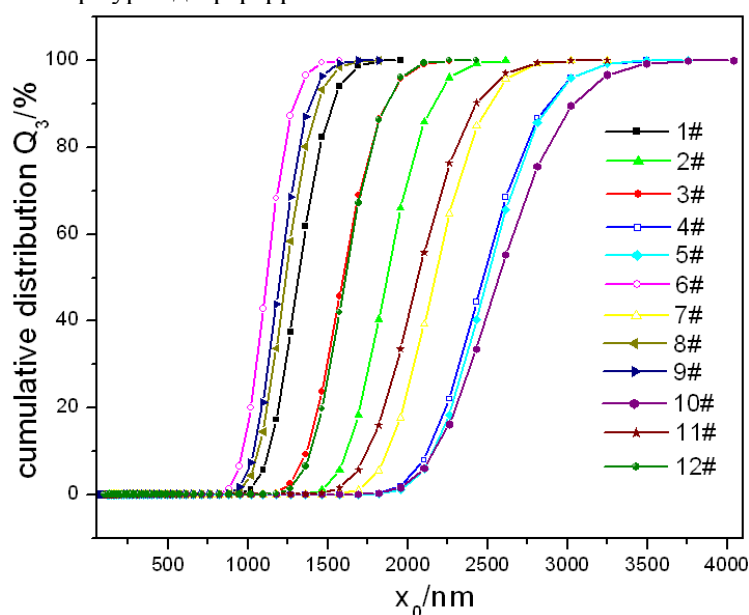
NANOPHOX багажаар хэмжсэн дээжүүд дахь бөөмсийн кумулятив тархалтын тоон утгуудыг 1-р хүснэгтэд эмхэтгэн харуулав.

Дээж→	1#	2#	3#	4#	5#	6#	7#	8#	9#	10#	1-р хүснэгт	
											11#	12#
$x_0, \text{нм} \downarrow$	$Q_3/\%$	$Q_3/\%$	$Q_3/\%$	$Q_3/\%$	$Q_3/\%$	$Q_3/\%$	$Q_3/\%$	$Q_3/\%$	$Q_3/\%$	$Q_3/\%$	$Q_3/\%$	$Q_3/\%$
74.82									0.01			
80.45						0.01			0.01			
86.50						0.01		0.01	0.01			
93.00						0.01		0.01	0.02			
100.00						0.01		0.01	0.02			0.01
107.52	0.01	0.01	0.01			0.02		0.02	0.03		0.01	0.01
115.61	0.01	0.01	0.01		0.01	0.02	0.01	0.02	0.04	0.01	0.01	0.01
124.30	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.03	0.01	0.03	0.05	0.01	0.02	0.02
133.65	0.02	0.02	0.02	0.01	0.02	0.03	0.01	0.04	0.06	0.02	0.03	0.02
143.71	0.02	0.02	0.02	0.01	0.02	0.04	0.02	0.04	0.08	0.02	0.04	0.03
154.52	0.03	0.03	0.03	0.02	0.03	0.04	0.02	0.05	0.09	0.03	0.04	0.03
166.14	0.04	0.04	0.03	0.02	0.03	0.05	0.03	0.06	0.10	0.03	0.05	0.04
178.64	0.04	0.04	0.04	0.03	0.04	0.06	0.03	0.07	0.11	0.04	0.06	0.05
192.07	0.05	0.05	0.05	0.03	0.05	0.06	0.04	0.08	0.13	0.04	0.07	0.05
206.52	0.05	0.05	0.05	0.03	0.05	0.07	0.04	0.09	0.14	0.05	0.08	0.06
222.05	0.06	0.06	0.06	0.04	0.06	0.07	0.05	0.10	0.15	0.06	0.09	0.07
238.76	0.06	0.07	0.07	0.04	0.07	0.08	0.05	0.11	0.17	0.07	0.10	0.07
256.71	0.06	0.07	0.07	0.04	0.07	0.08	0.05	0.12	0.18	0.07	0.11	0.08
276.02	0.06	0.07	0.07	0.04	0.07	0.08	0.05	0.12	0.18	0.07	0.11	0.08
296.78	0.06	0.07	0.07	0.05	0.07	0.08	0.05	0.12	0.18	0.07	0.11	0.08
319.11	0.06	0.07	0.07	0.05	0.07	0.08	0.06	0.12	0.18	0.07	0.11	0.08
343.11	0.06	0.07	0.07	0.05	0.07	0.08	0.06	0.12	0.18	0.07	0.11	0.08
368.92	0.06	0.07	0.07	0.05	0.07	0.08	0.06	0.12	0.18	0.07	0.11	0.08
396.67	0.06	0.07	0.07	0.05	0.07	0.08	0.06	0.12	0.18	0.07	0.11	0.08
426.50	0.06	0.07	0.07	0.05	0.07	0.08	0.06	0.12	0.18	0.07	0.11	0.08
458.58	0.06	0.07	0.07	0.05	0.07	0.08	0.06	0.12	0.18	0.07	0.11	0.08
493.08	0.06	0.07	0.07	0.05	0.07	0.08	0.06	0.12	0.18	0.07	0.11	0.08
530.16	0.06	0.07	0.07	0.05	0.07	0.08	0.06	0.12	0.18	0.07	0.11	0.08
570.04	0.06	0.07	0.07	0.05	0.07	0.08	0.06	0.12	0.18	0.07	0.11	0.08
612.92	0.06	0.07	0.07	0.05	0.07	0.08	0.06	0.12	0.18	0.07	0.11	0.08
659.02	0.06	0.07	0.07	0.05	0.07	0.08	0.06	0.12	0.18	0.07	0.11	0.08
708.59	0.06	0.07	0.07	0.05	0.07	0.08	0.06	0.12	0.18	0.07	0.11	0.08
761.89	0.06	0.07	0.07	0.05	0.07	0.08	0.06	0.12	0.18	0.07	0.11	0.08
819.19	0.06	0.07	0.07	0.05	0.07	0.17	0.06	0.12	0.18	0.07	0.11	0.08
880.81	0.06	0.07	0.07	0.05	0.07	1.35	0.06	0.16	0.34	0.07	0.11	0.08
947.06	0.17	0.07	0.07	0.05	0.07	6.56	0.06	0.88	1.79	0.07	0.11	0.08
1018.30	1.25	0.07	0.07	0.05	0.07	20.07	0.06	4.41	7.48	0.07	0.11	0.08
1094.89	5.73	0.07	0.08	0.05	0.07	42.83	0.06	14.56	21.35	0.07	0.11	0.08
1177.24	17.31	0.07	0.45	0.05	0.07	68.29	0.06	33.75	43.84	0.07	0.11	0.19

1265.79	37.52	0.07	2.54	0.05	0.07	87.28	0.06	58.43	68.56	0.07	0.11	1.42
1361.00	61.89	0.12	9.27	0.05	0.07	96.62	0.06	80.19	87.05	0.07	0.11	6.60
1463.37	82.31	1.10	23.80	0.05	0.07	99.53	0.06	93.27	96.38	0.07	0.31	19.82
1573.44	94.12	5.74	45.69	0.05	0.07	100.00	0.11	98.54	99.43	0.07	1.52	42.03
1691.79	98.75	18.34	68.99	0.05	0.07		1.07	99.86	99.99	0.08	5.76	67.14
1819.04	99.88	40.42	86.53	0.28	0.14		5.54	100.00	100.00	0.33	15.97	86.33
1955.86	100.00	66.09	95.82	1.94	1.16		17.72			1.64	33.59	96.15
2102.98		85.96	99.17	8.00	5.85		39.29			6.02	55.80	99.39
2261.16		96.12	99.93	22.09	18.40		64.78			16.21	76.33	99.99
2431.23		99.42	100.00	44.33	40.27		84.99			33.53	90.23	100.00
2614.10		100.00		68.54	65.71		95.66			55.27	97.05	
2810.73				86.74	85.58		99.29			75.53	99.42	
3022.14				96.12	95.91		99.98			89.54	99.95	
3249.46				99.32	99.35		100.00			96.67	100.00	
3493.87				99.97	99.99					99.27		
3756.67				100.00	100.00					99.92		
4039.24										100.00		

Тайлбар: x_0 -бөөмийн диаметр, Q_3 %-эзэлхүүний процентийн хувь.

1-р хүснэгт дэх утгуудыг ашиглан бөөмийн хэмжээ, эзэлхүүний тархалтын хамаарлын графикийг байгуулан 1-р зураг дээр үзүүлэв.



1-р зураг. Бөөмийн хэмжээний кумулятив тархалт

Дээжүүдийн бөөмийн дундаж диаметр, түүний тархалтын өргөн, бөөмийн хувийн гадаргуугийн талбай (S_v), бөөмийн гадаргуугийн дундаж диаметр (SMD), бөөмийн эзэлхүүний дундаж диаметр (VMD) зэргийг 2-р хүснэгтэд эмхэтгэн үзүүлэв.

2-р хүснэгт

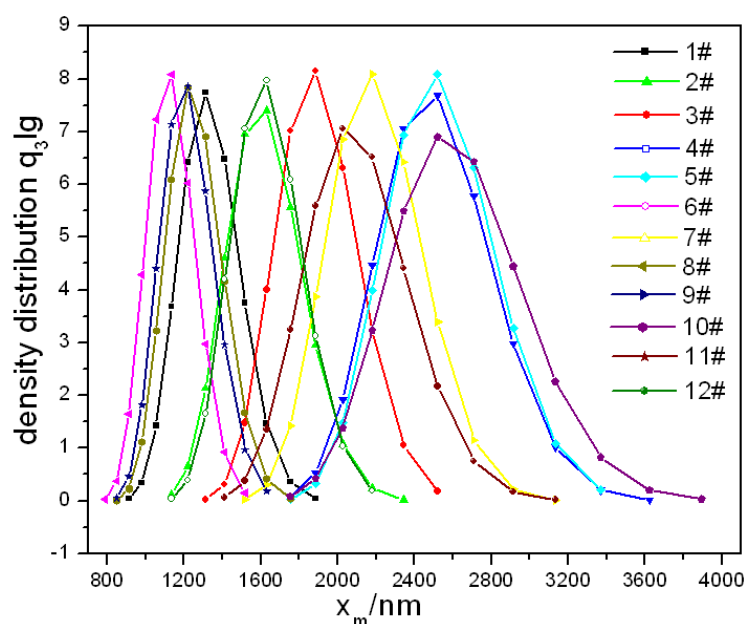
Дээж	Бөөмийн дундаж диаметр, x_{50} , мкм	Бөөмийн хэмжээсийн тархалтын муж	Бөөмийн хувийн гадаргуугийн талбай, S_v [$\text{м}^2/\text{см}^3$]	SMD, мкм	VMD, мкм
1#	1.3 ± 5	107 нм ÷ 1.9 мкм	4.62	1.20	1.30
2#	1.8 ± 5	107 нм ÷ 2.6 мкм	3.52	1.84	1.87
3#	1.5 ± 5	107 нм ÷ 2.4 мкм	3.81	1.50	1.60
4#	2.4 ± 4	124 нм ÷ 3.7 мкм	2.46	2.44	2.48
5#	2.5 ± 3	115 нм ÷ 3.7 мкм	2.44	2.40	2.50
6#	1.1 ± 3	80 нм ÷ 1.5 мкм	5.43	1.10	1.14
7#	2.1 ± 3	115 нм ÷ 3.2 мкм	2.80	2.14	2.18
8#	1.2 ± 3	86 нм ÷ 1.8 мкм	4.93	1.21	1.24
9#	1.1 ± 3	74 нм ÷ 1.8 мкм	5.10	1.10	1.20
10#	2.5 ± 3	115 нм ÷ 4.0 мкм	2.38	2.52	2.59
11#	2.0 ± 5	107 нм ÷ 3.2 мкм	2.97	2.02	2.08
12#	1.6 ± 4	100 нм ÷ 2.4 мкм	3.78	1.50	1.60

Дээжүүд дэх бөөмсийн нягтын тархалтын NANOPHOX багажаар хэмжсэн утгыг 3-р хүснэгтэд эмхэтгэн харуулав.

Дээж→	3-р хүснэгт											
	1#	2#	3#	4#	5#	6#	7#	8#	9#	10#	11#	12#
$x_m, nm \downarrow$	q_3lg	q_3lg	q_3lg	q_3lg	q_3lg	q_3lg	q_3lg	q_3lg	q_3lg	q_3lg	q_3lg	q_3lg
790.02						0.03						
849.44						0.37		0.01	0.05			
913.33	0.04					1.65		0.23	0.46			
982.03	0.34					4.29		1.12	1.81			
1055.90	1.42					7.23		3.22	4.40			
1135.32	3.68		0.12			8.08		6.09	7.14			0.04
1220.71	6.42		0.66			6.03		7.84	7.85			0.39
1312.53	7.74	0.02	2.14			2.97		6.91	5.87			1.65
1411.26	6.48	0.31	4.61			0.92		4.16	2.96		0.06	4.20
1517.41	3.75	1.47	6.95			0.15	0.02	1.67	0.97		0.38	7.05
1631.54	1.47	4.00	7.40				0.30	0.42	0.18		1.35	7.97
1754.26	0.36	7.01	5.57	0.07	0.02		1.42	0.05		0.08	3.24	6.09
1886.21	0.04	8.15	2.95	0.53	0.33		3.87			0.42	5.59	3.12
2028.09		6.31	1.07	1.92	1.49		6.85			1.39	7.05	1.03
2180.63		3.23	0.24	4.47	3.99		8.09			3.24	6.52	0.19
2344.65		1.05	0.02	7.06	6.94		6.42			5.50	4.41	
2521.01		0.18		7.68	8.08		3.39			6.90	2.17	
2710.63				5.78	6.31		1.15			6.43	0.75	
2914.52				2.98	3.28		0.22			4.45	0.17	
3133.74				1.02	1.09		0.01			2.26	0.02	
3369.45				0.20	0.20					0.83		
3622.89				0.01						0.20		
3895.39										0.03		

Тайлбар: x_m -бөөмийн диаметр, q_3lg -бөөмийн нягт

Бөөмийн хэмжээ ба нягтын хамаарлыг 2-р зураг дээр үзүүлэв.



2-р зураг. Бөөмийн нягтын тархалт

1 ба 2-р хүснэгтээс харахад автозамын дагуух бөөмсийн дундаж диаметр (1.1 ± 3) -ээс (2.5 ± 3) мкм, бөөмийн хэмжээний тархалтын муж 74 нм-4.0 мкм, бөөмийн хувийн гадаргуугийн талбай $(S_v) 2.38 \pm 5.43 [m^2/cm^3]$, бөөмийн гадаргуугийн дундаж диаметр (SMD) 1.10 ± 2.52 мкм, бөөмийн эзэлхүүний дундаж диаметр (VMD) 1.14 ± 2.59 мкм зэрэг утгуудтай байна. Хэмжилтийн явцад 74 нм-ээс бага

хэмжээтэй бөөм бүртгэгдээгүй болно. Энэ нь агаар мандлын хэт-нарийн бөөмүүд (нано бөөм) ойролцоогоор 100 нм-ээс бага диаметртэй бөгөөд өндөр ба нам температурын үүсгүүрүүдээс үүсээд шууд агаар мандал руу дэгддэг ба харин буцаад тунах үзэгдэл бараг явагдаггүйтэй холбоотой байж болох юм. Эндээс бөөмийн дундаж диаметр, түүний тархалтын муж буурахаар бөөмийн хувийн

гадаргуугийн талбай ихсэж, SMD ба VMD багасах зүй тогтол ажиглагдаж байна.

2-р хүснэгтээс үзэхэд бөөмүүд 790нмч3.8мкм мужид 0.02-оос 8.15(q_3lg) хүртэл нягттайгаар гаусс тэгш хэмтэйгээр түгсэн байна (2-р зураг).

1-р зургаас нийт дээжүүдийн хувьд бөөмүүд 74ч100 нм мужид эзэлхүүний 0.02%-ийг хэт нарийн бөөм буюу нанобөөм, 100нмч2.4мкм мужид дунджаар эзэлхүүний 83.73%-ийг нарийн ширхэгтэй бөөм (PM2.5), 2.4ч4.0мкм мужид эзэлхүүний 100%-ийг том хэмжээт бөөм (PM10) тус тус эзэлж байна. Эндээс автомашины дагуух тоосонцорын дээжүүдэд PM2.5, PM10 бөөмүүдийн агууламж өндөр хувьтай байдаг нь ажиглагдаж байна.

IV. ДҮГНЭЛТ

1. Автозамын дагуух бөөмсийн дундаж диаметр(1.1 ± 3)-ээс (2.5 ± 3)мкм, бөөмийн хувийн гадаргуугийн талбай (Sv) $2.38\pm5.43[m^2/cm^3]$, бөөмийн хэмжээсийн тархалтын муж 74нмч4.0мкм гэж тодорхойлов.
2. Хэмжилтийн явцад 74нм-ээс бага хэмжээтэй бөөм бүртгэгдээгүй болно.
3. Бөөмийн дундаж диаметр, түүний тархалтын муж буурахаар бөөмийн хувийн

гадаргуугийн талбай ихсэж, SMD ба VMD багасах зүй тогтол ажиглагдаж байна.

4. Бөөмүүд 790нмч3.8мкм мужид 0.02-оос 8.15(q_3lg) хүртэл нягттайгаар гаусс тэгш хэмтэйгээр түгсэн байна.
5. Дээжүүдийн хувьд бөөмүүд 74ч100 нм мужид эзэлхүүний 0.02%-ийг хэт нарийн бөөм буюу нанобөөм, 100нмч2.4мкм мужид дунджаар эзэлхүүний 83.73%-ийг нарийн ширхэгтэй бөөм (PM2.5), 2.4ч4.0мкм мужид эзэлхүүний 100%-ийг том хэмжээт бөөм (PM10) тус тус эзэлж байна.
6. Автомашины дагуух тоосонцорын дээжүүдэд PM2.5 бөөмүүдийн агууламж өндөр хувьтай байна.

АШИГЛАСАН НОМ ЗҮЙ

1. NSF Workshop Report on “Emerging Issues on Nanoparticles Aerosol Science and Technology (NAST)”, University of California, Los Angeles, June 27-28, 2003.
2. Улаанбаатар хотын агаарын бохирдол. Дэлхийн банк, Хэлэлцүүлгийн баримт бичиг. 2009 оны 12 сар.
3. Nanophox Operating Instructions. © 2008, Sympatec GmbH, System-Partikel-Technik, Am Pulverhuas 1, D-38678 Clausthal-Zellerfeld, Deutschland.

Усанд суспензлэгдсэн перовскит төрлийн $\text{La}_{1-x}\text{Cu}_x\text{MnO}_3$ ($x \leq 0.1$)-ийн кристалл бүтэц ба бөөмийн хэмжээсийн судалгаа

Г.Батдэмбэрэл^{1*}, Г.Оюунгэрэл²
Ш.Чадраабал¹, Г.Цэрмаа¹, П.Мөнхбаатар¹

¹Шинжлэх Ухаан Технологийн Их Сургууль, Материал Судлалын Салбар,

Хатуу биеийн физик, нанотехнологийн профессорын баг

²Монгол Улсын Боловсролын Их Сургууль, Физик Технологийн Сургууль

*Э-mail: gdembee@must.edu.mn

Аморф гетероцөмийн комплекс аргаар янз бүрийн талсжилтийн температурт $\text{La}_{1-x}\text{Cu}_x\text{MnO}_3$ ($x \leq 0.1$) перовскит төрлийн нэгдлүүдийг гарган авсан. Рентген дифракцийн аргаар эдгээр нэгдлүүд нь $R\bar{3}c$ огторгуйн групп бүхий ромбоэдр тэгш хэмтэй $\text{La}_{1-x}\text{Cu}_x\text{MnO}_3$, $C2/c$ огторгуйн групп бүхий моноклин $k, l/m, >$ тэгш хэмтэй $\text{La}_2\text{Cu}_2\text{O}_5$ гэсэн хоёр фазуудаас тогтож байв. Талсжилтийн температур 500°C -ээс 900°C хүртэл нэмэгдэхэд дээжүүдэд үүссэн $\text{La}_{1-x}\text{Cu}_x\text{MnO}_3$ нэгдлийн тоо хэмжээ 91.22%-иас 97.62% хүртэл өсч, харин $\text{La}_2\text{Cu}_2\text{O}_5$ фазын тоо хэмжээ 8.78%-иас 2.37% хүртэл буурдаг болохыг тус тус тодорхойлов.

PCCS (NANOPHOX) багажын хэмжилтийн дүнд талсжилтийн температураас хамаарч суспензийн дээж $\text{La}_{1-x}\text{Cu}_x\text{MnO}_3$ ($x \leq 0.1$)-ийн pH 9.20-оос 8.27 хүртэл буурдаг, бөөмийн дундаж диаметр (276 ± 4) -ээс (455 ± 5) нм хүртэл өсдөг, бөөмийн хувийн гадаргуугийн талбай (S_v) 21.84 ± 13.29 $[\text{м}^2/\text{см}^3]$ хүртэл буурах, бөөмийн хэмжээсийн тархалтын муж $55 \div 761$ нм, бөөмийн гадаргуугийн ба эзэлхүүний дундаж диаметр (SMD, VMD)-ууд 247 нм-ээс 459 нм хүртэл өсөх зэрэг зүй тогтол байгааг тус тус тогтоосон.

Түлхүүр үг: перовскит төрлийн исэл, гетероцөмийн комплекс арга, рентген дифракци, суспенз, бөөмийн хэмжээ

I. ОРШИЛ

Лантан бүхий перовскит төрлийн нэгдлүүдийг ($\text{La}_{1-x}\text{MMnO}_3$, M-Ce, Sr, Pr, Eu, Nd) олон төрлийн хэрэглээнд зориулж судалсаар байна [1-6]. Тухайлбал, түлшний элемент, нүүрстөрөгчийн шаталт, утааны бохирдол, каталитик мембран гэх мэт. Олон судлаачид LaMnO_3 дахь La атомын зарим хэсгийг ховор шорооны элементүүдээр “халалцах” маягаар хольцолж судалсаар байна [1, 7-11]. ($\text{La}_{1-x}\text{MMnO}_3$, M-Ce, Sr, Pr, Eu, Nd) нэгдэлүүд нь нүүрстөрөгчийн дан исэл (CO), метаны шаталт, угаарын SO_2 хийг эсэргүүцэх зэрэг нэлээн сайн идэвхтэй гэдгээ харуулсан [12-15].

Перовскит төрлийн оксидуудыг голдуу керамик [16], тундасжуулах [17], шүршиж хатаах [18], хөлдөөж хатаах [19], аморф цитрат [20, 21] зэрэг аргуудаар гарган авч байна. Янз бүрийн аргаар гарган авсан үр дүн нь катализын өөр өөр үзүүлэлтийг өгч буй перовскитын бүтцийн дефектийн өөрчлөлт гэж үзэж байгаа юм. Аморф гетероцөмийн комплекс арга нь дээжийг авах өртөг хямд,

перовскит төрлийн бүтэц үүсэх температур бага, перовскит төрлийн катализаторуудыг синтезлэхэд маш чухал юм.

Тус ажлын зорилго нь LaMnO_3 дахь La атомын зарим хэсгийг Cu атомоор хольцолж янз бүрийн талсжилтийн температурт аморф гетероцөмийн комплекс аргаар $\text{La}_{1-x}\text{Cu}_x\text{MnO}_3$ ($x \leq 0.1$) бөөмүүдийг синтезлэх, тогтвортой суспензийн дээжийг амжилттай бэлтгэх, рентген дифракцийн аргаар судлах тэдгээрийг кристалл бүтцийг тогтоох, гарган авах температураас хамааруулж $\text{La}_{1-x}\text{Cu}_x\text{MnO}_3$ ($x \leq 0.1$) нэгдлийн бөөмүүдийн хэмжээсийг тодорхойлох явдал юм.

II. ТУРШИЛТ

500°C , 600°C , 700°C , 800°C , 900°C -ийн температурт гетероцөмийн комплекс аргаар нанохэмжээт $\text{La}_{1-x}\text{Cu}_x\text{MnO}_3$ ($x \leq 0.1$) перовскит төрлийн бөөмсийг синтезлэн гарган авсан.

Рентген дифракцийн хэмжилтийг тасалгааны температурт нунтгийн “Enraf Nonius Delft” дифрактометр дээр дараахь нөхцөлтэйгээр хэмжсэн: хэмжсэн муж: $2\Theta = 5-$

60°, өнцөг алхам=0.02°, нэг алхам дээр хэмжсэн хугацаа 3 секунд байсан. Рентген фазын шинжилгээг <<X'Pert HighScore Plus>> программаар гүйцэтгэсэн [22]. Хэмжсэн рентген дифракцийн спектрийг Ритвельдийн арга дээр үндэслэсэн FULLPROF. программаар боловсруулсан [23].

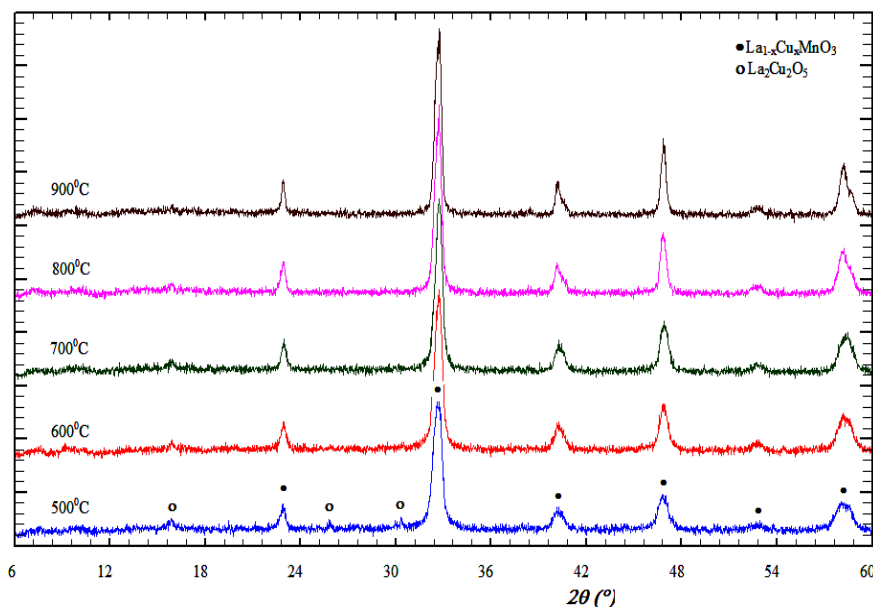
Анхны суспензийг 0.0207гр нунтаг дээжийг 60мл нэрсэн усанд хийж бэлдсэн. Хэмжилтэнд зориулж бөөмийн тунах процессоос зайлсхийхийн тулд суспензийн дээжийг титан хэт авианы хошуу (Ultrasonic Cell Disruptor KS-900F)-гаар 10 минутийн туршид (дараалсан олон удаагийн хэмжилтийн дүнд 10 минут байхаар тогтсон) хутгаж нэгэн төрлийн тархалттай, тундасжаагүй суспензийг бэлтгэсэн (үүсгүүр 230В/50Гц, 20кГц; хэт авианы импульс 30%, далайц нь 50%). Детекторын тоолох хурдыг 1200kcps байхаар триггерийн нөхцлийг сонгож тухайн дээжийг бас 20мл+60мл байхаар дахин шингэрүүлсэн. Хэт авиагаар үйлчилсэний дараа суспензийн дээжүүдийн рН-ийн хэмжээ 8.27~9.20 хооронд хэлбэлзэж байв. Иймэрхүү маягаар судалгааны бүх дээжүүдийг адилхан гарган авсан. NANOPHOX-ийн хэмжилтэнд зориулсан суспензийн дээжийг 12.5мм өргөнтэй, 12.5мм-ийн гүнтэй, 36мм-ийн өндөртэй, 50мкл-2.000мкл хүртэл дүүргэх эзлэхүүн бүхий нэг удаагийн тунгалаг пластик уветт (Eppendorf UVette®, Sympatec Item No.NZ0020) саванд хийж бэлдсэн. Дээж бүхий уветтийг 632.8нм долгионы урттай

HeNe-лазерийн цацрагийн замд ортогональ байхаар термостатийн тохируулга бүхий цэвэр устай саванд хийж төхөөрөмж дотор байрлуулдаг. Термостат бүхий савыг 0.22мкм шүүлтүүрээр шүүсэн усаар өндрийн $\frac{3}{4}$ байхаар дүүргэдэг.

Эцсийн байдлаар гарган авсан суспензийн дээж дахь бөөмсийн диаметр, түүний тархалтыг Фотоны хөндлөн корреляцийн спектроскоп (NANOPHOX (NX0061), (ХБНГУ, Симпатекомпани)-оор NNLS горимд гүйцэтгэсэн. Хэмжилтийн үр дүнг боловсруулахад WINDOX 5 программыг ашигласан [24].

III.ҮР ДҮН

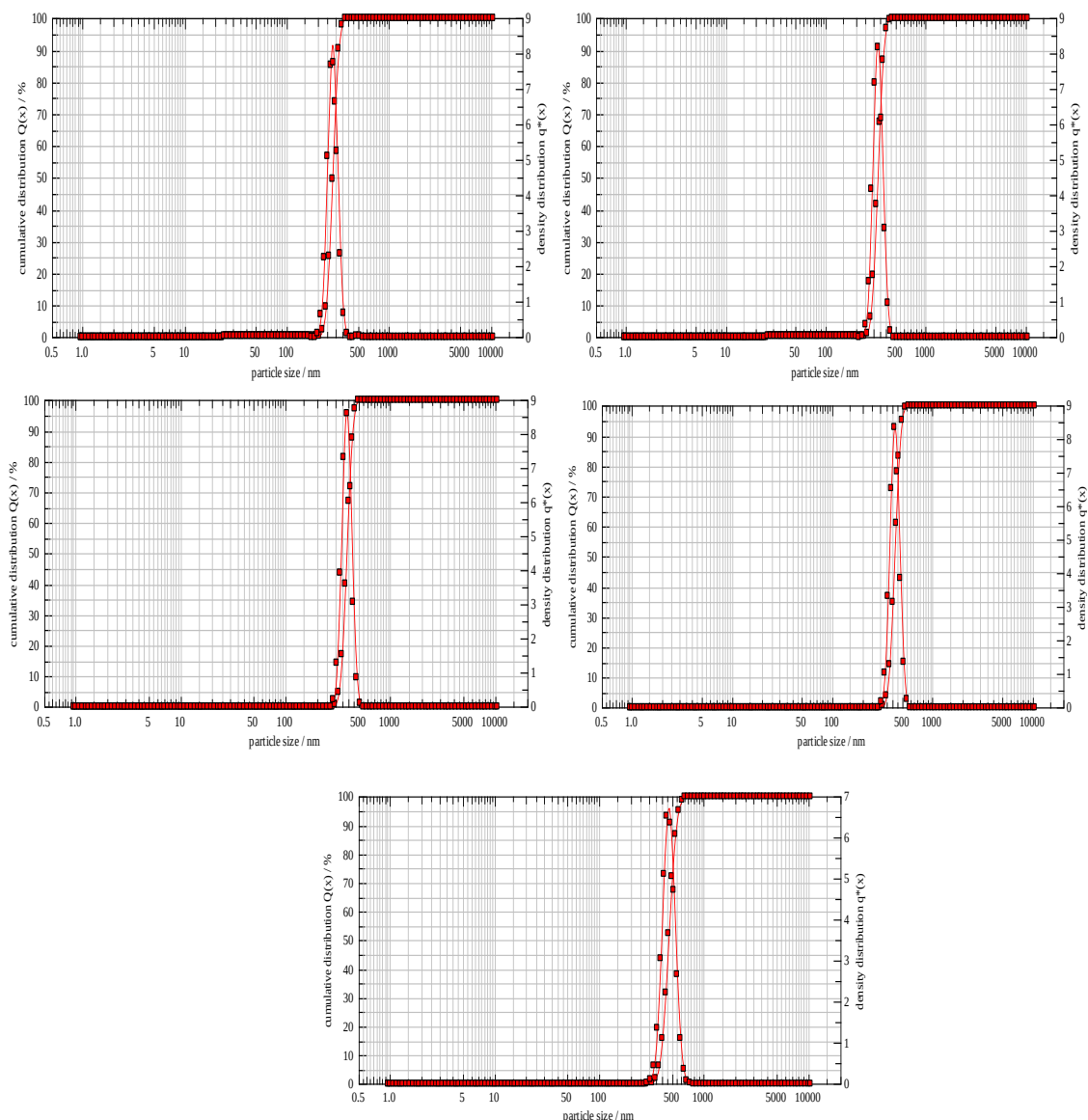
Рентген дифракцийн аргаар янз бүрийн температурт хэмжсэн $\text{La}_{1-x}\text{Cu}_x\text{MnO}_3$ ($x \leq 0.1$)-ийн рентген дифрактограммыг 1-р зураг дээр харьцуулан үзүүлэв. Дифрактограмм дээр $\text{La}_{1-x}\text{Cu}_x\text{MnO}_3$ нэгдлийг • тэмдэгтээр, $\text{La}_2\text{Cu}_2\text{O}_5$ нэгдлийг о тэмдэгтээр тус тус тэмдэглэсэн. <<X'Pert HighScore Plus>> программ ашиглан рентген фазын шинжилгээ хийхэд дээжүүд $R\bar{3}c$ огторгуйн групп бүхий ромбоэдр тэгш хэмтэй $\text{La}_{1-x}\text{Cu}_x\text{MnO}_3$, $C2/c$ огторгуйн групп бүхий моноклин тэгш хэмтэй $\text{La}_2\text{Cu}_2\text{O}_5$ гэсэн хоёр фазуудаас тогтож байв. Ритвельдийн арга дээр үндэслэсэн FULLPROF. програмаар дээжүүд дахь фазуудын тоо хэмжээг тооцоолж 1-р хүснэгт дээр эмхэтгэн харуулав



1-р зураг. Янз бүрийн талсжилтийн температур дахь $\text{La}_{1-x}\text{Cu}_x\text{MnO}_3$ ($x \leq 0.1$) бөөмүүдийн харьцуулсан рентген дифрактограмм

1-р хүснэгт

Дээж	$\text{La}_{1-x}\text{Cu}_x\text{MnO}_3$, ат %	$\text{La}_2\text{Cu}_2\text{O}_5$, ат %
500 ⁰ C	91.22	8.78
600 ⁰ C	96.97	3.03
700 ⁰ C	97.19	2.81
800 ⁰ C	97.52	2.47
900 ⁰ C	97.62	2.37



2-р зураг. Температурын 500⁰C, 600⁰C, 700⁰C, 800⁰C, 900⁰C утгуудад бөөмийн хэмжээнээс $\text{La}_{1-x}\text{Cu}_x\text{MnO}_3$ -ийн бөөмүүдийн кумулятив тархалт ба нягт хамаарах нь.

Талсжилтийн температур 500⁰C-ээс 900⁰C хүртэл нэмэгдэхэд дээжүүдэд үүссэн $\text{La}_{1-x}\text{Cu}_x\text{MnO}_3$ нэгдлийн тоо хэмжээ 91.22%-иас 97.62% хүртэл өсч, харин $\text{La}_2\text{Cu}_2\text{O}_5$ фазын тоо хэмжээ 8.78%-иас 2.37% хүртэл буурч байна. PCCS (NANOPHOX) дээрх хэмжилтийн үр дүнг 2-р зураг дээр үзүүлэв.

Дээжүүдийн pH-ийн утгууд, бөөмийн дундаж диаметр, түүний тархалтын өргөн, бөөмийн хувийн гадаргуугийн талбай (Sv), бөөмийн гадаргуугийн дундаж диаметр (SMD), бөөмийн эзэлхүүний дундаж диаметр (VMD) зэргийг 2-р хүснэгтэд эмхэтгэн үзүүлэв.

2-р хүснэгт

Дээж	pH	Бөөмийн дундаж диаметр, x_{50} , нм	Бөөмийн хэмжээсийн тархалтын өргөн, нм	Бөөмийн хувийн гадаргуугийн талбай, S_v [$\text{м}^2/\text{см}^3$]	SMD , нм	VMD, нм	Бөөмийн нягт, q_3lg
500°C	9.20	276 ± 4	55÷396	21.84	274	278	7.73
600°C	8.62	326 ± 3	60÷458	18.49	324	328	8.18
700°C	8.60	379 ± 4	296÷530	15.91	377	381	8.60
800°C	8.58	414 ± 5	319÷570	14.57	411	416	8.34
900°C	8.27	455 ± 5	296÷761	13.29	451	459	6.51

PCCS (NANOPHOX) багажын хэмжилтийн дүнд талсжилтийн температураас хамаарч суспензийн $\text{La}_{1-x}\text{Cu}_x\text{MnO}_3$ дээжүүдийн pH 9.20-оос 8.27 хүртэл буурч байна.

2-р зураг ба 2-р хүснэгтээс харахад $\text{La}_{1-x}\text{Cu}_x\text{MnO}_3$ ($x \leq 0.1$)-ийн талсжилтийн температураас хамаарч бөөмсийн дундаж диаметр (276±3)-ээс (455±3) нм хүртэл, бөөмийн хэмжээний тархалтын өргөн 55÷761 нм, бөөмийн хувийн гадаргуугийн талбай (SMD) 13.29÷21.84 [$\text{м}^2/\text{см}^3$], бөөмийн гадаргуугийн дундаж диаметр (SMD) 274÷451 нм, бөөмийн эзэлхүүний дундаж диаметр (VMD) 278÷459 нм зэрэг утгуудтай байна.

Эндээс суспензийн дээжүүдэд талсжилтийн температур өсөхөөр pH-ийн утгууд буурч, бөөмийн дундаж диаметр, түүний тархалтын өргөн өсч байна. Харин энэ үед бөөмийн хувийн гадаргуугийн талбай буурч, SMD ба VMD өсөх зүй тогтол ажиглагдаж байна.

2-р зургаас бөөмүүд 199нм÷307нм мужид 0.02-оос 8.60(q_3lg) хүртэл нягттайгаар гаусс тэгш хэмтэйгээр түгсэн байна (2-р зураг, 2-р хүснэгт). Бас талсжилтийн температур өсөхөөр бөөмүүдийн нягт буурдаг болох нь ажиглагдав. Мөн бөөмийн нягт 500°C-аас 700°C хүртэл өсөөд 900°C хүртэл буурч байв.

IV. ДҮГНЭЛТ

1. Рентген дифракцийн аргаар эдгээр нэгдлүүд нь $R\bar{3}c$ огторгуйн групп бүхий ромбоэдр тэгш хэмтэй $\text{La}_{1-x}\text{Cu}_x\text{MnO}_3$, $C2/c$ огторгуйн групп бүхий моноклин тэгш хэмтэй $\text{La}_2\text{Cu}_2\text{O}_5$ гэсэн хоёр фазуудаас тогтож байв. Талсжилтийн температур 500°C-ээс 900°C хүртэл нэмэгдэхэд дээжүүдэд үүссэн $\text{La}_{1-x}\text{Cu}_x\text{MnO}_3$ нэгдлийн тоо хэмжээ 91.22%-иас 97.62% хүртэл өсч, харин $\text{La}_2\text{Cu}_2\text{O}_5$ фазын тоо хэмжээ 8.78%-иас 2.37% хүртэл буурдаг болохыг тус тус тодорхойлов.

2. Талсжилтийн температур өсөхөөр pH-ийн утгууд буурч, бөөмийн дундаж диаметр, түүний тархалтын өргөн өсч байна. Харин энэ үед бөөмийн хувийн гадаргуугийн талбай буурч, SMD ба VMD багасах зүй тогтол ажиглагдаж байна.
3. Бөөмүүд 199нм÷307нм мужид 0.02-оос 8.60(q_3lg) хүртэл нягттайгаар гаусс тэгш хэмтэйгээр түгсэн байна. Мөн бөөмийн нягт 500°C-аас 700°C хүртэл өсөөд 900°C хүртэл буурч байв.

АШИГЛАСАН НОМ ЗҮЙ

1. D.B. Meadowcroft. *Nature*, 1970(226): 847
2. R.J.H. Voorhoeve, J.P. Remeika, P.E. Freeland, B.T. Mattias. *Science*, 1972(177): 353
3. T. Shimizu. *Catal.Rev.-Sc.Eng.*, 1992(34): 355
4. J.E.H. Sansom, H.A. Rudge-Pickard, G. Smith, P.R. Slater and M.S. Islam. *Solid State Ionics*, 2004(175): 99
5. I. Arul Raj, F. Tietz, A. Gupta, W. Jungen and D. Stöver. *Acta Materialia*, 2001, 49(11): 1987
6. J. L. Routbort, K. C. Goretti, R. E. Cook and J. Wolfenstine. *Solid State Ionics*, 2000,(129): 53
7. N. Yamazoe, Y. Teraoka. *Catal. Today.*, 1990(8): 175
8. H. Arai, T. Yamada, K. Eguchi, T. Seiyama. *Appl.Catal.*, 1986(26): 265
9. H.M. Zhang, Y.Shimizu, Y. Teraoka, N. Miura, N. Yamazoe. *J.Catal.*, 1990(121): 432
10. Yung-Fang Yu Yao. *J.Catal.*, 1975(36): 266
11. T. Nitadori, S. Kurihara, M. Misono. *J.Catal.*, 1986(98): 221
12. T. Nitadori, M. Misono. *J.Catal.*, 1985(93): 459
13. K.S. Chan, J. Ma, S. Jaenicke and G.K.Chuah. *Appl. Catal. B.*, 1994(107): 201

- 14.M. Alifanti, R. Auer, J. Kirchnerova, F. Thyron, P. Grange and B. Delmon. *Appl. Catal. B.*, 2003(41): 71
- 15.Davide Ferri and Lucio Forni. *Appl. Catal. B.*, 1998(16): 119
- 16.R.J.H. Voorhoeve, J.P. Remeika, L.E. Trimble, in W.R. Moser and J. Happel (Editors), *Catalytic Chemistry of Solid State Inorganics*, Vol. 272, The New York Academy Sciences, 1976, p.3
- 17.Y. Zhang-Steenwinkel, J. Beckers and A. Blik. *Appl. Catal. A.*, 2002(235): 79
- 18.H. Imai, K. Takami, M. Naito. *Mat.Res.Bull.*, 1984(19): 1293
- 19.J. Kirchnerova, D. Klvana, J. Vaillancourt, J. Chaouki. *Catal.Lett.*, 1993(21): 77
- 20.M.S.G. Bayathoun, F.R. Sale, *J.Mat.Sci.*, 1982(17): 2757
- 21.R.Ganguly, I.K.Gopalakrishnan and J.V.Yakhmi. *J.Phys.: Condens. Matter* 12 (2000) L719-722.
- 22.X'Pert High Score Plus. Version 2.0a. © PANalytical B.V.2003.
- 23.Rietveld, Profile Matching and Integrated Intensities Refinement of X-ray and /or Neutron Data (powder and /or single-crystal). Version 3.5d Oct98-LLB-JRC Juan Rodriguez-Carvajal, Laboratories Leon Brillouin (CEA-CNRS).
- 24.Nanophox Operating Instructions. © 2008, Sympatec GmbH, System-Partikel-Technik, Am Pulverhuas 1, D-38678 Clausthal-Zellerfeld, Deutschland.

Long Term Performance Analysis of Photovoltaic Modules in the Sainshand of Dornogobi Province

Amarbayar Adiyabat^{1*}, Bat-Erdene Ganbaatar¹, Kenji Otani², Naruush Enkhmaa³

¹Department of Applied Physics, School of Physics and Electronics, National University of Mongolia

²National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST), Japan

³Sainshand Meteorological Observation Center of Dornogobi province, Mongolia

*E-mail: Amarbayar@gmail.com

This paper presents the evaluation results of a long-term performance of 2 type PV module from actual data measured over a period of more than 6 years in the Gobi Desert of Mongolia. For the purpose of estimating solar energy potentials and durability of PV systems in the Gobi desert area, a data acquisition system, which includes crystalline silicon (c-Si), polycrystalline silicon (p-Si) modules and precision pyranometer, thermometer and anemometer, have been installed at the Sainshand city in October, 2002. This system has been measuring 23 parameters including solar irradiation and meteorological parameters in every 10 minutes. It has been observed that the high output gain due to the operating condition in an extreme low ambient temperature and the PV module degradation rate indicated over -1.5[%/yr] after 6 years exposure test.

I. INTRODUCTION

The Gobi Desert, Mongolia, is one of the most promising candidate sites for introduction of the 100MW class Very Large Scale Photovoltaic Systems (VLS-PV) specified by Task 8 “Very Large Scale Photovoltaic Power Generation Systems” conducted as part of the IEA Photovoltaic Power Systems Program (IEA PVPS) [1]. Within the framework of the IEA PVPS Task 8 activity, a conceptual design has been developed and a trial calculation of the costs associated with power generation and construction of a VLS-PV system in the Gobi Desert area has been performed [2].

The meteorological environmental characteristics of the Gobi Desert may affect the PV system performance and design specifications. Therefore, it is necessary to clarify the factors that will affect the system design, operation, and maintenance. However, no useful reference data are available and there have been no case studies analyzing solar energy resources or performance for PV system installation in the Gobi Desert area.

In the Gobi Desert, Mongolia, we set up two types of photovoltaic modules and checking devices (e.g., I-V Curve Tracer, etc.) as well as meteorological devices to study the characteristics of photovoltaic system operation under such severe environmental conditions. The present study was performed to verify the output simulation technique for the VLS-PV to confirm the efficiency of using a large-scale concentrated photovoltaic system in this area, and to clarify the specific requirements for

system design. To clarify the actual environmental capabilities (loss analysis) in the Gobi Desert, we measured meteorological data, such as the amount of solar irradiation and temperature, and the I-V characteristics of the photovoltaic modules.

II. EXPERIMENTAL SETUP

In order to determine the potential of VLS-PV in Gobi desert area it has been installed two types of the crystalline silicon PV modules and checking devices (e.g. I-V curve tracer, etc.) as well as a new data acquisition system in the Sainshand (44°54' N and 110°07'E) - the field site (see Figure 1, 2), which is located in the south eastern part of Mongolia. The data acquisition system (see figure 2) automatically will be switched on at every 10 min and records the total solar irradiation received on the horizontal and 45degree tilted surfaces, site meteorological data and measures PV module current-voltage (I-V) curves.

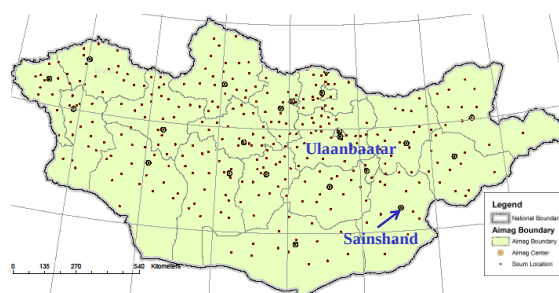


Figure 1. Location of the exposure test site

Measurement items listed below line:

1. Global Irradiance in horizon
2. In-plane Irradiance, in 45 degree
3. Wind Speed & Direction
4. Air Temperature
5. Humidity
6. Albedo
7. Short - circuit current I_{sc}
8. Open - circuit voltage V_{oc}
9. Current at maximum power I_{pm}
10. Voltage at maximum power V_{pm}
11. Temperature of modules T_1, T_2



Figure 2. Overview of the experimental set-up

Table 1 Electrical characteristics of PV modules on the STC

PV module name and Type		PV module-1	PV module-2
Parameters	Unit	p-Si	c-Si
Short-circuit current (I_{sc})	A	5.3	4.8
Open-circuit voltage (V_{oc})	V	21.3	21.7
Current at max. power (I_{pm})	A	4.7	4.4
Voltage at max. power (V_{pm})	V	17.1	17.0
Maximum power rating (P_{max})	W	80	75
Temperature coefficient	W/°C	0.373	0.321

III. ANALYSIS METHOD

The field data analysis is divided into 3 parts regarding environmental conditions, solar energy resource evaluation, and photovoltaic (PV) performance. The environmental condition indices include ambient and module temperatures, average wind speed, humidity, and albedo. For evaluation of the solar energy resource, we use sunshine duration time, monthly average irradiation, and irradiation variable ratio. The PV Module performance indices include reference yield, array (module) yield, and performance ratio [3].

In this analysis, we used 6 years of data collected from March 2003 to February 2009. First, raw data obtained from the test site were checked and correctable noise was filtered.

A. Environmental condition indices

The average values of the ambient temperature, module backside temperature, wind speed/direction, humidity and albedo will be indicated to Figure out the real environmental situations of PV modules. We will compare measured meteorological data to an average year data of local weather station, in order to evaluate the environmental conditions during the measurement period to a normal year.

B. Solar Energy Resource Indices

The horizontal and in-plane irradiation [$\text{kWh}/\text{m}^2/\text{day}$], the time of sunshine duration $T_{Meas.Duration}$ [hour/month] and fraction F_{SD} to possible sunshine duration time were used for the indices of solar energy resource. In here, possible sunshine duration time is mean for fine day's duration time. We will compare monthly irradiance and sunshine duration time to local weather station data, in order to evaluate the irradiance situation during the measurement period.

$$F_{SD} = T_{Meas.Duration} / T_{Possible Duration} \quad (1)$$

C. PV Module performance indices

All system performance data have been evaluated in terms of operational performance and reliability. The evaluation procedures are based on the IEC Standard 61724 [7].

$$Y_r = H_A / G_S \quad (2) \quad Y_A = E_{A,d} / P_{max} \quad (3)$$

$$PR = Y_A / Y_r \quad (4)$$

The reference yield Y_r is based on the in-plane irradiation H_A and represents the theoretically available energy G_S per day and kW_p . The array yield Y_A is the daily array energy output $E_{A,d}$ per kW and represents the number of hours per day that the array would need to operate at its rated output power P_{max} to contribute the same daily array energy to the system as it was monitored. The array performance ratio PR is the ratio of actual array

output energy to the energy theoretically available (i.e. Y_A/Y_r). It is independent of location and array size and indicates the overall losses on the array's rated output due to module temperature and incomplete utilization of irradiation. η_{array} is mean test module in our case/

IV.RESULTS

Environmental condition: The PV module, frame, and cable were working over a wide range of temperatures and were subjected to severe thermal stress. The monthly ambient temperature (average, minimum, maximum) value ranged from -30°C to $+40^{\circ}\text{C}$ (see Figure 4). The monthly average wind speed (6 years) indicated 3.0[m/s] at a height of 3 m, and wind in spring was strong (over 4[m/s]) than other season (see Figure 5).

The daily transition of ambient and module temperature is shown in Figure 3 by the monthly average hour values. The difference between

daytime and nighttime air temperature was around 10°C . The rise in module temperature was from 15 to 20°C relative to ambient temperature, and module temperature was kept below the standard conditions of 25°C in April and January.

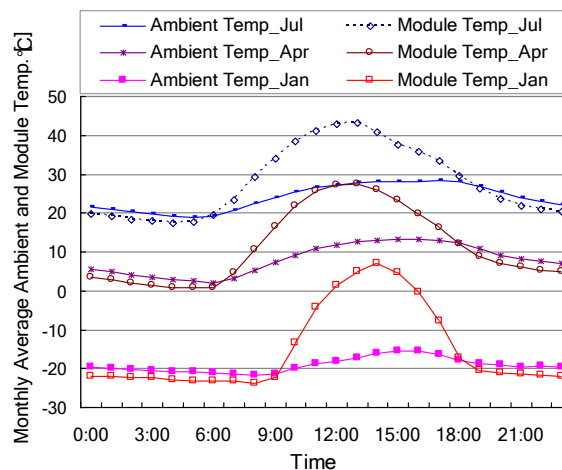


Figure 3 Daily transition of ambient and module temperature by monthly average value

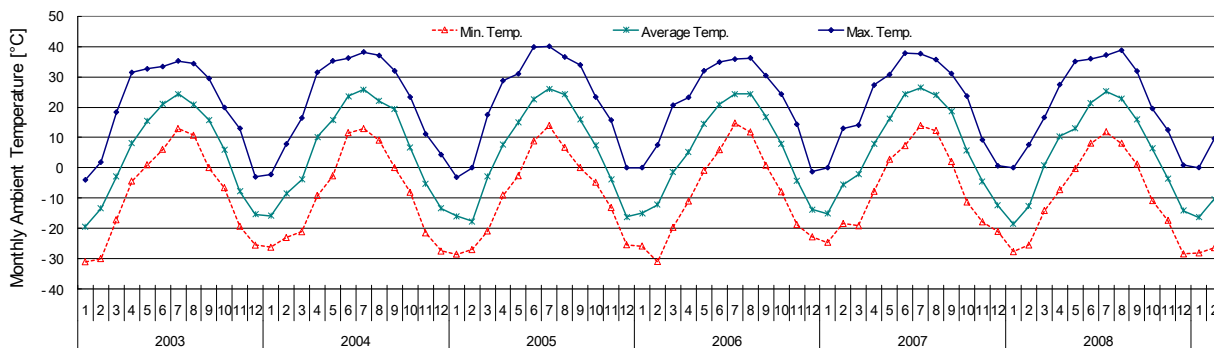


Figure 4 Monthly Ambient Temperature (Average, Min, Max) [$^{\circ}\text{C}$]

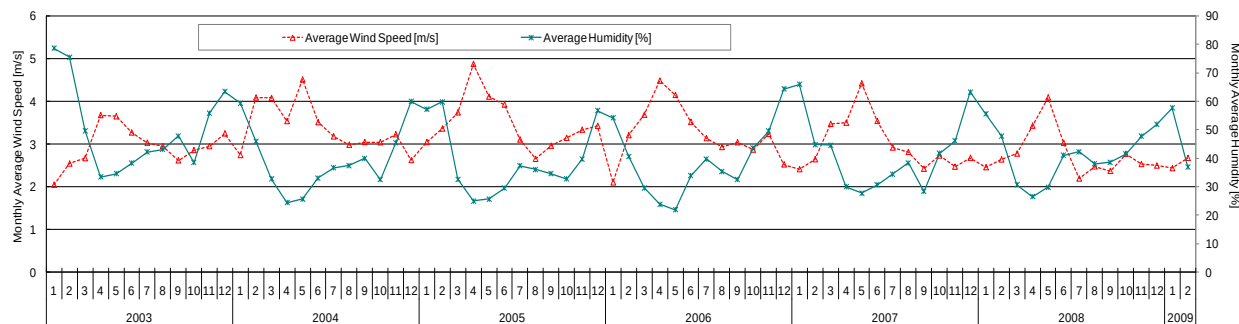
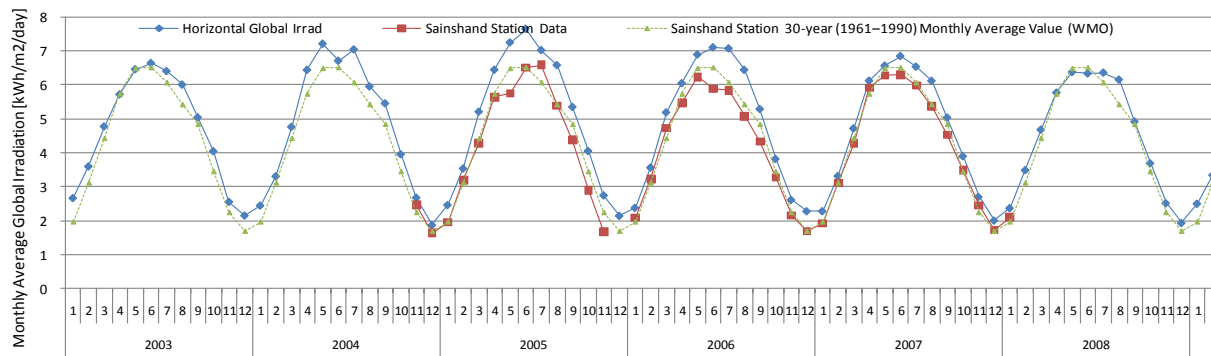
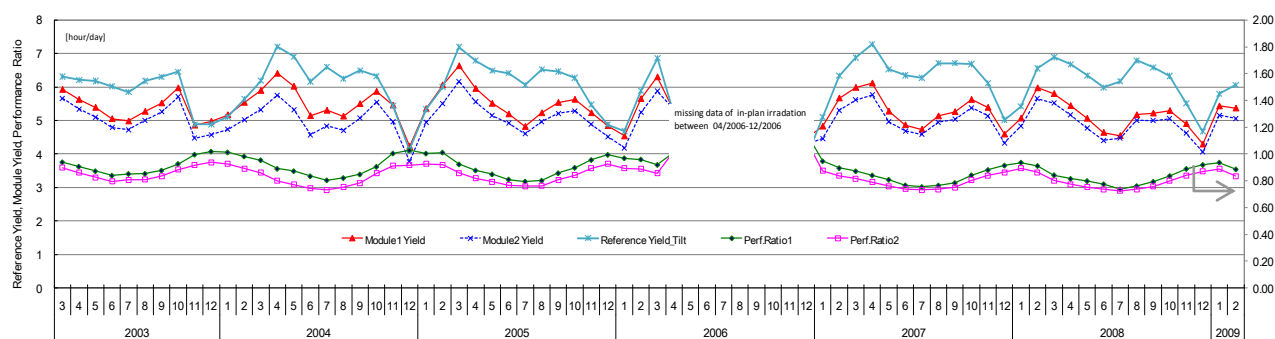


Figure 5 Monthly Average Wind Speed and Humidity

Figure 6 Monthly Average Horizontal Global Irradiation [$\text{kWh/m}^2/\text{day}$]Figure 7 Reference Yield Y_r , Array Yield Y_A , Performance Ratio by monthly average value

A. Solar Energy Resource

Figure 6 shows the monthly average values of horizontal global irradiation with comparison of normal year (1961-1990, 30-year statistic values of Sainshand Weather Station by the WMO). Solar irradiations of 2003, 2007, and 2008 were similar to those in a normal year. The mean of horizontal irradiation was $4.77 \text{ kWh/m}^2/\text{day}$, which was 1.5-fold greater than that in Sapporo, Japan. The annual average of in-plane irradiation was $5.95 \text{ kWh/m}^2/\text{day}$ (6 year average). The tilted irradiation data showed relatively small variation within a year, as precipitation is concentrated in the summer.

B. PV Module performance

Figure 8 shows the annual PV module yields. The mean of 6 year annual PV module yields were $Y_{A1}=1932$ and $Y_{A2}=1822 \text{ h/yr}$, indicating that each module worked for 1932 h and 1822 h by rated power, $P_{\max}$, in the year.

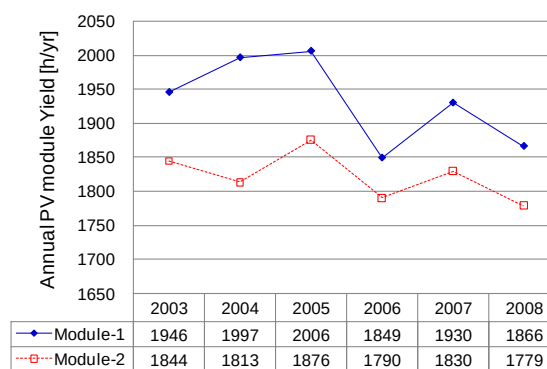


Figure 8 Annual PV module Yield [h/yr]

It has been observed that the high output gain (see Figure 7, 9) due to the operating condition in an extreme low ambient temperature. Strong seasonal variations were apparent in the performance of both modules. The PR of module 1 showed very high values of >1.0 in winter and around 0.85 in the warm season due to the effect of module temperature. The PV module degradation rate indicated over $-1.5\%/yr$ after 6 years exposure test.

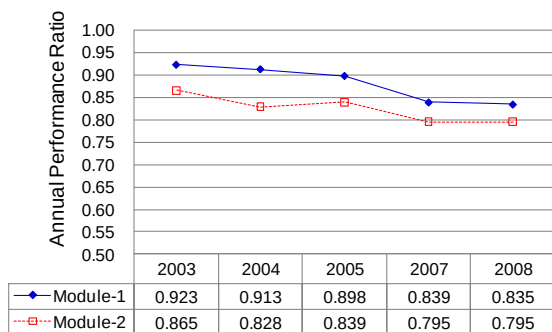


Figure 9 Annual Average Performance Ratio (NA 2006)

V.CONCLUSION

In this paper, outdoor performance tests of two types of PV module were conducted in Sainshand City, Mongolia. The results described here indicated high output gain due to the extremely low ambient temperature and the module performance ratio showed high values in winter. In summary, the results of the present study show that PV modules with high temperature coefficients, such as crystalline silicon, are advantageous for use in the Gobi Desert area.

REFERENCES

- [1] IEA, Photovoltaic Power Systems Program, Task 8: Very large scale photovoltaic power generation systems, <http://www.iea-pvps.org/tasks/task8.htm>
- [2] K. Kurokawa, editor: Energy from the Desert, Feasibility of Very Large Scale Photovoltaic Power Generation (VLS-PV) Systems, James & James Ltd: United Kingdom, May, 2003, 195 pages
- [3] Amarbayar Adiyabat, Kenji Otani, et al., Evaluation of Solar Energy Potential and PV module Performance in the Gobi Desert of Mongolia, Progress in Photovoltaics, May 2006, pp.553–566, DOI: 10.1002/pip.692

Гамма спектрометрийн аргаар байгалийн дээжид ^{238}U тодорхойлох

П.Зузаан*, Б.Отгоолой, Р.Маахүү

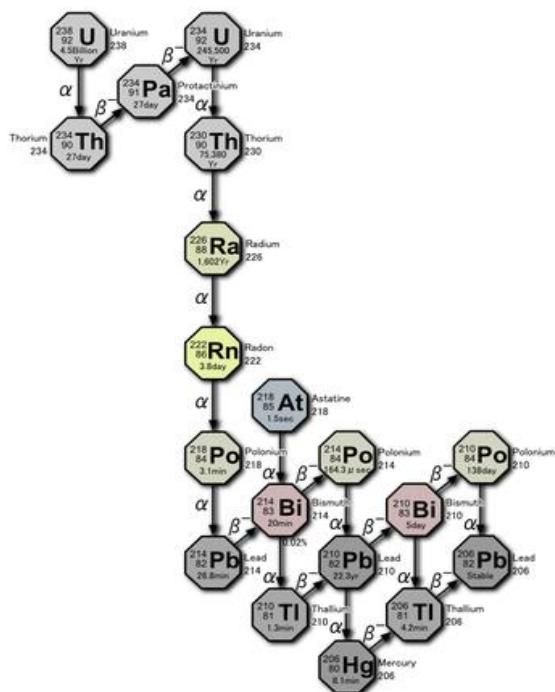
Монгол Улс, Улаанбаатар-210646, Монгол Улсын Их Сургууль, Цөмийн Судалгааны Төв

*Э- ууудан: pzuzaan@yahoo.com

Уран-радийн тэнцвэрээс үл хамааран аливаа дээж дэх уран-238-ын агуулгыг ^{238}U -ын шууд бүтээгдэхүүн болох ^{234}Th изотопоос үүсэх 92,4+92,8 кэВ шугамуудын нийлбэр импульсийн тоогоор тодорхойлох аргын давуу талыг харуулав. Гамма спектрометрийн аргын мэдрэх чадвар 1г/т.

1.ОРШИЛ

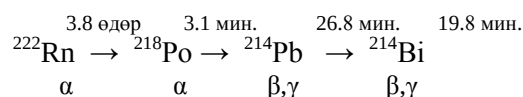
МУИС-ийн ЦСТ-д судалж байгаа дээжинд уран-радийн тэнцвэр хадгалагдаж байгаа тохиолдолд ураны хэмжээг түүний задралын (Зураг.1.) бүтээгдэхүүнүүд болох ^{214}Pb , ^{214}Bi –ээс гарах 351, 609 кэВ энергитэй квантуудыг бүртгэх замаар гамма спектрометрийн аргаар (ГСА) тодорхойлдог [1,2].



Зураг1. Уран-238 бүлийн задралын схем

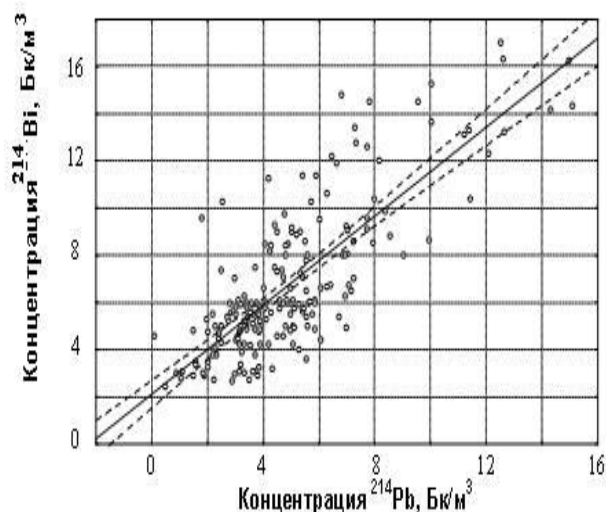
Дээрхи задралын хэлхээн дотроос радийн задралын бүтээгдэхүүн болох ^{222}Rn изотоп хийн төлөвт оршдог бөгөөд газрын хөрсөнд усаар дамжин нүүдэллэх, агаарт ихээхэн хуримтлагдах магадлал ихтэй.

Харин дээр дурьдагдсан хартугалга болон висмутын изотопууд задралын схем ёсоор дараах хэлхээгээр үүснэ:



Хамгийн гол нь ^{214}Pb (RaB), ^{214}Bi (RaC) изотопууд нь атмосферийн гамма цацрагийн орны үндсэн үүсгүүрүүд болдог бөгөөд агаарын температур, даралт, урсгалаас маш их хамаарсан гамма цацрагийн тогтворгүй фоныг үүсгэдэг [3].

Түүнээс гадна эдгээр изотопын агаар дахь идэвхийн хоорондын корреляци төдийлөн сайн бус байдгийг 2-р зургаас харж болно [4].



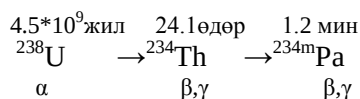
Зураг 2. ^{214}Bi ба ^{214}Pb -ийн идэвхийн харилцан хамаарал

Нөгөө талаас практик дээр уран-радийн абсолют тэнцвэр байдаггүй. Дээр тэмдэглэгдсэн бүх шалтгаанаас үүдэн ^{214}Pb , ^{214}Bi изотопуудын задралаас гарах 351, 609 кэВ энергитэй квантыг бүртгэх замаар ураны тоон хэмжээг тодорхойлох нь учир дутагдалтай.

Иймд дээр дурьдагдсан аргаас өөр найдвартай аргыг судалсан үр дүнг энэхүү ажлын хүрээнд авч үзэв.

II. ^{238}U -ЫГ ТОДОРХОЙЛОХ АРГА

Байгалийн ердийн орчинд байсан аливаа дээж дэх ^{238}U ба түүний задралын шууд бүтээгдэхүүн болох ^{234}Th изотопуудын хооронд үргэлж тэнцвэрийн нөхцөл оршиж байдгийг судлаачид аль дээр үед тогтоосон байдаг [5]. Ураны задралын эхний хоёр үеийг бичвэл:



Схемээс харахад ^{238}U ба $^{234\text{m}}\text{Pa}$ изотопуудын хооронд ч мөн тэнцвэр сайн тогтсон байдаг гэсэн үг юм. Өөрөөр хэлбэл энэ гурван изотопын хувьд идэвх нь тэнцүү байна:

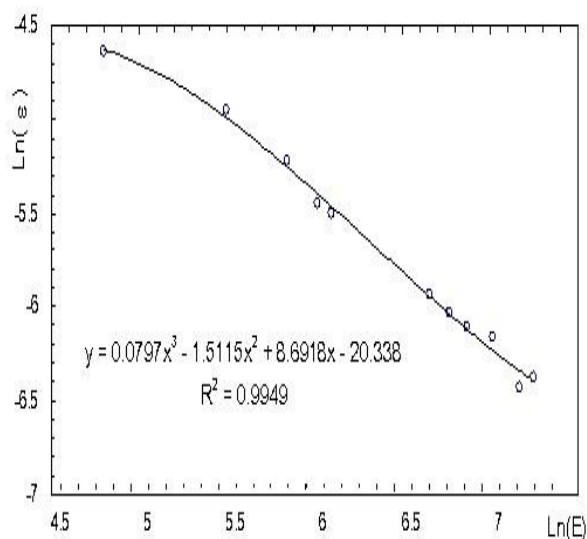
$$\lambda_U N_U = \lambda_{Th} N_{Th} = \lambda_{Pa} N_{Pa}$$

энд: λ , N – харгалзан тухайн изотопын хагас задралын тогтмол болон цөмийн тоо.

^{234}Th изотопоос үүсэх гамма цацрагаас $I(92.4)=0.0272$ харьцангуй гаралттай, 92.4 кэВ энергитэй, мөн $I(92.8)=0.0269$ харьцангуй гаралттай, 92.8 кэВ энергитэй гамма квантуудаас өөр бүртгэгдчихээр их энергитэй гамма цацраг байхгүй. Харин $^{234\text{m}}\text{Pa}$ изотопоос $I(1001)=0.0058$ харьцангуй гаралттай, 1001 кэВ энергитэй гамма квант үүсдэг.

Иймд ^{234}Th изотопын ≈ 0.05 нийлбэр гаралттай ойролцоогоор $(92.4+92.8)/2 \approx 92.6$ кэВ дундаж энергитэй шугамаар эсвэл $^{234\text{m}}\text{Pa}$ изотопын 1001 кэВ энергитэй гамма шугамаар ^{238}U -ыг тодорхойлж болно.

МУИС-ийн ЦСТ-ийн 52 см^3 ажлын багтаамжтай (HrGe) хагас дамжуулагч германи детекторын бүртгэх чадварыг 3-р зурагт үзүүлэв.



Зураг 3. HrGe) детекторын бүртгэх чадварын муруй.

Зурагт тэмдэглэгдсэнээр детекторын бүртгэх чадвар цэгэн үүсгүүрийн хувьд дараах томъёогоор тодорхойлно:

$$\text{Ln}(\varepsilon) = 0,08 \cdot [\text{Ln}(E)]^3 - 1,51 \cdot [\text{Ln}(E)]^2 + 8,69 \cdot \text{Ln}(E) - 20,34$$

Хэрэв детекторын бүртгэх чадварын муруйн хэлбэр үүсгүүрийн овроос бараг хамаардаггүйг тооцвол, авч үзэж буй энергиүдэд харгалзах бүртгэх чадвар, гаралтуудын үржвэрийн харьцангуй утгыг дээжний дурын геометрт дараах байдлаар үнэлж болно:

$$\frac{\varepsilon_{92.6 \text{ кэВ}} I(92.6)}{\varepsilon_{1001 \text{ кэВ}} I(1001)} = \frac{0.01085 \cdot 0.05}{0.00245 \cdot 0.006} = 38$$

Өөрөөр хэлбэл ^{234}Th ба $^{234\text{m}}\text{Pa}$ изотопуудаас үүсэх аналитик гамма шугамуудын үзүүлэлтүүдийн жишгээс үзэхэд байгалийн нөхцөлд байсан аливаа дээж дэх ^{238}U -г ^{234}Th – оос үүсэх 92.4+92.8 кэВ шугамуудын нийлбэрээр тодорхойлох нь статистикийн хувьд илүү тохиромжтой гэсэн дүгнэлт аяндаа гарч байна.

Харин $^{234\text{m}}\text{Pa}$ изотопын хувьд дор хаяж 2-4 цагийн хэмжилтийн дүнд 1001кэВ энергитэй гамма квантаас тоологдох эффект хүрэлцэхүйц хэмжээнд фоноос (ядаж гурав дахин) ялгаран гарна. Иймд энэхүү шугамаар дээжүүд дэх тэнцвэрийн нөхцлийг шалгах боломжтой.

III. ҮР ДҮН

A. Уран-радийн тэнцвэр

Онгилог нуурын фосфоритын ордын ОФ2 дугаартай дээжийн байгалийн гамма спектрийг 4-р зурагт үзүүлэв. Энэ спектр нь фонын спектр хасагдсан, тухайн дээжийн цэвэр спектр.

Энэхүү ажилд тухайн өдрийн фонын спектр хасагдсан цэвэр спектрүүдэд хийгдсэн боловсруулалтын үр дүнгүүдээр бүх тооцоо хийгдсэнийг онцлон тэмдэглэж байна.

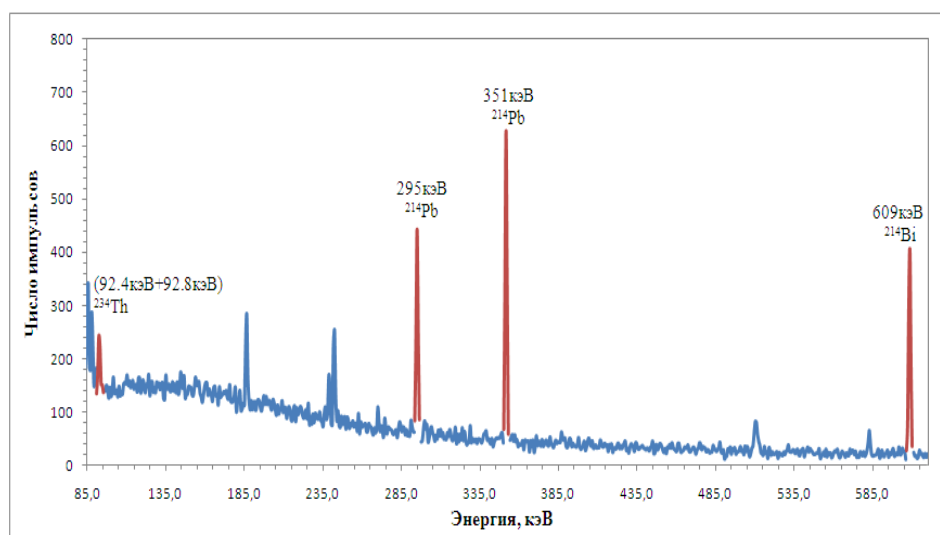
Энэхүү гамма спектрт заагдсан (92.4+92.8 кэВ), 351 кэВ болон 609 кэВ энергийн шугамуудаар харгалзан ^{238}U , ^{214}Pb ба ^{214}Bi изотопуудын хувийн идэвх (Бк/кг)- ийг Хөвсгөл аймгийн фосфоритын зарим орд газрын дээжинд тодорхойлсныг 1-р хүснэгтэнд нэгтгэн харуулав.

Хүснэгтээс харахад ^{214}Pb ба ^{214}Bi изотопуудын хувийн идэвх ^{238}U -ынхаас зөрж гарсан байна. Хэрэв тэнцвэрийн нөхцөл хадгалагдаж байсан бол эдгээр элементийн хувийн идэвх тэнцүү байх ёстой бөгөөд ураны агуулгыг шууд статистик сайтай (Зураг 4.-ийг

хар) 351 кэВ болон 609 кэВ энергийн шугамуудаар тодорхойлж болох байсан. Гэвч эдгээр шугамыг ашиглаж болох эсэхийг дараах шалгуураар тогтоож болно.

Уламжлал ёсоор хэрэв эдгээр элементийн хувийн идэвх зөвшөөрөгдсөн дундаж квадрат алдааны мужид багтаж байвал тухайн дээжүүдэд уран-радийн тэнцвэр ойролцоогоор хадгалагдаж байна гэж үзэж

болно. Энэхүү зөвшөөрөгдсөн алдааг 2-р хүснэгтэд үзүүлэв. Уран-238-ын хувийн идэвхтэй харьцангуйгаар ^{214}Pb ба ^{214}Bi изотопуудын хувийн идэвх (Бк/кг)-ийн гарсан зөрүүнүүдийг хувиар илэрхийлж зөвшөөрөгдсөн алдаатай харьцуулсан дүнг 3-р хүснэгтэд нэгтгэн үзүүлэв.



Зураг 4. Онгилог нуурын фосфоритын ОФ2 дээжний гамма спектр

Хүснэгт 1. Фосфоритын орд газруудын дээж дэх үндсэн цацраг идэвхт элементүүдийн хувийн идэвх

Дээж №	Орд	^{214}Pb , Бк/кг (351 кэВ)	^{214}Bi , Бк/кг (609 кэВ)	^{238}U , Бк/кг (92,4+92,8 кэВ)
Оф1	Онгилог	155	192	124
Оф2	Онгилог	262	328	215
Оф3	Онгилог	99	126	81,5
Оф4	Жанхай	77	105	68
Оф5	Жанхай	4,7	21	12,4
Оф6	Хэсэн	15	29	19,8
Оф7	Хэсэн	22	29	35,8

Хүснэгт 2. Янз бүрийн мужид зөвшөөрөгдсөн дундаж квадрат алдаа, (%)

Агуулгын муж, Бк/кг	Агуулгын муж, г/т	Зөвшөөрөгдсөн дундаж квадрат алдаа, %
5-24	0,5-1,9	25
25-60	2,0-4,9	20
61-125	5,0-9,9	18
126-235	10,0-19,0	6

Хүснэгт 3. ^{238}U –тай харьцангуй ^{214}Pb ба ^{214}Bi изотопуудын хувийн идэвхийн зөрүү, (%)

Дээж №	Орд	Хувийн идэвхийн зөрүү, %		Зөвшөөрөгдсөндундаж квадрат алдаа, %
		^{214}Pb	^{214}Bi	
Оф1	Онгилог	25	55	6
Оф2	Онгилог	22	53	6
Оф3	Онгилог	21	55	18
Оф4	Жанхай	13	54	18
Оф5	Жанхай	-62	69	25
Оф6	Хэсэн	-24	46	25
Оф7	Хэсэн	-38	-19	20

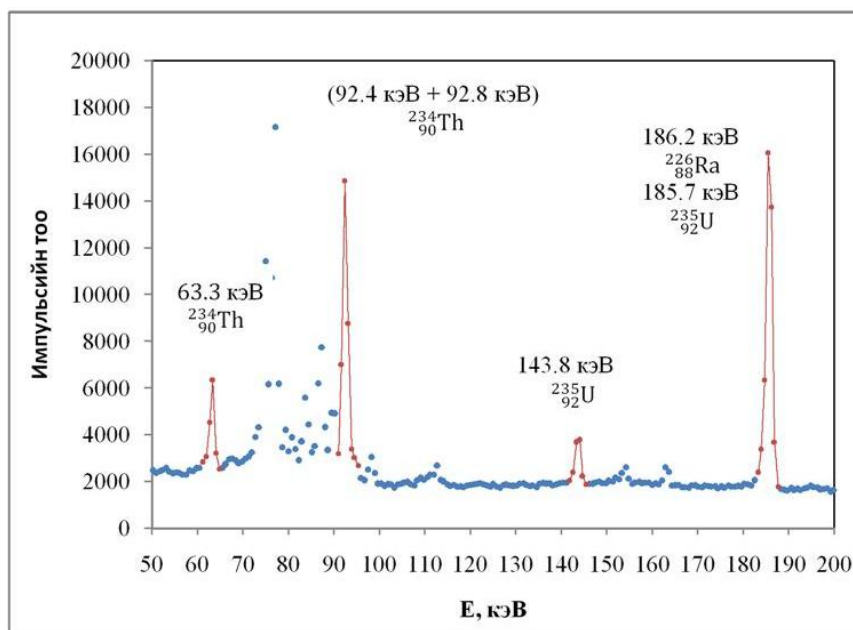
Хүснэгтээс харахад Оф4, Оф6 дээжүүдэд ^{214}Pb , харин Оф7 дээжинд ^{214}Bi зөвшөөрөгдсөн алдааны мужид ^{238}U –тай тэнцвэрийн байдалд байна гэж үзэж болохоор байна.

Хэмжилтийн дүнгээс үзэхэд Онгилог нуурын орд газрын дээжнүүдэд ^{214}Pb , ^{214}Bi элементүүдийн хуримтлал явагдсан нь харагдаж байгаа бөгөөд ялангуяа энэхүү хуримтлал ^{214}Bi –ийн хувьд илүү явагдаж байна гэж үзэж болно. Энэ нь ^{214}Pb , ^{214}Bi элементүүдийн аналитик шугамуудаар ^{238}U –ыг тодорхойлох боломжгүйг харуулж байна.

Б. 92,4+92,8 кэВ нийлбэр шугамаар ^{238}U -ыг тодорхойлсон дүн

Судалж буй аргын хувилбарыг ГСА-ын харьцангуй болон үнэмлэхүй хэмжилтийн аргууд дээр туршиж, тэдгээрийн үр дүнг нейтрон идэвхжилийн аргын (НИА) дүнтэй жишээнийг энэ хэсэгт авч үзэв.

Ураныг тодорхойлоход бидний сонгосон арга нь ^{238}U –ын задралын шууд бүтээгдэхүүн болох ^{234}Th изотопоос үүсэх 92.4+92.8 кэВ шугамуудын нийлбэр импульсийн тоогоор тодорхойлоход үндэслэгдсэн [6]. Энэ шугамууд нь хагас дамжуулагч детекторт давхцаж бүртгэгднэ. Бидний туршилтад хэрэглэгдэж байгаа гамма-спектрометрийн өрөөний фоныг хассан, ураны хүдрийн ердийн байгалийн гамма цацрагийн 50-200 кэВ энергийн мужид харгалзах цэвэр спектрийг 5-р зурагт үзүүлэв.



Зураг.5. Ураны хүдрийн гамма цацрагийн 50-200 кэВ энергийн мужид харгалзах спектр.

Зураг 5. нь HPGe хагас дамжуулагч детектор бүхий спектрометр дээр хэмжигдэн гардаг байгалийн гамма цацрагийн ердийн спектрийг харуулж байгаа билээ.

Дээр тэмдэглэснээр 92.4+92.8 кэВ нийлбэр шугамын импульсийн тоогоор ^{238}U -ыг тодорхойлох нь хамгийн тохиромжтой болохыг зургаас шууд харж болно.

Нөгөө талаас $^{238}\text{U}/^{235}\text{U}$ харьцаа, ^{226}Ra болон ^{235}U изотопуудаас үүсэх 186.2 + 185.7 кэВ шугамуудын нийлбэр импульсийн тоог ашиглан ^{226}Ra -г өндөр нарийвчлалтай тодорхойлох бүрэн боломжтой.

Хэмжилтэд хэрэглэгдсэн харьцангуй болон үнэмлэхүй аргуудын ялгааг тус бүрд нь тодруулж товчлон томъёолбол:

Харьцангуй арга [1]

Адилхан нөхцөлд хэмжсэн дээжийн болон стандартын идэвхжилийг харьцуулах замаар агууламжийг тодорхойлоход үндэслэнэ:

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

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

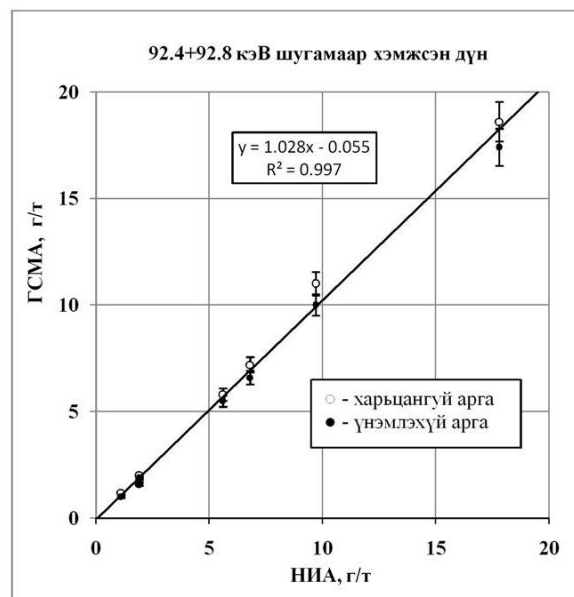
Үнэмлэхүй арга [2]

Энэхүү аргаар тухайн изотопын хувийн идэвхийг дараах томъёогоор тодорхойлно:

$$A = \frac{S E_i - S_{\text{фон}}(E_i)}{K_i * \varepsilon E_i * \omega E_i * t * m}$$

A -изотопын хувийн идэвх (Бк/кг); $S E_i$ – бүрэн шингээлтийн шугамын талбай; $S_{\text{фон}}(E_i)$ -тухайн нөхцөл дэхь гамма спектрометрийн фон; K_i -цацраг идэвхт изотопын тухайн гамма квантын гаралт; εE_i - детекторын үнэмлэхүй бүртгэх чадвар; ωE_i -дээжинд гамма квантын сулралыг тооцсон коэффициент; t -хэмжих хугацаа (сек); m -дээжний жин.

Хөвсгөлийн фосфоритын 1 ба 3-р хүснэгтүүдэд заагдсан дээжүүд дэх ^{238}U -ын орцыг ^{234}Th изотопоос үүсэх 92.4+92.8 кэВ нийлбэр шугамын импульсийн тоогоор тодорхойлсон дүнг НИА-ын дүнтэй харьцуулсныг 6-р зурагт үзүүлэв.



Зураг 6. ГСА-аар хэмжсэн дүнг НИА-тай харьцуулсан дүн.

Зургаас харахад бидний сонгосон хувилбараар үл хамаарах гурван өөр аргаар тодорхойлсон уран-238 –ын агуулгын үр дүнгүүд зөвшөөрөгдсөн алдааны мужид сайн тохирч байна.

Өөрөөр хэлбэл эдгээр хэмжилтийн үр дүнгүүд байгалийн дээжинд ^{234}Th изотопоос өгөгдөх 92.4+92.8 кэВ шугамуудын нийлбэр импульсийн тоогоор ^{238}U –ыг зөвшөөрөгдсөн алдааны мужид найдвартай тодорхойлж болохыг харуулж байна.

IV. ДҮГНЭЛТ

1. Уран-радийн тэнцвэрээс үл хамааран аливаа дээж дэх уран-238-ын агуулгыг ^{238}U –ын шууд бүтээгдэхүүн болох ^{234}Th изотопоос үүсэх 92.4+92.8 кэВ нийлбэр шугамын импульсийн тоогоор тодорхойлох нь өмнө ашиглагдаж ирсэн аргаас давуу талтайг туршлагын дүнгээр нотлон харуулав.
2. Дээрх аргыг ашиглан хэмжээ ихтэй (1кг) дээжинд үнэмлэхүй ГСА-аар уран-238-г тодорхойлох нь илүү тохиромжтой. Аргын мэдрэх чадвар 1г/т.
3. Энэхүү аргыг улсын стандарт болгон батлуулж, байгалийн дээж дэх уран тодорхойлох аргачлал болгон нэвтрүүлэх нь зүйтэй.

АШИГЛАСАН МАТЕРИАЛ

1. Б.Далхсүрэн, Ц.Намчинсүрэн, Р.Маахүү, Ц.Цэрэнгомбо. Радиоактивность почв Хубсугул и Баянхонгорского аймака. МУИС. ФЭС. ЭШБ. ФИЗИК №309(15) 2009. Хууд.69-71.
2. Ц.Эрхэмбаяр, Н.Норов, Г.Хүүхэнхүү, М.Алтангэрэл. Монгол орны төвийн бүсийн аймгуудын хөрсний цацраг идэвх. МУИС. ФЭС. ЭШБ. ФИЗИК №309(15) 2009. Хууд.104-115.
3. Кухтевич В.И., Машкович В.П. Распространение ионизирующих излучений в воздухе. М. Атомиздат. 1979. 214 с.
4. Г.Ф. Батраков, Т.В. Чудиновских и другие. Свинец-214 и висмут-214 в приземной атмосфере Севастопольского региона. Морской гидрофизический институт. НАН. Украины. Севастополь, ул. Капитанская, 2
5. П.С. Микляев и другие. Определение коэффициентов эманирования грунтов. Проблемы прикладной спектromетрии и радиометрии. ППСР-2003. Тезисы докладов. УИМеждународное совещание. Менделеево, Россия. 2003.
6. А.В. Пономаренко, В.Н. Даниленко, А.Е. Бахур. Инновационные гамма-спектрометрические методы определения содержания урана в рудах. Россия. 2011.

Атомын цацаргалтын спектрийн шинжилгээнд шилждэг электрод ашигласан нь

Т.Батбаяр¹, П.Зузаан², Д.Нямаа³

¹ Монгол Улс, Улаанбаатар, Стандарт хэмжилзүйн газар

² Монгол Улс, Улаанбаатар-210646, Их сургуулийн гудамж-1, Монгол Улсын Их Сургууль, Цөмийн судалгааны төв,

³ Монгол Улс, Улаанбаатар, Шинжлэх Ухааны Академи, Физик технологийн хүрээлэн

1.ОРШИЛ

Орчин үед бодисын бүтэц судлах физик аргууд ихээхэн хөгжин, тэдгээрийн нарийвчлал, мэдрэх чадвар улам сайжирч, багаж төхөөрөмжүүд нь орчин үеийн электроникийн түвшинд автоматчлагдаж шинжлэх ухаан, үйлдвэрийн янз бүрийн салбарт хэрэглэгдэх хүрээ өргөссөөр байна. Бодисын бүтэц судлах физик аргуудын дотроос хамгийн дэлгэрсэн аргын нэг нь оптик спектроскопийн арга бөгөөд энэ нь цацаргалт ба шингээлтийн спектроскопийн гэж үндсэндээ хоёр хэсгээс тогтдог.

Гадаад орнуудад эрдэс, хүдэр, уулын чулуулаг зэрэг объектуудын элементийн хольц тодорхойлох спектроскопийн болон бусад физик аргуудыг боловсруулах, боловсронгуй болгоход холбогдсон судалгаанууд өргөн явуулж ирсэн ба явуулж байгаа боловч төгс боловсорсон иж бүрэн аргууд одоохондоо тэр бүр алга байна. Бодисын элементийн бүтцийг спектроскопийн аргаар тодорхойлоход уул бодисын өвөрмөц шинж чанар, бүтцээс эцсийн дүн их хамаарах учраас судлагдах бодисын өвөрмөц шинж чанарт тохирсон арга зүй боловсруулах шаардлагатай байхаас гадна шинэ арга зүй боловсруулахын тулд түүнтэй холбоо бүхий физик, химийн судалгаа явуулах шаардлага гарч байна.

Цацаргалтын спектрийн задлан шинжилгээ бол бодисын химийн найрлагыг тодорхойлоход өргөн хэрэглэгддэг аргын нэг бөгөөд олон тооны дээжинд спектрийн задлан шинжилгээ хийхэд тохиромжтой, харьцангуйгаар өртөг багатай, хурдац, мэдрэх чадвар сайтай, ялангуяа дээжийн бүтцийн талаар өргөн хүрээтэй мэдээлэл өгөх талаар сайн зэрэг дэвшилттэй талтай. Ийм ч учраас Монгол орны геологи, геохимийн болон томоохон орд газруудын судалгааны ажлууд эрчимтэй явагдаж байгаа одоогийн нөхцөлд спектрийн задлан шинжилгээний үүрэг хэрэгцээ, онол практикийн гүнзгий ач холбогдолтой болж байна. Үүнтэй уялдаж янз бүрийн төрлийн эрдэс чулуулаг дахь хольц элементийн агууламжийг

тодорхойлох аргыг боловсронгуй болгох, өөрөөр хэлбэл мэдрэх чадвар, давталт, нарийвчлал, хурдацыг улам дээшлүүлэх шаардлага байнга тавигдаж байна.

Бид цацаргалтын спектрийн шинжилгээнд маш өргөн хэрэглэгддэг цахилгаан нумын ниргэлтийг оновчтой ашиглахад чиглэсэн хэд хэдэн хувилбараар туршилт тавьсан бөгөөд энд шилждэг электрод ашиглан явуулсан судалгааг авч үзэв.

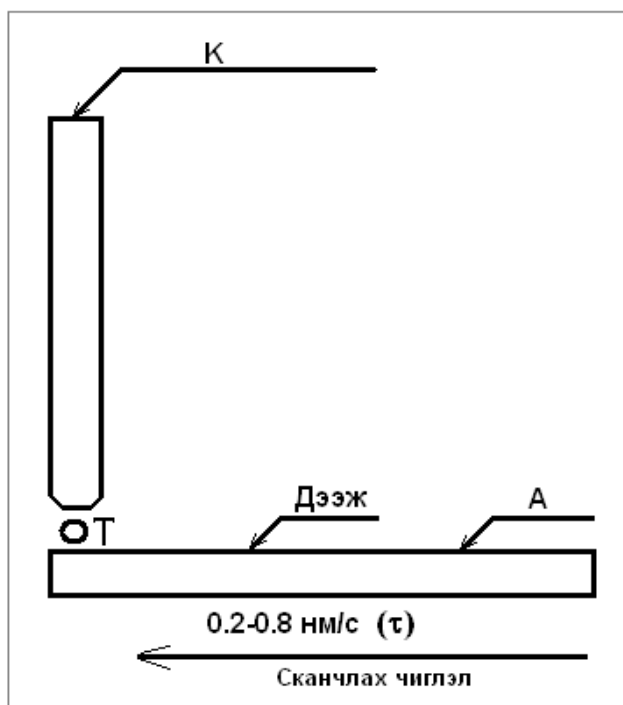
II.ТУРШИЛТЫН ХЭСЭГ

Байгалийн боржин дахь хольц элементийг тодорхойлдог аргад шилждэг электрод ашиглах туршилт явуулав.

А.Шилждэг электрод

Шилждэг электрод ашиглан цацаргалтын спектрийн шинжилгээний мэдрэх чадварыг дээшлүүлэх талаар судалгааны ажлууд [1, 2, 3] нилээд хийгдсэн байдаг. Эдгээр ажлууд нь голдуу цэвэр эсвэл урвалж мэтийн макробүтцийн хувьд харьцангуй хялбар нэг төрөл сорьц дээжүүд дэх хольц элементийг тодорхойлоход зориулагдсан байна.

Туршилтанд ашигласан шилждэг электродын бүдүүвчийг зураг 1-д үзүүлэв. Туршилтын бүдүүвч дээр хөндлөн байрласан шилждэг электрод (анод), босоо электродтой харьцангуйгаар шилжилт хийнэ. Шилжилтийн хурдыг хөдөлгүүрийн тусламжаар 0,2-1 мм/секунд хэмжээнд өөрчилж болно. Дээжийг шилждэг электрод дахь сувагт (урт 30 мм, өргөн 4мм, гүн 3мм) хийгээд тогтмол гүйдлийн (10-18а) нумаар ууршуулан спектрийг СТЭ-1 төрлийн спектрографийн тусламжаар фотохальс дээр бүртгэв. Өдөөлтийн зохимжтой нөхцлийг сонгож авахын тулд электродын шилжилтийн хурд ба нумын гүйдлээс өдөөлтийн процесс хир зэрэг хамаарахыг авч үзэв.

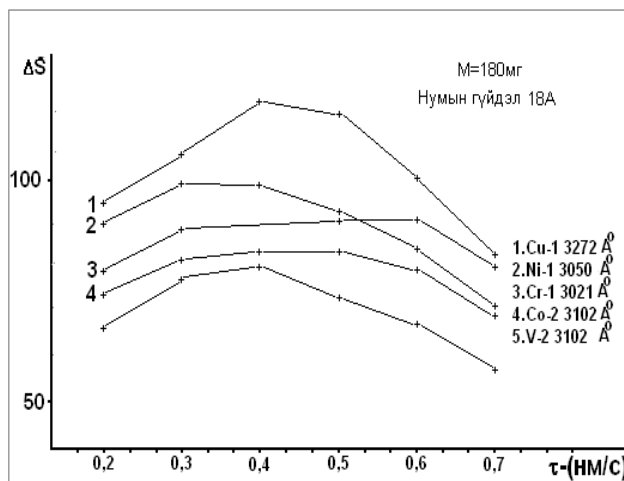


Зураг 1. Цацаргалтын спектрийн шинжилгээнд шилждэг электрод ашиглах бүдүүвч
K - дээд электрод /анод/, *A* – шилждэг электрод, *OT* – спектрографийн оптик тэнхлэгч бөгөөд зургийн хавтгайн нормалийн дагуу байна.

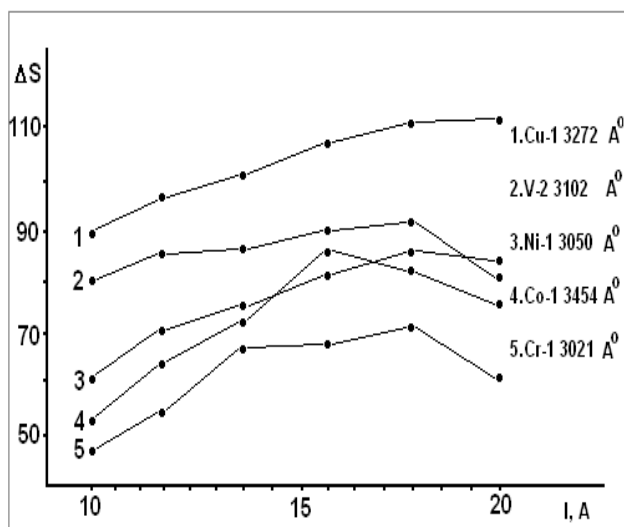
Шилждэг электрод ашигласанаар аналитик сигнал бүрдүүлэхэд оролцож буй дээжийн тоо хэмжээ нэмэгдэхийн зэрэгцээ электродын шилжилтийн хурд ихсэх тутам электродын сувгаас дээж уурших процесс саарах, мөн ниргэлэгийн мужид оролгүй хаягдаж буй уурын хэмжээ нэмэгдэх учраас эцэстээ аналитик сигналын хэмжээ тодорхой максимумд хүрээд буурах (зураг 2) хандлага гарав. Энэ нь задлан шинжилгээний үр дүнд муугаар нөлөөлөх сөрөг хандлага юм.

Харин энэ үед гүйдлийн хүчийг нэмэгдүүлэх замаар ууршилтийг идэвхжүүлэх боломжтой боловч энэ нь бас хязгаартай юм. Тухайлбал гүйдлийн хүч 20 ампераас дээш ихсэхэд нумын ниргэлтийн муж өргөсөж гүйдлийн нягтын өсөлт ханаж байв. Өөрөөр хэлбэл плазмын температурын цаашдын өсөлтийн хурд багасна. Иймд аналитик сигнал ч цааш ихсэхгүй (зураг 3) буурах юм.

Энэ туршилтын явцад электродын шилжилтийн хурдыг 0,4 мм/с, гүйдлийн хүчийг 18 ампераар сонгож аваад боржин дээжинд хольц элементийн агууламжийг тодорхойлох аргын мэдрэх чадвар буюу харьцангуй илрүүлэлтийн хязгаарт үнэлэлт хийв.



Зураг 2. Аналитик сигнал ба электродын шилжилтийн хурдны хамаарал
 ΔS - аналитик сигнал буюу спектр шугам, фонын харлалтын ялгавар,
 τ - электродын шилжилтийн хурд (мм/сек)
M – шинжилгээнд орж байгаа дээжийн масс



Зураг 3. Аналитик сигнал ба цахилгаан нумын гүйдлийн хамаарал
 ΔS - аналитик сигнал буюу спектр шугам, фонын харлалтын ялгавар
I – нумын гүйдэл

Цацаргалтын спектрийн шинжилгээнд илрүүлэлтийн харьцангуй хязгаар (*C*)- ыг дараах томъёогоор илэрхийлдэг

$$C = 100 \cdot \frac{\sigma}{M}$$

Энд: σ -абсолют мэдрэх чадвар буюу уг аргаар илрүүлэн тодорхойлж чадах тухайн элементийн хамгийн бага тоо хэмжээ, *M*-шинжилгээнд орж буй дээжийн масс.

Эндээс үзвэл тухайн шинжилгээний аргын илрүүлэлтийн хязгаарыг багасгах буюу мэдрэх чадварыг дээшлүүлэхийн тулд шинжилгээнд орж байгаа дээжийн тоо хэмжээг нэмэгдүүлэх хэрэгтэй болж байна.

Тэгэхлээр байгалийн боржин дахь хольц элементийг ердийн хундган электрод ашиглан тодорхойлоход шинжилгээнд орж буй дээжийн хэмжээ нь 30 мг байдаг бол шилждэг электрод ашигласнаар үүнээс 6 дахин их 180 мг дээжийг шинжилгээнд оруулах боломж гарч байгаа юм.

Тэгэхдээ бид “сул туршилтын” арга [4] хэрэглэн аналитик сигналыг бүрхэгдүүлж байгаа нөлөөллийн нормал түгэлтийн эхний хоёр моментийг бодож гаргасны дараа тодорхой магадлалтай үед бүртгэгдэж чадаж байгаа аналитик сигналын хамгийн бага дундаж хэмжээ Х-г дараах илэрхийллээр тооцсон.

$$X_{\text{пред}} = X_{\text{хол}} + kS_{\text{хол}}$$

Хүснэгт 1- Илрүүлэлтийн хязгаарын харьцуулалт

№	Тодорхойлох элемент	Аналитик шугамууд, нм	Өдөөлтийн энерги, эВ	Илрүүлэлтийн харьцангуй хязгаар, %		C ₁ /C ₂
				Ердийн электрод, С	Шилжигч электрод, С	
1	V	310.2	4.36	$1.5 \cdot 10^{-4}$	$7 \cdot 10^{-5}$	2.1
2	Cr	302.4	5.08	$8.0 \cdot 10^{-4}$	$3.5 \cdot 10^{-4}$	2.3
3	Ni	305.0	4.09	$1.0 \cdot 10^{-4}$	$4.0 \cdot 10^{-5}$	2.2
4	Co	304.4	4.02	$4.7 \cdot 10^{-3}$	$1.0 \cdot 10^{-4}$	4.7
5	Cu	327.4	3.78	$3.0 \cdot 10^{-5}$	$1.5 \cdot 10^{-5}$	2.0

Мөн давталтыг үнэлэхэд вариацийн коэффициент 13-20% байгаа нь цаашдаа олон тооны дээжинд задлан шинжилгээ явуулахад бүрэн бололцоотой юм.

III. ДҮГНЭЛТ

Атомын цацаргалтын спектроскопийн шинжилгээнд хэрэглэгддэг цахилгаан нумын ниргэлэгт шилждэг электродыг ашигласнаар аналитик сигналыг ихэсгэх замаар элементийн илрүүлэх хязгаарыг сайжруулж болохыг боржингийн төрлийн чулуулагийн хольц элементийг тодорхойлох жишээн дээр харуулав.

Энд: k - коэффициент бөгөөд тухайн шинжилгээний шаардлагаас хамааран 3-4 хооронд бүхэл тоон утга авна. Тухайлбал илрүүлэлтийн магадлал 0,5 үед $k=3$ гэж авна.

$X_{\text{пред}}$ -ийг тодорхойлсны дүнд дараах илэрхийллээр C -илрүүлэлтийн харьцангуй хязгаарыг олно.

$$lgC = X_{\text{хол}} + kS_{\text{хол}} - lga / b$$

lga ба b параметруудийг ажлын графикаас тодорхойлно.

Энэ тодорхойлсон дүнгүүдээ хундган электрод ашиглаж боржин дахь хольц элементэд тоон шинжилгээ хийдэг аргатай харьцуулан үзэхэд харьцангуй илрүүлэлтийн хязгаар нь шилждэг электрод ашигласнаар 2-3 дахин нэмэгдэх дэвшилттэй сайн тал гарч байна (хүснэгт 1).

АШИГЛАСАН НОМ ЗҮЙ

1. З.В. Красильников, Снижение относительных пределов обнаружения при эмиссионном спектральном анализе с использованием угольной дуги для возбуждения спектра. Журнал Аналит.Химии (ЖАХ), 1977, вып 10, с.1891
2. З.Г.Воронков, Спектральный анализ диоксида теллура с использованием методов движущегося камерного электрода. ЖАХ., 1977, вып.33, № 6, с.1149
3. В.В.Красальших, Спектральный анализ с использованием метода сканирующего электрода. “Заводская лаборатория”, 1980, с.320
4. А.В.Ильин, “Хубсугульский фосфоритносный бассейн” М.Наук., 1973,

Нейтрон идэвхжилийн аргаар уран тодорхойлох

Б.Отгоолой, П.Зузаан*, Ж.Амгалан, Г.Дамдинсүрэн, Д.Баатархүү

Монгол Улс, Улаанбаатар-210646, Монгол Улсын Их Сургууль, Цөмийн Судалгааны Төв

*Э- шуудан: pzuzaan@yahoo.com

Микротрон МТ-22 дээр цөмийн $^{238}\text{U}(n,\gamma)^{239}\text{U}^{\beta^-}$, 0.392цаг , $^{239}\text{Np}^{\beta^-}$, 2.36 хоног. урвалыг ашиглан уран-238-ыг ^{239}Np изотопын 228 кэВ энергийн гамма шугамаар тодорхойлох нейтрон идэвхжилийн арга боловсруулсан. Энэ аргаар уран-238-ыг тодорхойлох мэдрэх чадвар 0.1г/т . Дээжүүдийг шарах болон хүлээх зохистой хугацаа тус бүр 2 цаг болохыг тогтоосон. Энэ ажлыг "Цөмийн физикийн аналитик арга" сэдэвт ажлын хүрээнд гүйцэтгэв.

I.ОРШИЛ

Монгол Улсын Засгийн газрын 2008-2012 оны үйл ажиллагааны мөрийн хөтөлбөрт цацраг идэвхт ашигт малтмалыг эдийн засгийн эргэлтэнд оруулах, цөмийн эрчим хүч, цөмийн технологийг ашиглаж эхлэх асуудлууд тусгагдсанаар Монгол Улсын төрөөс холбогдох хууль тогтоомжуудыг баталж, баримтлах бодлого, хөтөлбөр, төлөвлөгөөг хэрэгжүүлэхэд онцгой анхаарах болсон [1].

Монгол орны хувьд геологийн эрэл хайгуулын ажлыг үр дүнтэй болгож, ордыг илрүүлж нөөцийг тогтооход тухайн ордын хүдэрт агуулагдах уран гэдэг элементийн орцын хэмжээг тодорхойлох нь чухал асуудлын нэг юм. Түүнчлэн нөгөө талаас нүүрс, фосфорит, цахилгаан станцын хаягдал үнснээс уран ялгах технологи боловсруулахтай холбоотойгоор ураны хэмжээг нарийн тодорхойлох шаардлага тавигдаж байна.

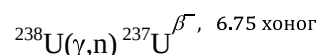
Үүнтэй уялдан МУИС-ийн Цөмийн судалгааны төв атом, цөмийн физикийн аргаар төрөл бүрийн дээжинд уран тодорхойлох арга зүйн судалгаа явуулж байна.

Энэ ажилд ураны хүдэр, фосфорит болон нүүрс, тэдгээрээс уран ялгах технологийн дээжинд ураны агууламжийг тодорхойлох нейтрон идэвхжилийн аргыг боловсруулах асуудлыг авч үзлээ.

Дээжинд аливаа боловсруулалт хийсний дараа ^{238}U -ын задралын шууд болон бусад бүтээгдэхүүнүүд нь баяжих юмуу эсвэл хорогдсон байдаг. Өөрөөр хэлбэл цацраг идэвхт тэнцвэрийн тухай ямар ч ойлголт байхгүй болно. Иймээс ^{238}U -г шууд тодорхойлох арга зайлшгүй шаардагдаж байгаа юм. Цаашид боловсруулагдсан дээж дэх ^{238}U -г техногенийн гэв.

Энэ асуудлыг шийдэх нэг зам бол цөмийн урвалыг ашиглах явдал юм. МУИС-ийн ЦСТ-ийн хурдасгагч МТ-22 дээр гамма болон нейтрон идэвхжилийн гэсэн хоёр суваг байдаг [2].

Эхлээд гамма идэвхжилийн суваг ашиглах асуудлыг авч үзье. Энэхүү суваг дээр дараах цөмийн фотоурвалыг явуулж болно:

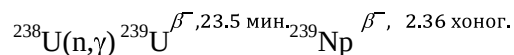


^{237}U - изотопоос үүсэх 59.54 кэВ болон 208 кэВ энергитэй харгалзан 34.5% ба 21.2 % гаралттай шугамуудаар шинжилгээ хийх боломжтой. Гэвч энэ сувгийн дутагдалтай тал нь нэг удаагийн шаралтанд 5 – аас дээш дээж тавихад систематик алдаа ихэсдэг талтай. Иймд зөвхөн цөөн тооны дээжинд тохиромжтой арга.

Иймээс олон дээжинд шинжилгээ хийхэд зориулсан графитан удаашруулагч бүхий суваг дээр удаан нейтроноор явагдах цөмийн урвалыг ашиглах хувилбарыг сонгосон болно.

II.УРАНЫГ ТОДОРХОЙЛОХ НЕЙТРОН ИДЭВХЖИЛИЙН АРГА (НИА)

Уран агуулсан аливаа дээжинд нейтрон идэвхжилийн аргаар ^{238}U изотопыг шууд тодорхойлох арга нь удаан нейтроноор явагдах



урвал дээр үндэслэгдсэн.

Дулааны болон резонансын нейтроноор явагдах дээрх урвалын харгалзах σ_t , σ_p огтлолууд ба бусад шаардлагатай физик хэмжигдэхүүнийг 1-р хүснэгтэд нэгтгэв.

Хүснэгт.1. $^{238}\text{U}(\text{n},\gamma)^{239}\text{U}^{\beta^-}$, 23.5 мин- $^{239}\text{Np}^{\beta^-}$, 2.36 хоног. урвалын зарим өгөгдөл [3]

Урвал	Хагас задралын үе	Урвалын огтлол барн	Гамма квантын энерги Е,кэВ	Гамма квантын гаралт %
$^{238}\text{U}(\text{n},\gamma)^{239}\text{U}$	23.5 мин.	$\sigma_t = 2.70 \pm 0.02$ $\sigma_p = 276.3 \pm 2.7$	44 75	4 50
$^{239}\text{U}^{\beta^-} ^{239}\text{Np}$	2.35 өдөр		106 210 228 278	23 3 11 14

Хүснэгт.2. Саад болох урвалууд [3]

Урвал	Хагас задралын үе	Урвалын огтлол, барн	Гамма квантын энерги Е,кэВ	Гамма квантын гаралт %
$^{130}\text{Te}(\text{n},\gamma)^{131\text{m}}\text{Te}$	30 цаг	$\sigma_t = 0.02$ $\sigma_p = 0.05$		34.5
$^{131\text{m}}\text{Te}(\text{n},\gamma)^{132}\text{Te}$	78 цаг	$\sigma_t = 0.11$ $\sigma_p = 0.16$	228	88
$^{198}\text{Pt}(\text{n},\gamma)^{199}\text{Pt}$	31мин	3.7		7
$^{199}\text{Pt}(\text{n},\gamma)^{200}\text{Pt}$	11.5 цаг	1.5	227	2
$^{236}\text{Pu}(\text{n},\gamma)^{237}\text{Pu}$	45.6 өдөр	197	229	8
$^{176}\text{Lu}(\text{n},\gamma)^{177}\text{Lu}$	155 өдөр	2.1 3.8	208 228	79 48
$^{242}\text{Cm}(\text{n},\gamma)^{243}\text{Cm}$	28 жил	5 33	228	11

Нейтронноор явагдах (n,γ) урвалаар үүсэх ^{239}U изотопын хагас задралын үе нь 23.5 минут учраас шаралтын хугацаа 2 цаг байхад тухайн элементийн идэвхи үндсэндээ ханасан хэмжээндээ хүрнэ. Өөрөөр хэлбэл ^{238}U -ыг удаан нейтронноор 2 цагаас илүү шарахад ^{239}U изотопын идэвх 3%-иас илүү нэмэгдэхгүй.

Хүснэгтээс харахад ^{239}U изотопоос үүсэх 50%-ийн гаралттай 75 кэВ энергитэй шугамаар ураны шуурхай шинжилгээ хийх бүрэн боломжтой. Гэвч энэхүү изотопын идэвх нь 47 минутын дараа 75% буурах учраас шинжилгээнд хамрагдах дээжний тоо хязгаарлагдмал.

Нөгөө талаас ураны рентген цацрагийн K_{α} , K_{β} шугамууд харгалзан 97,13, 111,28 кэВ

энергитэй тул бага энергийн фоныг ихэсгэх учраас аливаа идэвхжилийн шинжилгээнд энэхүү энергиэс бага энергитэй гамма квантыг ашиглахаас зайлсхийх нь илүү оновчтой байдаг. Иймд рентген цацрагаас их энергитэй гамма квантыг сонгон авах нь шинжилгээний систематик алдааг багасгах нэг арга билээ.

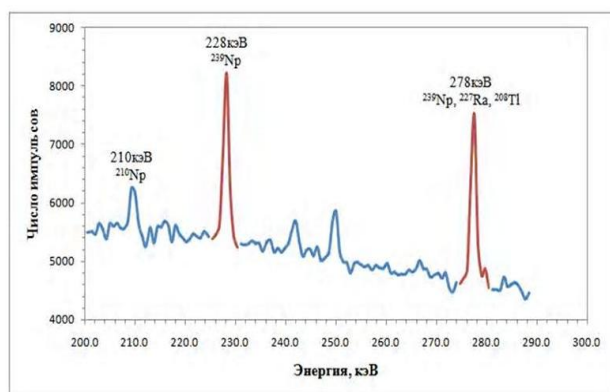
Харин шаралтын дараа 2 цаг хүлээхэд ^{239}U изотопын 97% нь задарч дараагийн 2,36 өдрийн хагас задралын үетэй ^{239}Np изотопод үндсэндээ бүрэн шилжинэ. Ийнхүү богино настай изотоп удаан настай изотоп руу шилжиж байгаа нь урт хугацаанд олон тооны дээжинд шинжилгээ хийх таатай нөхцлийг бүрдүүлж байгаа билээ.

Иймд олон дээжийг зэрэг 2 цаг шараад 2 цаг хүлээсний дараа хэмжилтийг 2 өдөр үргэлжлүүлэн хийхэд сүүлийн дээж дэх ^{239}Np изотопын идэвх анхны хэмжилт эхэлсэн үеийнхээс ~ 2 дахин буурсан байх болно.

Шаралтаас хойш 2 цагийн дараа анхны хэмжилт хийх шаардлага нь дараах хоёр хүчин зүйлтэй холбоотой: нэгдүгээрт ^{239}U изотопын идэвхид ^{239}U изотопоос үзүүлэх нөлөө бараг байхгүй болсон байх тул хэмжилтийн дүнд боловсруулалт хийхэд шаардагдах хугацааны ярвигтай засвар хийх шаардлагагүй болно, хоёрдугаарт ^{239}Np изотопоос үүсэх аналитик гамма квантын энерги богино настай бета задралаас үүсэх аннигиляцийн 511 кэВ энергис бага учир түүний комптоны сарнилын өндөр фононд дарагдах магадлал өндөр тул хэдэн минутын настай изотопуудын нөлөөг багасгах шаардлагатай.

Микротроны электроны гүйдэл 10 мкА үед (дулааны нейтроны урсгалын нягт $\sim 10^8$ нейтрон/см²сек) 2 цаг шарж, 2 цаг хүлээсний дараа хэмжсэн дээж №ОФ2 –ын β^- , 2,36 хоног хувьд ^{239}Np задралын гамма спектрийг 1-р зурагт үзүүлэв.

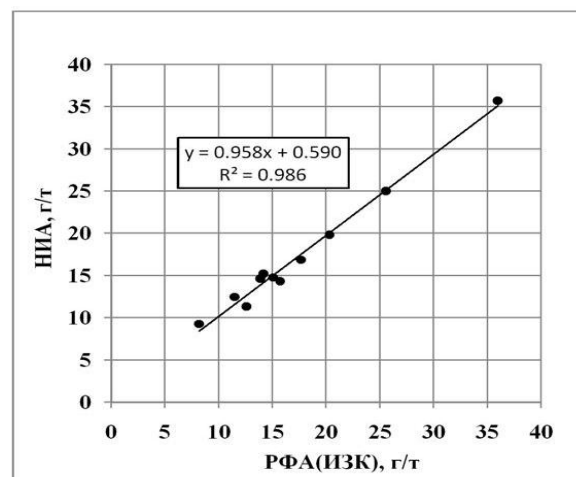
Энэ спектр нь хэмжилт хийсэн өдрийн фонын спектрийг хассан цэвэр спектр бөгөөд бусад бүх боловсруулалт зөвхөн цэвэр спектрт хийгдсэн. Зургаас харахад 278 кэВ энергийн шугамтай ^{227}Ra , ^{208}Tl изотопуудын шугам давхцаж байна. Харин 210 ба 228 кэВ энергитэй шугамууд ялгарсан байна. Иймд гаралт ихтэй 228 кэВ шугамыг ^{238}U -ыг тодорхойлоход сонгон авах нь илүү тохиромжтой.



Зураг.1. №ОФ2 дээж дэх ^{239}Np изотопын гамма спектр. Хэмжсэн хугацаа 2 цаг.

Фосфоритын ордын хүдэр, зарим нүүрсний ордын дээж болон тэдгээрт химийн боловсруулалт хийсэн дээжинд энэхүү НИА-аар ^{238}U -ыг тодорхойлох шинжилгээ хийж

рентгенфлуоресценцийн аргын (РФА) дүнтэй харьцуулсныг 2-р зурагт үзүүлэв.



Зураг.2. ^{238}U -ыг НИА болон РФА-аар тодорхойлсон дүнгийн харьцуулалт. ИЗК-Эрхүүгийн дэлхийн царцдас судлалын хүрээлэн

Зургаас харахад хоёр өөр аргаар зэрэгцээ тодорхойлсон үр дүнгүүд зөвшөөрөгдсөн алдааны мужид сайн тохирч байгаа нь аливаа дээжин дэх төдийгүй техногенийн ураныг

НИА-аар $^{238}\text{U}(n,\gamma) \rightarrow ^{239}\text{U} \xrightarrow{\beta^-, 23.5 \text{ мин.}} ^{239}\text{Np} \xrightarrow{\beta^-, 2.36 \text{ хоног.}}$

урвалыг ашиглан тодорхойлж болохыг бүрэн баталж байна. Онцлон тэмдэглэхэд энэхүү аргыг шалгах гадны лабораториор олон улсад хүлээн зөвшөөрөгдсөн Эрхүүгийн дэлхийн царцдас судлалын хүрээлэнг сонгон авч хамтран ажилласан нь бидний боловсруулсан аргын үнэмшлийг бататгах чухал хөшүүрэг болсон билээ.

Стандарт дээжний тусламжтайгаар i – дугаар дээж дэх ураны C_i агуулгыг дараах харьцаагаар тодорхойлсон:

$$C_i = \frac{S_i P_c \Phi_c}{S_c P_i \Phi_i}$$

энд: S_c и S_i – стандарт болон судалж буй i – дээжийн хувьд шарах, хүлээх, хэмжих ижил хугацаануудад харгалзах импульсийн тоо; P_c ба P_i – стандарт болон дээжийн жин; S_c – стандарт дээж дэх ураны (^{238}U) агуулга; Φ_i – нейтроны урсгалын засвар. Нейтроны урсгалыг зэсэн дээр явагдах (n,γ) урвалын тусламжтайгаар хянасан.

Энэхүү аргаар 30 дээжийг нэгэн зэрэг 2 цаг шараад хэмжилтийг 2 цагийн дараа эхэлж дээж болгоныг 2 цагаар хэмжихэд шаардагдах хугацаа 64 цаг. Энэ тохиолдолд мэдрэх чадвар 0.1г/т байна. Аргын нэг давуу тал нь шинжилгээнд шаардагдах дээжийн хамгийн бага жин 5гр байхад хангалттай.

Ш.ДҮГНЭЛТ

Микротрон МТ-22 дээр цөмийн $^{238}\text{U}(\text{n},\gamma)$ ^{239}U β^- , 0.392цаг ^{239}Np β^- , 2.36 хоног. урвалыг ашиглан уран-238-г ^{239}Np изотопын 228 кэВ энергийн гамма шугамаар тодорхойлох НИА-ыг боловсруулав. Энэ аргаар уран-238-г тодорхойлох мэдрэх чадвар 0.1г/т. Дээжүүдийг шарах болон хүлээх зохистой хугацаа тогтмол, тус бүр 2 цаг болохыг тогтоов. 3.

АШИГЛАСАН МАТЕРИАЛ

1. Монгол Улсын Ерөнхий сайд С.Батболдын цөмийн энергийн салбарын төлөөлөлтэй хийсэн “Цөмийн технологи-Монгол Улсын хөгжил” зөвлөлдөх уулзалтанд хэлсэн үгээс, 2009.
2. Д.Баатархүү бусад. Электроны цикл хурдасгуур МУИС,ЭШБ,№4(137) хууд.109-119 Улаанбаатар, 1998 он.
3. Handbook on Nuclear Activation Data, Technical reports series No.273,International Atomic Energy Agency, Vienna, 1987.

“Гамма-Нейтрон” төхөөрөмж дээрх гамма цацрагийн болон дулааны нейтроны урсгалын харьцаа

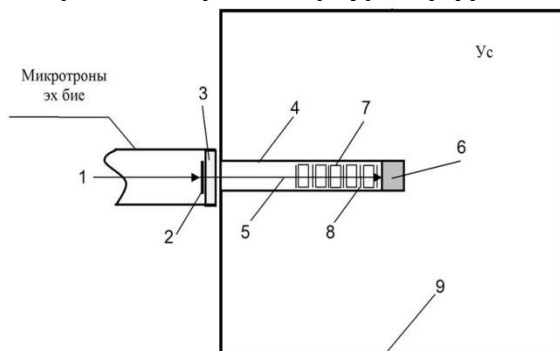
Б.Отгоолой, П.Зузаан, Г.Дамдинсүрэн, Д.Баатархүү

Монгол Улс, Улаанбаатар-210646, Монгол Улсын Их Сургууль, Цөмийн Судалгааны Төв
*Э- шуудан: pzuzaan@yahoo.com

Энэ ажлаар “Гамма-Нейтрон” төхөөрөмжийн дээж шарах суваг дахь гамма цацрагийн болон дулааны нейтроны урсгалын нягтын харьцааг зэс, мышьяк дээр явагдах цөмийн (γ, n) , (n, γ) урвалуудыг ашиглан тодорхойлох тооцоо хийгдсэн. Дулааны болон резонансын нейтроны урсгалын нягтын харьцааг тодорхойлох шинэ арга боловсруулсан.

І.ОРШИЛ

МУИС-ийн Цөмийн Судалгааны Төвийн (ЦСТ) Микротроны гамма квантын суваг дээр суурилсан гамма болон нейтрон идэвхжилийн шинжилгээг нэгэн зэрэг хийх зориулалттай “Гамма-Нейтрон” төхөөрөмж 2009 оноос ашиглагдаж эхэлсэн. Тухайн төхөөрөмжийн суваг дээжтэй байх үед ($L_0=5-10$ см мужид) харгалзах тормозын гамма цацрагийн урсгалын дундаж нягт $3 \cdot 10^{11} \gamma/\text{см}^2 \text{сек}$, харин дулааны нейтроны урсгалын дундаж нягт $1.4 \cdot 10^8$ нейтрон/ $\text{см}^2 \text{сек}$ тус тус байдаг [1]. Төхөөрөмжийн бүтцийг 1-р зурагт үзүүлэв.



Зураг 1. “Гамма-Нейтрон” төхөөрөмжийн бүтэц: 1- электроны цацраг, 2-тантал бай, 3- Al экран, 4-дээж шарах суваг, 5-тормозын цацраг, 6- хар тугалган хувиргагч, 7- дээж, 8- монитор, 9- усан удаахируулагчийн органик шилээр хийсэн сав $250 \times 250 \times 250 \text{ мм}^3$.

Төхөөрөмжийн дээж шарах суваг дахь тормозын цацрагийн болон дулааны нейтроны урсгалын $\Phi_\gamma(r)/\Phi_n(r)$ харьцаа мэдэгдэж байгаа тохиолдолд (γ, n) болон (n, γ) урвалыг шинжилгээнд ашиглах боломжийг урдчилан үнэлэх бүрэн боломжтой.

Иймд энэхүү ажилд “Гамма-Нейтрон” төхөөрөмжийн дээр гамма цацраг болон нейтроны урсгалын харьцааг дээж шарах суваг хоосон болон ачаалалтай байх үед үнэлэх аргыг боловсруулах асуудлыг хөндөв. Цацрагын урсгалыг хянах мониторт зэс болон мышьяк сонгон авсан. Учир нь Cu^{63} , As^{75} изотопууд дээр явагдах (γ, n) урвалын босго энерги ойролцоогоор ижил 10 МэВ учраас цацрагын урсгалын харьцааг зөв үнэлэх гол нөхцөл юм.

ІІ.ҮР ДҮН

$\text{A.Cu}^{63}(\gamma, n)\text{Cu}^{62}$, $\text{As}^{75}(\gamma, n)\text{As}^{74}$ урвалуудын эффектив болон дундаж огтлолын үнэлгээ

Тормозын цацраг нь E_{max} энергиэр хязгаарлагдсан нил спектртэй тул энэ спектрт харгалзах эффектив болон дундаж огтлолыг E_{max} энергиэс хамааруулан тооцоолох шаардлагатай болдог. Микротрон МТ-22-ын хувьд $E_{\text{max}}=22$ МэВ. Харин фото-урвалуудын энергиэс хамаарсан огтлолын мэдээллүүд өнөө үед бүрэн хангалттай бий [2,3]. Авч үзэж буй фото урвалуудын огтлолуудын үнэлгээгээр $\Phi_\gamma(r)/\Phi_n(r)$ харьцааны алдаа тодорхойлогдно.

Энэ хэсэгт ЦСТ-ийн микротроны тормозын цацрагийн хувиргагч тантал байны хувьд дараах хоёр тооцооны дүнг нэгтгэв:

1. $\text{Cu}^{63}(\gamma, n)\text{Cu}^{62}$, $\text{As}^{75}(\gamma, n)\text{As}^{74}$ урвалуудын хувьд $E_{\text{max}}=22$ МэВ хязгаарын энергитэй тормозын цацрагийн спектрт харгалзах σ_{eff} эффектив болон σ_d дундаж огтлолын үнэлгээ.

2. Дээж шарах суваг алтны ордын дээжүүдээр ачаалагдсан үед $\text{Cu}^{63}(\gamma, n)\text{Cu}^{62}$,

$As^{75}(\gamma, n)As^{74}$ урвалуудын эффектив болон дундаж огтлолын өөрчлөлтийн үнэлгээ.

Микротрона МТ-22 дээр үүсч буй тормозын цацрагийн спектрийн энергийн (0-22) МэВ мужийн бүтэн интеграл урсгалын нягт $\Phi_\gamma(r)$ болон урвалын E_B босго энергиэс дээш энергийн мужид харгалзах $\Phi(r, E_B)$ интеграл урсгалын нягтууд дараах хамааралтай байдаг [1]:

$$\Phi_\gamma(r)\sigma_{eff}(r) = \Phi_\gamma(r)\sigma_d(r) \int_{E_B}^{22\text{МэВ}} f(r, E)dE = \Phi(r, E_B)\sigma_d(r) \quad (1)$$

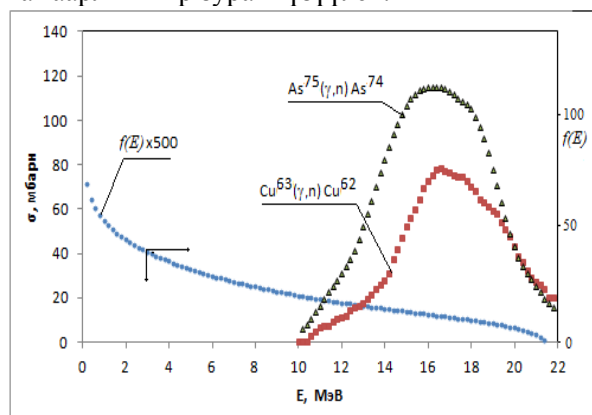
$$\sigma_{eff}(r) = \int_0^{22\text{МэВ}} f(r, E)\sigma(E)dE \text{ барн -}$$

$f(r, E)$ спектрт харгалзах эффектив огтлол[2],

$$\sigma_d(r) = \int_{E_B}^{22\text{МэВ}} f(r, E)\sigma(E)dE / \int_{E_B}^{22\text{МэВ}} f(r, E)dE$$

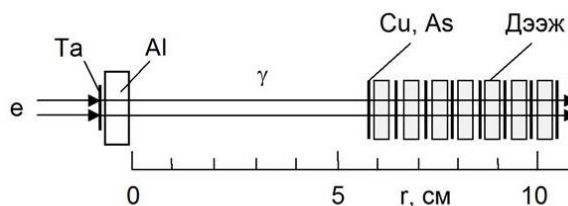
$$\text{- дундаж огтлол, } \int_0^{22\text{МэВ}} f(r, E)dE = 1$$

Тантал байны хувьд бодогдсон $f(r, E)$ спектр [1] болон $Cu^{63}(\gamma, n)Cu^{62}$, $As^{75}(\gamma, n)As^{74}$ урвалуудын огтлолуудын энергиэс [2,3] хамаарлыг 2-р зурагт үзүүлэв.



Зураг 2. $f(r, E)$ спектр болон $Cu^{63}(\gamma, n)Cu^{62}$, $As^{75}(\gamma, n)As^{74}$ урвалуудын огтлолын энергиэс хамаарах хамаарал [1,3].

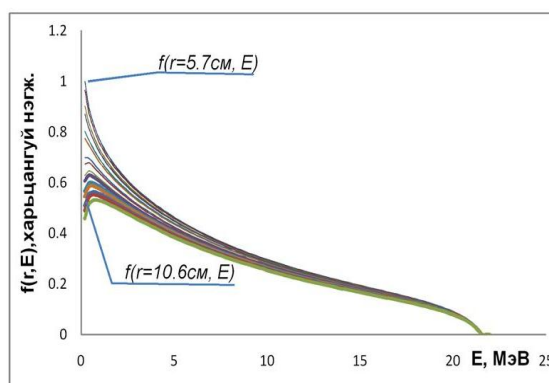
Хийсэн тооцоонд харгалзах шаралтын геометрийг ойлгомжтой болгох үүднээс төхөөрөмжийн сувагт алтны ордын дээжийг шарсан байршилыг хөнгөн цагаан экраны гадаргатай харьцангуйгаар 3-р зурагт үзүүлэв.



Зураг 3. "Гамма-Нейтрон" төхөөрөмж дээр алтны дээжийг шарсан геометр.

Шарагдаж байгаа монитор болон дээжийг нэвтэрч гарсан тормозын цацрагийн спектрийн хэлбэрийн өөрчлөлтийг бодсон үр дүнг 4-р зурагт нэгтгэв.

Харин дээжийг нэвтэрч гарсан тормозын цацрагийн (ялангуяа бага энергийн мужид харгалзах) $f(r, E)$ спектрийн хэлбэр өөрчлөгдвөл (1) томъёонууд ёсоор эффектив болон дундаж огтлолууд өөрчлөгднө.



Зураг 4. Монитор болон дээжүүдийг нэвтэрсэн тормозын цацрагийн спектрийн хэлбэрийн өөрчлөлт.

Зургаас харахад анхны туссан $f(r = 5.7\text{см}, E)$ спектрийн хэлбэр бүх монитор болон дээжийг нэвтэрч гарсны дараа $f(r = 10.6\text{см}, E)$ хэлбэртэй болж өөрчлөгдсөн байна. Өөрөөр хэлбэл бага энергийн мужид ихээхэн өөрчлөлт гарсан нь спектрийн хэлбэрийн өөрчлөлтийн ерөнхий зүй тогтол зөв байгааг харуулж байна. Практикт урвалын огтлолыг энергийн дискрет утгуудад хэмжсэн юмуу бодсон байдаг. Бидний авч үзэж буй фото урвалын хувьд огтлолын утгууд 0.3 МэВ энергийн алхамтай өгөгдсөн тул $f(r, E)$ спектр мөн энэхүү алхмаар бодсон [1].

$$\sigma_{eff}(r) = \sum_{i=1}^n f_i(r, E)\sigma_i(E)\Delta E \quad (2)$$

$$\Delta E = 0.3 \text{ МэВ}, \quad \sum_{i=1}^n f_i(r, E) \Delta E = 1$$

$$\sigma_d(r) = \sum_{i=k}^n f_i(r, E) \sigma_i(E) \Delta E / \sum_{i=k}^n f_i(r, E) \Delta E \quad (3)$$

k- E_б босго энергид харгалзах дугаар.

Тантал бай бүхий микротрон МТ-22 дээрх $f(r=5.7 \text{ см}, E)$, $f(r=10.6 \text{ см}, E)$ спектрүүдийн хувьд $\text{Cu}^{63}(\gamma, n) \text{Cu}^{62}$, $\text{As}^{75}(\gamma, n) \text{As}^{74}$ урвалын эффе́ктив болон дундаж огтлолуудыг (2), (3) томъёонуудын тусламжтайгаар үнэлсэн дүнг 1-р хүснэгтэнд нэгтгэв.

Хүснэгт, 1. МТ-22 дээр $\text{Cu}^{63}(\gamma, n) \text{Cu}^{62}$, $\text{As}^{75}(\gamma, n) \text{As}^{74}$ урвалуудын эффе́ктив болон дундаж огтлолыг бодсон дүн.

Урвал	r=5.7см		r=10.6см	
	$\sigma_{\text{eff}}(r), \text{мбн}$	$\sigma_d(r), \text{мбн}$	$\sigma_{\text{eff}}(r), \text{мбн}$	$\sigma_d(r), \text{мбн}$
$\text{Cu}^{63}(\gamma, n) \text{Cu}^{62}$	10.1±0.1	34.7±0.4	11.0±0.2	34.8±0.6
$\text{As}^{75}(\gamma, n) \text{As}^{74}$	18.7±0.1	64.8±0.2	20.0±0.3	63.2±0.4

Хүснэгтээс харахад тормозын цацрагийн спектрин хэлбэрийн өөрчлөлтөөс урвалын огтлолуудад өгөх эффект тийм ч их биш байна. Иймд $\Phi_\gamma(r)/\Phi_t(r)$ харьцааг үнэлэх тооцоонд урвалын огтлолуудад засвар оруулах шаардлагагүй.

Б.Тормозын цацрагийн болон дулааны нейтроны $\Phi_\gamma(r)/\Phi_t(r)$ урсгалуудын харьцаа

Идэвхжилийн шинжилгээний уламжлалт томъёонуудыг ашиглан тормозын цацрагийн болон дулааны нейтроны урсгалуудын нягтын дурын цэг дээрх $\Phi_\gamma(r)/\Phi_t(r)$ харьцааг зэс болон мышьякын тохиолдолд бичвэл:

$$\frac{\Phi_\gamma^{\text{Cu}}(r)}{\Phi_t^{\text{Cu}}(r)} = \frac{S_\gamma^{\text{Cu}}(r)}{S_t^{\text{Cu}}(r)} D^{\text{Cu}}(r);$$

$$\frac{\Phi_\gamma^{\text{As}}(r)}{\Phi_t^{\text{As}}(r)} = \frac{S_\gamma^{\text{As}}(r)}{S_t^{\text{As}}(r)} D^{\text{As}}(r) \quad (4)$$

$$D^{\text{Cu}}(r) = \frac{\sigma_t^{\text{Cu}}}{\sigma_{\text{eff}}^{\text{Cu}}(r)} \frac{\varepsilon_t(E)}{\varepsilon_\gamma(E)} \frac{\lambda_\gamma^{\text{Cu}} I_t^{\text{Cu}} \theta_t^{\text{Cu}} (1-e^{-\lambda_{t_1}}) e^{-\lambda_{t_2}} (1-e^{-\lambda_{t_3}})}{\lambda_\gamma^{\text{Cu}} I_\gamma^{\text{Cu}} \theta_\gamma^{\text{Cu}} (1-e^{-\lambda_{t_1}}) e^{-\lambda_{t_2}} (1-e^{-\lambda_{t_3}})} \quad (5)$$

$$D^{\text{As}}(r) = \frac{\sigma_t^{\text{As}}}{\sigma_{\text{eff}}^{\text{As}}(r)} \frac{\varepsilon_t(E)}{\varepsilon_\gamma(E)} \frac{\lambda_\gamma^{\text{As}} I_t^{\text{As}} \theta_t^{\text{As}} (1-e^{-\lambda_{t_1}}) e^{-\lambda_{t_2}} (1-e^{-\lambda_{t_3}})}{\lambda_\gamma^{\text{As}} I_\gamma^{\text{As}} \theta_\gamma^{\text{As}} (1-e^{-\lambda_{t_1}}) e^{-\lambda_{t_2}} (1-e^{-\lambda_{t_3}})}$$

энд: $\Phi(r)$ –бөөмийн урсгалын нягт; $S(r)$ – импульсын тоо; λ –изотопын задралын тогтмол; ε –E энергид харгалзах детекторын бүртгэх чадвар; I – E энергитэй гамма квантын гаралт; t_i –шарах, хүлээх, хэмжих хугацаа; θ - изотопын байгалийн тархалт; $\sigma(E)$ - цөмийн урвалын огтлол.

Тооцоонд Cu, As элементүүдийн цөмийн тоо шаардлагагүй болохыг дээрх харьцаануудаас харж болно. Ямар урвалыг ашиглаж $\Phi_\gamma(r)/\Phi_t(r)$ харьцааг тодоохойлсноос үл хамааран дурын цэг дээр дараах тэнцэтгэл биелнэ:

$$\Phi_X(r) \equiv \frac{\Phi_\gamma^{\text{Cu}}(r)}{\Phi_t^{\text{Cu}}(r)} = \frac{\Phi_\gamma^{\text{As}}(r)}{\Phi_t^{\text{As}}(r)};$$

В. Дулааны болон резонансын нейтроны урсгалын нягтын харьцааг тодорхойлох арга

Төхөөрөмж дээрх цацрагуудын урсгалын $\Phi_\gamma(r)/\Phi_t(r)$ харьцааг тодорхойлоход шаардлагатай $\text{Cu}^{65}(n, \gamma)\text{Cu}^{66}$, $\text{As}^{75}(n, \gamma)\text{As}^{76}$ урвалууд нь дулааны болон резонансын нейтроноор зэрэг явагдах тул спектрометр дээр энэ хоёр урвалын тус тусдаа ялгарч тоологдсон импульсын $N^{\text{Cu}}(r)$, $N^{\text{As}}(r)$ тоо нь дулааны болон резонансын нейтронуудаас өгөгдсөн нийлбэр эффект байдаг. Иймд дулааны нейтроны цэвэр эффектэд харгалзах $S_t^{\text{Cu}}(r)$,

$S_t^{\text{As}}(r)$ импульсын тоо дулааны болон нейтроны $\Phi_t(r)/\Phi_p(r)$ харьцаагаар тодорхойлогддог. Нейтрон идэвхжилийн уламжлалт аргаар кадмийн харьцааны тусламжтайгаар $S_t^{\text{Cu,As}}(r)$ импульсын тоонуудыг тодорхойлдог [4].

Төхөөрөмжийн цацрагийн урсгалын харьцааг тодорхойлоход шаардлагатай Cu болон As элементүүд дээр гамма ба нейтрон идэвхжилээр явагдах урвалын чухал физик тогтмолуудыг 2-р хүснэгтэнд нэгтгэн үзүүлэв.

Хүснэгт 2. As и Cu элемент дээр явагдах (n, γ) и (γ, n) урвалуудын зарим өгөгдлүүд

Реакция	$T_{1/2}$	σ , мбн	θ	E, кэВ	I
$\text{As}^{75}(n, \gamma)\text{As}^{76}$	26.4 цаг	$\sigma_t = 4480 \pm 110$ $\sigma_p = 61000 \pm 400$	1	559	0.440
$\text{Cu}^{65}(n, \gamma)\text{Cu}^{66}$	5.1 мин	$\sigma_t = 2270 \pm 30$ $\sigma_p = 2320 \pm 80$	0.309	1039	0.080
$\text{As}^{75}(\gamma, n)\text{As}^{74}$	426.5 цаг	$\sigma_{\text{eff}} = 18.7 \pm 0.1$	1	596	0.6
$\text{Cu}^{63}(\gamma, n)\text{Cu}^{62}$	9.8 мин	$\sigma_{\text{eff}} = 10.1 \pm 0.1$	0.691	1173	0.004

Харин гамма болон нейтрон идэвхжилийн аргуудыг хослуулан хэрэглэж байгаа тохиолдолд [4] ажилд заагдсан кадмийн харьцааны аргыг хэрэглэх шаардлагагүй.

Илэрхийлэл (4) ба (5) –аас дулааны болон резонансын нейтроны урсгалын нягтын $\Phi_t(r)/\Phi_p(r)$ харьцаа спектрометрээр ялгарч тоологдсон импульсын $N^{\text{Cu}}(r)$, $N^{\text{As}}(r)$ тоонууд дараах хэлбэрээр тодорхойлогдоно:

$$\frac{\Phi_t(r)}{\Phi_p(r)} = \frac{N^{\text{Cu}} \frac{\sigma_p^{\text{As}}}{\sigma_t^{\text{As}}} - \frac{S_\gamma^{\text{Cu}}(r) D^{\text{Cu}}(r) \sigma_p^{\text{Cu}}}{S_\gamma^{\text{As}}(r) D^{\text{As}}(r) \sigma_t^{\text{Cu}}} N^{\text{As}}}{\frac{S_\gamma^{\text{Cu}}(r) D^{\text{Cu}}(r)}{S_\gamma^{\text{As}}(r) D^{\text{As}}(r)} N^{\text{As}} - N^{\text{Cu}}} \quad (6)$$

Дулааны нейтроны цэвэр эффектэд харгалзах

$S_t^{\text{Cu}}(r)$, $S_t^{\text{As}}(r)$ импульсын тоонуудыг

дулааны болон нейтроны $\Phi_t(r)/\Phi_p(r)$ харьцаагаар илэрхийлбэл:

$$S_t^{\text{Cu}}(r) = N^{\text{Cu}}(r) - \frac{N^{\text{Cu}}(r)}{\frac{\sigma_t^{\text{Cu}}}{\sigma_p^{\text{Cu}}} \frac{\Phi_t(r)}{\Phi_p(r)} + 1};$$

$$S_t^{\text{As}}(r) = N^{\text{As}}(r) - \frac{N^{\text{As}}(r)}{\frac{\sigma_t^{\text{As}}}{\sigma_p^{\text{As}}} \frac{\Phi_t(r)}{\Phi_p(r)} + 1}$$

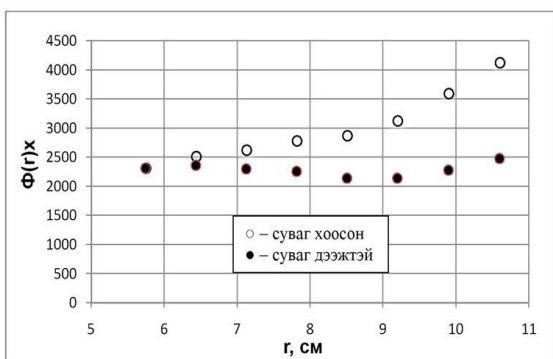
болно.

**Г. “Гамма-Нейтрон” төхөөрөмж дээрх
тормозын цацрагийн болон
дулааны нейтроны урсгалын нягтын харьцаа
 $\Phi_\gamma(r)/\Phi_t(r)$**

Илэрхийлэл (5), (6)-аас тормозын цацрагийн болон дулааны нейтроны урсгалын нягтын $\Phi_\gamma(r)/\Phi_t(r)$ харьцааг тодорхойлбол:

$$\Phi_x(r) = \frac{S_\gamma^{Cu}(r)D^{Cu}(r)}{N^{Cu}(r) - \frac{N^{Cu}(r)}{\frac{\sigma_t^{Cu}}{\sigma_p^{Cu}} \frac{\Phi_t(r)}{\Phi_p(r)} + 1}} = \frac{S_\gamma^{As}(r)D^{As}(r)}{N^{As}(r) - \frac{N^{As}(r)}{\frac{\sigma_t^{As}}{\sigma_p^{As}} \frac{\Phi_t(r)}{\Phi_p(r)} + 1}} \quad (7)$$

Хэмжилтийн $N^{Cu}(r)$, $N^{As}(r)$ дүнгүүд болон 2-р хүснэгтийг ашиглан (7) томъёогоор бодогдсон $\Phi_x(r) = \Phi_\gamma(r)/\Phi_t(r)$ харьцаа шаралтын r зайнаас хамаарлыг төхөөрөмжийн дээж шарах суваг хоосон ба дээжтэй тохиолдолд 5-р зурагт үзүүлэв.



Зураг.5. $\Phi_x(r) = \Phi_\gamma(r)/\Phi_t(r)$ харьцааны шаралтын r зайнаас хамаарал.

Төхөөрөмжийн суваг дээжтэй байх үед тормозын гамма цацрагийн урсгал буурч харин дээж болон түүний полиэтилен савнууд дээрх нейтроны удаашралаас үүдэн дулааны нейтрон урсгал ихэссэн болох нь зургаас харагдаж байна. Харин суваг хоосон байхад нейтроны конверторын ойролцоо зайд (1-р зургыг үз.) тормозын цацрагийн урсгал харьцангуй их байна. Иймд дээж шарах хэсэгт суваг дээжтэй байх үед $\Phi_\gamma(r)/\Phi_t(r)$ харьцаа ойролцоогоор 2000-3000, суваг хоосон үед 2000-4500 байна.

Ш.ДҮГНЭЛТ

Гамма болон нейтрон идэвхжилийн шинжилгээ зэрэг хийхэд зориулагдсан “Гамма-Нейтрон” төхөөрөмжийн суваг дахь тормозын цацрагийн болон дулааны нейтроны урсгалын нягтын харьцааны үнэлгээг дээж шарах хэсэгт хийж, дээжтэй үед $\Phi_\gamma(r)/\Phi_t(r)$ харьцаа ойролцоогоор 2000-3000, суваг хоосон үед 2000-4500 завсарт хэлбэлзэхийг тогтоов.

Дээж шарах байршил полиэтилен сав бүхий дээжтэй үед $Cu^{63}(\gamma, n)Cu^{62}$, $As^{75}(\gamma, n)As^{74}$ урвалуудын эффектив болон дундаж огтлолуудын утганд тормозын цацрагийн спектрийн хэлбэрийн өөрчлөлтийн үзүүлэх нөлөө 10% -иас хэтрэхгүй.

Энэхүү ажлаар дулааны болон резонансын нейтроны урсгалын нягтын харьцааг тодорхойлох шинэ арга боловсруулсан.

АШИГЛАСАН МАТЕРИАЛ

1. Б.Отгоолой, П.Зузаан, Г.Дамдинсүрэн. Микротрон дээр гамма нейтроны холимог орноор шарах төхөөрөмж. МУИС. ЭШБ. ФИЗИК, №355(16). Хууд. 76-82.
2. Varlamov.V.V, et ell. J,YK,1-2,48,2003
3. Handbook on Nuclear Activation Data, Technical reports series No.273, International Atomic Energy Agency, Vienna, 1987
4. Н.Норов, С.Одмаа, Г.Хүүхэнхүү. Нейтроны физикийн практик, МУИС, ЦСТ, Улаанбаатар, 2007.

Атомын шингээлтийн спектр судлалын арга боловсруулж хэрэглэсэн

Т.Батбаяр¹, П.Зузаан², Д.Нямаа³

¹ Монгол Улс, Улаанбаатар, Стандарт хэмжилзүйн газар

² Монгол Улс, Улаанбаатар-210646, Их сургуулийн гудамж-1, Монгол Улсын Их Сургууль, Цөмийн судалгааны төв,

³ Монгол Улс, Улаанбаатар, Шинжлэх Ухааны Академи, Физик технологийн хүрээлэн

I. ОРШИЛ

Бодисын химийн бүтэц судлах атомын шингээлтийн арга харьцангуй богино хугацаанд түргэн хөгжиж ихээхэн дэлгэрсэн нь уул аргын мэдрэх чадвар, нарийвчлал, универсаль чанар сайнтай холбоотой юм [1,2].

Атомын шингээлтийн спектроскопийн аргаар сорьц дахь 50 орчим элементийг маш бага илрүүлэх хязгаартайгаар тодорхойлж болох ба давтан хэмжилтийн алдаа, хөдөлмөрийн бүтээмж зэрэг үзүүлтүүдээр бусад физик химийн аргуудаас давуутай. Атомын шингээлтийн аргыг хэдийгээр шинжлэх ухаан техникийн олон салбарт хэрэглэж байгаа боловч тухайн салбарын объект бүрийн онцлогт тохирсон атомын шингээлтийн арга бүрэн гүйцэт боловсроогүй, түүний физик үндэс гүйцэт судлагдаагүй, хялбар дөхөм арга хэрэгсэл нэвтэрч чадаагүй бодисыг атом төлөвт шилжүүлэх үйл ажиллагаа төгс судлагдаж шаардлагын хэмжээнд хүртэл боловсронгуй болж чадаагүй зэрэг шийдвэрлэгдээгүй асуудал их байна. Ялангуяа манай оронд энэхүү шилдэг сайн физик аргыг эх орны эрдэс түүхий эд, геологи, биологи, хөдөө аж ахуйн объектүүдийн судалгаанд нэвтрүүлэн хэрэглэх, судлагдах дээж сорьцын өвөрмөц онцлогт тохирсон шинэ аргууд боловсруулах ба боловсронгуй болгох, үүнтэй холбогдсон физик судалгаануудыг явуулах шаардлага тавигдаж байгаа юм.

Атомын шингээлтийн спектр судлалын аргын суурь манай оронд 1970-аад оноос тавигдаж, үргэлжилсэн спектртэй гэрэл үүсгэгчийг атомын шингээлтийн спектрийн судалгаанд хэрэглэх, цахилгаан халаагуурын атомчлагчийг хэрэглэх боломжуудыг судлах ажлуудыг өөрсдийн угсарч, зохион бүтээсэн багажууд дээр явуулж ирсэн бөгөөд бодисын өдөөгдөн атомчлагдах процессын судалгааг үргэлжлүүлэн явуулж урьдчилсан зарим зохистой нөхцлүүдийг тогтоож, цаашид шинжилгээнд хэрэглэх боломж нөхцлийг бүрдүүлсэн [3-5]. Иймд бид бодисын

бүтэц найрлага судлах, геологи, биологийн болон хөрсний дээжид хольц элементүүдийг судлах аргыг боловсруулах, боловсронгуй болгох судалгааны ажил явуулж байна.

Энэ ажилд атомын шингээлтийн спектр судлалын талаар ШУА-ын ФТХ-д хийсэн судалгааны ажлын тоймоос өгүүлнэ.

II. ТУРШЛАГЫН ТӨХӨӨРӨМЖ, АРГАЗҮЙ

ШУА-ын ФТХ-д бүрэн автоматчлагдсан, программын удирдлагатай Перкин-Эльмер фирмийн спектрофотометр (модель 5000) -ыг угсарч тохируулан хэвийн ажилд оруулах, атомын шингээлтийн спектр судлалын аргыг өөрийн орны эрдэс түүхий эд, геологи, биологи болон хөрсний дээжинд судалгаа хийхэд нэвтрүүлэх, спектрофотометр түүнтэй хавсарч ажиллах өөрөө бичигч, хэвлэгч, автоматаар дээжийг тунлагч AS-50, графитан кюветийг ажиллуулах биеэ даасан төхөөрөмж, хийн хольцын дөлийг асаах төхөөрөмжүүд угсарч зүшгүүлсэн.

Судалгаанд ашигласан микропроцессор бүхий тусгай программын удирдлагатай атом шингээлтийн спектрофотометр 5000 нь 50 хүртэл дээжинд 6 элементийг тодорхойлох боломжтой. Бүх механик, цахилгаан ба оптик үйлдлүүд нь автоматаар хянагдаж, тохируулагдана. Эдгээрийг тусгай товчнуудаар программ өгч картанд бичиж, түүгээр шууд команд өгөх боломжтой. Хэмжилтийн дүнг өөрөө хэвлэгчээр шингээх чадвараар буюу концентрациар өөрөөр хэлбэл өгөгдсөн программаар хэвлэн гаргах ба шаардлагатай тохиолдолд өөрөө бичигчээр гаргах боломжтой.

Шинжилгээнд 1-3 эталон уусмал хэрэглэж тохируулгын муруйг байгуулна. Түүний тусламжтайгаар 10-15 дээжинд тодорхойлолт хийсэний дараа дахин эталоныг хэмжин тохируулгын муруйг шинэчлэн цаашдын хэмжилтэнд ашиглах нь тохиромжтой болохыг туршлагаар харуулав. Шинжилгээнд хэрэглэх

эталон уусмалуудыг эх уусмалаас шингэрүүлэн бэлтгэсэн ба ийм уусмалуудыг хэмжилт хийх болгондоо шинээр бэлтгэх шаардлагатай.

Анхны үед дөлөн атомчлагчийг асаах, түүний асаалтын зохимжтой харьцааг сонгох түүнд бололцоотой элементүүдийг тодорхойлох туршилт явуулав. Туршилтын дүнд Эрдэнэтийн зэсийн баяжмалын дээжинд Ag, Au, геологийн

дээж габброд Cu, Zn, Ni, Co, хүний цусны ийлдэс ба гемолизатад Cu, Zn, хөрсөнд Zn, Cu, Co, Ni, Cr, болорын дээжинд Cu, Zn, Co, Mn, Ni, Mg, Cr, Al зэрэг элементүүдийг тодорхойлох туршилтын нөхцлийг сонгосон бөгөөд хүснэгт 1-д зарим элементийн хувьд сонгосон хугацаа, температурын хамаарлын туршлагын нөхцлийг үзүүлэв.

Хүснэгт 1. Зарим элемент тодорхойлох туршлагын сонгосон нөхцөл

Ag	$\lambda = 328.1$ нм H = 0.7 нм T = 5 сек	Step	1	2	3	4
		Temp. °C	130	800	1900	
		Ramp (сек)	5	5	1	
		Hold (сек)	15	10	4	
		Read	-	-	0	
		Rec	-	-	-2	
		Baseline	-	-	-2	
		Jnt.Flao (мл/мин)	300	300	50	
Au	$\lambda = 242.8$ нм H = 0.7 нм T = 5 сек	Step	1	2	3	4
		Temp. °C	120	900	2400	2700
		Ramp (сек)	5	3	1	0
		Hold (сек)	20	30	5	2
		Read	-	-	0	-
		Rec	-	-	0	-
		Baseline	-	-	-	-
		Jnt.Flao (мл/мин)	300	300	50	300
Ni	$\lambda = 232.0$ нм H = 0.2 нм T = 5 сек	Step	1	2	3	4
		Temp. °C	120	1000	2300	
		Ramp (сек)	10	5	0	
		Hold (сек)	8	3	6	
		Read	-	-	0	
		Rec	-	-	-2	
		Baseline	-	-	-2	
		Jnt.Flao (мл/мин)	300	300	50	
Cu	$\lambda = 324.7$ нм H = 0.7 нм T = 4 сек	Step	1	2	3	4
		Temp. °C	120	900	2500	
		Ramp (сек)	10	50	1	
		Hold (сек)	15	3	5	
		Read			0	
		Rec			-2	
		Baseline			-2	
		Jnt.Flao (мл/мин)	300	300	50	
Pb	$\lambda = 283.3$ нм H = 0.7 нм T = 7 сек	Step	1	2	3	4
		Temp. °C	130	630	2300	
		Ramp (сек)	10	15	3	
		Hold (сек)	15	15	4	
		Read			0	
		Rec			-	
		Baseline			-	
		Jnt.Flao (мл/мин)	300	300	50	

V	$\lambda = 318.4$ нм $H = 0.7$ нм $T = 11$ сек	Step	1	2	3	4
		Temp. °C	120	1500	2700	
		Ramp (сек)	5	3	1	
		Hold (сек)	15	10	15	
		Read			0	
		Rec			0	
		Baseline			-2	
		Jnt.Flao (мл/мин)	300	300	50	
Dy	$\lambda = 421.2$ нм $H = 0.7$ нм $T = 16$ сек	Step	1	2	3	4
		Temp. °C	120	1800	2700	
		Ramp (сек)	5	3	1	
		Hold (сек)	15	15	8	
		Read			0	
		Rec			0	
		Baseline			-1	
		Jnt.Flao (мл/мин)	300	300	50	
Dy	$\lambda = 313.3$ нм $H = 0.7$ нм $T = 10$ сек	Step	1	2	3	4
		Temp. °C	120	1800	2700	2700
		Ramp (сек)	3	5	1	0
		Hold (сек)	15	10	6	3
		Read	-	-	0	
		Rec	-	-	0	0
		Baseline	-	-	-1	
		Jnt.Flao (мл/мин)	300	300	50	300
Yb	$\lambda = 308.8$ нм $H = 0.2$ нм $T = 7$ сек	Step	1	2	3	4
		Temp. °C	120	1300	2700	
		Ramp (сек)	3	3	1	
		Hold (сек)	15	15	5	
		Read	-	-	0	
		Rec	-	-	0	
		Baseline	-	-	-	
		Jnt.Flao (мл/мин)	300	300	50	

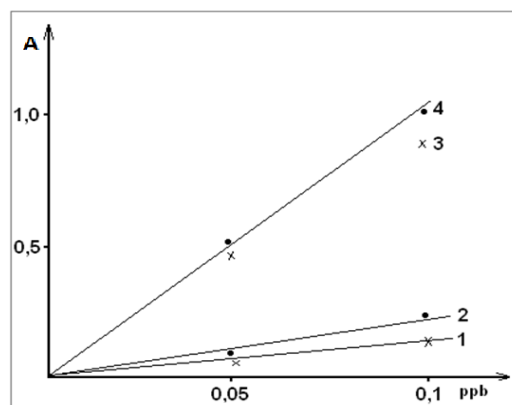
III.ҮР ДҮН БА ХЭЛЭЛЦҮҮЛЭГ

Алтыг МШБК-аар экстрац хийсэн ба хийгээгүй үеийн тохируулгын муруйг зураг 1, шингээлтийн сигналд идэвхгүй хий-аргоны урсгалын хурд хэрхэн нөлөөлж байгааг зураг2-т тус тус үзүүлэв.

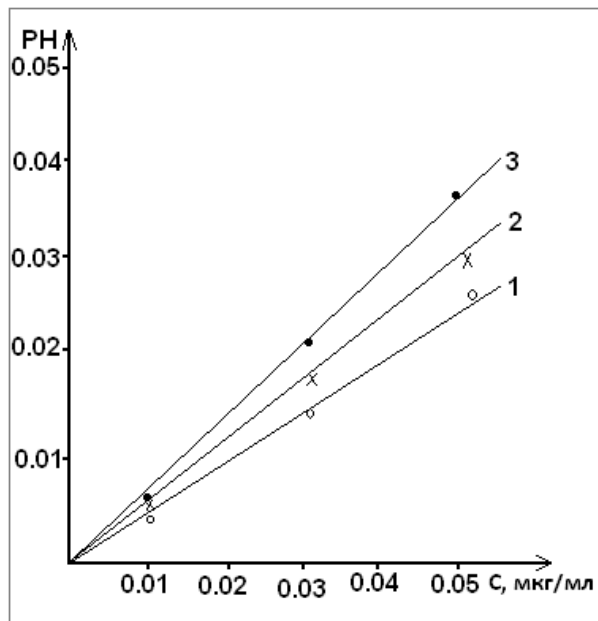
Зургаас МШБК-аар экстракц хийсэн тохиолдолд шингээх чадвар нэмэгдэж байгаа нь харагдаж байна. Энэ нь экстракцын явцад Au-ны баяжилт явагдаж байгааг харуулж байна.

Эндээс үзэхэд молибдены хувьд атомчлалт явагдах хоромд инерт хийг урсгахгүй байх нь шингээх чадварт сайн нөлөө үзүүлж уул аргын илрүүлэх хязгаарыг сайжруулж байна.

Зурагт 3-т шингээлтийн сигнал дээжийн хэмжээнээс хамаарахыг харуулав.



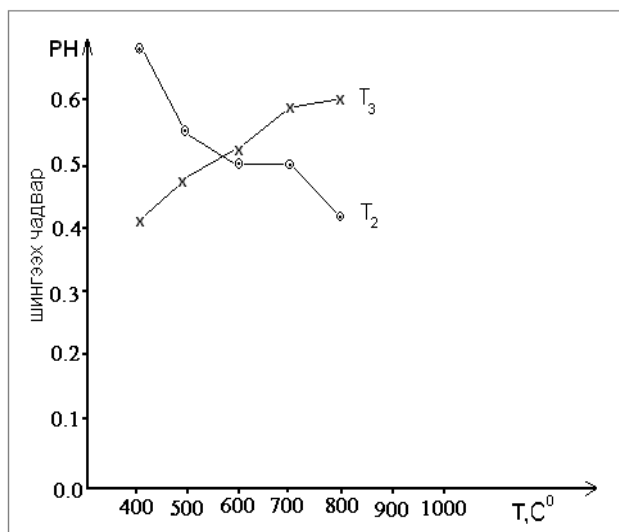
Зураг 1. Алтыг экстрац хийсэн ба хийгээгүй үеийн тохируулгын муруй
1 – ABS. AA, 2 – ABS. AA/BG,
3 – МШБК-ээр экстракц хийсэн AA-хэмжилт,
4 – мөн AA/BG хэмжилт



Зураг 2. Шингээлтийн сигналд аргоны урсгалын хурдны нөлөө

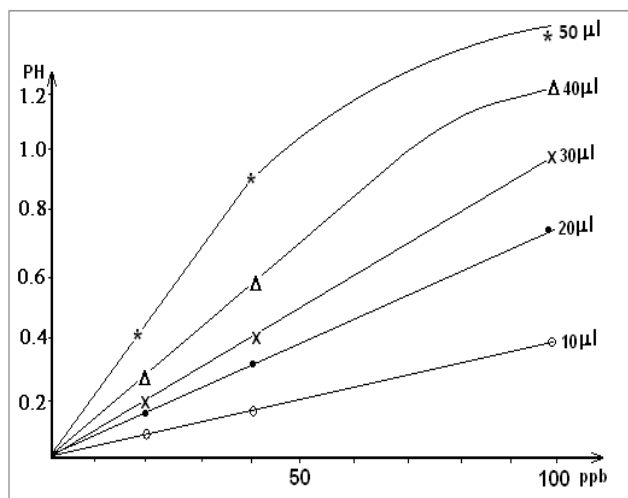
1 – Аргоны урсгалын хурд 50 мл/мин
2 – 10 мл/мин, 3 – Аргоны урсгалыг зогсоосон

Зурагт 4-т алтыг тодорхойлоход шингээлтийн сигнал, үнсжилт ба атомчлалтын температурын хамаарлыг үзүүлэв.



Зураг 4. Шингээх чадвар атомчлалтын температурын хамаарал

1 – T_2 үнсжүүлэлт, 2 – T_3 атомчлалтын температур



Зураг 3. Алтыг HGA-500-аар тодорхойлоход шингээлтийн сигнал дээжийн хэмжээний хамаарал

Энд бид дээжийн эзэлхүүнийг 20μl-ээр авч атомчлах хромд аргон хийн урсгалыг зогсоох нь зохимжтой нөхцөл гэж үзлээ.

Зургаас үзэхэд үнсжилтийн температурыг ихэсгэхэд шингээлтийн сигнал температурын тодорхой утга буюу атомчлалын явагдах хүртэл буурч байна. Харин атомчлалтын температурыг ихэсгэхэд шингээлтийн сигнал илүүтэй өсөж байна. Ийм учир үнсжилтийн температурыг зөв сонгож дээжийн бүтцээс хамааруулан үнсжилтийг хэд хэдэн шаттай явуулах шаардлагатай нь харагдаж байна.

Атомын шингээлтийн спектрийн дээрхи боловсруулсан аргыг хэрэглэн алтны агуулагатай стандарт, Эрдэнэтийн зэсийн баяжмалын дээжүүдэд Ag, Au, хөрсний дээжинд Mo, болорын дээжинд V, Cu, Al, Pb зэрэг элементүүдийг тодорхойлж үр дүнг зохих газруудад шилжүүлж байв. Тухайлбал, Хангайн районы болорын дээжинд зарим хольц элемент тодорхойлсон дүнг жишээ болгож хүснэгт 2-т үзүүлэв.

Хүснэгт 2. Хангайн районы болорын дээжинд хольц элементүүдийг атомын шингээлтийн спектрын аргаар тодорхойлсон дундаж дүн /г/т/

	Таацын гол	Цахирын орд	Орхоны илрэл	Мөрөнгийн илрэл	Горхи
Li_2O	22.1	76.9	19.0	57.0	57.0
Na_2O	1208.4	1240.9	1159.9	1081.5	1360.0

K ₂ O	2080.0	1879.1	1428.0	1675.5	1902.0
CaO	30.4	305.5	71.0	304.7	27.0
MgO	71.8	122.0	122.2	95.0	66.0
Al ₂ O ₃	680.0	116.2	376.3	182.0	623.0
Fe ₂ O ₃	96.3	124.9	116.5	96.3	157.0
MnO	8.2	6.4	6.3	6.8	11.0
V ₂ O ₅	224.1	2.0	164.0	52.0	6091.0
CuO	16.7	12.3	11.5	15.0	19.0
Co ₂ O ₅	1.3	4.0	2.3	2.2	1.0
NiO	13.7	18.3	16.3	15.3	8.0
ZnO	17.1	149.9	17.3	169.8	19.0
Cr ₂ O ₃	4.5	6.3	3.0	4.3	5.0
PbO	9.0	24.8	14.0	22.5	7.0

Энд орд бүрээс ирсэн 5-15 дээжийн дундажийг харуулсан бөгөөд элементийн дундаж агуулга орд бүрт өөр байгаа нь түүний гарал үүсэлтэй холбоотой нь ойлгомжтой. Шинжилгээний дүнгээс Li₂O-ын агуулга нь 8-48, Na₂O 870-1570, K₂O 960-3000, CaO 5-380, MgO 20-200, Al₂O₃ 40-3850, Fe₂O₃ 50-180, MnO 15 хүртэл, V₂O₅ 5-490, CuO 5-40, NiO 8-30, PbO 30 г/т хүртэл мужид хэлбэлзэж байв.

IV. ДҮГНЭЛТ

Энэхүү туршилтаар цахилгаан халаагч атомчлагчтай хувилбарыг ашиглан бага буюу маш бага (10⁻⁵%-оос доош) агуулгатай элементийг тодорхойлох шинжилгээний ажлын аргачлалын тохиромжтой нөхцлийг туршлагаар сонгон тогтоож, боловсруулсан аргыг хэрэглэн алтны агуулагатай стандарт, Эрдэнэтийн зэсийн баяжмалын дээжүүдэд Ag, Au; хөрсний дээжинд Mo; болорын дээжинд V, Cu, Al, Pb зэрэг элементүүдийг тодорхойлов.

АШИГЛАСАН НОМЗҮЙ

1. М.Э.Брицке, Атом-абсорбционный спектрохимический анализ. М. Химия. 1982
2. "Analytical Memhods for Gmomic Absorption Spectrophotometry". 1982
3. З.Цэвээн, Ү.Чулуунбат, Т.Батбаяр, Б.Палам, А.Рийжээ, Зарим элемент тодорхойлох атомын шингээлтийн спектрийн аргын метрологийн үнэлгээ, ШУА, ФТХ-ийн бүтээл, № 23, 1984,
4. Ж.Лосолмаа, Ү.Чулуунбат, Т.Батбаяр, М.Баяр, Д.Доржготов, Туул-Овоотын орчинд тархсан голлох хэв шинжийн хөрсний микроэлемент ШУА, ФТХ-ийн бүтээл, № 29, 1990,
5. Ж.Лосолмаа, З.Цэвээн, Ү.Чулуунбат, Б.Палам, А.Рийжээ, Применение атомно-абсорбционного и эмиссионного методов анализа к определению микроэлементов в почвах, ШУА, ФТХ-ийн бүтээл, № 24, 1985,

Цөмийн потенциал саадыг (n, α) урвалаас гарах альфа-бөөм нэвтрэх факторын тооцоо

Т.Дэлгэрсайхан, Г.Хүүхэнхүү*, М.Одсүрэн, Ж.Мөнхсайхан

Монгол Улс, Улаанбаатар-210646, Монгол Улсын Их Сургууль, Цөмийн Судалгааны Төв

*Э- шуудан g_khuukhenkhuu@yahoo.com

I. ОРШИЛ

Альфа задралын үед цөмөөс гарч буй альфа-бөөмийн энерги E_α охин цөмийнхөө потенциал энерги V -ээс бага ($E_\alpha < V$) байдаг. Сонгодог физикийн энерги хадгалагдах хууль болон цахилгаан соронзон харилцан үйлчлэлийн онолын үүднээс авч үзэхэд альфа-бөөм хэрхэн яаж охин цөмийнхөө потенциал саадыг даван гарч байгаа нь ойлгомжгүй байв.

Харин 1928 онд Г.Гамов квант онолыг ашиглан энэ үзэгдлийг тайлбарласнаар [1,2] альфа-бөөм цөмийн потенциал саадыг нэвтрэх фактор буюу нэвтрэлтийн коэффициент гэдэг ойлголт буй болжээ. Үүнээс хойш эрдэмтэд цөмийн потенциал саадыг альфа-бөөм нэвтрэх факторыг ердийн альфа задрал болон (n, α) урвалаас гарах альфа бөөмийн хувьд тооцоолж, судалгаандаа хэрэглэж ирсэн байна [3-5].

Гэвч эдгээр судалгааны ажил нэлээд дээр үед хийгдсэн учир орчин үеийн өгөгдлүүдээр шинэчлэн баяжуулж, дахин тооцоолох шаардлага зүй ёсоор гарч байна. Нөгөө талаас, 1966 онд

А.Ф.Дадакинагийн гүйцэтгэсэн [5] ажлаас өөр, байгальд тогтвортой оршдог изотопуудыг нийтэд нь хамарсан системтэй тооцоо судалгаа бараг алга.

Иймээс бид сүүлийн үеийн өгөгдлүүдийг [6-9] ашиглан, удаан нейтроноор явагдах, экзотермик (n, α) урвалаас үүсэн гарах альфа-бөөмийн нэвтрэлтийн коэффициентийг байгаль дээр тогтвортой оршдог хэт хөнгөн биш ихэнх изотопуудын хувьд тооцоолох зорилго тавьсан юм. Энэ тооцооны үр дүнг цаашид удаан нейтроноор явагдах (n, α) урвалын огтлолыг үнэлэхэд ашиглаж болохоос гадна цөмийн потенциал саадыг альфа-бөөм нэвтрэх фактор цөмийнхөө ерөнхий шинж чанараас хэрхэн хамаарч байгаад систематик анализ хийхэд хэрэглэх боломжтой.

II. ОНОЛЫН ҮНДЭС

Квант механикт үндэслэгдсэн Гамовын онолд альфа-бөөм долгионлог чанартай учраас цөмийн потенциал саадыг нэвтрэн гарах боломжтой гэж үздэг. Нэвтрэлтийн коэффициент буюу факторыг дараах томьёогоор илэрхийлдэг [4]:

$$P_\alpha = \exp -2 \int_{R_i}^{R_o} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_n(r) + V_c(r) + V_l(r) - E_\alpha)} dr \quad (1)$$

Энд: m – альфа бөөмийн эмхэтгэсэн масс; $V_n(r)$ – цөмийн буюу хүчтэй харилцан үйлчлэлийн потенциал; $V_c(r)$ – Кулоны потенциал; $V_l(r)$ – орбиталь моментын буюу төвөөс зугтах потенциал, E_α – альфа-бөөмийн кинетик энерги; R_i – дотоод классик эргэлтийн радиус, R_o – гадаад классик эргэлтийн радиус. (1) томьёон дахь Кулоны ба төвөөс зугтах потенциалууд:

$$V_c(r) = \frac{2Ze^2}{r} \quad (2)$$

$$V_l(r) = \frac{\hbar^2}{2mr^2} l(l+1) \quad (3)$$

гэж тодорхойлогдоно.

Энд: Z – охин цөм дэх протоны тоо; e – протоны цахилгаан цэнэг; l – альфа-бөөмийн орбиталь момент.

Цөмийн хүчтэй харилцан үйлчлэлийн оронг голдуу Вүүдс-Саксоны потенциал [10] хэлбэртэй авдаг:

$$V_n(r) = -\frac{V_0}{1 + \exp\left(\frac{r - R_n}{a}\right)} \quad (4)$$

Энд: V_0 – потенциал нүхний гүн; R_n – охин цөмийн радиустай ойролцоо хэмжигдэхүүн; a – тухайн цөмийн гадаргуугийн диффузийн зузаан.

Гэвч альфа-бөөмийн хувьд цөмийн оронг Игогийн потенциал хэлбэртэй [11] авбал туршлагын үр дүнтэй илүү сайн тохирдог байна. Нөгөө талаас, бид тооцооны үр дүнгээ харьцуулж үзэхийн тулд Дадакинагийн сонгосонтой адилаар Игогийн потенциалыг ашиглах нь зүйтэй гэж үзэв:

$$P_{\alpha} = \exp \left[-2 \int_{R_i}^{R_o} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left(-1100 \exp \frac{1.17A^{1/3}-r}{0.574} + \frac{2Ze^2}{r} - E_{\alpha} \right)} dr \right] \quad (6)$$

(6) томьёоны гадаад классик эргэлтийн радиусыг

$$E_{\alpha} = \frac{2Ze^2}{R_o}$$

нөхцлөөс (1-р зураг) шууд

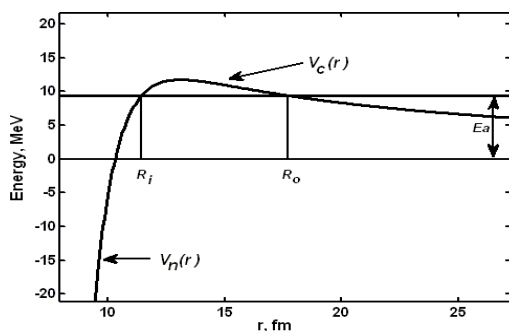
$$R_o = \frac{2Ze^2}{E_{\alpha}} \quad (7)$$

гэж олж болно.

Харин дотоод классик эргэлтийн радиусыг 1-р зургаас гарах

$$E_{\alpha} = -1100 \exp \frac{1.17A^{1/3}-R_i}{0.574} + \frac{2Ze^2}{R_i} \quad (8)$$

тэгшитгэлээс олно.



1-р зураг. ^{140}Ce -цөмийн потенциал орон

III. ТООЦООНЫ АРГА ЗҮЙ

Цөмийн потенциал оронг альфа-бөөм нэвтрэх факторыг тооцох аргыг бүх цөмийн хувьд ижил байлгахад гадна тооцооны явц ойлгомжтой, эцсийн үр дүнг эмх цэгцтэй болгохын тулд бид эхлээд уг тооцоонд шаардлагатай бүх өгөгдлүүдээ бүрдүүлж, дараа нь (6) томьёог ашиглан нэвтрэлтийн факторыг тооцоолох гэсэн хоёр үе шаттайгаар энэ ажлыг гүйцэтгэв. Эхний шатанд (6) томьёонд шаардлагатай өгөгдлүүдийг эмхэтгэж, гадаад ба дотоод классик эргэлтийн радиусыг (7) ба (8) томьёонуудыг ашиглан тодорхойлж, эдгээр мэдээллийг агуулсан файлууд үүсгэв. Гэхдээ дотоод классик эргэлтийн

$$V_n(r) = -1100 \exp \frac{1.17A^{1/3}-r}{0.574} \text{ МэВ} \quad (5)$$

Энд: A - охин цөмийн масс тоо.

Тооцоог хялбар болгохын тулд альфа-бөөмийн орбиталь момент $l=0$ гэвэл (3) ёсоор төвөөс зугтах потенциал байхгүй болно. Тэгвэл (1) томьёонд (2) ба (5) илэрхийллийг орлуулахад цөмийн потенциал саадыг альфа-бөөм нэвтрэх фактор дараах илэрхийллээр тодорхойлогдоно:

радиусыг (8) томьёоноос шууд олоход бэрхшээлтэй учир нэг хувьсагчийн тасралтгүй функцийн шийдийг дараалан дөхөх аргаар олдог Matlab программын “fzero” команд ашиглав.

Тооцооны хоёр дахь шатанд (6) томьёоны интегралыг хэрхэн бодсон байдлыг ^{143}Nd бай-цөмийн жишээн дээр авч үзье. Эхлээд (6) томьёоны интегралыг агуулсан функцийн fNd143.m гэсэн файлыг тухайн цөмийн хувьд бичнэ:

```
Function y = fNd143(x)
Ea=9.45;
A=140;
Ro=17.66;
Vpot=-1100.*exp((1.17*A.^(1/3)-x)/0.574);
y=sqrt(Vpot/Ea+b./x-1);
```

Дараа нь Симпсоны аргын адаптацлагдсан хувилбарыг [12] ашиглан fNd143.m нэртэй файл дахь функцийн интегралыг (R_i, R_o) завсарт бодуулна.

```
Q=quad(@fNd143,Ri,Ro)
```

Ийм байдлаар бүх цөмд харгалзах интегралуудыг тус тус бодсоны дараа (6) томьёогоор нэвтрэлтийн факторыг 135 бай-цөмийн хувьд тооцоолж олсоноо Дадакинагийн үр дүнтэй хамт 1 ба 2-р хавсралтан дахь хүснэгтэнд нэгтгэв.

IV. ҮР ДҮН БА ХЭЛЭЛЦҮҮЛЭГ

Хавсралтанд өгөгдсөн хүснэгтийн E_{α} -ийг олохдоо бай-цөм дээр тусч буй нейтроны энергийг бага гээд тооцоонд оруулаагүй бөгөөд зөвхөн тийрэгдсэн охин цөмийн кинетик

энергийг урвалын энерги Q_{α} –аас хасав. Q_{α} –ийн утгуудыг [6-9] ажлуудаас авав. P_{α} –ийн утгыг өгөхдөө өмнөх коэффициентийг зуутын оронгийн нарийвчлалтай авч, үржих арвын зэргийг хаалтанд бичив.

Бидний олсон P_{α} –ийн утгууд Дадакинагийн үр дүнгээс нэлээд олон цөмийн хувьд ихээхэн зөрж байгаа нь тооцоонд ашигласан Q_{α} –ийн утгууд мэдэгдэхүйц ялгаатай байгаатай (1-р хавсралтыг үз) холбоотой гэж үзэж болохоор байна. Тухайлбал, P_{α} –ийн утгууд 10^3 – 10^9 дахин зөрж буй ^{72}Ge , ^{75}As , ^{78}Se , ^{81}Br , ^{85}Rb , ^{90}Zr , ^{100}Mo , ^{102}Ru , ^{106}Pd , ^{108}Pd , ^{114}Cd , ^{120}Sn , ^{154}Sm , ^{159}Tb , ^{163}Dy , ^{186}W , ^{189}Os зэрэг бай-цөмүүдийн хувьд, [5] ажилд өгөгдсөн Q_{α} –ийн утгуудыг тооцоондоо ашиглавал гарах үр дүнгүүд нь Дадакинагийнхтай ойролцоо болж байв (2-р хавсралтыг үз). Иймээс Q_{α} –ийн орчин үеийн өгөгдлүүдийг ашиглан бидний гаргасан үр дүнгүүд ерөнхийдөө зөв гэж үзэх үндэслэлтэй байна. Харин ^{79}Br , ^{112}Cd , ^{127}I , ^{204}Hg , ^{208}Pb гэсэн таван цөмийн хувьд [5] ажил дахь Q_{α} –ийн утгыг авсан ч уг зөрүү үндсэндээ хэвээрээ (10^3 – 10^{16} дахин) байна.

Иймээс [5] ажил дахь ^{79}Br , ^{112}Cd , ^{127}I , ^{204}Hg , ^{208}Pb бай-цөмүүдийн хувьд олсон нэвтрэлтийн факторын утгуудыг ташаарсан гэж үзэхээс өөр аргагүй болж байна.

Түүнээс гадна Дадакина тооцоондоо альфа бөөмийн орбиталь момент l -ийг оруулж тооцсон бол бид түүний үзүүлэх нөлөөг бага гээд орхисныг тэмдэглэх хэрэгтэй. Үнэхээр l -ийн

нөлөөнөөс болж нэвтрэлтийн факторт гарах өөрчлөлт нэг эрэмбийн дотор байгаа юм.

V. ДҮГНЭЛТ

1. Q_{α} –ийн орчин үеийн өгөгдлүүдийг ашиглан удаан нейтроноор явагдах (n, α) урвалаас үүсэн гарч буй альфа-бөөм цөмийн потенциал саадыг нэвтрэх факторыг тогтвортой 135 изотоп дээр тооцоолон олов.

2. Тооцоогоор гарган авсан нэвтрэлтийн факторын утгуудаа Дадакинагийн өгөгдлүүдтэй харьцуулж, нэлээд цөмийн хувьд [5] ажилд байгаагаас бидний үр дүн ихээхэн зөрүүтэй байгаа нь тооцоонд ашиглагдсан Q_{α} ялгаатай байгаатай холбоотой гэдгийг харуулав.

3. ^{79}Br , ^{112}Cd , ^{127}I , ^{204}Hg , ^{208}Pb бай-цөмүүдийн хувьд [5] ажилд байгаа Q_{α} –ийн утгыг ашигласан ч нэвтрэлтийн факторууд нь Дадакинагийн үр дүнгээс 10^3 – 10^{16} дахин зөрж байна. Энэ нь дээрх 5 цөмийн хувьд [5] ажилд гарган авсан P_{α} –ийн утгуудыг ташаарсан гэж үзэхэд хүргэж байна.

4. Цаашид цөмийн потенциалын төвөөс зугтах гишүүнийг оролцуулан нэвтрэлтийн факторын тооцоо хийвэл гарах үр дүн нь улам нарийвчлал сайтай байх болно.

ХАВСРАЛТ

1-р хүснэгт.

Бай-цөмийн өгөгдлүүд ба нэвтрэлтийн факторын утгууд

№	Z	Бай- цөм	Тархалт, %	Q(n, α), МэВ		E _α , МэВ	P _α [Бидний утга]	P _α [5]
				[5]	[6, 7, 8, 9]			
1	22	Ti-47	7.4	2.169	2.184	2.00	1.58(-9)	8.52(-10)
2		Ti-49	5.4	0.223	0.227	0.21	5.8(-58)	7.83(-57)
3	24	Cr-53	9.50	1.791	1.789	1.66	1.67(-13)	1.19(-12)
4	26	Fe-54	5.8	0.835	0.844	0.78	3.96(-29)	5.78(-29)
5		Fe-56	91.8	0.319	0.326	0.30	5.49(-56)	9.87(-55)
6	27	Co-59	100	0.314	0.328	0.31	5.52(-59)	1.79(-58)
7	28	Ni-58	68.3	2.888	2.899	2.70	2.30(-14)	4.69(-13)
8		Ni-60	25.1	1.351	1.355	1.27	6.13(-22)	6.19(-21)
9	29	Cu-63	69.2	1.72	1.715	1.61	1.31(-18)	1.86(-18)
10	30	Zn-66	27.9	2.28	2.261	2.13	7.07(-15)	4.86(-14)
11		Zn-68	18.8	0.32	0.765	0.72	2.00(-37)	4.45(-35)
12	31	Ga-69	60.1	2.67	2.580	2.44	1.54(-13)	2.38(-12)
13	32	Ge-70	20.5	2.97	2.964	2.80	3.24(-12)	2.73(-12)

14		Ge-72	27.4	1.07	1.480	1.40	3.09(-24)	2.38(-29)
15		Ge-73	7.8	3.79	3.912	3.70	1.85(-8)	3.21(-10)
16	33	As-75	100	1.5	1.205	1.14	5.8(-30)	2.79(-24)
17	34	Se-77	7.6	4.5	4.468	4.24	8.56(-8)	3.21(-7)
18		Se-78	23.5	0.53	0.476	0.45	2.4(-60)	1.05(-54)
19	35	Br-79	50.69	1.86	1.867	1.77	2.62(-22)	5.99(-9)
20		Br-81	49.31	0.62	0.485	0.46	1.03(-61)	5.27(-51)
21	36	Kr-82	11.6	0.95	0.974	0.93	1.85(-39)	3.38(-40)
22		Kr-83	11.5	3.428	3.425	3.26	2.65(-12)	9.87(-12)
23	37	Rb-85	72.17	0.900	0.981	0.94	1.54(-40)	2.84(-43)
24	38	Sr-86	9.8	1.108	1.112	1.06	6.67(-39)	1.71(-38)
25		Sr-87	7.0	3.204	3.203	3.06	1.50(-14)	9.46(-16)
26	40	Zr-90	51.5	1.396	1.751	1.67	2.46(-28)	1.94(-34)
27		Zr-91	11.2	5.306	5.670	5.42	2.79(-7)	6.37(-8)
28		Zr-92	17.1	3.396	3.400	3.25	1.06(-14)	1.96(-14)
29		Zr-94	17.4	2.256	2.039	1.95	1.24(-24)	5.09(-22)
30	42	Mo-92	14.8	3.606	3.707	3.55	1.64(-14)	1.60(-15)
31		Mo-94	9.3	5.176	5.126	4.91	1.97(-9)	4.30(-9)
32		Mo-95	15.9	6.696	6.394	6.13	1.58(-6)	7.93(-6)
33		Mo-96	16.7	4.226	3.974	3.81	3.12(-13)	5.35(-12)
34		Mo-97	9.6	5.286	5.372	5.15	1.06(-8)	1.00(-8)
35		Mo-98	24.1	3.406	3.193	3.06	4.42(-17)	1.65(-15)
36		Mo-100	9.6	2.756	2.411	2.32	1.44(-22)	5.07(-19)
37	44	Ru-96	5.5	6.606	6.379	6.12	2.52(-7)	2.14(-6)
38		Ru-99	12.7	7.066	6.820	6.55	2.11(-6)	7.93(-6)
39		Ru-101	17.0	5.802	5.809	5.58	2.02(-8)	3.01(-8)
40		Ru-102	31.6	1.766	2.514	2.42	3.19(-23)	9.82(-31)
41		Ru-104	18.7	1.061	1.062	1.02	2.72(-47)	1.49(-46)
42	46	Pd-104	11.0	4.188	4.200	4.04	2.68(-14)	3.77(-14)
43		Pd-105	22.2	6.506	6.327	6.09	5.3(-8)	1.90(-7)
44		Pd-106	27.3	3.406	2.997	2.88	6.78(-21)	6.87(-18)
45		Pd-108	27.3	2.506	2.061	1.99	1.1(-29)	5.80(-24)
46		Pd-110	11.8	1.018	1.020	0.98	2.37(-51)	2.66(-50)
47	47	Ag-107	51.83	4.526	4.193	4.04	6.8(-15)	4.70(-13)
48		Ag-109	48.17	3.516	3.296	3.18	1.78(-19)	1.36(-17)
49	48	Cd-110	12.5	3.746	3.670	3.54	6.32(-18)	3.25(-17)
50		Cd-111	12.8	5.856	5.914	5.70	1.21(-9)	2.83(-9)
51		Cd-112	24.1	2.796	2.669	2.57	9.95(-25)	1.14(-7)
52		Cd-114	28.7	1.856	1.640	1.58	5.17(-38)	1.25(-33)
53	49	In-115	95.7	2.746	2.735	2.64	6.98(-25)	9.95(-25)
54	50	Sn-116	14.8	3.316	3.175	3.07	3.62(-22)	1.65(-20)
55		Sn-117	7.75	5.176	5.273	5.10	3.14(-12)	5.52(-12)
56		Sn-118	24.3	2.086	2.087	2.02	1.09(-32)	8.85(-32)
57		Sn-119	8.6	4.136	4.302	4.16	8.4(-16)	6.20(-16)
58		Sn-120	32.4	0.766	0.962	0.93	2.38(-58)	4.72(-68)
59	51	Sb-121	57.3	3.352	3.510	3.40	1.67(-20)	3.73(-21)
60		Sb-123	42.	2.122	2.230	2.16	1.33(-31)	1.75(-32)
61	52	Te-125	7.0	6.586	6.567	6.36	2.06(-9)	6.70(-9)
62		Te-126	18.7	3.381	3.399	3.29	1.0(-21)	1.52(-21)
63		Te-128	31.7	2.816	2.552	2.47	1.18(-28)	8.63(-26)

64		Te-130	34.5	1.909	1.803	1.75	1.13(-38)	4.85(-36)
65	53	I-127	100	4.216	4.282	4.15	2.04(-17)	3.62(-14)
66	54	Xe-129	26.4	7.083	7.016	6.80	4.25(-9)	1.65(-8)
67		Xe-131	21.2	6.000	6.214	6.03	5.56(-11)	2.29(-11)
68		Xe-132	26.9	3.398	3.364	3.26	3.58(-23)	1.23(-22)
69		Xe-134	10.4	2.686	2.728	2.65	2.37(-28)	2.08(-28)
70	55	Cs-133	100	4.164	4.451	4.32	1.33(-17)	1.03(-18)
71	56	Ba-135	6.59	6.963	7.063	6.35	2.64(-9)	1.08(-9)
72		Ba-136	7.85	4.536	4.403	4.27	2.55(-18)	1.88(-17)
73		Ba-137	11.2	5.802	6.035	4.27	1.59(-10)	1.06(-12)
74	57	La-139	99.911	4.656	4.769	4.63	4.1(-17)	4.53(-17)
75	58	Ce-140	88.5	5.386	5.294	5.14	1.62(-15)	5.62(-15)
76		Ce-142	11.1	6.036	6.033	5.86	5.45(-13)	4.29(-13)
77	59	Pr-141	100	6.185	6.151	5.98	4.1(-13)	1.59(-12)
78	60	Nd-142	27.2	6.697	6.660	6.47	4.46(-12)	8.24(-12)
79		Nd-143	12.2	9.689	9.724	9.45	4.04(-6)	2.78(-6)
80		Nd-144	23.8	7.405	7.335	7.13	2.24(-10)	2.49(-10)
81		Nd-145	8.3	8.555	8.747	8.51	1.43(-7)	5.09(-8)
82		Nd-146	17.2	6.121	6.327	6.16	6.6(-13)	4.62(-13)
83	62	Sm-147	15.1	10.041	10.128	9.86	4.67(-6)	2.74(-6)
84		Sm-148	11.3	7.886	7.742	7.53	3.93(-10)	6.08(-10)
85		Sm-149	13.9	9.606	9.435	9.18	5.38(-7)	7.15(-7)
86		Sm-150	7.4	6.746	6.742	6.56	1.63(-12)	1.32(-12)
87		Sm-152	26.6	5.186	5.259	5.12	2.25(-17)	3.48(-17)
88		Sm-154	22.6	3.276	4.137	4.03	1.06(-22)	2.22(-28)
89	63	Eu-151	47.9	7.897	7.857	7.65	3.5(-10)	9.03(-10)
90		Eu-153	52.1	5.296	5.875	5.72	1.53(-15)	2.70(-17)
91	64	Gd-155	14.8	8.136	8.338	8.12	1.83(-9)	1.51(-9)
92		Gd-156	20.6	5.714	5.669	5.53	1.07(-16)	2.74(-14)
93		Gd-157	15.7	7.856	7.277	7.10	8.82(-12)	4.26(-10)
94	65	Tb-159	100	5.036	6.197	6.04	3.51(-15)	1.72(-19)
95	66	Dy-161	19.0	7.156	8.283	8.07	3.74(-10)	1.29(-12)
96		Dy-162	25.5	6.046	6.029	5.88	3.38(-16)	8.96(-16)
97		Dy-163	24.9	5.966	7.210	7.03	1.26(-12)	1.89(-16)
98		Dy-164	28.1	5.146	5.187	5.06	1.84(-19)	1.03(-19)
99	68	Er-166	33.4	7.346	7.102	6.93	1.19(-13)	4.55(-13)
100		Er-167	22.9	8.446	8.324	8.13	1.18(-10)	1.73(-10)
101		Er-168	27.1	6.146	6.269	6.12	3.69(-16)	5.21(-17)
102	70	Yb-171	14.4	9.867	9.331	9.11	2.86(-9)	6.54(-9)
103		Yb-172	21.9	7.332	7.314	7.15	9.55(-14)	2.23(-13)
104		Yb-173	16.2	8.246	8.205	8.02	1.64(-11)	3.87(-11)
105		Yb-174	31.6	6.472	6.422	6.27	2.12(-16)	2.52(-16)
106	71	Lu-175	97.39	7.757	7.857	7.68	1.14(-12)	1.38(-12)
107	72	Hf-176	5.2	8.828	8.625	8.43	3.08(-11)	1.88(-10)
108		Hf-177	18.6	9.938	9.706	9.48	3.97(-9)	1.93(-8)
109		Hf-178	27.1	8.163	7.903	7.72	6.81(-13)	2.47(-12)
110		Hf-179	13.7	8.909	8.672	8.48	4.42(-11)	2.29(-11)
111	73	Ta-181	99.99	7.236	7.537	7.37	3.97(-14)	8.15(-15)
112	74	W-182	26.3	7.556	7.872	7.70	1.25(-13)	7.23(-15)
113		W-183	14.3	8.786	9.069	8.87	7.39(-11)	3.81(-11)

114		W-184	30.7	7.396	7.353	7.19	5.37(-15)	1.54(-14)
115		W-186	28.6	5.056	6.420	6.28	5.27(-18)	2.44(-23)
116	75	Re-185	37.4	7.276	8.257	8.08	5.59(-13)	2.88(-15)
117		Re-187	62.60	7.375	7.267	7.11	1.41(-15)	7.38(-15)
118	76	Os-188	13.3	8.034	7.895	7.73	3.29(-14)	1.58(-13)
119		Os-189	16.1	11.096	9.168	8.97	3.34(-11)	1.39(-7)
120		Os-190	26.4	6.606	6.842	6.70	2.67(-17)	9.42(-18)
121	77	Ir-191	37.3	8.106	7.955	7.79	2.27(-14)	1.39(-13)
122		Ir-193	62.7	6.632	6.640	6.50	2.3(-18)	4.92(-18)
123	78	Pt-198	7.2	5.541	5.420	5.31	7.58(-24)	8.75(-23)
124	79	Au-197	100	7.251	7.020	6.88	7.6(-18)	9.42(-17)
125	80	Hg-198	10.0	7.793	7.489	7.34	9.63(-17)	1.63(-15)
126		Hg-199	16.8	9.029	8.746	8.57	2.39(-13)	2.18(-12)
127		Hg-200	23.1	6.565	6.564	6.43	7.73(-20)	1.79(-19)
128		Hg-201	13.2	8.236	7.890	7.73	1.66(-15)	2.97(-14)
129		Hg-202	29.8	5.620	5.706	5.59	1.9(-23)	7.83(-24)
130		Hg-204	6.9	4.457	4.680	4.60	5.1(-29)	1.53(-25)
131	81	Tl-203	29.5	7.064	7.180	7.04	4.88(-18)	4.41(-18)
132		Tl-205	70.5	5.949	6.170	6.05	9.11(-22)	2.88(-22)
133	82	Pb-207	22.1	7.896	7.886	7.73	3.55(-16)	7.96(-16)
134		Pb-208	52.3	6.031	6.186	6.07	3.54(-22)	2.56(-16)
135	83	Bi-209	100	9.686	9.642	9.46	3.47(-12)	9.67(-12)

2-р хүснэгт

Дадакинагийн ашигласан Q_{α} -ийн утгуудыг авахад гарсан үр дүн

№	Бай-цөм	Q_{α} , МэВ [5]	P_{α} [5]	P_{α} [Бидний утга]
1	Ge-72	1.07	2.38(-29)	1.38(-31)
2	As-75	1.5	2.79(-24)	6.24(-25)
3	Se-78	0.53	1.05(-54)	2.58(-56)
4	Br-79	1.86	5.99(-9)	2.22(-22)
5	Br-81	0.62	5.27(-51)	1.13(-52)
6	Rb-85	0.900	2.84(-43)	3.50(-43)
7	Zr-90	1.396	1.94(-34)	3.62(-34)
8	Mo-100	2.756	5.07(-19)	9.29(-20)
9	Ru-102	1.766	9.82(-31)	7.86(-32)
10	Pd-106	3.406	6.87(-18)	3.27(-18)
11	Pd-108	2.506	5.80(-24)	9.56(-25)
12	Cd-112	2.796	1.14(-7)	1.03(-23)
13	Cd-114	1.856	1.25(-33)	3.67(-34)
14	Sn-120	0.766	4.72(-68)	1.98(-69)
15	I-127	4.216	3.62(-14)	1.05(-17)
16	Sm-154	3.276	2.22(-28)	6.63(-29)
17	Tb-159	5.036	1.72(-19)	9.70(-20)
18	Dy-163	5.966	1.89(-16)	2.11(-16)
19	W-186	5.056	2.44(-23)	7.52(-24)
20	Os-189	11.096	1.39(-7)	7.71(-8)
21	Hg-204	4.457	1.53(-25)	1.79(-30)
22	Pb-208	6.031	2.56(-16)	8.77(-23)

АШИГЛАСАН НОМ, ХЭВЛЭЛ

1. G. Gamow. Zeitschrift fur Physik. A., v.51, N3/4, 1928, s.204
2. Г.А.Гамов. Атомное ядро и радиоактивность. Гос.изд. Москва-Ленинград. 1930
3. I. Perlman, J.O. Rasmussen. In: Handbuch der Physik, v.42, Springer-Verlag, Berlin, 1957, p.151
(И. Перлман, Дж. Расмуссен, Альфа-радиоактивность, перевод с английского, изд.ИЛ, Москва, 1959)
4. J.O. Rasmussen. Physical Review. v.113, N6, 1959, p.1593
5. А.Ф.Дадакина. Бюллетень информационного центра по ядерным данным. Вып.3, 1966, Атомиздат, с.226
6. В.М. Бычков и др. Сечения пороговых реакций, вызываемых нейтронами. Энергоиздат. Москва, 1982
7. А.Н. Wapstra, G. Audi. Nuclear Physics. A, v.432,N1, 1985, p.1
8. J.A. Holmes *et al.* Atomic Data and Nuclear Data Tables, v.18, N4, 1976, p.305
9. Report of Japan Atomic Energy Research Institute, JAERI-M, 1989, p.89
10. R.D. Woods, D.S. Saxon. Physical Review, v.95, N2, 1954, p.577
11. G. Igo. Physical Review Letters, v.1, N2, 1958, p.72
12. Adaptive Simpson's Method.
http://en.wikipedia.org/wiki/Adaptive_Simpson_method

Ураны Уурхайн Цацрагийн Аюулгүй Байдал

Н.Энхбат, Н.Норов*, Б.Отгоолой

Монгол Улс, Улаанбаатар-210646, Их сургуулийн гудамж-1,
МУИС-ийн Цөмийн Судалгааны Төв
*Э-шуудан: nnnorov@yahoo.com

Товч утга: Ураны уурхайн ажилчдын жилд авах эффектив тун нь гадаад шарлага болон урт наст байгалийн цацраг идэвхт изотопууд агуулсан үйлдвэрийн тоос, радон, түүний задралын богино наст бүтээгдэхүүнүүдээс амьсгалаар авах дотоод шарлагын нийлбэртэй тэнцүү бөгөөд ураны уурхайн цацрагийн аюулгүй байдлын үнэлгээ хийх арга зүйн асуудлыг Гурванбулаг ураны далд уурхайн жишээн дээр авч үзсэн болно.

Түлхүүр үг: Ураны далд уурхай, гамма цацраг, радон, урт наст цацраг идэвхт тоос, эффектив тунгийн чадал.

PACS: 88.75 N; 29.90.+r

I. ОРШИЛ

Цөмийн түлшний циклийн эхний үе шат болох уран олборлох үйл ажиллагааны үед ажилчдын цацрагийн аюулгүй байдлыг хангах нь чухал юм. Манай орны ураны ордуудын хүдэр дэх ураны агуулалт 0.05-0.2% байгаа нь бага буюу дунд зэргийн ангилалд хамаарагдана. Хүдрийн агуулалт ихтэй ордууд Австрали, Канад, Казахстан улсуудад байдаг. Ураны ордыг ураны биет орших гүн, түүний хэмжээ, хүдэр дэх ураны агуулалт зэрэг тухайн орд газрын онцлогоос хамааран ил, далд уурхайгаас мөн газар доор уусган баяжуулах аргаар олборлоно. Энэ өгүүлэлд ураны уурхайн ажилчдын цацрагийн аюулгүй байдлыг үнэлэх арга зүйн асуудлыг авч үзэв.

II. ЦАЦРАГИЙН ЭХ ҮҮСГҮҮР

Ураны хүдэрт байгалийн уран ^{238}U (99.275%), ^{235}U (0.72%), ^{234}U (0.005%) изотопуудтай бөгөөд эхний хоёр изотоп нь өөр өөрийн цацраг идэвхийн бүлийг үүсгэх эх цөмүүд юм. ^{235}U -ын байгалийн тархалт бага учраас түүний цацрагийн нөлөөлөл харьцангуй бага болно. ^{238}U -ын бүлийн изотопуудын задралын бүтээгдэхүүнүүдийг 1-р хүснэгтэнд үзүүлэв. Тэдгээрээс гарах цацрагийн нөлөөгөөр ураны уурхайн ажилчид гадаад, дотоод шарлага байнга авна. Гадаад шарлагын эх үүсвэр нь ураны задралын бүтээгдэхүүнээс цацрах гамма цацраг бөгөөд ажилчдын авах шарлагын тунгийн хэмжээ нь хүдэр дэх ураны агуулалттай шууд хамааралтай. Гурванбулаг ураны далд уурхайн хүдэр дэх ураны агуулалт ~0.2% байгаа нь ~10 мкЗв/цаг тунгийн чадалтай тэнцүү.

Ураны далд уурхайн ажилчдын хувьд

цацрагийн эрүүл ахуйн үүднээс хамгийн их нөлөө үзүүлэх изотопууд нь ^{226}Ra -ийн задралын бүтээгдэхүүн инертийн хий радон, түүний богино наст задралын бүтээгдэхүүнүүд (RaA , RaB , RaC , RaC') бөгөөд эдгээр нь хүний амьсгалаар орж, дотоод шарлага үүсгэнэ [1].

Хүснэгт 1. Ураны бүл

Изотоп	Нэр	Хагас задралын үе	Задрал
^{238}U	Уран I	4.47×10^9 жил	α , < 1% γ
^{234}Th	Уран X1	24.1 өдөр	β , γ
^{234}Pa	Уран X2	1.17 мин	β , < 1% γ
^{234}U	Уран II	2.44×10^5 жил	α , < 1% γ
^{230}Th	Иони	7.7×10^4 жил	α , < 1% γ
^{226}Ra	Ради	1600 өдөр	α , γ
^{222}Rn	Радон	3.8 өдөр	α , < 1% γ
^{218}Po	Ради A (RaA)	3.05 мин	α , < 1% γ
^{214}Pb	Ради B (RaB)	26.8 мин	β , γ
^{214}Bi	Ради C (RaC)	19.7 мин	β , γ
^{214}Po	Ради C' (RaC')	164 мксек	α , < 1% γ
^{210}Pb	Ради D (RaD)	22.3 жил	β , γ
^{210}Bi	Ради E (RaE)	5.01 өдөр	β , γ
^{210}Po	Ради F (RaF)	138.4 өдөр	α , < 1% γ
^{206}Pb	Ради G (RaG)	Тогтвортой	-

Мөн ураны далд уурхай дахь уулын тэсэлгээ, малталтын үед үүсэх урт наст цацраг идэвхт изотоп агуулсан тоосоор дотоод шарлага үүснэ.

III. УУРХАЙН АЖИЛЧДЫН ШАРЛАГЫН ТУНГ ҮНЭЛЭХ

Дээр дурьдсанаар цацраг идэвхт материалтай харьцан ажилладаг уурхайн ажилчдын жилд авах эффектив тунг D нь гадаад шарлага (D_γ) болон урт наст байгалийн цацраг идэвхт изотопууд $D_{урт}$ агуулсан үйлдвэрийн тоос болон радоны задралын богино наст бүтээгдэхүүнүүд D_{Rn} -ээс амьсгалаар авах дотоод шарлагын нийлбэртэй тэнцүү байна.

$$D = D_\gamma + D_{урт} + D_{Rn} \quad (1)$$

Уурхайн ажилчдын авах гадаад шарлагын тунг ажлын байранд дозиметрийн багажаар хэмжсэн цацрагийн тунгийн чадлыг ажилласан хугацаагаар үржүүлж үнэлнэ.

Гамма цацрагийн тунгийн чадлыг P дозиметрийн багажны заалтаар тодорхойлохдоо багажийн фон P_ϕ , сансарын туяаны тунгийн чадлын утга P_c -ийг хасна.

$$P_\gamma = P - P_\phi + P_c, \text{ нГр/цаг} \quad (2)$$

Гадаад шарлагаас жилд авах эффектив тунг дараах томъёогоор тооцож болно.

$$D_\gamma = 10^{-6} \cdot K \cdot \Sigma P_{\gamma i} \cdot t_i, \text{ мЗв/жил} \quad (3)$$

Энд: $P_{\gamma i}$ - i -р цэг дээрх цацрагийн тунгийн чадал, нГр/цаг; t_i - i -р цэг дээр ажилчдын ажиллах хугацаа, цаг/жил; K - гамма цацрагийн дундаж энергийн хувьд эквивалент тунгийн чадал, шингэсэн тунгийн чадлын харьцаа (Зв/Гр) бөгөөд энэ харьцаа байгалийн гамма цацраг идэвхт изотопуудын хувьд 0.7 Зв/Гр-тэй тэнцүү [5].

Уурхайн тоосонд агуулагдах урт наст байгалийн цацраг идэвхт изотопууд амьсгалын замаар (ингаляци) орсноор үүсэх ажилчдын дотоод шарлагын тунг дараах байдлаар үнэлнэ.

$$D_{урт} = 10^{-3} \cdot \Sigma A_i \cdot \varepsilon_i \cdot V \cdot f \cdot t, \text{ мЗв/жил} \quad (4)$$

Энд: A_i - уурхайн тоосон дахь i -р цацраг идэвхт изотопийн хувийн идэвх, Бк/м³; ε_i - i -р цацраг идэвхт изотоп амьсгалаар орох

тунгийн коэффициент, Зв/Бк [2]; V - амьсгалах агаарын хэмжээ, м³/цаг (дунд зэргийн ачаалалтай ажиллах үед 1.2 м³/цаг) [3]; t - уурхайн тоосжилтой нөхцөлд ажиллах хугацаа, цаг/жил; f - ажиллах хугацаа (t)-ны туршид ажилтны амьсгалах бүс дэх агаарын дундаж тоосжилт, мг/м³.

Уран, торийн бүлийн цацраг идэвхт изотопуудын хувьд тунгийн коэффициентууд нь эдгээр бүлийн гишүүн бүрийн чанарын коэффициентуудын нийлбэртэй тэнцүү. Цацраг идэвхийн тэнцвэр тогтсон үед уран, торийн бүлийн хувьд тунгийн коэффициент нь $5.2 \cdot 10^{-5}$ Зв/Бк, $7.85 \cdot 10^{-5}$ Зв/Бк байна. Ажилтны амьсгалах бүс дэх агаарын ерөнхий тоосжилтын хэмжээг 4.0 мг/м³, уурхайд жилд ажиллах хугацааг 2000 цаг гэж сонгож авсан.

Радоны богино наст цацраг идэвхт изотопууд ажилчдын амьсгалын замаар орсноор үүсэх дотоод шарлагын тунг дараах байдлаар үнэлнэ.

$$D_{Rn} = 10^{-6} \cdot 7.8 \cdot C_{эқв, Rn} \cdot t, \text{ мЗв/жил} \quad (5)$$

Энд: $C_{эқв, Rn}$ - жилд ажиллах хугацааны турш (t , цаг/жил) радоны эквивалент тэнцвэрт эзлэхүүний идэвхийн дундаж утга, Бк/м³.

Авсрали, Канад, Египит зэрэг гадаадын зарим ураны уурхайд радоны эквивалент эзлэхүүний идэвхийг ажлын түвшин (АТ) гэсэн нэгжээр илэрхийлдэг. Радон нь өөрийн задралын богино наст бүтээгдэхүүнүүдтэйгээ цацраг идэвхийн тэнцвэрт байгаа тохиолдолд 1АТ нь 3.7 кБк/м³ эзлэхүүний идэвхтэй эквивалент байдаг [3].

Гурванбулагийн ураны далд уурхайн ажлын байруудад 2007, 2009 онуудад радоны АТ-ыг тодорхойлсон дүнг улиралаар дундажлан 1-р зурагт харуулав. АНУ-ын “SKC Inc” компанийн Model 224-PCXR4 төрлийн агаар соруулагчаар 5 минут агаар соруулж, радоны задралын богино наст бүтээгдэхүүнүүд суусан шүүлтүүрийг сцинтиляцийн тоолуур бүхий “Environmental Instruments Canada Inc.” компанийн Model TM372 төрлийн альфа тоолуурт тавьж, агаар соруулж дууссанаас хойш 1 минутын дараа 6 минут хэмжсэн импульсийн тоог дараах илэрхийлэлд оруулан ажлын байрны агаар дахь радоны ажлын түвшин (АТ)-г тодорхойлов.

$$AT = \frac{N \cdot \varepsilon}{R_\phi \cdot v \cdot t \cdot \eta} \quad (6)$$

Үүнд: N - агаар соруулж дууссанаас 1 минутын дараа альфа-тоолуурт 3 минутанд бүртгэгдсэн импульсын тоо; ε - шүүлтүүрийн барих чадвар; R_ϕ - Роллын коэффициент, манай тохиолдолд 213 байна; ν - агаар соруулах хурд, л/мин; t – шүүлтүүр дээр суусан радоны задралын бүтээгдэхүүнээс гарах альфа бөөмийг тоолох хугацаа, 3 мин; η - альфа тоолуурын бүртгэх чадамж.

Гурванбулаг ураны далд уурхайн ажлын байруудад тодорхойлсон радоны дундаж ажлын түвшин (AT), радоноос ажилчдын авах

дотоод шарлагын тун (D_γ)-г 3-р хүснэгтэнд үзүүлэв.

4-р хүснэгтэнд тус уурхайн ажлын байруудад тодорхойлсон урт наст байгалийн цацраг идэвхт изотопын хувийн идэвх (A_i), урт наст цацраг идэвхт тоосжилтоос ажилчдын авах дотоод шарлагын тун (D_γ)-г үзүүлэв. 2-р хүснэгтэнд Гурванбулаг ураны уурхайн ажлын байранд хэмжсэн гамма цацрагийн шингэсэн тунгийн чадал болон илэрхийлэл [3]-аар тооцоолсон гадаад шарлагын эффектив тунгийн чадлыг үзүүлэв.

Хүснэгт 2. Гурванбулаг ураны уурхайн ажлын байранд хэмжсэн гамма цацрагийн шингэсэн тунгийн чадал (P_γ), тооцоолсон гадаад шарлагын эффектив тунгийн чадал (D_γ).

Байршил	P_γ , нГр/цаг	t_i , цаг	D_γ , мЗв/жил
Хатаалгын байр	170	2000	0.24
Геологичдын байр	147	2000	0.21
Дээжтэй ажиллах байр	185	2000	0.26
Далд уурхайд	310	2000	0.43
Уурхайн талбайн орчим	196	2000	0.27
Уурхайн гол амны орчим	210	1500	0.22
Дээжтэй ажиллах байрны гадна талбай	268	2000	0.37
Эмээлт майнз кемп	251	1500	0.26
Дундаж	217	1857	0.28

Хүснэгт 3. Гурванбулаг ураны уурхайн ажлын байруудад тодорхойлсон радоны дундаж ажлын түвшин (AT), радоноос ажилчдын авах дотоод шарлагын тун (D_{Rn}).

Байршил	$C_{экв.Rn}$, АТ	D_{Rn} , мЗв/жил
Дээж хадгалах байр	0.052	0.0008
Хатаалгын байр	0.008	0.0001
Геологичдын байр	0.016	0.0002
Дээжтэй ажиллах байр	0.069	0.0011
Далд уурхай	0.193	0.0030
Дундаж	0.068	0.0011

Хүснэгт 4. Уурхайн тоосонд агуулагдах урт наст байгалийн цацраг идэвхт изотопын дундаж хувийн идэвх (A_i), цацраг идэвхт тоосжилтоос ажилчдын авах дотоод шарлагын тун ($D_{урт}$).

Байршил	A_i , Бк/м ³	$D_{урт}$, мЗв/жил
Дээж хадгалах байр	0.014	$1.7 \cdot 10^{-5}$
Хатаалгын байр	0.010	$1.2 \cdot 10^{-5}$
Геологичдын байр	0.007	$8.1 \cdot 10^{-6}$
Дээжтэй ажиллах байр	0.038	$4.7 \cdot 10^{-5}$
Далд уурхай	0.521	$6.5 \cdot 10^{-4}$
Дундаж	0.118	$1.7 \cdot 10^{-5}$

IV. ЦАЦРАГИЙН ХАМГААЛАЛТ

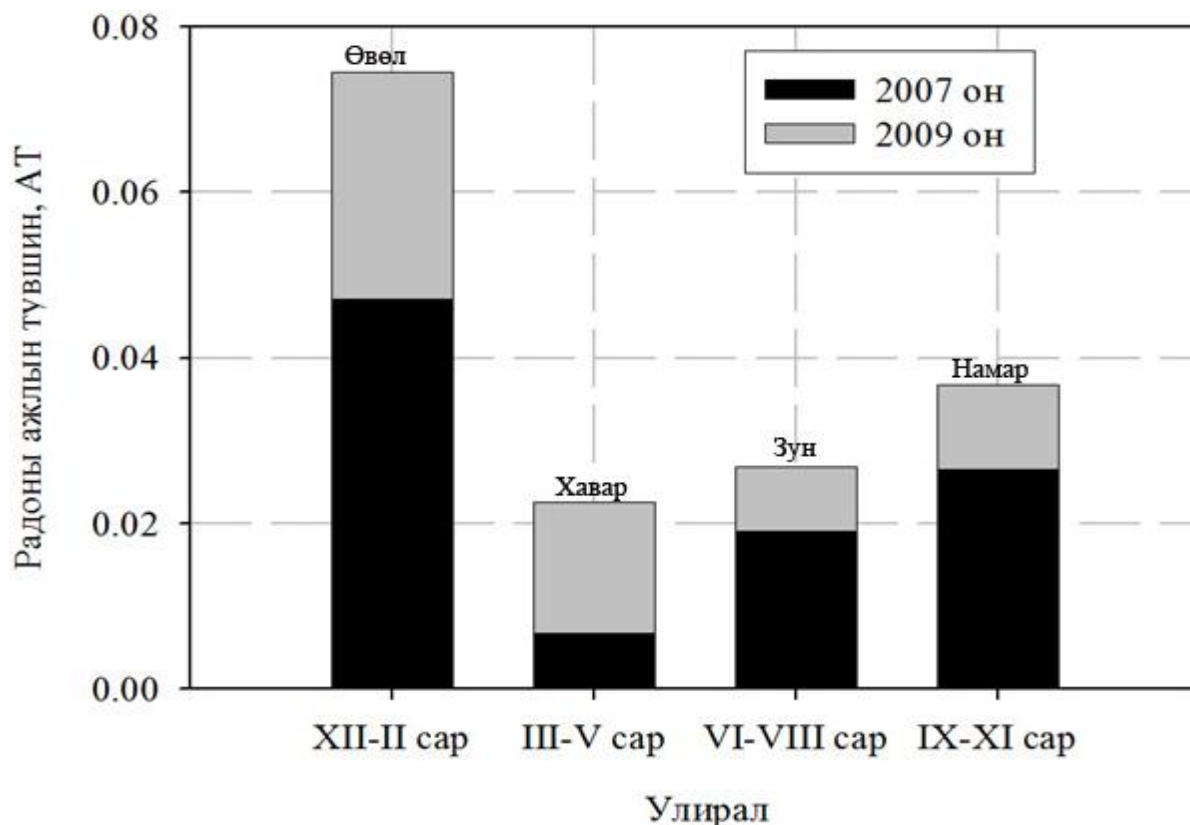
Ураны олборлох, боловсруулах үед хайгуулын болон үйлдвэрийн ажилчид, хүн амын цацрагийн шарлагын детримент нөлөөлөлөөс хамгаалахын тулд Олон Улсын Цацрагийн Хамгаалалтын Комисс (ОУЦХК)-оос гаргасан цацрагийн тунг хязгаарлах системийг ашигладаг. Цацрагийн хамгаалалтын үндсэн зорилго нь цацрагийн шарлагийг аль болох доод хэмжээнд байлгах (ALARA)-ын тулд эдийн засгийн болон нийгмийн хүчин зүйлсийг тооцдог. Аливаа ураны хүдэр олборлох, боловсруулах үйл ажиллагаа нь ALARA зарчмын хувьд оновчтой байх ёстой. ОУЦХК-оос зөвлөсөн цацрагийн тунг хязгаарлах системийн үндсэн гурван зарчмыг баримталдаг.

Үүнд:

1. Үндэслэлгүйгээр цацрагийн шарлага үүсгэхгүй байх. Цацрагтай холбогдолтой аливаа үйл ажиллагаа нь эерэг, ашигтай, үндэслэлтэй байх;
2. Оновчло.: Эдийн засгийн болон нийгмийн хүчин зүйлийг онцгойлон анхаарч, цөмийн цацрагийн шарлагын хэмжээг аль болох зохистой хамгийн бага байлгах;
3. Тунгийн хязгаарлалт. Хувь хүний авах цацрагийн тунгийн хэмжээг тухайн нөхцөл байдалд нь зориулан тогтоосон тунгийн хязгаараас хэтрүүлэхгүй байх ёстой.

Цацрагийн хамгаалалтын үндэсний стандартыг боловсруулахдаа мэргэжлийн болон нийт хүн амын авах цацрагийн тунгийн

хязгаарлалтанд ОУЦХК-оос гаргасан
зөвлөмжүүдийг үндэс болгоно.



Зураг 1. Гурванбулагийн ураны далд уурхайн ажлын байруудад 2007, 2009 онуудад хийсэн радоны ажлын түвшин (АТ)-ий дундаж утгын улиралын хамаарал.

А. Тунг хязгаарлах систем

ОУЦХК-ын зөвлөмжийн дагуу цацрагийн тунгийн зөвшөөрөгдөх хэмжээ нь мэргэжлийн шарлагын хувьд дараалсан дурын таван жилд дунджаар нэг жилд 20 миллизиверт (5 жилд 100 мЗв), гэхдээ нэг жилд хамгийн их хэмжээ нь 50 мЗв байна. Харин хүн амын шарлагын нэмэлт тунгийн зөвшөөрөгдөх хэмжээ таван жилийн дундажаар нэг жилд 1 мЗв байна. Энэхүү хоёр ангилалд хамаарах тунгийн утгууд байгалийн цацрагийн дэвсгэр түвшин дээр нэмж авах тунгийн хэмжээ гэж ойлгох бөгөөд үүнд эмнэлэгийн шарлага тооцогдоогүй болно [2, 3, 4].

В. Цацрагийн шарлагыг багасгах арга хэмжээ

Ураны уурхайн ажлын байрны гадаад шарлагын хэмжээ хүдэр дэх ураны агуулалтаас хамаарах учраас уурхай дахь гамма цацрагаар үүсэх цацрагийн тунгийн чадлыг хянах шаардлагатай. Гэвч бага агуулалттай ураны уурхайн хувьд гамма цацрагийн тунгийн чадал харьцангуй бага

байна. Харин хүдэр дэх ураны агуулалт их байх тохиолдолд уурхайд ажиллагчдын авах гадаад шарлагын хэмжээг бага байлгахын тулд уурхайд зориулалтын хувийн хамгаалах хэрэгсэл хэрэглэх, ажлын ээлжийн цагийн зохицуулалт хийх зэрэг арга хэмжээг авна.

Хүдрийн биетээс ялгарах радоны хэмжээг багасгаснаар уурхайн агаар дахь радоны агуулалтыг бага хэмжээнд барьж болно. Хүдэр олборлоход шарагдах гадаргын талбай, хүдрийн бутралтыг багасгахын тулд уран олборлох арга болон тэсэлгээний цэгийг зөв сонгож хийх нь чухал юм. Хамгийн үр ашигтай хяналтын арга нь агааржуулалт юм. Уурхайд шаардагдах агаарын хэмжээ нь далд уурхайн ажлын цар хэмжээ, хүдэр олборлолтын ажлын хэмжээ, тухайн цагт уурхайд ажиллаж байгаа ажилчдын тоо зэргээс хамаарна. Уурхайн агаар дахь хүдрийн тоосны хэмжээг багасгахын тулд тоосны ялгаралт, тархалтын эх үүсвэрт чийгтэй өрөмдлөгө хийх, өрмийн хаягдлыг норгох зэрэг арга хэмжээ авах шаардлагатай [6, 7].

ДҮГНЭЛТ

1. Монгол улсад уран олборлох үйл ажиллагааны үед цацрагийн аюулгүй байдлыг хангах дүрэм журам боловсруулахдаа ОУЦХК-ын гаргасан тунг хязгаарлах системд заагдсан бүх аюулгүйн арга хэмжээний зөвлөмжийг баримтлах нь ураны уурхайн ажилчдын цацрагийн хамгаалалтын асуудлыг зөв шийдэх боломжийг бүрдүүлнэ.
2. Дорноговь, Дундговийн нутагт орших ураны агуулалт бага (0.05%)-тай, гидрогеннийн үүсэлтэй ордын хүдрийг олборлох үед цацрагийн аюулгүй байдлыг хангах асуудал харьцангуй хялбар болно. Харин ураны агуулалт их (0.2%)-тэй Гурванбулаг, Дорнод далд уурхайн цацрагийн аюулгүй байдлыг хангах асуудал хүндрэлтэй. Ураны далд уурхайд радоноос авах дотоод шарлагын хэмжээг багасгахын тулд агааржуулалтыг зохих ёсоор хийх шаардлагатай. Иймээс далд уурхайн ажил эхлэхийн өмнө уурхайн агаар дахь радоны хэмжээг байнга хянаж, агааржуулалт шаардлага хангаж байгаа эсэхийг тогтооно. Мөн далд уурхайн уулын ажлын үед агаарын тоосжилтыг хэмжиж урт наст байгалийн цацраг идэвхт изотопуудаас ажилчдын амьсгалын замаар авах дотоод шарлагын тунг тооцоолон дүгнэлт өгөх шаардлагатай.
3. Бидний боловсруулсан энэ арга зүй нь манай улсын ураны уурхайн ажилчдын цацрагийн хамгаалалт, хяналтын олон төрлийн хэмжилт, тооцооны ажлуудыг нэгтгэн цацрагийн аюулгүй байдлын үнэлгээ хийхэд чухал ач холбогдолтой.

АШИГЛАСАН ХЭВЛЭЛ

1. Н.Норов, С.Даваа. Агаар дахь радон, түүний задралын бүтээгдэхүүний задралын бүтээгдэхүүнийг судалсан тухай. МУИС, Эрдэм Шинжилгээний Бичиг №5(138), 3-11-р тал (1998).
2. International Atomic Energy Agency, International Basic Safety Standards for protection against ionizing radiation and for the safety of radiation sources, **BSS-115**. IAEA, Vienna (1996).
3. ICRP International Commission on Radiological Protection. Protection against Radon-222 at Home and Work. ICRP Publication 65. **Ann. ICRP 23/2** (1993).
4. International Commission on Radiological Protection, Recommendations of the ICRP, Publication 60, **Ann. ICRP Vol.21**, Elsevier Science, Oxford (1991).
5. United Nations Scientific Committee on the Effects of Atomic Radiation (**UNSCEAR**). Sources and Effects of Ionizing Radiation. Report to the General Assembly (1993).
6. Safety Series **No.95**. "Radiation Monitoring in the Mining and Milling of Radioactive Ores". IAEA, Vienna (1989).
7. Safety Series **No.RS-G-1.6**. "Occupational Radiation Protection in the Mining and Processing of Raw Materials Radiation Monitoring in the Mining and Milling", IAEA, Vienna (2004).

RADIATION SAFETY OF URANIUM MINE

N.Enkhbat, N.Norov, B.Otgooloi

*Nuclear Research Center, National university of Mongolia
University street-1, Ulaanbaatar-210646, Mongolia*

The paper discusses about safety assessment methodology for radiation safety of uranium mining. Case-study for radiation safety assessment of uranium mine is also considered on Gurvanbulag underground uranium mine. Annual effective dose to mine workers was estimated by the sum of the external exposure to gamma and the internal exposure to long lived radioactive dust and radon.

Монгол Орны Эмийн Ургамлын Судалгаанд Цөмийн Анализын Аргыг Хэрэглэх нь

Н.Балжинням¹, Н.Норов^{2*}, Б.Жүгдэр³, М.В.Фронтасьева¹, С.С.Павлов¹

¹Оросын Холбооны Улс, Дубна хот, Цөмийн Шинжилгээний Нэгдсэн Институт,

И.М.Франкийн нэрэмжит нейтроны физикийн лаборатори

²Монгол Улс, Улаанбаатар хот-210646, Их Сургуулийн гудамж-1,

Монгол Улсын Их Сургууль, Цөмийн судалгааны төв

³Монгол Улс, Улаанбаатар хот, "Монос" Анагаах Ухааны Дээд Сургууль

*Э-уудан: nnnorov@yahoo.com

Энэ өгүүлэлд Дубнагийн Цөмийн Шинжилгээний Нэгдсэн Институтын ИБР-2 реактор ашиглан нейтроноор идэвхжүүлэх анализын аргаар Удвал навчит тавилгана ургамлын газраас гарсан хэсгээс бэлтгэсэн дээжийн найрлага дахь микро, макро элементийн агуулалтыг тодорхойлох арга зүй боловсруулж, эмийн ургамлын судалгаанд энэ аргыг нэвтрүүлэх боломжтойг харуулав.

1. ОРШИЛ

Дэлхий дээр үйлдвэрлэн хэрэглэж байгаа эмийн 38% нь ургамлын гаралтай гэдэг тооцоог дэлхийн эрүүл мэндийн байгууллага гаргажээ. Монгол орон эмийн ургамлын нэр төрөл олон, боломжийн нөөцтэй бөгөөд сүүлийн хориод жилд ургамлын шинжлэх ухааны үндэслэлтэй судалгаа зохих үр дүнд хүрч байгааг энэ төрлийн судалгааны мэргэжилтэнүүд онцолсон байдаг. Монгол орны ургамлын санд нийт 16 хүрээнд хамаарах 306 овгийн 1220 төрлийн 5107 орчим зүйл дээд, доод ургамал бүртгэгдсэнээс 845 зүйл нь эмийн ургамал юм [1]. Энэтхэг, Төвд, Монголын уламжлалт анагаах ухаанд хэрэглэгддэг эмийн ургамал болон ургамлын гаралтай эм бэлдмэлүүдийн биологийн идэвхт нэгдлүүдийн бүтэц, бүрэлдэхүүнийг судалж, фармакологийн тодорхой үйлчлэл, механизмыг тайлбарлах, улмаар шинжлэх ухааны үндэслэлтэйгээр стандартчлагдсан сонгомол үйлчилгээтэй эм бэлдмэл хийх ажил сүүлийн жилүүдэд эрчимтэй хөгжиж байна [2]. Үүнтэй уялдан эмийн ургамалд агуулагдах эрдэс бодис, макро-микро элементүүдийн агуулалтыг өндөр нарийвчлалтай тодорхойлох асуудал урган гарч байна.

Дээрх асуудлаас үүдэн цөмийг идэвхжүүлэх анализын аргуудын нэг болох нейтроноор идэвхжүүлэх анализын аргыг эмийн ургамлын түүхий эдийн найрлага дахь элементүүдийн агуулалтыг тодорхойлоход ашиглах боломжийг судлахаар Удвал навчит тавилгана эмийн ургамал дээр анхны туршилтыг явууллаа.

Удвал навчит тавилгана (*Spiraea aquilegifolia* Pall.) зүйл ургамлыг Өрнө, Дорнын анагаах ухаанд эртнээс эмчилгээний журмаар эм, тангийн найрлаганд оруулан хэрэглэсээр

ирсэн байна. Түвд Монголын уламжлалт анагаах ухаанд тавилгана нь няг-шад, маг-шад нэрийн дор халуун, хүйтэн суулгыг зогсооход болон шарханд гадуур шавшиж хэрэглэгдэж ирсэн байна. Тодорхой нэг эмийн жорын найрлагад орсон баримт одоогоор олдоогүй [1, 3]. Эмийн түүхий эдэд газар дээрээс ил гарсан иш мөчир, навч, цэцгийг хэрэглэнэ. Энэ ургамлын биологийн идэвхт нэгдлүүдийн бүтэц, бүрэлдэхүүн, фармакологийн тодорхой үйлчлэл, механизм болон фотохимийн судалгаа хийгдэж эхлээд байна [4, 5].

Удвал навчит тавилгана ургамалаас газрын дээд хэсгээс бэлтгэсэн дээжинд Дубнагийн Цөмийн шинжилгээний нэгдсэн институтын (ЦШНИ) ИБР-2 реактор ашиглан нейтроноор идэвхжүүлэх анализын аргаар химийн элементүүдийн агуулалтыг тодорхойлох судалгаа хийв. Судлагдсан дээжинд 40 гаруй макро, микро биологийн идэвхт болон зарим хортой, хүнд химийн элементүүд (Na, Mg, Al, Cl, K, Ca, Sc, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Zn, A, Se, Br, Rb, Sr, Zr, Mo, Cd, Cs, Ba, La, Hf, Ta, W, Sb, Au, Hg, Ce, Nd, Sm, Eu, Tb, Dy, Yb, Th, U, Lu)-ийг нэгэн зэрэг тодорхойлох боломжтойгоороо энэ судалгааны ач холбогдол оршино.

Нейтроноор идэвхжүүлэх шинжилгээний арга нь судалж буй дээжийг ямар нэгэн химийн урвалд оруулахгүй, эвдэж задлахгүйгээр дээжинд агуулагдаж буй химийн элементүүдийг нэгэн зэрэг нарийвчлал өндөртэй (10^{-4} - $10^{-7}\%$) тодорхойлдоогоороо бусад анализын аргаас давуутай [6]. Манай оронд энэ шинжилгээний аргыг геологи, экологи, уул уурхай, анагаах ухааны салбаруудад мөн хүрээлэн байгаа орчны болон агаарын бохирдолыг үнэлэх судалгаа гэх мэт олон салбарт өргөн ашиглаж байна [7,8].

II. СУДАЛГААНЫ АРГА ЗҮЙ, ДЭЭЖ БЭЛТГЭЛ

A. Дээж цуглуулалт ба бэлтгэлт

Удвал навчит тавилгана (*Spiraea aquilegifolia* Pall) нь Монгол орны төв болон баруун хойд зүгийн уулархаг нутгаар ургадаг Сарнайн овогт хамаарах сөөглөг ургамал юм. Хэнтий, Хангай, Монгол Дагуур, Дорнод Монгол, Говь-Алтай, Дорноговь, Ховдын тойргуудад ихэвчлэн ойт хээрийн бүслүүр, хээрийн бүсэд уулын чулуурхаг энгэр, байц хад, шинэсэн ойн зах, сөөгөн ширэнгэ, асга хадтай хажуу, цөлийн хээрт ургана [1, 9].

Энэхүү ургамалыг Монгол оронд баримтладаг эмийн ургамал түүж бэлтгэх журмын дагуу Гүнтийн орчмоос түүж, түүний газар дээр ил гарсан хэсгээс дээж бэлтгэв.

Түүж бэлтгэсэн дээжүүдийг шинжилгээ хийхийн өмнө шороо, бусад хогноос нь цэвэрлэн өрөөний температурт хэд хоног сэврээсний дараа хатаах шүүгээний 30°C хэмд хатааж, нунтаглав. ИБР-2 реакторын дээж шарах нейтроны суваг дээр 0.3-0.5 грамм жинтэй дээжийг полиэтилен уутанд савлан, хөнгөн цагаан ялтасанд савлан удаан хугацаатай шарав.

B. Судалгааны арга зүй

Шаралтанд зориулан бэлтгэсэн дээжийн химийн элементийн агуулалтыг ОХУ-ын Дубна хот дахь ЦШНИ-ийн И. М. Франкийн нэрэмжит Нейтроны физикийн лабораторийн хурдан нейтроны импульсэн ажиллагаатай ИБР-2 реактор ашиглан нейтроноор идэвхжүүлэх шинжилгээний аргыг ашиглан хийв. Дулааны нейтроны урсгалын нягт 1.1×10^{12} н/см²·с, резонансын нейтроны урсгалын нягт 1.4×10^{12} н/см²·с шаралтын суваг дахь температур 60°-70°C-ээс ихгүй байв [10].

Урт настай цацраг идэвхт нуклидууд үүсгэдэг элементүүд (As, Cd, Ba, Br, Ce, Cs, Eu, Fe, Ni, La, Rb, Sb, Sc, Se, Sm, Th, U, Zn)–ийг тодорхойлохын тулд дээжүүдийг 100 цаг шарсны дараа дахин савлаж 5, 13, 20 хоног хүлээсний дараа дээжийг 3 удаа 1-3 цаг хэмжсэн болно. Харин богино настай цацраг идэвхт нуклидууд үүсэх элементүүдийг тодорхойлохын тулд дээжүүдийг 20 мин шарж 5 ба 20 мин хүлээж, 2 удаа 8 ба 20 минутын хугацаатайгаар тус тус хэмжсэн.

⁶⁰Со-ын 1332.4 кэВ энергитэй гамма шугамын хувьд 1.96 кэВ ялгах чадамжтай цэвэр Ge хагас дамжуулагч детектор ашиглан хэмжилт хийв.

Олон улсын стандарт дээж (Bowen Cabbage)-ийг ашиглав. ЦШНИ-ийн нейтроны физикийн лабораторид хэрэглэгдэж байгаа ACTIVE [11] программыг ашиглан хэмжилтийн спектрүүдийг боловсруулан, засварын коэффициентийг тооцон дээжин дэх элементүүдийн агуулалтыг тодорхойлов:

$$m_x = m_{\text{ст}} \cdot \frac{N_x}{N_{\text{ст}}} \cdot k_3$$

Үүнд: $m_{\text{ст}}$ – стандарт дээжийн масс; N_x , $N_{\text{ст}}$ – судалж байгаа дээж, стандарт дээж дэх элементийн цацраг идэвхт изотопын гамма квантын бүрэн шингээлтийн пикийн талбай; k_3 – засварын коэффициент.

Засварын коэффициент нь шарах, хүлээх, хэмжих горим янз бүр байдаг болон мөн судалж байгаа, стандарт дээжийн цөмийн физикийн үзүүлэлтүүдүүдээс хамаарч өөр өөр байх бөгөөд түүнийг утгыг дараах илэрхийллээр олно:

$$k_3 = k_1 \cdot k_2 \cdot k_3 \cdot k_4 \cdot k_5.$$

Үүнд:

$$k_1 = \frac{(\rho\sigma_{\text{эф}}/M)_{\text{ст}}}{(\rho\sigma_{\text{эф}}/M)_x}; \quad k_2 = \frac{(\varepsilon a)_{\text{ст}}}{(\varepsilon a)_x};$$

$$k_3 = \frac{1 - \exp(-\lambda t_{\text{ш}})_{\text{ст}}}{1 - \exp(-\lambda t_{\text{ш}})_x}; \quad k_4 = \frac{\exp(-\lambda t_{\text{хүл}})_{\text{ст}}}{\exp(-\lambda t_{\text{хүл}})_x};$$

$$k_5 = \frac{(\lambda t_{\text{хэм}})_x [1 - \exp(-\lambda t_{\text{хэм}})_{\text{ст}}]}{(\lambda t_{\text{хэм}})_{\text{ст}} [1 - \exp(-\lambda t_{\text{хэм}})_x]}.$$

Дээрх илэрхийлэлүүдэд ρ – изотопын агуулалт; $\sigma_{\text{эф}}$ – эффектив огтлол; M – атом масс; t – шарах, хүлээх, хэмжих хугацаа; a – гамма квантын гаралт; $t_{\text{хэм}} \ll T_{1/2}$ – тохиолдол буюу урт наст цацраг идэвхт изотопуудыг хэмжих үед $k_5 \approx 1$ болно.

III. СУДАЛГААНЫ АЖЛЫН ҮР ДҮН, ДҮГНЭЛТ

Нейтроноор идэвхжүүлэх анализын аргаар (НИАА) Удвал навчит тавилгана (*Spiraea aquilegifolia* Pall)–ны дээжинд тодорхойлогдсон элементүүдийг макро (Ca, Cl, K, Na, Mg), микро (Fe, Cu, Zn, Mn, Cr, Se, Mo, I, Co, V, Ni, As) биологийн идэвхт, биологийн идэвхгүй болон бусад (Hg, Sb, Ba, Sr, Cs, Al, Rb, Ag, Au, Br, Sc, Co, In, La, W, Ta, U), мөн ховор шороо (Sm, Eu, Tb)–ны элементүүд хэмээн ангилж болно.

НИАА-ийн аргаар дээжинд тодорхойлогсон 41 элементийн дүнг ургамлын стандарт дээжинд агуулагдах элементийн агуулалт (“Reference plant”) [12]–тай харьцуулан хүснэгт 1-д

үзүүлээ. 1-р хүснэгтээс зарим элемент тухайлбал Mn, Ca, K, Na, Mg, Se, Fe, Co, Cr, V зэрэг элементүүдийн агуулалт харьцангуй их байгаа нь харагдаж байна. Амьдралын үйл ажиллагаанд шийдвэрлэх үүрэг гүйцэтгэдэг хэд хэдэн металлууд, тухайлбал натри, кали, кальци, магни, төмөр, цайр, зэс, манган, молибден, кобальт болон бусад элементүүд байдаг бөгөөд эдгээр элементүүд (Na, K, Ca, Mg, Fe, Cu, Zn, Mn, Co, Ni)-ийн агуулалтыг өвслөг ургамлын стандарттай агуулгатай харьцуулан судлав. Судалж буй энэ ургамалын хувьд стандарт хэмжээтэй харьцуулахад K, Ca, Fe, Se, Mo гэсэн элементүүдийн агуулалт хамгийн өндөр буюу харгалзан 22300, 6760, 1070, 0.45, 3.56 мг/кг хэмжээтэй байна.

Цөмийн физикийн анализын аргуудын нэг болох НИАА-г Монгол орны эмийн түүхийн эдэд ашиглагдаж буй ургамлуудын элементийн агуулалтыг тодорхойлох судалгаанд ашиглаж болох нь энэ судалгааны дүнгээс харагдаж байна.

НОМЗҮЙ

1. Энхжаргал Д., Баясгалан Б., Пүрэвсүрэн С. “Эмийн ургамал судлал”. УБ, 2004. 144-150-р хуудас.
2. Пүрэв Ө., Химическое изучение биологических активных веществ некоторых видов растений Монголии и создание на их основе лекарственных препаратов. Дисс.УБ.1994. стр 14-15.
3. Лигаа У., Даваасүрэн Б., Нинжид Н. “Монгол орны эмийн ургамлыг өрнө дорнын анагаах ухаанд хэрэглэхүй”. УБ, 2006. 17-38,314-315-р хуудас.
4. Б.Жүгдэр. “Удвал навчит тавилгана(*Spiraea aquilegifolia* Pall.) ургамлын фотохимийн болон биологийн идэвхт бодисын судалгаа”. УБ.2009 (Магистрийн бүтээл).
5. Ц.Мөнхтуяа. “Удвал навчит тавилгана (*Spiraea aquilegifolia* Pall.) ургамлын фармакологийн судалгаа”. Докторын бүтээл. УБ. 2009.
6. Кузнецов Р.А. “Активационный анализ”. 2 изд., М., 1974.
7. Ganbold G, Frontasyeva M. V., et al. “Atmospheric Deposition of Trace Elements around Ulan-bator City Studied by Moss and Lichens Biomonitoring Technique and INAA”. JINR, Preprint E18-2005-113. Dubna, 2005.
8. Gerbish Sh., Baljinnyam N. et al. “Determination Major and Minor Elements in Sediments of the Central and Northern Mongolian some rivers using INAA”. JINR, Preprint E18-2008-120. Dubna, 2008.
9. Өлзийхутаг Н. “БНМАУ-ын бэлчээр хадлан дахь тэжээлийн ургамал таних бичиг”.
10. Frontasyeva M.V., Pavlov S.S. “Analytical investigations at the IBR-2 reactor in Dubna”. JINR, Preprint E14-2000-177, Dubna, 2000.
11. Ostrovnaya T.M., Nefedyeva L.S., Nazarov V.M., Borzakov S.B., Strelrkova L.P. “Software for NAA on the basis of relative and absolute methods nuclear data base, in activation analysis in environment protection”, D14-93-325, Dubna, 1993, pp.319-326.
12. Markert B. Establishing of “Reference plant” for inorganic characterization of different plant species by chemical fingerprinting”. Water, Air, and Soil Pollution 64: 533-538. 1992.

Application of Nuclear Analytical Method for Mongolian Study of Medical Plants

N.Baljinnyam¹, N.Norov^{2*}, B.Jugder³, M.V.Frontasieve¹, S.S.Pavlov¹

¹Laboratory of Neutron Physics, Joint Institute for Nuclear Research,
Joliot-Curie 6, 141980 Dubna, Moscow region, Russia

²Nuclear Research Center, National University of Mongolia, University street-1, Ulaanbaatar-210646, Mongolia

³“Monos” University, Ulaanbaatar, Mongolia

*e-mail: nnnorov@yahoo.com

In this paper, The method determination of macro, micro elements for *Spiraea aquilegifolia* Pall medicinal plant samples collected from Mongolia has been developed using by neutron activation analysis at the IBR-2 reactor of JINR in Dubna. There is a possibility to apply the method for a study of Mongolian medical plants.

ХАВСРАЛТ

Хүснэгт 1. Удвал навчит тавилгана (*Spiraea aquilegifolia* Pall.) ургамлын элементийн агуулалтыг тодорхойлсон дүн(мг/кг)

№	Элемент	Удвал навчит тавилгана	Стандарт дээж (Bowen Cabbage)	Стандарт дээж "Reference plant"
1	Na	697	563	150
2	Mg	3000	2160	2000
3	Al	1460	142	80
4	Cl	2410	5760	2000
5	K	22300	32500	1900
6	Ca	6760	18800	1000
7	Sc	0.30	0.03	0.02
8	V	1.80	-	0.5
9	Cr	3.48	2.9	1.5
10	Mn	31.6	22.1	200
11	Fe	1070	179	150
12	Co	0.4	0.12	0.2
13	Ni	6.4	2.87	1.5
14	Zn	27.7	41.9	50
15	As	0.8	0.15	0.1
16	Se	0.4	0.10	0.02
17	Br	22.4	7.96	4.0
18	Rb	21.6	7.00	50
19	Sr	23.0	49.6	50
20	Zr	4.6	6.67	0.1
21	Mo	3.6	10.0	0.5
22	Cd	1.0	0.3	0.05
23	Cs	0.2	0.03	0.2
24	Ba	25.9	11.6	40
25	La	1.3	0.16	0.2
26	Hf	0.3	0.03	0.05
27	Ta	0.03	0.01	0.001
28	W	0.32	0.12	0.2
29	Sb	0.10	0.05	0.1
30	Au	0.001	0.001	0.001
31	Hg	0.34	0.35	0.1
32	Ce	2.01	0.39	0.5
33	Nd	1.34	0.98	0.2
34	Sm	0.17	0.02	0.04
35	Eu	0.02	0.001	0.008
36	Tb	0.02	0.001	0.008
37	Dy	0.14	-	0.03
38	Yb	0.05	0.03	0.02
39	Th	0.32	0.03	0.005
40	U	0.12	0.02	0.01
41	Lu	0.02	0.001	0.003

Ураны Далд Уурхайн Агааржуулалтаар Хаягдах Радоны Тархалт

Н.Энхбат, Н.Норов*, Г.Хүүхэнхүү

Монгол Улс, Улаанбаатар хот-210646, Их сургуулийн гудамж-1,
Монгол Улсын Их Сургууль, Цөмийн Судалгааны Төв

*Э-шуудан: nnnorumov@yahoo.com

Энэхүү ажлаар бид Дорнод аймгийн Баяндун, Дашбалбар, Сэргэлэн сумын уулзвар цэгт орших Гурванбулаг ураны далд уурхайн агааржуулалтаар гадаад орчинд хаягдах цацраг идэвхт хий радоны агаар мандал дахь тархалтыг судлав. Тус ураны уурхайн баруун амны агааржуулалтын хоолойноос салхины дагуу, салхины эсрэг чигт хэмжилтийн цэгүүдийг сонгон авч агаар дахь радоны эзлэхүүний идэвхийг агаар соруулсан шүүлтүүрийг хоёр удаа хэмжиж хурдан тодорхойлон, агаар дахь түүний түгэлтийг үнэлэв.

Түлхүүр үг: Радон, түүний задралын богино наст бүтээгдэхүүн, агааржуулалтын систем, радоны эзлэхүүний идэвх, радоны ундарга.

PACS: 87.55.N,

I. ОРШИЛ

Уран нь хөрс, уулын чулуулагт ямар нэг хэмжээтэй, харин ураны хүдэрт их агуулагдах бөгөөд байгалийн цацраг идэвхт энэ элементийн задралын бүлд цацраг идэвхт инертийн хий радон ялгарна. Радон бол агаараас хүнд бөгөөд барилгын суурийн давхар болон газар дээрх барилга байгууламжийн агааржуулалтгүй дотоод орчинд хуримтлагдана. Ураны далд уурхай доторхи радоны хуримтлал нь цацрагийн эрүүл ахуйн үүднээс хүний эрүүл мэндэд ноцтой аюул учруулж болно. Радоны задралаар үүсэх бүтээгдэхүүн цацраг идэвхт цөмүүд тоос болон агаар дахь бусад маш жижиг хэсгүүдтэй нийлж хүний амьсгалаар орж дотоод шарлага үүсгэнэ [1, 2].

Радоны задралын богино наст бүтээгдэхүүнүүд хүний биед амьсгалын замаар нэвтрэн орж эд эсэд сууж ДНХ-д эвдрэл учруулж чадахуйц альфа бөөмсийг цацаргана. Өнгөрөгч 50 гаруй жилийн эпидемиологийн судалгаагаар уурхайн ажилчдын уушигны хавдар үүсэх гол шалтгаан нь богино наст радоны задралын бүтээгдэхүүн болох нь батлагдсан байна. Далд уурхай, туннел, хонгил, рашаан, усан эмчилгээний байгууламж, агааржуулалт муутай орон сууц, байран дахь радоны хуримтлал нь хүний эрүүл мэндэд аюултай дотоод шарлага үүсгэнэ. Радоны шарлагаар үүсэх уушигны хавдараар үхэлд хүрэх магадлал нь тамхины хавдараар үхэх магадлалын дараа хоёрдугаар байрыг эзэлдэг байна [3, 4].

Нэгдсэн Үндэстний Байгууллагийн Олон Улсын Атомын Цацрагийн Үйлчлэлийн

Шинжлэх Ухааны Хороо (АЦҮШУХ)–ноос гаргасан үнэлгээгээр байгалийн цацрагийн эх үүсгүүрээс хүний авах цацрагийн тунгийн 50 орчим хувийг радоноос авах тун эзлэж байна [5, 6].

Энэ ажилд Гурванбулаг ураны далд уурхайн агааржуулалтын хоолойгоор агаарт хаягдах радоны түгэлтийг агаар соруулах үед шүүлтүүрт сууж үлдсэн радоны задралын богино наст бүтээгдэхүүнүүдийн альфа бөөмийг бүртгэх аргаар судалсан тухай өгүүлнэ.

II. СУДАЛГААНЫ МАТЕРИАЛ, АРГА ЗҮЙ

А. Уурхайн агааржуулалтын систем

Мардайн бүлэг ордод багтах Гурванбулаг ураны далд уурхайн 260 метр гүн дэх хүдрийн биетийн сунал, уналын дагуух малталтуудын агааржуулалтын систем 3 амтай (1-р зураг).

Тус ураны далд уурхайн гол, хойд амуудаар агаар нэвтрэн орж, малталтуудын хэсгүүдээр тарна. Эдгээр хэсгүүдэд байсан радон ихэй агаар баруун аман дээр байрлах агаар соруулах төхөөрөмжийн гаднах хоолой (2-р зураг)-гоор агаар мандалд хаягдана. Гурванбулаг ураны далд уурхайн гол ам ба 260 метрийн түвшинд нийлбэр урсгалын хурд $35 \text{ м}^3/\text{с}$ - $38 \text{ м}^3/\text{с}$ байсан. Баруун аманд агааржуулалтын 2 метрийн диаметртэй гурван хоолой суурилуулсны хоёр нь хөндлөн хэвтээ нэг нь босоо байрлалтай. Агаарын радоны хэмжилт хийж байх үед хөндлөн хэвтээ хоолой ажиллаж байв. Энэхүү агааржуулалтын хэвтээ хоолойн амсар нь газрын гадаргаас дээш 3 метрийн өндөрт байрласан ба амсрыг нь зүүн урд зүгт газрын

гадаргад 45° налуутайгаар чиглүүлж байрлуулсан болно.

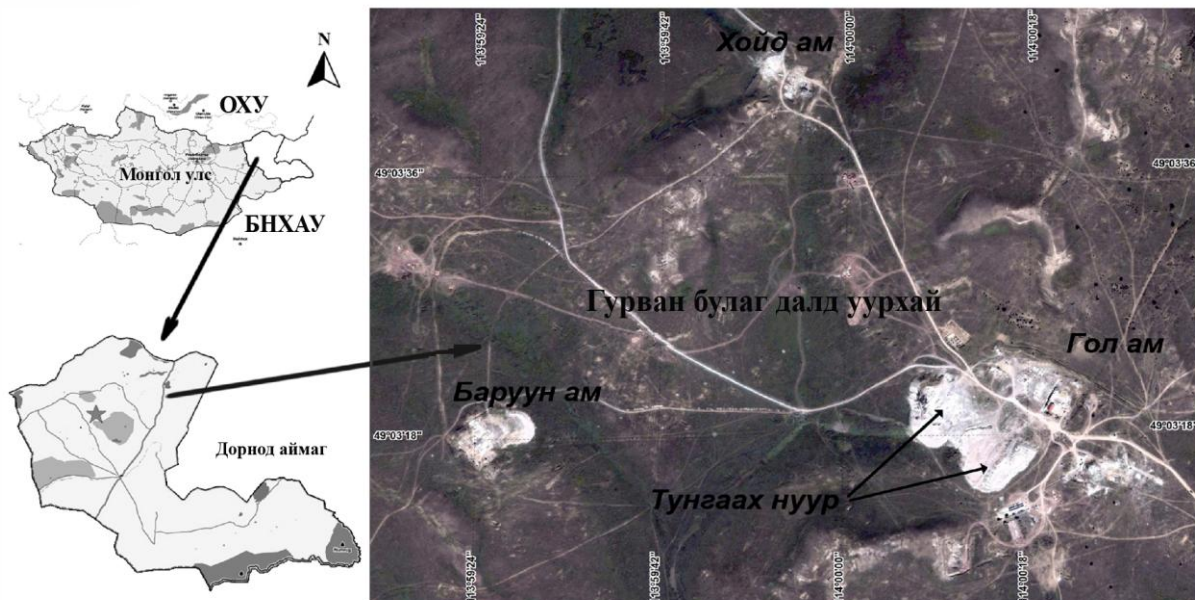
В. Далд уурхай доторх радоны эх үүсвэр

Ураны далд уурхайн агаарт радон ялгаран гарах эрчимийг радоны ундарга D_{Rn} (Бк/с) гэх бөгөөд энэ хэмжигдэхүүн нь уулын чулуулаг ба хүдрийн физик шинж чанар, эдгээрт агуулагдах ^{226}Ra -ийн хэмжээ, уулын малталтын үед радоны

хуримтлагдах хугацаа буюу агаар солилцооны хурд зэргээс хамаардаг.

Уурхай дахь радоны үүсгүүр:

- чулуулаг хүдрийн массив, бөөгнөрөл, тарамцаг (D_{Rn1}),
- сийрэгжсэн уулийн тарамцаг (D_{Rn2}),
- уурхайн ус (D_{Rn3}).



Зураг 1. Гурванбулаг ураны далд уурхайн босоо амнуудын байршил.

Эдгээр үүсгүүрээс радоны ундрагыг үнэлэх тооцооны аргыг авч үзье. Иймээс радоны ундрагын нийлбэр (D_{Rn})-ийг дараах хэлбэрээр илэрхийлж болно.

$$D_{Rn} = D_{Rn1} + D_{Rn2} + D_{Rn3}$$

Эдгээр үүсгүүрээс гарах радоны ундрагыг дараах байдлаар тооцоолно.

1. Хүдэр ба уулын чулуулагын массиваас гарах радоны ундарга:

$$D_{Rn1} = (I_{ia} + I_{oa}) \cdot D_{Rn}$$

Энд:

I_{ia}, I_{oa} – агаарын оролт гаралт дээрх радоны эзлэхүүний идэвх, Бк/м³;

D_{Rn} – уурхайн ханаар дамжин өнгөрөх агаарын хэмжээ буюу агааржуулалтын хурд, м³/с.

2. Хүдэр, уулын чулуулагын массив:

$$D_{Rn2} = 2.5 \cdot 10^3 \cdot M \cdot n \cdot \eta \cdot \beta$$

Энд: $2.5 \cdot 10^3$ Бк/(тонн·сек) – 1%-ын ураны агуулалтай хүдэр бүхий 1 тонн уулын чулуулагын массиваас радон ялгарах хурд,

M – уулын чулуулагын масс, тонн;

η – цацраг идэвхийн эквивалент;

β – чулуулагын нүх сүв, эвдрэлээр ялгаран гарах радоны задралын коэффициент.

3. Уурхайн ус:

$$D_{Rn3} = A_{Rn} \cdot D_{Rn}$$

Энд:

A_{Rn} – усан дахь радоны дундаж эзлэхүүний идэвх, Бк/м³.

D_{Rn} – уурхайн усны радоны нийлбэр ундрага, м³/с.

С. Радон, түүний богино наст задралын бүтээгдэхүүнийг тодорхойлох арга зүй

Агаар дахь радоныг түүний задралын бүтээгдэхүүнүүдийн альфа идэвхээр тодорхойлох олон аргууд байдаг [6, 7].

Агаар соруулсан шүүлтүүрийг нэг удаа хэмжих арга

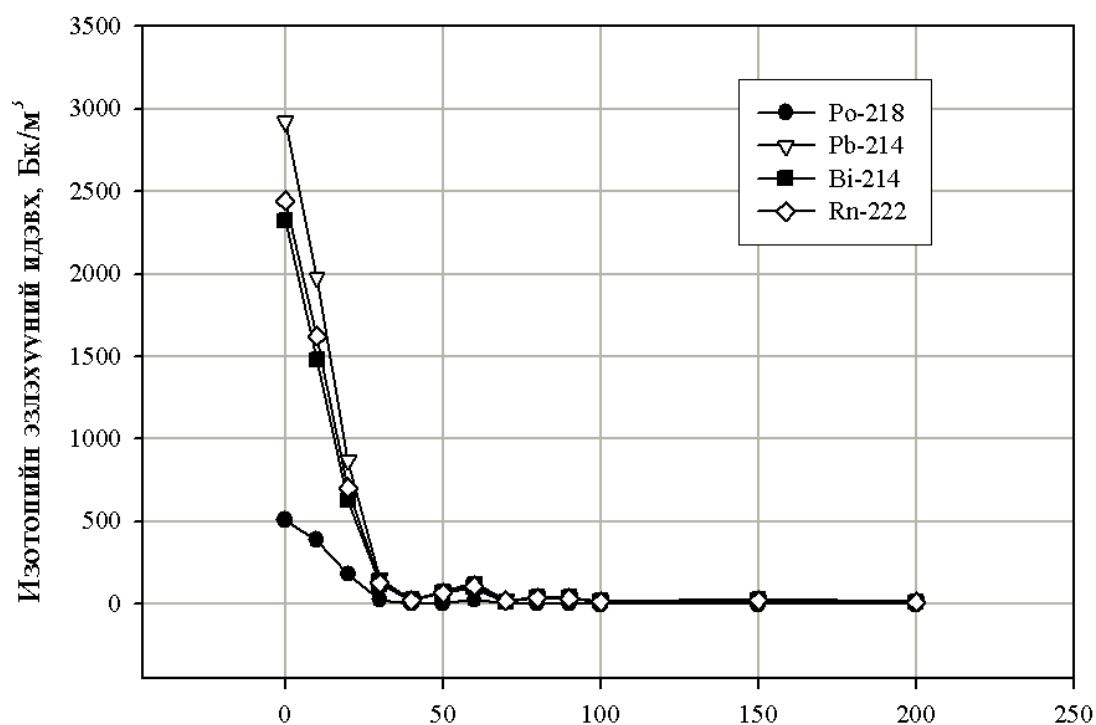
Хамгийн өргөн хэрэглэгддэг энэ аргыг Кузнец, Ролл нар боловсруулсан бөгөөд эдгээр аргууд нь агаарын дээж соруулах, шүүлтүүрийн альфа идэвхийг хэмжих хугацааны сонголтоороо

ялгаатай байдаг. Агаарыг 2-10 л/мин хурдтай сорох багажаар 5-10 минутын турш агаар соруулж, 90 минут хүлээсний дараа шүүлтүүрийг сцинтилляцийн тоолуур дээр 5-10

минутын хугацаанд хэмжиж нийт альфа бөөмийг бүртгэнэ.



Зураг 2. Гурванбулаг ураны далд уурхайн баруун амны агааржуулалтын хоолой



Баруун амны агааржуулалтын хоолойноос холдох зай, м

Зураг 3. Радон, түүний богино наст задралын бүтээгдэхүүний тархалт

Агаар соруулсан шүүлтүүрийг хоёр удаа хэмжих арга

Агаар дахь радоны эзлэхүүний идэвхийг агаар соруулсан шүүлтүүр дээрх түүний задралын бүтээгдэхүүнүүдээс гарах альфа идэвхийг хоёр удаа хэмжих арга нь бусад аргуудаас дараах давуу талуудтай. Үүнд: нэг удаа хэмжих аргын нарийвчлалыг сайжруулах, ^{218}Po , ^{214}Pb , ^{214}Bi изотопуудын эзлэхүүний идэвхийг тус тусад нь тодорхойлох, нийт зарцуулах хугацаа багасах зэрэг болно. Хоёр удаа хэмжих аргаар нийлбэр альфа эсвэл бета идэвхийг тодорхойлох янз бүрийн аргууд байдаг. Үүнд:

- Хиллийн арга (нийлбэр альфа идэвх);
- Жамес–Стронгийн арга (нийлбэр альфа идэвх);
- Шревийн арга (нийлбэр альфа, бета идэвх);
- Марковын арга (нийлбэр альфа идэвх) зэрэг болно.

Агаар соруулсан шүүлтүүрийг гурван удаа хэмжих арга

Агаар соруулсан шүүлтүүрийг гурван удаа хэмжих арга нь нэг, хоёр удаа хэмжих аргуудаас нарийвчлал сайтай байдаг. Гэвч зарим аргын хувьд тоолох статистик хангалтгүй байдагтай холбоотойгоор санамсаргүй алдаа ихтэй. Гурван удаа хэмжих аргуудаас Цивогловын арга хамгийн их ашиглагддаг [1].

Мөн альфа спектрометрийн аргыг ашиглах боломжтой. Кузнецийн арга нь хамгийн сайн нарийвчлал, мэдрэх чадвартай. Энэ аргын дутагдалтай тал нь агаар соруулахаас эхлээд шүүлтүүрийн альфа идэвхийг хэмжиж дуусах хүртэлх хугацаа ихтэй. Өөрийн задралын бүтээгдэхүүнүүдтэй цацраг идэвхийн тэнцвэрт орших радоны эквивалент эзлэхүүний идэвхийг хурдан шуурхай тодорхойлоход Ролл, Марковын аргуудыг хэрэглэх нь тохиромжтой байна. Роллын аргын мэдрэх чадамж Марковын аргынхаас 2 дахин их байдаг боловч нарийвчлал муутай. Ролл, Кузнецийн аргуудтай харьцуулахад Марковын аргын сайн тал нь шүүлтүүрийн идэвхийг хоёр удаа хэмжиж, цацраг идэвхийн тэнцвэрийг үнэлнэ. Энэ арга нь агаар соруулж, шүүлтүүрт баригдаж үлдсэн радоны задралын богино наст цацраг идэвхт изотопуудаас гарах альфа бөөмийг альфа-радиометрээр тоолоход үндэслэдэг [8, 9].

Энэ судалгааны ажилд Марковын арга [10] дээр үндэслэн бидний боловсруулсан радоны задралын богино наст бүтээгдэхүүнүүдийн агаар дахь эзлэхүүний идэвхийг 5 минут агаар

соруулж, 1 минут ба 5 минутын дараа 3 минутаар хоёр удаагийн хэмжилт хийж хурдан тодорхойлох аргад дараах илэрхийллийг ашиглав:

$$\left. \begin{aligned} C_{RaA} &= \frac{4.4}{\varepsilon\eta\nu} (N_1 - N_2) \\ C_{RaB} &= \frac{1}{\varepsilon\eta\nu} (1 \cdot N_2) \\ C_{RaC} &= \frac{1}{\varepsilon\eta\nu} (2 \cdot N_2 - 0.91 \cdot N_1) \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

Үүнд: C_{RaA} , C_{RaB} , C_{RaC} – радоны задралын бүтээгдэхүүнүүд ^{218}Po , ^{214}Pb , ^{214}Bi -ийн агаар дахь эзлэхүүний идэвх, Бк/м³, N_1 – агаар соруулж дууссанаас 1 минутын дараа альфа-тоолуурт 3 минутанд бүртгэгдсэн импульсын тоо, N_2 – агаар соруулж дууссанаас 7 минутын дараа альфа-тоолуурт 3 минутанд бүртгэгдсэн импульсын тоо, ε – шүүлтүүрийн барих чадвар, η – альфа тоолуурын бүртгэх чадамж, ν – Агаар соруулах хурд, л/мин. Томъёо (1)-оор тооцоолж гаргасан задралын богино наст бүтээгдэхүүнүүдийн эзлэхүүний идэвхийн утгуудыг ашиглаж, агаар дахь радоны цацраг идэвхийн тэнцвэрийн эквивалент идэвх C_{Rn} (Бк/м³)-ийг дараах томъёогоор тооцов:

$$C_{Rn} = 0.105 \cdot C_{RaA} + 0.516 \cdot C_{RaB} + 0.379 \cdot C_{RaC} \quad (2)$$

III. ҮР ДҮН БА ХЭЛЭЛЦҮҮЛЭГ

Дорнод аймгийн Гурванбулаг ураны далд уурхайн баруун амны агааржуулалтын хоолойноос хаягдах радоны агаар дахь тархалтыг судлах зорилгоор баруун амны агааржуулалтын хоолойн амнаас салхины дагуу болон эсрэг чиглэлд Хавсралтын 4-р зурагт харуулсан янз бүрийн байрлалд хэмжилт хийв. Баруун амны агааржуулалтын хоолой дээр агаар дахь радоныг тодорхойлох хэмжилт хийх үед салхины хурд 1.7 м/с, салхины чиглэл баруун хойноос зүүн урагшаа чиглэлтэй байсан нь агааржуулалтын хоолойноос радонтой агаарын хаягдах чиглэлтэй давхцаж байсан тохиолдолд агааржуулалтын хоолойн амнаас зүүн өмнө зүгт 500 м зайд агаар дахь радоны эзлэхүүний идэвхийн хамгийн их утга 28 Бк/м³ байв.

Радоны задралын бүтээгдэхүүнүүд $\text{RaA}(^{218}\text{Po})$, $\text{RaB}(^{214}\text{Pb})$, $\text{RaC}(^{214}\text{Bi})$ -ийн агаар дахь эзлэхүүний идэвхийг (1), агаар дахь радоны цацраг идэвхийн тэнцвэрийн эквивалент идэвхийг (2) илэрхийллээр

тооцоолсон дүнг Хавсралтын 1-р хүснэгтэнд үзүүлэв. Уурхайн баруун амны газрын гадаргад 45 градусын өнцөг үүсгэн зүүн урд зүг рүү чиглэсэн агааржуулалтын хоолой (2-р зураг)-ноос агаарт хаягдах ^{218}Po , ^{214}Pb , ^{214}Bi , ^{222}Rn изотопуудын хэмжээ зайнаас хамааран хэрхэн буурч байгааг 3-р зурагт үзүүлэв.

ДҮГНЭЛТ

1. Гурванбулаг ураны далд уурхайн баруун амны агааржуулалтын хоолойн амсар дээрх радоны эзлэхүүний идэвхийн утга $2618 \div 10535 \text{ Бк/м}^3$ байгаа нь Монгол Улсын **MNS 5627:2006**-д заасан цацрагтай ажиллагсдын ажлын байранд радоны зөвшөөрөгдөх хэмжээ (1110 Бк/м^3)–ээс $2.4 \div 9.5$ дахин их бөгөөд хоолойноос гадагш хаягдаж байгаа агаарын урсгал дахь радоны эзлэхүүний идэвхийн энэ хэлбэлзэл нь агааржуулалтын системийн үйл ажиллагаа, түүний тасралтгүй ажилласан хугацаа, далд уурхайн газар доорхи байгууламжаар дамжин өнгөрч байгаа агаарын урсгалын хурд зэргээс хамаарч байна.
2. Уурхайн баруун амны агааржуулалтын хоолойн ам салхины зонхилох чиглэл болох зүүн урагш чиглэсэн учир түүнээс энэ чиглэлд хаягдах радонтой агаарын урсгалын нөлөө 500 метрийн дотор, бусад чиглэлд 100 метрийн дотор байна. Салхины хурд ихсэх тутам агааржуулалтын хоолойн амнаас хаягдах радонтой агаарын урсгалын нөлөө бүх чиглэлд 30 м хүртлэх зайд эрчимтэй буурч байгалийн дэвсгэр түвшний хэмжээтэй болж байв.
3. Агааржуулалтын хоолойноос гадагш хаягдах агаарын урсгал дахь радон ба түүний задралын богино наст бүтээгдэхүүнүүдийн (^{218}Po , ^{214}Pb , ^{214}Bi) хооронд цацраг идэвхийн тэнцвэр ихэнх тохиолдолд тогтоогүй байгаа нь ажиглагдав.
4. Уурхайн баруун амны агааржуулалтын хоолойноос агаарын урсгалтай хаягдах радоны хэмжээ 100 метрээс их зайд агаар мандлын урсгалд орж сарнин байгалийн дэвсгэр түвшний хэмжээтэй болж байгаа учир ойр орчмын оршин суугчид, тус ураны уурхайн ажиллагсдын эрүүл мэндэд сөргөөр нөлөөлөхгүй болно.

Хүснэгт 1. Гурванбулаг ураны далд уурхайн агаар дахь радоны хэмжилтийн үр дүн

№	Байршил	Салхины хурд, м/с	^{218}Po	^{214}Pb	^{214}Bi i	^{222}Rn
			Хувийн идэвх, Бк/м ³			
1	Уурхайн гол ам	1.5	11	8	7	8
2	Агааржуулалтын баруун ам	1.5	22	4	-	5
3	Далд уурхайн баруун амны агааржуулалтын хоолойн амсар	1.5	5324	2570	193 9	2618
4	Агааржуулалтын амнаас баруун хойд зүгт 15 м	1.5	-	16	19	16
5	Агааржуулалтын амнаас баруун хойд зүгт 30 м	1.5	27	15	12	15
6	Агааржуулалтын амнаас баруун хойд зүгт 100 м	1.5	-	15	18	14
7	Агааржуулалтын амнаас баруун хойд зүгт 200 м	1.5	11	10	9	9
8	Далд уурхайн баруун амны агааржуулалтын хоолойн амсар	1.5	17501	1045 6	873 6	1053 5
9	Агааржуулалтын амнаас зүүн өмнө зүгт 100 м	1.5	-	16	19	16
10	Агааржуулалтын амнаас зүүн өмнө зүгт 200 м	1.5	-	35	42	34
11	Агааржуулалтын амнаас зүүн өмнө зүгт 300 м	1.5	65	12	1	14
12	Агааржуулалтын амнаас зүүн өмнө зүгт 500 м	1.5	65	27	19	28
13	Далд уурхайн баруун амны агааржуулалтын хоолойн амсар	1.7	15525	1025 0	889 7	1028 2
14	Агааржуулалтын баруун амнаас зүүн өмнө зүгт 30 м	1.7	-	16	19	16
15	Агааржуулалтын баруун амнаас зүүн өмнө зүгт 50 м	1.7	16	23	24	23
1	Агааржуулалтын баруун амнаас баруун хойд	1.7	5	8	9	8

6	зүгт 50 м					
1	Агааржуулалтын баруун амнаас зүүн өмнө зүгт	1.7	-	4	5	4
7	200 м					
1	Агааржуулалтын баруун амнаас зүүн өмнө зүгт	1.7	5	5	5	5
8	300 м					
1	Агааржуулалтын баруун амнаас зүүн өмнө зүгт	1.7	5	7	7	7
9	400 м					
2	Агааржуулалтын баруун амнаас зүүн өмнө зүгт	1.7	5	4	4	4
0	500 м					
2	Далд уурхайн баруун амны агааржуулалтын	1.7	13014	8394	722	8428
1	хоолойн амсар				4	
2	Агааржуулалтын баруун амнаас зүүн өмнө зүгт	1.7	38	27	24	27
2	100 м					
2	Агааржуулалтын баруун амнаас зүүн өмнө зүгт	1.7	16	7	5	7
3	500 м					
2	Агааржуулалтын баруун амнаас баруун хойд	1.7	5	16	18	16
4	зүгт 100 м					
2	Агааржуулалтын баруун амнаас зүүн өмнө зүгт	салхигүй	5	11	12	11
5	50 м					
2	Далд уурхайн баруун амны агааржуулалтын	3.7	11696	6176	488	6261
6	хоолойн амсар				3	
2	Сонгосон цэг No 0, агааржуулалтын баруун	3.7	27	45	47	44
7	амнаас хойш 50 м					
2	Сонгосон цэг No 0-ын зүүн талд 10 м зайд	3.7	38	19	15	19
8						
2	Сонгосон цэг No 0-ын зүүн талд 20 м зайд	3.7	-	27	32	26
9						
3	Сонгосон цэг No 0-ын зүүн талд 30 м зайд	3.7	16	22	22	21
0						
3	Сонгосон цэг No 0-ын зүүн талд 40 м зайд	3.7	22	5	2	6
1						
3	Сонгосон цэг No 0-ын зүүн талд 50 м зайд	3.7	-	7	8	7
2						
3	Сонгосон цэг No 0-ын баруун талд 10 м зайд	3.7	22	7	4	7
3						
3	Далд уурхайн баруун амны агааржуулалтын	3.7	10994	5609	435	5696
4	хоолойн амсар				9	
3	Сонгосон цэг No 1 агааржуулалтын баруун	3.7	27	24	23	24
5	амнаас өмнө зүгт 50 м					
3	Сонгосон цэг No1-ийн баруун талд 10 м зайд	3.7	11	20	22	20
6						
3	Сонгосон цэг No1-ийн баруун талд 20 м зайд	3.7	43	10	2	10
7						
3	Сонгосон цэг No1-ийн баруун талд 30 м зайд	3.7	27	15	12	15
8						
3	Сонгосон цэг No1-ийн баруун талд 40 м зайд	3.7	43	8	1	9
9						
4	Агааржуулалтын баруун амнаас хойш 200 м зайд	3.7	-	11	13	10
0						
4	Агааржуулалтын баруун амнаас зүүн өмнө зүгт	салхигүй	11	4	3	4
1	50 м зайд					
4	Агааржуулалтын баруун амнаас зүүн өмнө зүгт	салхигүй	22	5	2	6
2	500 м зайд					
4	Агааржуулалтын баруун амнаас зүүн өмнө зүгт	салхигүй	22	4	-	5

3	400 м зайд					
4	Агааржуулалтын баруун амнаас зүүн өмнө зүгт	салхигүй	-	7	8	7
4	300 м зайд					
4	Агааржуулалтын баруун амнаас зүүн өмнө зүгт	салхигүй	5	10	10	9
5	200 м зайд					
4	Агааржуулалтын баруун амнаас зүүн өмнө зүгт	салхигүй	-	10	11	9
6	100 м зайд					
4	Агааржуулалтын баруун амнаас хойш 50 м зайд,	1.5	-	3	3	3
7	салхины доор					
4	Агааржуулалтын баруун амнаас зүүн өмнө зүгт	1.5	5	5	5	5
8	50 м зайд					
4	Агааржуулалтын баруун амны хоолойн амсар	1.5	16	4	2	4
9	доор, газрын гадаргаас дээш 1 м					
5	Далд уурхайн баруун амны агааржуулалтын	1.5	11939	5537	408	5653
0	хоолойн амсар				2	
5	Агааржуулалтын баруун амнаас зүүн урд зүгт	1.5	22	7	4	7
1	100 м зайд					
5	Агааржуулалтын баруун амнаас зүүн урд зүгт	1.5	16	10	8	10
2	200 м зайд					
5	Агааржуулалтын баруун амнаас зүүн урд зүгт	1.5	16	5	3	6
3	300 м зайд					

АШИГЛАСАН ХЭВЛЭЛ

1. Н.Норов, С.Даваа. Агаар дахь радон, түүний задралын бүтээгдэхүүнийг судалсан тухай. МУИС, Эрдэм Шинжилгээний Бичиг №5(138), 1998, 3-11-р тал.
2. ICRP International Commission on Radiological Protection. "Protection against Radon-222 at Home and Work". **ICRP Publication 65**. Ann. ICRP 23/2 (1993).
3. S̆evc, J., Kunz, E. and Plac̆ek, V. "Lung cancer in uranium miners and long-term exposure to radon daughter products". *Health Phys.* **30**, 433–437 (1976).
4. The World Health Organization, Fact Sheet No.291: Radon and Cancer, June 2005.
5. United Nations Scientific Committee on the Effects of Atomic Radiation. Sources and Effects of Ionizing Radiation. **UNSCEAR 1993** Report to the General Assembly, Annex A (1993).
6. **Safety Series No. 95** "Radiation Monitoring in the Mining and Milling of Radioactive Ores". IAEA, Vienna (1989).
7. **Safety Series No. RS-G-1.6** "Occupational Radiation Protection in the Mining and Processing of Raw Materials Radiation Monitoring in the Mining and Milling", IAEA, Vienna (2004).
8. H.Kuznets. *Amer. Industr. Hyg. Assoc. Quart.* **17**, 85 (1956).
9. H.Rolle. *Amer. Industr. Hyg. Assoc. Quart.* **16**, 85 (1956).
10. Марков К.П., Рябов Н.В., Стась К.Н. Экспресс-метод оценки радиационной опасности, связанный с наличием в воздухе дочерних продуктов радона. *Атомная энергия*, т.12, вып.4, с.315-319 (1962).

DISTRIBUTION OF RADON DISCHARGING VENTILLATION SYSTEM OF UNDERGROUND URANIUM MINE

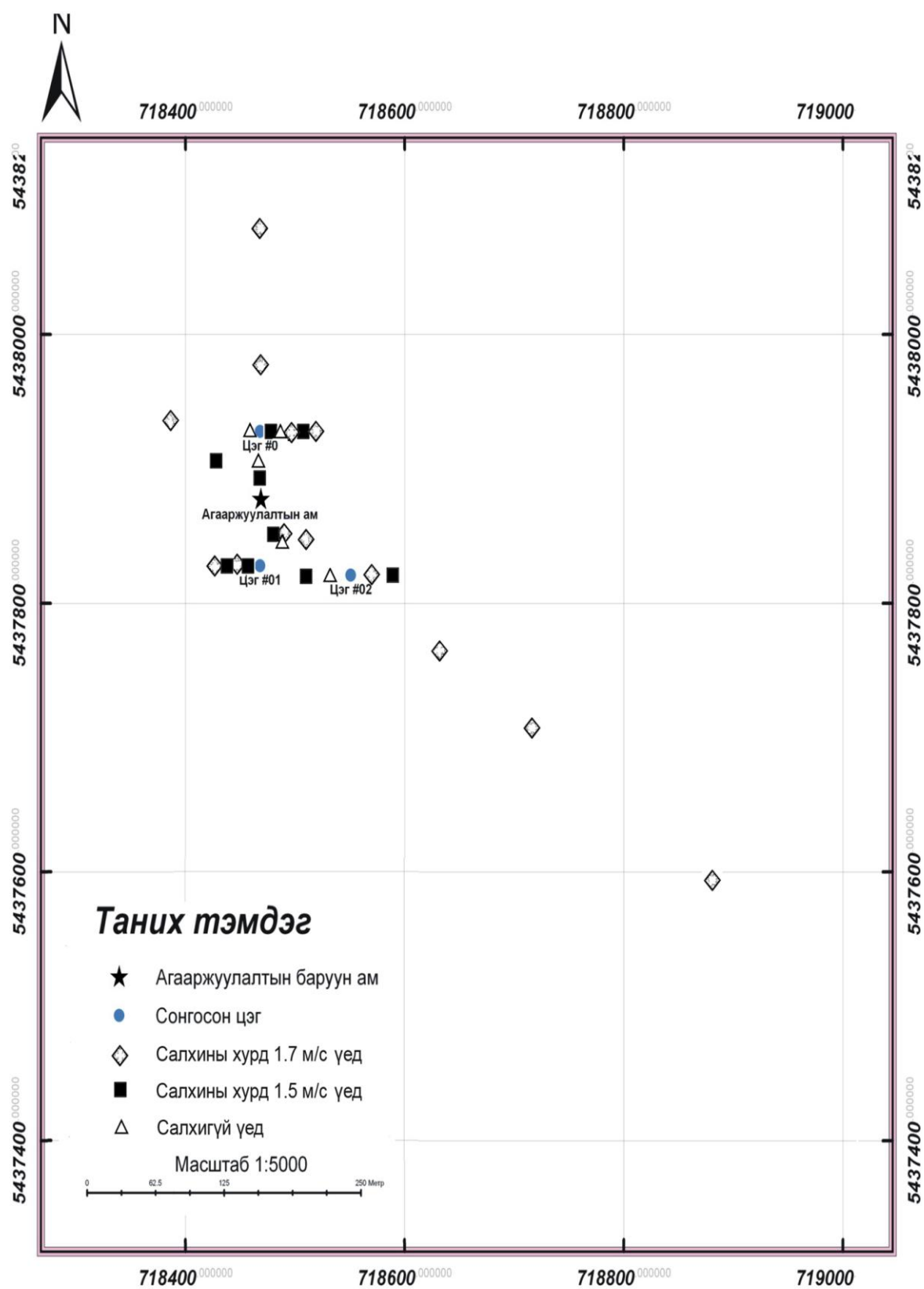
N.Enkhbat, N.Norov*, G.Khuukhenkhuu

Nuclear Research Center, National University of Mongolia, University street-1, Ulaanbaatar-210646, Mongolia

**E-mail: nnnorov@yahoo.com*

The paper discusses a study on distribution of radon discharging from Gurvanbulag underground uranium mine which locates at node of Bayan-Uul, Dashbalbar, Sergelen soum in Dornod province. The volumic radioactive of radon in air was carried out by two counts of the filter drawing air at selected points from air ventilation system of west shaft in uranium mine along and vice versa to wind speed. Then distribution of radon in air was evaluated.

ХАВСРАЛТ



Зураг 4. Далд уурхайн агааржуулалтын баруун ам орчимд радоны хэмжилт хийсэн цэгүүд.

Ураны Хүдэр дэх Цацраг Идэвхийн Тэнцвэр

Г.Цэмбэлмаа, Н.Норов*, Н.Энхбат

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

Монгол Улсын Их Сургууль, Цөмийн судалгааны төв

*Э-шуудан nnnorum@yahoo.com

Энэ ажлаар уран-радийн цацраг идэвхийн тэнцвэрийг 186 кэВ энергитэй ^{226}Ra , ^{235}U -ын нийлбэр шугамыг ашиглан үнэлэх арга зүй боловсруулав. ^{235}U -ийн 143.7 кэВ, 63 кэВ энергитэй шугамын талбайгаар 186 кэВ энергитэй нийлбэр шугамын талбайд ^{235}U -ийн 185.7 кэВ шугамын эзлэх хувийг тооцож, ^{226}Ra -ийн 186.2 кэВ энергитэй гамма шугамын талбайг олсноор уран-радийн цацраг идэвхийн тэнцвэрийг үнэлнэ. Харин ради, радоны цацраг идэвхийн тэнцвэрийг ^{222}Rn -ын богино наст бүтээгдэхүүнүүдийн гамма шугамын талбай болон ^{226}Ra -ийн тооцож олсон шугамын талбайг ашиглан тодорхойлоно.

I. УДИРТГАЛ

Байгалийн ураны хоёр изотоп ^{238}U ($T_{1/2}=4.5\cdot 10^9$ жил, 99.2745 %), ^{235}U ($T_{1/2}=7\cdot 10^8$ жил, 0.72 %), ^{232}Th ($T_{1/2}=1.4\cdot 10^{10}$ жил, 100%), эдгээр эх цөмүүдийн цацраг идэвхт задралаар цацраг идэвхт гурван бүл үүснэ. Уран, торийн бүл тус бүрийн гишүүдийг хоорондоо цацраг идэвхийн тэнцвэрт байгаа гэж үзэн эдгээр цацраг идэвхт изотопуудаас гарах γ -цацрагуудыг хагас дамжуулагч германи детектор бүхий γ -спектрометр ашиглан бүртгэж бүлийн эх изотоп болох уран, торийн агуулалтыг ураны хүдэр, нүүрс, үнс, фосфорит, хөрс гэх мэт төрөл бүрийн дээжүүдэд тодорхойлсон байдаг [1,2,3]. Харин уран-ради болон ради-радоны цацраг идэвхийн тэнцвэр алдагдсан тохиолдолд радоны задралын богино наст бүтээгдэхүүн болох ^{214}Bi ба ^{214}Pb -ийн гамма шугамаар уран, радийг тодорхойлох боломжгүй болно. Иймд эхлээд судалж байгаа дээжид уран-ради-радоны цацраг идэвхийн тэнцвэрийг шалгах хэрэгтэй. Уран-радийн цацраг идэвхийн тэнцвэрийг ^{226}Ra -ийн 186.2 кэВ болон ^{235}U -ын 185.7 кэВ шугамуудын нийлбэр 186 кэВ шугамын хүндийн төвийн шилжилтээр үнэлэх [4], ураны хүдрийн дээжинд ради, ураны харьцааг тодорхойлох харьцангуй арга [5,6] зэрэг судалгаа хийгдсэн байна. Нөгөө талаас ^{238}U -ын бүлд хийн төлөвт үүсэх ^{222}Rn нь судалж буй дээжээс амархан нэвчин алдагдах учир түүний богино наст бүтээгдэхүүнүүдийн гамма шугамаар ради, ураны агуулалтыг зөв тодорхойлох боломжгүй болно. Иймээс уран, радийн цацраг идэвхийн тэнцвэрийг үнэлэх арга зүй боловсруулах шаардлага гарч байна.

II. СУДАЛГААНЫ АРГАЗҮЙ

А. Уран-радийн цацраг идэвхийн тэнцвэртэй үеийн ^{235}U ба ^{226}Ra -ийн шугамын харьцаа

^{235}U ба ^{238}U -ын цацраг идэвхийн харьцаа (0.0466)-наас ^{238}U цөмийн нэг задралд үүсэх ^{235}U -ын 185.71 кэВ энергитэй гамма квантын гаралтыг олсноор 186 кэВ энергитэй давхацсан шугамын талбайд ^{235}U ба ^{226}Ra эзлэх хувийг тодорхойлж болно.

Уран, радийн хооронд цацраг идэвхийн тэнцвэр тогтсон үед 186 кэВ нийлбэр шугамд ^{235}U ба ^{226}Ra -ийн эзлэх хувийг эдгээр изотопын гамма квантын гаралтаас хамааруулан тооцоолж олсон үр дүнг 1-р хүснэгтэд харуулав.

Хүснэгт 1. 186 кэВ энергитэй нийлбэр шугамд 186.2 кэВ, 185.7 кэВ энергитэй шугамын эзлэх хувь

Изотопууд	186.2 кэВ, 185.7 кэВ энергитэй гамма квантуудын гаралт			
	К γ [7]	К γ [8]	К γ [9]	К γ [10]
^{235}U	54	57.5	57.2	57.2
^{226}Ra	3.8	3.28	3.59	3.51
186 кэВ энергитэй нийлбэр шугамд 186.2 кэВ, 185.7 кэВ энергитэй шугамын эзлэх хувь				
^{226}Ra -ийн эзлэх хувь, %	59.2	55.0	57.4	56.7
^{235}U -ын эзлэх хувь, %	40.8	45.0	42.6	43.3

Б. Цацраг идэвхийн тэнцвэрийг 143.7 кэВ энергитэй шугамаар шалгах

Ураны хүдэр дэх цацраг идэвхийн тэнцвэрийг тодорхойлоход 186 кэВ энергитэй γ -шугамын талбайг ашиглах бөгөөд энэ гамма-спектрт ^{226}Ra -ын 186.2 кэВ (3.51 %) энергитэй, ^{235}U -ын 185.7 кэВ (57.2%) энергитэй γ -шугамуудын нийлбэр талбайтай тэнцүү. ^{226}Ra -ын γ -шугамын талбайг $S_{186}(^{226}\text{Ra})$, ^{235}U -ынхыг $S_{185}(^{235}\text{U})$ гэвэл 186 кэВ энергитэй γ шугамын талбай:

$$S_{186} = S_{186}(^{226}\text{Ra}) + S_{185}(^{235}\text{U}) \quad (1)$$

Эндээс $S_{186}(^{226}\text{Ra}) = S_{186} - S_{185}(^{235}\text{U})$ болно. ^{235}U -ын 185.7 кэВ энергитэй γ -шугамын талбайг уг γ -цацрагтай энергийн нэг түвшнээс гарах 143.7 кэВ энергитэй γ -цацрагийн харьцангуй эрчимээр илэрхийлье.

$$\frac{I_{U235}^{186}}{I_{U235}^{143}} = (S_{185.7}(^{235}\text{U})/\varepsilon_{185}) / (S_{143}(^{235}\text{U})/\varepsilon_{143}) \quad (2)$$

болно. Үүнд: $^{143}\text{I}_{U235}$, $^{185}\text{I}_{U235}$, γ -шугамуудын харьцангуй эрчим; ε_{143} , ε_{185} γ -шугамуудад харгалзах детекторын бүртгэх чадамж.

(2) харьцаанаас ^{235}U –д хамаарах γ -шугамын талбайг олбол

$$S_{185.7}(^{235}\text{U}) = S_{143}(^{235}\text{U}) \frac{I_{U235}^{186} \varepsilon_{185}}{I_{U235}^{143} \varepsilon_{143}} \quad (3)$$

Одоо (1) ба (3)-г ашиглан ^{226}Ra -ын 186.2 кэВ энергитэй γ шугамд харгалзах талбайг олж.

$$S_{186}(^{226}\text{Ra}) = S_{186} - S_{143}(^{235}\text{U}) \frac{\varepsilon_{185}/I_{U235}^{186}}{\varepsilon_{143}/I_{U235}^{143}} \quad (4)$$

Эндээс үзвэл, ^{226}Ra -ийн 186.2 кэВ энергитэй γ -шугамд харгалзах талбай нь хэмжилтээс олдох 143.7кэВ, 186 кэВ энергитэй γ -цацрагын харьцангуй эрчим, харгалзах шугамын талбай, детекторын бүртгэх чадамжаар тодорхойлогдоно.

Детекторийн бүртгэх чадамжийн муруйгаас 143.7 кэВ ба 186 кэВ энергид харгалзах бүртгэх чадамжийн харьцаа:

$$\frac{\varepsilon_{185.7}}{\varepsilon_{143.7}} = 0.91 \pm 0.05$$

^{235}U -ын бүлийн ^{223}Ra -ын задралаас 144.3 кэВ энергитэй γ -квант гарах тул 143.7 кэВ энергитэй γ –шугамын эрчимд түүний оролцоог оролцуулан тооцвол:

$$\frac{I_{U235}^{185.7}}{I_{U235}^{143.7} + I_{Ra223}^{144.2}} = \frac{57.2}{10.96 + 3.5} = 3.95 \quad (5)$$

байна. Иймээс ^{235}U -д хамаарах 185.7 кэВ энергитэй γ шугамын талбай (3)–д (5) ба бүртгэх чадамжийн харьцааг орлуулбал:

$$S_{185.7}(^{235}\text{U}) = S_{143}(^{235}\text{U}) \cdot 0.91 \cdot 3.96 = 3.59 \cdot S_{143}(^{235}\text{U}) \quad (6)$$

Ийнхүү 186 кэВ энергитэй нийлбэр шугамын талбайгаас ^{226}Ra -ийн 186.2 кэВ энергитэй шугамын талбайг дараах байдлаар тооцоолж олно.

$$S_{186}(^{226}\text{Ra}) = S_{186} - 3.59 \cdot S_{143}(^{235}\text{U}) \quad (7)$$

Хүснэгт 2.Цацраг идэвхт цөмүүдийн гамма квантын гаралт

Анхдагч цөм	Үүссэн цөм	$T_{1/2}$	Энерги, кэВ	Гамма квантын гаралт, % [7]	Гамма квантын гаралт, % [8]	Гамма квантын гаралт % [9]	Гамма квантын гаралт, % [10]
^{238}U	^{234}Th	24.1 өдөр	63.29	3.5	4.47	3.2	3.6
			92.38	4	2.73	2.82	4.9
			92.80	-	2.69	2.77	-
			1001.03	0.6	0.59	0.87	0.837
	^{226}Ra	1602 жил	186.21	3.8	3.28	3.59	3.51
	^{218}Po	26.8 минут	295.21	19	19.7		18.5
			351.92	36	38.9		35.8
	^{214}Bi	19.9 минут	609.31	47	43.3	46.1	44.8
			1120.29	17	15.7	15.1	14.8
			1764.50	17	17	15.4	
^{235}U		$7.0 \cdot 10^8$ Жил	185.71	54	57.5	57.2	57.2
			163.35	4.6	5.0	6.3	5.08
			143.76	9.7	10.93	10.96	10.96
	^{231}Pa	$3.3 \cdot 10^4$ Жил	64.04	-	-	4.00	
	^{223}Ra	11.4 өдөр	144.2	4.1		3.2	

В.Цацраг идэвхийн тэнцвэрийг 609 кэВ энергитэй шугамаар шалгах

^{235}U -ын задралын харьцангуй сул эрчимтэй 163.3 кэВ энергитэй γ -шугамыг ураны агуулалтыг тодорхойлоход ашигласан байна [10]. Гэвч ийм энергитэй γ -квантын гаралт нь 185.7 кэВ энергитэй шугамын эрчмээс 11 дахин бага юм. Иймээс уран, радийн цацраг идэвхийн тэнцвэрийг 186 кэВ энергитэй нийлбэр шугамын эрчмээр шалгах үнэмлэхүй арга боловсруулах шаардлага урган гарч байна.

Ураны хүдрийн стандарт дээжийг саванд хийж битүүмжлээд, ради-радоны цацраг идэвхийн тэнцвэр тогтоон ^{226}Ra , ^{222}Rn -ын задралын бүтээгдэхүүнүүдийн гамма шугамуудын талбайг 609 кэВ энергитэй шугамын талбайд харьцуулсан дүн [12] 3-р хүснэгтэд үзүүлэв.

Дээжийн нягтаас хамааран тухайн энергитэй γ -квантын шингээлт өөрчлөгдөх учраас 3-р хүснэгтэд үзүүлсэн гамма шугамуудын талбайн харьцаа өөрчлөгдөнө. Энэ нөлөөг тооцохын тулд янз бүрийн нягттай дээж бүрийн хувьд γ -квантын

шугамын талбайн харьцаа $\alpha(E_i)=S(E_i)/S(609)$ -г харгалзах үзүүлэлт $\alpha_{\text{Ra}}(E_i)$ -тай харьцуулсан $\beta(E_i)=\alpha(E_i)/\alpha_{\text{Ra}}(E_i)$ харьцааг тогтоож, 186 кэВ энергитэй шугамын хувьд экстрополяц хийж, $\alpha(186)$ нь дээжийн нягтаас $\alpha(186)=0.322-0.0296\rho$ хамааралтай болохыг тогтоов (1-р зураг). Үүнд: ρ -дээжийн нягт (г/см^3).

Ураны хүдрийн дээжинд ради, радоны хооронд цацраг идэвхийн тэнцвэр тогтсон үед ^{226}Ra -ийн 186.2 кэВ энергитэй гамма квантын бүрэн шингээлтийн шугамын талбайг 609.3 кэВ энергитэй шугамын талбайгаар үнэлж, түүнийг 186 кэВ-ийн нийлбэр талбайгаас хасаж ^{235}U -ын 187.5 кэВ энергитэй γ -квантын бүрэн шингээлтийн шугамын талбайг олно.

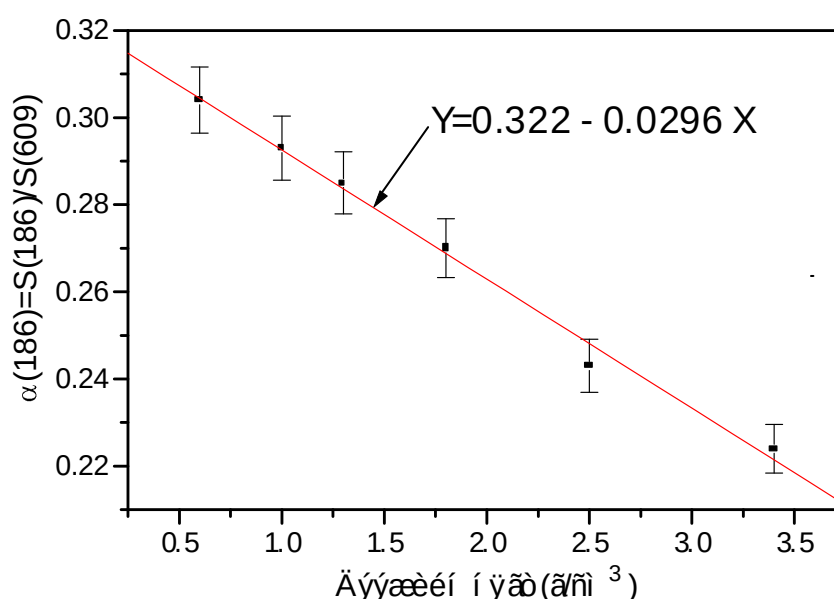
$$S_{186.2}(^{226}\text{Ra})=\alpha_{\text{Ra}186} \cdot S_{609}(^{226}\text{Ra}),$$

$$S_{185.7}(^{235}\text{U})=S_{186}-\alpha_{\text{Ra}}(186) \cdot S_{609}(^{226}\text{Ra})$$

Үүнд: $\alpha_{\text{Ra}}(186)$ -ийн утгыг хэмжиж байгаа дээжийн нягтаас хамааруулан 1-р зургаас авна.

Хүснэгт 3. ^{222}Rn -ын задралын бүтээгдэхүүнүүдийн гамма шугамуудын талбай ба 609 кэВ энергитэй шугамын талбайн харьцаа

Үзүүлэлт	^{226}Ra	^{214}Pb		^{214}Bi			
E, кэВ	186	295	352	609	768	1120	1764
α_{Ra}	0.285	0.896	1.493	1	0.091	0.179	0.124

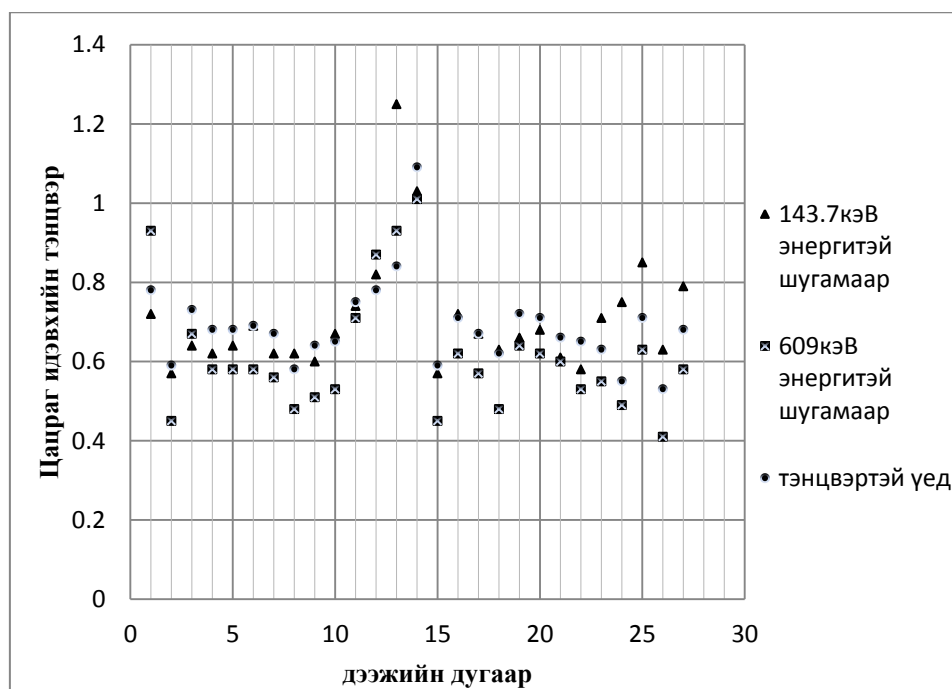


Зураг 1. ^{226}Ra -ийн 186 кэВ, ^{214}Bi -ийн 609 кэВ шугамын эрчмийн харьцаа $[\alpha(186)]$ ба дээжний нягтын хамаарал

III. ХЭМЖИЛТИЙН ҮР ДҮН, ХЭЛЭЛЦҮҮЛЭГ

Хэмжилтэд Архангай аймгийн Өндөр-Улаан сумын нутагт орших ураны хайгуулын Чулуут төслийн талбайн SL1001 ба SL1002

хоёр цооногийн өндрөөс хамааруулан авсан (Хавсралт 3-р зураг) чөмгийн 27 дээжинд цацраг идэвхийн тэнцвэрийг тодорхойлсон үр дүнг 2-р зураг, хавсралтын 4 ба 5-р хүснэгтэд харуулав.



Зураг 2. Ураны хүдрийн дээжин дэх цацраг идэвхийн тэнцвэр

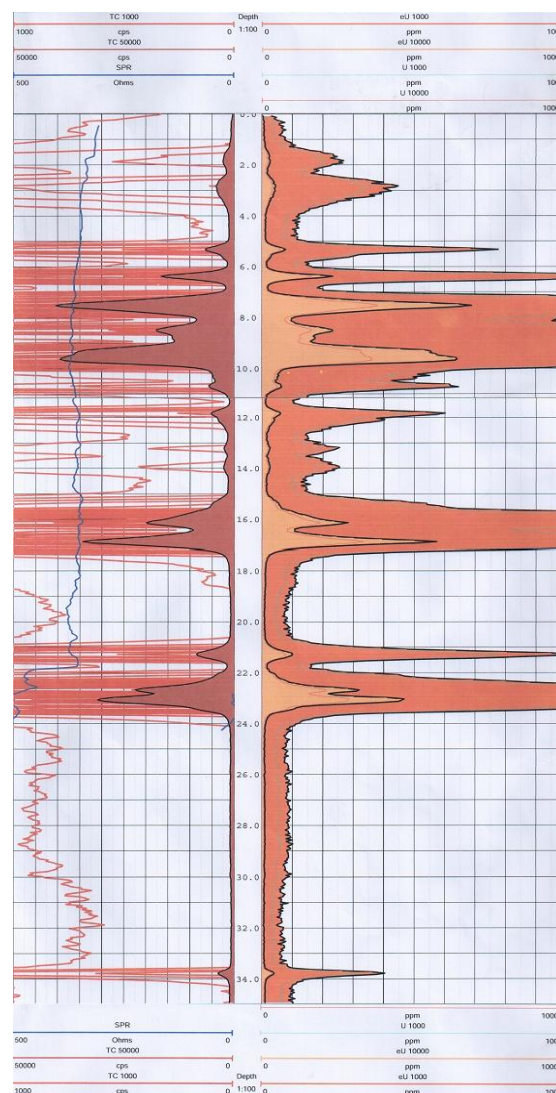
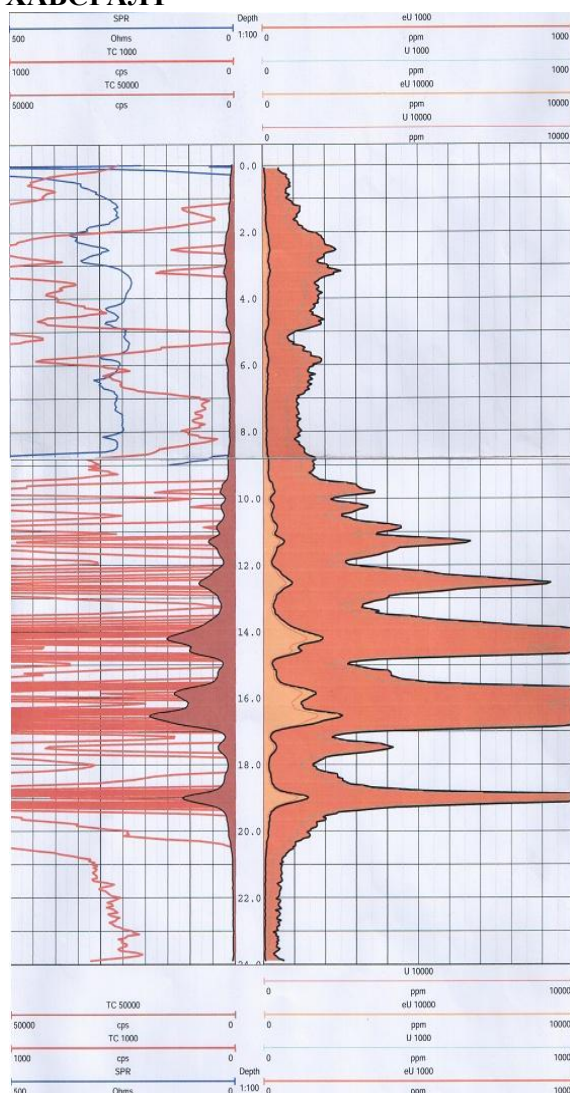
IV. ДҮГНЭЛТ

- 186 кэВ энергитэй нийлбэр шугамд ^{235}U ба ^{226}Ra -ийн эзлэх хувийг ^{235}U -ийн 143.7 кэВ энергитэй шугамаар болон ^{214}Bi -ын 609 кэВ энергитэй шугамаас тооцоолж олсон дүнгээ уран, радийн цацраг идэвхийн тэнцвэрт үеийн ^{235}U ба ^{226}Ra -ийн шугамын харьцаагаар шалгах, ^{222}Rn -ийн богино наст задралын бүтээгдэхүүн ^{214}Bi -ын 609 кэВ энергитэй шугам болон ^{226}Ra -ийн 186.2 кэВ энергитэй шугамаар ради, радоны цацраг идэвхийн тэнцвэрийг тодорхойлох арга зүй боловсруулав.
- Бидний боловсруулсан арга зүй зөв болох нь судалгаа хийсэн ураны хүдрийн дээжүүдээс SL1001 цооногийн 2-3 метрийн гүний 14-р дээжинд уран, радийн цацраг идэвхийн тэнцвэр тогтсон ($\text{Ra}/\text{U}=1$) болохыг 186 кэВ энергитэй нийлбэр шугамд ^{235}U ба ^{226}Ra -ийн эзлэх хувийг ^{235}U -ийн 143.7 кэВ энергитэй шугамаар болон ^{214}Bi -ын 609 кэВ энергитэй шугамаас тооцоолж олсон дүн

(2-р зураг) хэмжилтийн алдааны дотор тохирч байгаагаар батлагдаж байна. SL1002 цооногийн 19-20 метрийн гүний 13-р дээжинд цацраг идэвхийн тэнцвэр 1.45 байгаа нь ради хуримтлагдсантай холбоотой байж болно.

- Архангай аймгийн Өндөр-Улаан сумын нутагт орших ураны хайгуулын Чулуут төслийн талбайн SL1001 ба SL1002 хоёр цооногийн өндрөөс хамааруулан авсан ураны хүдрийн дээжинд хийсэн судалгаанаас харахад ураны хүдрийн ихэнх дээжинд уран, радийн цацраг идэвхийн тэнцвэр алдагдсан нь хөрсний усаар уран нэмэгдэн хуримтлагдсан болохыг гэрчилж байгаа бөгөөд цацраг идэвхийн тэнцвэрт ороогүй цооногийн радоны богино наст бүтээгдэхүүний гамма цацраг бүртгэсэн гамма каратожийн диаграмм дээр уран илрэхгүй учраас гамма каратожийн диаграммаар тооцоолсон ураны нөөцийн хэмжээ дутуу үнэлэгдэх болно.

ХАВСРАЛТ



Зураг3. Ураны хайгуулын Чулуут төслийн талбайн SL1001 ба SL1002 цооногийн гамма каратожийн диаграмм

Хүснэгт 4. Ураны хүдэр дэх цацраг идэвхийн тэнцвэрийг 143.7 кэВ энергитэй шугамаар тодорхойлсон үр дүн

д/д	Дээжийн индекс	Өндөрийн интервал, м	^{143}S	^{186}S	$^{185}\text{S}_{235}$	$^{86}\text{S}_{\text{Ra}226}$	$^{609}\text{S}_{\text{Ra}226}$	Цацраг идэвхт элементийн агуулалт		Ra/U
								U, г/т	U (Ra), г/т	
1	A0000002	2-3	107	1249	584.13	764.87	2503	139.6	101.0	0.72
2	A0000003	3-4	1073	8681	3852.1	4828.9	13063	225.6	129.2	0.57
3	A0000009	9-10	794	5980	2843.2	3136.7	11065	140.5	89.6	0.64
4	A0000010	10-11	1716	13651	6160.4	7490.5	23443	294.7	183.1	0.62
5	A0000011	11-12	2120	17282	7610.8	9671.2	29647	380.3	244.4	0.64
6	A0000012	12-13	2505	21823	8992.9	12830	37699	451.5	312.9	0.69
7	A0000014	13-14	2066	16716	7416.9	9299.1	28339	354.6	221.2	0.62
8	A0000015	14-15	1037	9138	3722.8	5415.2	13465	986.7	610.5	0.62
9	A0000018	15-16	3098	25175	11121	14053	40637	567.4	343.6	0.60
10	A0000019	16-17	1151	9914	4132.1	5781.9	16333	1093	739.2	0.67
11	A0000020	17-18	1474	12583	5291.6	7291.3	23846	267.6	199.7	0.74
12	A0000021	18-19	1305	11257	4684.9	6572.1	22363	1135	926.7	0.82
13	A0000022	19-20	866	8764	2150.4	6613.6	18639	115.6	153.1	1.25
14	A0000035	2-3	375	3720	1346.2	2373.7	8236	357.0	369.0	1.03
15	A0000038	5-6	218	2045	782.62	1262.4	3093	223.0	128.1	0.57
16	A0000040	7-8	1380	10225	4954.2	5270.8	18296	1035	750.3	0.72
17	A0000041	8-9	2283	18488	8195.5	10292	31557	2104	1386	0.67

18	A0000042	9-10	1672	13692	6002.5	7689.5	21453	1494	913.2	0.63
19	A0000045	10-11	2934	24040	10533	13507	43605	2475	1752	0.66
20	A0000047	11-12	1269	9164	3895.1	5268.8	16400	187.9	129.4	0.68
21	A0000048	12-13	216	2056	775.44	1280.5	3416	175.3	132.1	0.61
22	A0000051	15-16	1154	8127	3773.1	4353.9	13346	185.2	107.1	0.58
23	A0000052	16-17	1141	9576	4096.2	8479.8	15178	901.5	571.4	0.71
24	A0000053	17-18	1830	14862	6569.7	8292.3	20587	1583	848.6	0.75
25	A0000057	21-22	1886	16923	5988.1	10931	30269	334.2	285.4	0.85
26	A0000058	22-23	1422	11959	5104.9	6854.0	15962	1419	759.1	0.63
27	A0000059	23-24	4366	33661	12015	21645	57809	611.5	488.3	0.79

Ураны агуулалт хамгийн бага (115.6 Бк/кг) **A0000002** дээжийн хэмжилтын алдаа 6.9 %, ураны агуулалт хамгийн их (2475 Бк/кг) A0000045 дээжийн хэмжилтийн алдаа 1,3 % байв

Хүснэгт 5. Ураны хүдэр дэх цацраг идэвхийн тэнцвэрийг 609 кэВ энергитэй шугамаар тодорхойлсон үр дүн

д/д	Дээжийн индекс	Өндөрийн интервал, м	^{186}S	^{609}S	$^{185.7}\text{S}_{\text{U}235}$	$^{186}\text{S}_{\text{Ra}226}$	Цацраг идэвхт элементийн агуулалт		Ra/U
							U, г/г	U (Ra), г/г	
1	A0000002	2-3	1249	2503	535.65	713.35	127.8	101.0	0.93
2	A0000003	3-4	8681	13063	4958.1	3722.9	288.4	129.1	0.45
3	A0000009	9-10	5980	11065	2826.5	3153.5	134.1	89.6	0.67
4	A0000010	10-11	13651	23443	6969.7	6681.2	317.4	183.0	0.58
5	A0000011	11-12	17282	29647	8832.6	8449.4	424.1	244.4	0.58
6	A0000012	12-13	21823	37699	11079	10744	535.0	312.8	0.58
7	A0000014	13-14	16716	28339	8639.4	8076.6	393.0	221.2	0.56
8	A0000015	14-15	9138	13465	5300.5	3837.5	1404	610.5	0.48
9	A0000018	15-16	25175	40637	13593	11581	669.0	343.6	0.51
10	A0000019	16-17	9914	16333	5259.1	4654.9	1391	739.2	0.53
11	A0000020	17-18	12583	23846	5786.9	6796.1	282.1	199.7	0.71
12	A0000021	18-19	11257	22363	4883.5	6373.4	1182	926.7	0.87
13	A0000022	19-20	8764	18639	3451.8	5312.1	164.6	153.1	0.93
14	A0000035	2-3	3720	8236	1372.7	2347.2	364.1	368.9	1.01
15	A0000038	5-6	2045	3093	1163.5	881.51	279.8	125.6	0.45
16	A0000040	7-8	10225	18296	5010.6	5214.3	1078	673.4	0.62
17	A0000041	8-9	18488	31557	9494.2	8993.7	2438	1385	0.57
18	A0000042	9-10	13692	21453	7577.9	6114.1	1885	913.2	0.48
19	A0000045	10-11	24040	43605	11612	12427	2728	1752	0.64
20	A0000047	11-12	9164	16400	4490.0	4674.0	207.1	129.4	0.62
21	A0000048	12-13	2056	3416	1082.4	973.56	244.6	132.1	0.60
22	A0000051	15-16	8127	13346	4323.4	3803.6	203.6	107.1	0.53
23	A0000052	16-17	9576	15178	5250.3	4325.7	1155	571.4	0.55
24	A0000053	17-18	14862	20587	8994.7	5867.3	2167	848.6	0.49
25	A0000057	21-22	16923	30269	8296.3	8626.6	455.5	285.4	0.63
26	A0000058	22-23	11959	15962	7409.8	4549.2	2059	759.1	0.41
27	A0000059	23-24	33661	57809	17185	16475	843.6	488.3	0.58

Хүснэгт 6. Цацрагийн идэвхийн тэнцвэртэй үеийн харьцаагаар тооцсон үр дүн

Д/д	Дээжийн индекс	Өндөрийн интервал, м	^{186}S	$^{185.7}\text{S}_{\text{U}235}$	$^{186}\text{S}_{\text{Ra}226}$	Цацраг идэвхт элементийн агуулалт		Ra/U
						U, г/г	U (Ra), г/г	
1	A0000002	2-3	1249	540.82	708.18	129.0	101.0	0.78
2	A0000003	3-4	8681	3758.8	4922.13	217.8	129.1	0.59
3	A0000009	9-10	5980	2589.3	3390.66	122.7	89.6	0.73
4	A0000010	10-11	13651	5910.8	7740.12	268.8	183.0	0.68
5	A0000011	11-12	17282	7483.1	9798.89	358.9	244.4	0.68
6	A0000012	12-13	21823	9449.4	12373.64	455.9	312.8	0.69
7	A0000014	13-14	16716	7238.1	9477.97	328.9	221.2	0.67
8	A0000015	14-15	9138	3956.7	5181.24	1049	610.5	0.58
9	A0000018	15-16	25175	10900.7	14274.23	535.9	343.6	0.64
10	A0000019	16-17	9914	4292.7	5621.24	1136	739.2	0.65
11	A0000020	17-18	12583	5448.4	7134.56	265.5	199.7	0.75
12	A0000021	18-19	11257	4874.3	6382.72	1181	926.7	0.78
13	A0000022	19-20	8764	3794.8	4969.19	181.3	153.1	0.84
14	A0000035	2-3	3720	1610.8	2109.24	426.9	468.9	1.09
15	A0000038	5-6	2045	885.48	1159.51	212.7	125.6	0.59
16	A0000040	7-8	10225	4427.4	5797.57	952.5	673.4	0.71
17	A0000041	8-9	18488	8005.3	10482.70	2055	1386	0.67
18	A0000042	9-10	13692	5928.6	7763.36	1475	913.2	0.62
19	A0000045	10-11	24040	10409	13630.68	2446	1753	0.72

20	A0000047	11-12	9164	3968.1	5195.99	182.7	129.4	0.71
21	A0000048	12-13	2056	890.25	1165.75	201.2	132.1	0.66
22	A0000051	15-16	8127	3518.9	4608.01	165.2	107.1	0.65
23	A0000052	16-17	9576	4146.4	5429.59	912.4	571.4	0.63
24	A0000053	17-18	14862	6435.3	8426.75	1551	848.6	0.55
25	A0000057	21-22	16923	7327.6	9595.34	401.9	285.4	0.71
26	A0000058	22-23	11959	5178.2	6780.75	1440	759.1	0.53
27	A0000059	23-24	33661	14575	19085.79	715.1	488.3	0.68

АШИГЛАСАН ХЭВЛЭЛ

- [1] Н.Норов, О.Отгонсүрэн, С.Даваа. Дорнод Монголын нүүрсний цацраг идэвхийг судалсан дүн, МУИС, Эрдэм шинжилгээний бичиг, 1997, №2(125), 42-47-р тал.
- [2] Ш.Гэрбиш, Н.Ганбаатар, Ж.Сэрээтэр. Уран торийг тодорхойлох γ-спектрометрийн арга, МУИС, Эрдэм шинжилгээний бичиг, 1997, №2(125), 11-17-р тал.
- [3] Н.Ганбаатар, Г.Хүүхэнхүү, Н.Норов. Б.Болормаа, Эзлэхүүнт дээжийг судлах үнэмлэхүй арга. Улаанбаатар, МУИС ЭШБ, 1997, № 4(137)8. 62-67-р тал.
- [4] Chultem. D., Norov N., Ganzorig J., Gansukh N. A study of Uranium/Radium disequilibrium by the spectral line centroid expansion method, Nuclear Geophysics, 1991, Vol.5, No4, pp541-545, Oxford, Pergamum Press.
- [5] Ж.Сэрээтэр, Н.Ганбаатар, Ш.Гэрбиш. Ураны хүдрийн дээжинд радий, ураны харьцааг тодорхойлох харьцангуй арга: МУИС, Эрдэм шинжилгээний бичиг, 1997, №2(125), 73-76-р тал.
- [6] Н.Норов, Ж.Ганзориг, С.Даваа. Хүрэн нүүрсэнд цацраг идэвхийн тэнцвэрийг тодорхойлсон нь, МУИС, Эрдэм шинжилгээний бичиг, 1997, №2(125), 88-93-р тал.
- [7] Новиков Г.Ф. Радиометрическая разведка. Учебник для вузов, Л.: Недра, 1989.
- [8] INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY, Measurement of Radionuclides in food and the Environment, 1989, Technical Reports Series №295.
- [9] Table of nuclides 2000, Nuclear Data Center, Korea Atomic Energy Research Institute /<http://atom.kaeri.re.kr/>.
- [10] Y.Y.Ebaid. Use of gamma-ray spectrometry for uranium isotopic analysis in environmental samples, 2009. pp.69-74.
- [11] Bickel.M, W.Nagel and F.Qulk. High precision determination of Uranium in ore by Gamma-ray Spectrometry, Radioanalytical and Nuclear Chemistry, 1996, Vol.209, 1, pp.113-121.
- [12] Н.Норов, С.Даваа, Н.Ганбаатар. Байгалийн цацраг идэвхийг судлах гамма спектрометрийн нэгэн арга, МУИС, Эрдэм шинжилгээний бичиг, 1999, № 6(147), 162-169-р тал.

A Study of Radioactive Equilibrium in Uranium Ore

G.Tsembelmaa, N.Norov and N.Enkhbat

Nuclear Research Center, National University of Mongolia, University Street-1, Ulaanbaatar-210646, Mongolia

This work was developed an evaluation method for uranium, radium equilibrium using 186 keV energy sum of ^{226}Ra , ^{235}U isotope. To evaluate radioactive equilibrium between uranium and radium, taking account on 186 keV energy of ^{235}U by peak area of 143.7, 63 keV energy and calculated peak area of ^{226}Ra . Also radioactive equilibrium between uranium and radium has determined by gamma ray peak of ^{222}Rn progeny and calculated actual peak area of ^{226}Ra isotope.

Монгол улсад цөмийн энерги ашиглахад олон нийтийн хүлээн зөвшөөрлийг бий болгох нь

С.Одмаа*, С.Даваа, Т.Дэлгэрсайхан, Ц.Амартайван, Г.Хүүхэнхүү

Монгол Улс, Улаанбаатар-210646, Монгол Улсын Их Сургууль, Цөмийн Судалгааны Төв

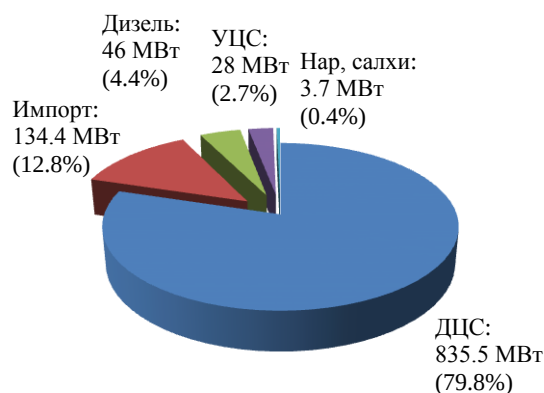
*Э- шуудан sodmaa1@yahoo.com

Цөмийн эрчим хүчний талаар ард иргэдийн ерөнхий хандлагыг тодорхойлох зорилгоор анх удаа санал асуулга явуулан, үр дүнд шинжилгээ хийв. Монгол оронд цөмийн эрчим хүчийг ашиглах талаар ард иргэдийн хүлээлт, эерэг болон сөрөг хандлага, тэдгээрийн шалтгаан, нөлөөлж буй хүчин зүйлсийг тодорхойлов.

PACS: 01.75.+m

I.ОРШИЛ

Монгол улс нийт эрчим хүчнийхээ дийлэнх хувийг түүхий нүүрс түлдэг дулааны цахилгаан станцуудаас хангаж байгаа нь 2010 оны байдлаар манай орны эрчим хүчний нөөцийн ашиглалтын байдлыг эх үүсвэрээр нь харьцуулсан зураг 1-ээс тодорхой харагдана [1].



Зураг 1. Эрчим хүчний нөөцийн ашиглалтын байдал (2010 оны байдлаар)

Сүүлийн жилүүдэд хот суурин газарт ялангуяа Улаанбаатар хотод хөдөөнөөс шилжин ирэх хүн амын тооны механик өсөлтийн улмаас нүүрс түлдэг гэр хороолол нэмэгдэж, улмаар агаарын бохирдол хэт ихэсч байгаа нь оршин суугчдын эрүүл мэндэд шууд нөлөөлөхөөс гадна цаг уурт өөрчлөлт оруулахуйц хэмжээнд байна [2,3].

Эрчим хүчний салбарт нэг төрлийн эх үүсвэр ноёлох нь найдвартай байдлыг хангаж чаддаггүй бөгөөд өөрийн орны онцлог, эдийн засгийн нааштай үзүүлэлтүүдэд тулгуурлан зохистой харьцаагаар хэд хэдэн эх үүсвэрийн холимог хувилбараар шаардагдах эрчим хүчээ хангах нь зөв гарц юм. Мөн улс орны тусгаар тогтнолын баталгааны бас нэг гол үзүүлэлт нь

эрчим хүчний хараат бус байх явдал байдаг. Монгол оронд уул уурхайн үйлдвэрлэл болон дэд бүтэц хурдан хөгжиж үйлдвэрүүд олноор баригдаж, хүн амын амьдралын түвшин дээшлэхэд цахилгаан дулааны эрчим хүч ихээр шаардагдана. Нөгөө талаас, Монгол орон эрс тэс хүйтэн ширүүн уур амьсгалтай тул халаалтын буюу дулааны эрчим хүчний хэрэгцээ их байдаг онцлогтой. Монголын засгийн газрын бодлогод [4,5] ирээдүйн өсөн нэмэгдэх эрчим хүчийг хангах эх үүсвэрүүдийн нэг нь цөмийн эрчим хүч байх болно гэж заасан бөгөөд 2009 онд УИХ-аар Цөмийн энерги, цацраг идэвхт ашигт малтмал ашиглах талаар баримтлах төрийн бодлого болон Цөмийн энергийн хуулийг соёрхон баталсан билээ [6]. Ийнхүү цөмийн эрчим хүч нь улс оронд тулгараад байгаа агаарын бохирдлын асуудлыг шийдэх болон өсөн нэмэгдэж буй дулаан цахилгааны эрчим хүчний хэрэгцээг хангах арга замуудын нэг байж болох хууль эрх зүйн орчин бүрдүүлэх, хөтөлбөр, төлөвлөгөө боловсруулах ажил хийгдэж байна.

Энэ мэтээр бодлого эрх зүйн орчинд тодорхой ажлууд хийгдэж байгаа боловч цөмийн эрчим хүчийг ашиглах талаар ард олон ямар санал бодолтой байгаа талаар тодорхой судалгаа шинжилгээ хийгдээгүй байсан юм. Иймд энэ асуудалд нилээд өргөн хүрээг хамруулан ард нийтийн байр суурийн ерөнхий түвшинг тандах, санал бодолд задлан шинжилгээ хийн, Монгол оронд цөмийн эрчим хүчийг ашиглах талаар ард иргэдийн хүлээлт, эерэг болон сөрөг хандлага, тэдгээрийн шалтгаан, нөлөөлж буй хүчин зүйлсийг тодорхойлон, цаашид олон нийтэд зөв мэдлэг, мэдээлэл олгох асуудал боловсруулахад үндэслэл болгох зорилгоор анх удаа өргөн хүрээтэй санал асуулга авав.

Ц.АРГА ЗҮЙ

Санал асуулгыг 2011.07.24-08.19-ны хооронд интернэтээр болон цаасан асуулга хэлбэрээр авсан ба цаасан асуулгыг Улаанбаатар хотын төвийн 6 дүүрэг, захын 1 дүүрэг (Налайх), Дархан, Эрдэнэт хотууд болон хөдөө орон нутгийн 4 аймаг (Завхан, Ховд, Дорноговь, Дорнод) -ийн ард иргэдийн төлөөллөөс авлаа. Дорнод, Дорноговь аймагт ураны ордын хайгуул, судалгаа хийгдэж байгаа ба Ховд аймаг хэрэгцээт цахилгаан эрчим хүчээ ОХУ-аас импортолдог. Завхан аймгийн хувьд нүүрсний хангалттай нөөц байхгүй юм. Тиймээс эдгээр нутгийн иргэд ирээдүйн эрчим хүчний хангамжийн талаар өөр өөр бодолтой байх гэсэн таамаглалаар судалгаанд хамрууллаа.

2010 оны эцсийн байдлаар Монголын хүн ам 2,754,685 байсан ба үүний 4 % буюу 107,140 нь гадаадад 6 сараас дээш хугацаагаар оршин суугаа, 65 % буюу 1,798,147 нь хотод, үлдсэн 31 % буюу 849,398 нь хөдөө орон нутагт оршин суудаг байв [7]. Энэ удаагийн санал асуулгад 18-аас дээш насны нийт 1671 хүн хамрагдсан ба цаасан асуулгад 1513 хүн (90.5%), үлдсэн 158 хүн (9.5%) интернетээр саналаа өгчээ. Улаанбаатар хотоос нийт 813 хүн, Дархан, Эрдэнэт хотуудаас тус бүр 150 хүн, аймгуудаас тус бүр 100 хүн санал асуулга өгсөн байна.

18 ба түүнээс дээш насны хүн бүр аливаа улс эх орны нийгэм, эдийн засгийн хөгжилд тодорхой хэмжээгээр өөрийн дуу хоолойгоо үзэл бодолдоо тулгуурлан илэрхийлдэг билээ. Тиймээс 18 ба түүнээс дээш насны 1,689,922 хүн амаас төлөөлөх чадвар өндөр байхаар (итгэх магадлал 99%, итгэх түвшин 3) түүвэрлэлт хийсэн. Санал асуулгын дүнд тоон судалгааны арга хэрэглэн их олонлогийг төлөөлүүлэн [8] түүвэрлэлт хийсэн. Судалгааны мэдээллийг боловсруулахдаа SPSS.17 программыг [9] ашигласан бөгөөд давтамжийн хүснэгт болон харьцуулсан үзүүлэлтүүдийг гаргах замаар хамаарлын хүчин зүйлийн шинжилгээ хийв.

Монгол улсын хүн амын бүтэц харьцангуй залуу [7] бөгөөд судалгаанд хамрагдагчдын 56 % нь 35 хүртэлх насны хүн, хүйсийн хувьд 44 % нь эрэгтэй, 56 % нь эмэгтэй байв. Судалгаанд хамрагдагсдыг боловсролын түвшингээр нь харахад 975 хүн буюу 58 % нь дээд боловсролтой, 396 хүн буюу 24 % нь бүрэн дунд боловсролтой байлаа. Энэ нь Монгол улсын нийт хүн амын бүтэцтэй харьцуулахад

[7] боловсрол өндөртэй хүмүүс илүү хамрагдсан байна.

Судалгаанд хот суурин газрын 1168 (70%), хөдөө орон нутгийн 452 (27%), гадаадад оршин суугаа 52 (3%) монгол хүн хамрагдав. Судалгаанд хамрагдагсдын 1132 хүн буюу 68 % нь ажил эрхэлдэг, үлдсэн 539 хүн буюу 32 % нь ажилгүй буюу оюутан сурагч, гэрийн эзэгтэй, тэтгэвэрт гарсан болон хөгжлийн бэрхшээлтэй иргэд байлаа. Санал асуулгад оролцогсдын ихэнх нь санхүүгийн нөхцөл байдлаа өөрийн амьдардаг хот суурин газрын бусад айл өрхтэй бараг ижил гэж үзсэн байна.

Ш.ҮР ДҮН БА ХЭЛЦЭМЖ

Судалгаанд хамрагдагчдын дийлэнх хувь нь өөрийн орны цахилгаан эрчим хүчийг хангахын тулд сэргээгдэх эрчим хүчийг дэмжинэ гэсэн бол цөмийн эрчим хүчийг нийт судалгаанд хамрагдагсдын 746 буюу 45 % нь дэмжинэ гэж хариулжээ (хүснэгт 1). Ерөнхийдөө эрчим хүчний дан ганц нүүрсэнд тулгуурласан байдлыг ард иргэд дэмжихгүй байгаа ба дийлэнх олонх нь олон төрлийн эх үүсвэрээр

Хүснэгт 1. Эрчим хүчний эх үүсвэрийг дэмжих байдал (дүнд эзлэх хувиар, %)

Эрчим хүчний эх үүсвэр	Тууштай дэмжинэ	Зарим талаар дэмжинэ	Үл ялиг эсэргүүцнэ	Эрс эсэргүүцнэ	Мэдэхгүй
Байгалийн хий	32	29	8	5	26
Газрын тос	35	33	9	6	17
Нүүрс	29	31	18	14	9
Цөмийн эрчим хүч	21	24	11	23	21
Усны энерги	42	28	9	8	13
Салхины энерги	60	24	5	2	10
Нарны энерги	73	17	3	1	7

эрчим хүчний хэрэгцээгээ хангах нь дээр гэж үзэж байгаа нь сайшаалтай хэрэг. Түүнчлэн газрын тос, цөмийн эрчим хүч, байгалийн хий гэсэн эх үүсвэрүүдийг дэмжих эсэхээ мэдэхгүй гэсэн хариулт 17% -26% эзэлж байгаа нь ард иргэдийн дунд эрчим хүчний эдгээр эх үүсвэрийн талаарх мэдлэг, мэдээлэл харьцангуй хомс байгааг харуулж байна. Гэхдээ энэ бол бодит байдлын тусгал юм. Учир нь, Монгол улс байгалийн хий байхгүй, газрын тосыг бага хэмжээгээр олборлодог боловч

боловсруулдаггүй, шатахуунаа бүгдийг гаднаас авдагтай холбоотой.

Судалгаанд хамрагдагсдын гуравны нэг нь нүүрсийг эрчим хүчний эх үүсвэр болгон ашиглахыг эсэргүүцнэ гэсэн байгаа нь сүүлийн жилүүдэд хүйтний улиралд Монголын томоохон хот суурин газарт, ялангуяа Улаанбаатар хотод агаарын бохирдол эрс нэмэгдэж гамшгийн хэмжээнд хүрч ард иргэдийн эрүүл мэндэд муугаар нөлөөлөх болсонтой шууд холбоотой. Энэ нь ард иргэд, тэр дундаа залуучууд улс эх орныхоо цахилгаан эрчим хүчийг хангахын тулд олон эх үүсвэрийг одооноос сайтар судлан үзэж, шаардлагатай өндөр технологийг нэвтрүүлэн, тэдгээрийг зохистой харьцаагаар хэрэгжүүлж эхлэх нь зүйтэй гэсэн байр суурьтай байгаагийн илэрхийлэл гэж үзэж болох юм.

Хүснэгт 2. Цөмийн эрчим хүчийг дэмжих эсэх, % (байршлаар)

	Хот	Хөдөө	Гадаад	Дундаж
Тууштай дэмжинэ	21	17	57	21
Зарим талаар дэмжинэ	27	16	20	24
Үл ялиг эсэргүүцнэ	11	12	6	11
Эрс эсэргүүцнэ	22	27	4	23
Мэдэхгүй	19	28	14	21

Монголдоо амьдарч буй иргэдтэй харьцуулахад гадаадад оршин амьдарч буй иргэд (76%) өөрийн орны цахилгаан эрчим хүчийг цөмийн эрчим хүчээр хангахыг дэмжиж байгаа нь анхаарал татаж байв (хүснэгт 2). Энэ нь тухайн хүмүүсийн одоогийн оршин амьдарч буй газар нь цөмийн эрчим хүчийг ашигладаг ба эдгээр хүмүүс түүний давуу болон үр өгөөжийн талаар тодорхой хэмжээний мэдээлэл авдагтай нь холбоотой байх талтай.

Залуу хүмүүстэй харьцуулахад ахмад насны хүмүүс уламжлалт буюу Монголын эрчим хүчний голлох эх үүсвэрийн түүхий эд болох нүүрсийг илүү дэмжиж байна (хүснэгт 3).

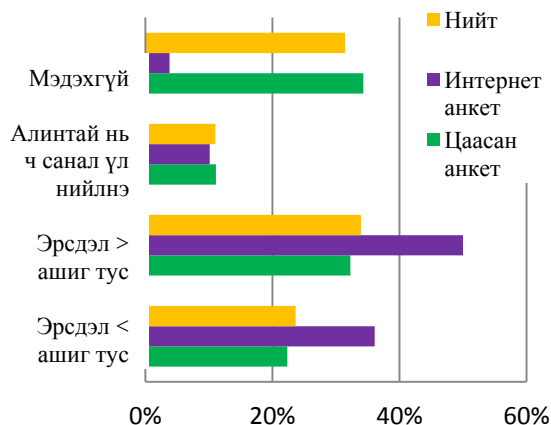
Судалгаанд хамрагдагсдын 567 хүн буюу гуравны нэг (34%) нь цөмийн эрчим хүчийг ашигласнаар учруулж болох эрсдэл нь түүний давуу талаас илүү гэсэн бол үлдсэн гуравны нэг (31%) буюу 525 хүн энэ талаар мэдэхгүй гэсэн байна. Энэ нь 2011 оны 3-р сард Японы Фүкүшима ЦЦС-д болсон ослын дараах хүнд нөхцөл байдлын талаарх таагүй мэдээллийн

улмаас, мөн гадаадын хэвлэл мэдээллийн хэрэгслээр сүүлийн үед Монгол улсад цөмийн хаягдлыг булшлах тухай цуурхал дэгдсэнээс үүдэн ард иргэдийн дунд сөрөг сурталчилгаа хийгдэж, цөмийн цацраг, хаягдал, ЦЦС-ын осол гэмтлийн эрсдлийн тухай мэдээлэл илүүтэй тархсанаас үүдэлтэй байж болно. Энд мөн Европын холбооны зарим улс (ХБНГУ) ЦЦС-аас татгалзах мэдэгдэл хийсэн нь нөлөө үзүүлсэн байж болох талтай.

Хүснэгт 3. Нүүрсийг дэмжих эсэх, % (насны бүлгээр)

	18-24	25-34	35-44	45-54	55-59	60+	Дундаж
Тууштай дэмжинэ	27	24	30	34	34	40	29
Зарим талаар дэмжинэ	23	33	35	34	41	29	31
Үл ялиг эсэргүүцнэ	19	21	15	13	16	13	18
Эрс эсэргүүцнэ	19	15	11	10	3	6	14
Мэдэхгүй	11	7	8	9	6	12	9

Энэ асуудлын талаар мэдэхгүй гэж цаасаар хариулсан хүмүүс давуутай байгаа нь монголд оршин суугчид мэдээлэл үнэхээр хомс байгааг харуулж байна (зураг 2).



Зураг 2. Цөмийн эрчим хүчний ашиг тус, эрсдэл

Ирээдүйд Монгол улсын цахилгаан эрчим хүчний өсөн нэмэгдэж буй хэрэгцээг хангахад цөмийн эрчим хүч чухал хэмээн судалгаанд хамрагдагсдын талаас илүү хувь (53%) нь үзсэн байна. Энэ нь нэг талаас одоогийн ашиглагдаж буй дулааны цахилгаан станцуудын ашиглалтын хугацаа дуусах дөхөж байгаа, агаар орчинг ихээр бохирдуулж байгаа, эдгээрийн урсгал засварт жил бүр ихээхэн хөрөнгө

зарцуулдаг нь зөв алхам биш гэж үзэх иргэд олон байдагтай холбоотой байж болох бөгөөд нөгөө талаас техник технологи хурдацтай хөгжихийн хэрээр урт хугацаанд аюулгүй, найдвартай ажиллах цөмийн эрчим хүчний дэвшилтэт реактор ашиглах нь дамжиггүй гэдэгт олонхи итгэл төгс байгаатай холбоотой бизээ. Хүснэгт 4-д үзүүлснээр цөмийн эрчим хүчний ач холбогдлын талаарх асуулгад харьцангуй олон хүн эерэг чиг хандлагатай байгаа нь харагдаж байна. Сүүлийн жилүүдэд агаарын бохирдол, цаг уурын өөрчлөлт, элсний нүүдэл мэдэгдэхүйц ихэсч, үүнтэй холбоотой гадаргын болон газрын гүний ус багасч, олон гол горхи, нуур цөөрөм ширгэн, экологийн тэнцвэр алдагдаж байгаагийн гол шалтгаан нь хүний оролцоотойгоор байгаль орчинд ээлгүй эрчим хүчний үйлдвэрлэл, машин тоног төхөөрөмжийн хэрэглээний уршгаар хүлэмжийн хийн ялгаралт ихэссэнтэй холбоотой байгааг олон тооны судалгаа харуулж байгаа билээ. Үүнийг иргэд ойлгон ухамсарлаж энэ сөрөг үзэгдэлд цэг тавих боломжит гарцын нэг нь цөмийн эрчим хүч байж болно гэж хүлээн зөвшөөрч байгааг уг хүснэгтээс харж болно.

Хоёр том гүрний дунд орших манай орны хувьд бензин шатахуун нь 100% зөвхөн тэднээс хараат байдаг бөгөөд хэдэн сарын өмнө ОХУ шатахууны экспортоноо хориг тавьснаас болж манайд шатахуун нийлүүлэлт тасалдаж, хэцүүхэн байдалд орсон нь ард иргэдийн амьдралд мэдэгдэхүйц нөлөөлсөн. Бензин шатахуун ховордож, түүний үнэ өссөнөөр, хүнсний өргөн хэрэглээний барааны нилээд хувийг импортоор тээвэрлэн оруулж ирдэг манай орны хувьд хэрэглэгчдэд хүрэх ердийн хэрэглээний барааны өртөгт огцом нөлөөлж, энэ эх үүсвэр хэр эмзэг болохыг ард иргэд

мэдрэв. Эрчим хүчний хараат бус байдлын чухлыг ойлгосон хүмүүс ураны баялгаа ашиглан эрчим хүч үйлдвэрлэх хэрэгтэй юм байна гэж үзсэн байх магадлалтай. Магадгүй энэ үүднээс цөмийн эрчим хүч ашигласнаар гадны импортын түлшнээс хараат байдлыг бууруулах боломжтой гэж үзэгсэд санал асуулгад оролцогсдын 60%-ийг эзэлж байж мэднэ.

Үүний зэрэгцээ ард иргэдийн дунд эрчим хүчний талаарх тэр дундаа цөмийн эрчим хүчний талаарх мэдээлэл харьцангуй хомс байгаа нь судалгаанд хамрагдагсдын 19-43% (хүснэгт 4, 5) нь цөмийн эрчим хүчний давуу талын талаарх асуулт бүрт мэдэхгүй гэж хариулснаас харагдана.

Манай орны хувьд цөмийн эрчим хүчний асуудал дөнгөж хөндөгдөж эхэлж байгаа болохоор хууль эрх зүйн орчны хувьд хангалтгүй гэж үзэгсэд дийлэнх олонхийг хамарч байна. Цаашилбал одоогоор манай оронд цөмийн эрчим хүч, инженерчлэлийн чиглэлийн дотоодын хангалттай боловсон хүчин байхгүй, энэ асуудал дээд боловсролын системд дөнгөж тавигдаж эхэлж байгаа бөгөөд манайд энэ талын холбогдох байгууллага олон байхгүй байна. Иймд манай орны хувьд ЦЦС-ыг ажиллуулдаг компани одоохондоо байхгүй тул ард иргэдээс итгэл үнэмшил хүлээнэ гэсэн асуудлыг ярих ч эрт байна.

Ирээдүйд эрчим хүчний олон эх үүсвэр дотор цөмийн эрчим хүчний одоогийн эзлэх хувь өснө хэмээн судалгаанд хамрагдагсдын гуравны нэг буюу 34% нь хариулсан бол энэ талаар сайн мэдэхгүй байна гэсэн хүн 37%, хэвээрээ байна гэж 13%, багасах байхаа гэж 16% нь хариулсан байна. Өснө гэж таамаглаж байгаа хэсэг нь эрчим хүчний хэрэглээгээрээ дэлхийд тэргүүлэгч гүрнүүдийн нэг болох

Хүснэгт 4. Цөмийн эрчим хүчний талаарх иргэдийн хандлага (дүнд эзлэх хувиар, %)

	Бүрэн нийлнэ	Нийлж болно	Зарим талаар нийлэхгүй	Огт үгүй	Мэдэхгүй
1. Цөмийн эрчим хүч байгаль орчны сөрөг өөрчлөлтийг хязгаарлахад тусална.	17	26	19	14	24
2. Цөмийн эрчим хүч ашиглах нь бензин шатахуун, байгалийн хий гэх зэрэг импортын түлшнээс хараат байдлыг бууруулахад тусална.	23	35	14	9	19
3. Цөмийн эрчим хүч нь илүү тогтвортой үнэтэй, өрсөлдөх чадвартай.	21	26	13	9	31

Хүснэгт 5. Цөмийн эрчим хүчний аюулгүй байдлын талаарх иргэдийн хандлага (дүнд эзлэх хувиар, %)

	Бүрэн нийлнэ	Нийлж болно	Зарим талаар нийлэхгүй	Огт үгүй	Мэдэхгүй
1 Цөмийн цахилгаан станцыг аюулгүй ажиллуулах боломжтой.	22	22	23	14	19
2 Хууль эрх зүй (манай орны) нь Цөмийн аюулгүй байдлыг хангалттай хангана.	8	16	22	25	28
3 Манай холбогдох мэргэжлийн байгууллагууд цөмийн цахилгаан станцын аюулгүй ажиллагааг хангалттай баталж чадна.	9	14	21	23	32
4 Та цөмийн цахилгаан станц ажиллуулдаг компаниудад итгэдэг.	10	13	20	27	30
5 Цацраг идэвхт хаягдлыг аюулгүй хадгалж болно.	9	15	15	29	32
6 Цөмийн цахилгаан станцууд террорист халдлагаас бүрэн хамгаалагдсан.	7	11	14	30	38
7 Цөмийн материалуудыг буруу ашиглахын эсрэг хангалттай хамгаалсан байдаг	8	12	14	23	43

манай өмнөд хөршийн цөмийн эрчим хүчний бодлого нь цаашдаа хэвээр үргэлжлэх талаарх мэдээлэлтэй холбоотой байж болох талтай байхад, эсрэг байр суурь эзлэгсдийн хувьд хөгжлөөрөө дэлхийд тэргүүлэгч Европын зарим орон цөмийн эрчим хүчнээс татгалзах мэдэгдэлтэй холбоотой байх магадлалтай. Ер нь энэ асуултад дэлхий дахины чиг хандлагыг бодож хариулсан байх талтай.

Судалгаанд хамрагдагсдын талаас илүү хувь нь манай оронд шинээр цөмийн цахилгаан станц барихтай санал нийлж байна гэсэн бөгөөд оршин суугаа байршлаар нь судалгаанд хамрагдагсдыг харьцуулж харахад (хүснэгт 6) гадаадад байгаа монголчууд эх орондоо цөмийн цахилгаан станц барихыг түлхүү дэмжиж байсан бол энэ талаар ямар нэгэн санал байхгүй гэж голдуу хөдөө, орон нутгийнхан хариулжээ.

ЦЦС барихыг дэмжигчид нь Монголд цөмийн эрчим хүчийг хэрэглэхийг дэмжиж буйгаа илэрхийлсэн хэсэгтэй тохирч байгаа нь үр дүнгүүд хоорондоо нийцэж байгааг харуулж байна.

Хүснэгт 6. Цөмийн цахилгаан станцыг барихыг дэмжих эсэх, % (байршлаар)

	Хот	Хөдөө	Гадаад	Дундаж
Бүрэн нийлнэ	24	19	43	24
Зарим талаар нийлнэ	32	31	29	32
Бага зэрэг нийлэхгүй	13	15	10	13
Эрс эсэргүүцнэ	22	23	18	22
Мэдэхгүй	8	12	0	9

Түүнчлэн насны хувьд аливаа шинэ зүйл, техник технологийн хөгжилтэй зэрэгцэж явдаг залуучууд энэ асуудалтай санал түлхүү нийлж байсан юм (хүснэгт 7).

Хүснэгт 7. Цөмийн цахилгаан станцыг дэмжих эсэх, % (насны бүлгээр)

	18-24	25-34	35-44	45-54	55-59	60+	Дундаж
Бүрэн нийлнэ	29	24	19	18	19	27	24
Зарим талаар нийлнэ	41	33	27	22	19	23	32
Бага зэрэг нийлэхгүй	13	14	13	15	14	15	13
Эрс эсэргүүцнэ	12	21	29	33	36	25	22
Мэдэхгүй	5	8	12	12	13	10	9

Хүснэгт 2, 6, 7 -аас өнгөц харахад, цөмийг дэмжиж байгаа хүмүүс 45% ба 56% гэж ялгаатай мэт харагдаж байна. Хүснэгт 2 нь улс орныхоо эрчим хүчний хэрэгцээг хангахын тул олон төрлийн эх үүсвэрээс алийг нь хэр дэмжиж байна гэсэн асуултын дүн юм. Энэ асуултад хариулахдаа цөмийн эрчим хүчийг нүүрс болон сэргээгдэх эрчим хүчний эх үүсвэрүүдтэй харьцуулаад 45% нь дэмжсэн байна. Хүснэгт 6, 7-ын хариулт нь бусад эх үүсвэрийн тухай дурьдалгүйгээр “Цөмийн станц барихтай санал нийлж байгаа эсэхийг” асуухад дээрхээс өндөр буюу 56% нь дэмжсэн хариулт өгчээ.

Цөмийн эрчим хүчгүйгээр сэргээгдэх эрчим хүчээр манай орны нийт эрчим хүчийг хангаж болно хэмээн судалгаанд хамрагдагсдын 49% үзсэн нь манай орны газар нутаг өргөн, хүн ам тархаж суурьшсантай холбоотойгоор байнга нүүдэллэн амьдардаг малчин өрхийн хэрэглээг хангах чадалтай, зөөврийн жижиг нарны зайн хэрэглээ илүүтэй гэж үзэж байгаатай холбогдож болно.

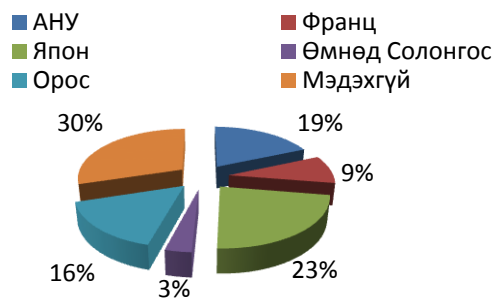
Иргэд өөрсдөө цөмийн цахилгаан станцын талаарх мэдлэгээ ерөнхийдөө муу гэж үнэлсэн. Энэ нь манай оронд ЦЦС байхгүй бөгөөд түүнийг цахилгаан эрчим хүчний эх үүсвэр болгон ашиглах талаар урьд өмнө нь төдийлөн сурталчилж байгаагүйтэй холбоотой. Иргэд цөмийн эрчим хүчний талаарх мэдээллийг ТВ, интернэт, сонин, сэтгүүлээс голдуу олж авдаг ч үүнийгээ хангалтгүй гэжээ. Судалгаанд хамрагдагсдын дийлэнх хэсэг нь ЦЦС-уудын аюулгүй байдлын гол механизм, үйл явцын талаар илүүтэй мэдэхийг хүсч байв.

Цөмийн аюулгүй байдлын талаар хамгийн итгэлтэй мэдээлэл өгөх субъектэд сэтгүүлчид, цөмийн энергийн газар болон тухайн чиглэлийн үйл ажиллагаа эрхэлдэг олон улсын байгууллагыг нэрлэсэн байна. Тиймээс сэтгүүлчид цөмийн эрчим хүчний талаар ямарваа нэгэн мэдээлэл өгөхдөө түүний үнэн зөв байдлыг сайтар нягталж зөв мэдээлэл өгөх нь зүйтэй юм. Эс тэгвэл тэдний өгсөн ташаа мэдээллийг иргэд авснаар сөрөг хандлагатай болж болзошгүй нь судалгааны үр дүнгээс харагдаж байна. Иймээс ерөнхий боловсролын сургуулийн сургалтын хөтөлбөрт эрчим хүчний, ялангуяа цөмийн эрчим хүчний давуу тал, эрсдэлийн тухай үндсэн мэдлэг, мэдээлэл өгч, сэтгүүлчдэд зориулан цөмийн эрчим хүч, цөмийн станцын хаягдлын талаар сургалт семинар хийх хэрэгтэй байна.

Цөмийн осол болоход хэвлэлээр цацагдаж байгаа мэдээллүүд нь ард иргэдийн айдас түгшүүрийг ихэсгэдэг болохоор цөмийн эрсдэл ер нь их гэж үзсэн байна. Үүнийг бидний амьдралд тохиолддог агаарын бохирдол, дэлхийн дулаарал, эдгэршгүй өвчин, архидалт, тамхидалт, автомашины осол, онгоцны осол, гэмт хэрэгт өртөх гэх мэт эрсдэлт зүйлстэй харьцуулж үзэх шаардлагатай.

Хэдийгээр Японы ЦЦС-д осол аваар гараад удаагүй байсан, тэр талаар телевиз, сонин хэвлэлээр их шуугисны дараа энэ санал асуулгыг авсан боловч судалгаанд хамрагдагсдын 23 % нь хэрэв манай оронд

ЦЦС баривал Японы технологийг импортлох нь харьцангуй давуу талтай гэсэн байна (зураг 3).



Зураг 3. ЦЦС барих технологи импортлох орон, дүнд эзлэх хувь

Харин 30 % нь мэдэхгүй гэж хариулсан нь асуулгын сонголтод цөмийн эрчим хүчийг эсэргүүцэж байгаа хүмүүс өөр сонголт байхгүй учраас “мэдэхгүй” гэсэн хариултыг сонгосон байх талтай.

Японы технологи өндөр хөгжсөн, машин техник, ахуйн хэрэглээний цахилгаан, электрон бараа найдвартай байдаг, бас манай оронд хамгийн их тусалдаг донор орон гэдгээр хүмүүс илүүтэй мэддэг тул бусад оронтой харьцуулахад хамгийн олон санал авсан байна. Дэлхийн ихэнх оронд ажиллаж байгаа ЦЦС нь АНУ-ын технологид үндэслэсэн байдаг тул Японы дараа санал авчээ. Бидний олон жилийн найрамдалт хөрш ОХУ-ын техник технологи, тэдний чанар, найдварт итгэж байдаг хүмүүс нийт санал асуулгад хамрагсдын 16%-ийг эзэлсэн байна. Эрчим хүчнийхээ нийт хэрэгцээний бараг 80 орчим хувийг дан цөмийн үйлдвэрлэлээс гарган авдаг Франц улсын талаарх мэдээлэл бас дутмаг байгаа нь ердөө 9%-ийн санал авснаас (Арева компани нь ажилладаг Дорноговьд мөн 9%) харагдаж байна.

Өмнөд Солонгос хамгийн бага буюу 3%-ийн санал авсан нь тухайн орны цөмийн эрчим хүчний өндөр технологийн талаар хүмүүст мэдлэг мэдээлэл дутмаг байгаатай холбоотой болов уу. Өмнөд Солонгос нь харьцангуй богино хугацаанд цөмийн инженерчлэл, эрчим хүчний технологийг сайн хөгжүүлж, найдвартай ажиллуулж байгаа бөгөөд өнөөг хүртэл осол гаргаж байгаагүй, Солонгосын ЦЦС-ууд ашиглалтын хувь өндөртэй байдаг тул манай Цөмийн Энергийн Газар Солонгосын SMART реакторыг ихэд сонирхож байгаа билээ. Иймд эдгээр улс орнуудын ашиглаж буй болон зохион бүтээн туршигдсан найдвартай ажиллагаатай, аюулгүй реактор, ЦЦС-ийн талаар нийтэд өргөн мэдээлэл өгч, сурталчлах нь зүйтэй гэдэг нь харагдаж байна.

IV. ДҮГНЭЛТ

1. Санал асуулгад хамрагдагсдын нас, хүйс, ажлын нөхцөл, байршил, орлого зэрэг нийтлэг үзүүлэлтүүдийг харахад Монгол улсын нийт хүн амын ерөнхий бүтэцтэй ойролцоо гарсан. Иймд энэхүү судалгааны үр дүн нь монголын хүн амыг бүрэн төлөөлж чадах, бодит зураглал харуулахуйц болсон гэж үзэх үндэслэлтэй байна. Цөмийн эрчим хүчний асуудал нь тодорхой мэдлэг шаардсан, зохих мэдээлэлтэй хүмүүс л хариулах боломжтой учраас боловсрол, мэдлэг харьцангуй өндөртэй хүмүүс арай түлхүү хамрагдсан тал бий. Энэхүү санал асуулга нь манай орны нийгмийн бүх давхрага, ард нийтийн өргөн төлөөллийг хамарсан анхны судалгаа бөгөөд шинжлэх ухааны үндэслэлтэй үр дүнгүүдийг гарган авсан гэж үзэж байна.
2. Японы Фүкүшимагийн ЦЦС-д осол гарснаас хойш удаагүй байхад, Монгол улсад гадны цөмийн хаягдлыг булшлах тухай асуудал сэмхэн яригдаж байна гэсэн мэдээлэл телевиз, интернэт, сонин хэвлэлүүдээр ихээхэн тараагдсан байгаа тааламжгүй үед энэхүү санал асуулгыг авсан боловч цөмийн эрчим хүчийг Монголд ашиглахыг ерөнхийдөө дэмжигчдийн эзлэх хувь 45-56% байлаа. Цөмийн эрчим хүчний ашигтай тал, үр өгөөжийн тухай урьдчилан системтэй мэдээлэл, сурталчилгаа хийгээгүй байхад ийм үр дүн гарсныг бага гэж үзэх аргагүй юм.
3. Цөмийн эрчим хүчийг Монголд ашиглахыг дэмжиж байгаа эсэхэд оролцогчдын хариулсан байдалд тэдний хэв шинжээс хамааруулан шинжилгээ хийж үзэхэд дараах онцлог байдлууд ажиглагдаж байна. Үүнд:
 - Цөмийн эрчим хүч ашиглахыг 18-34 насны залуучуудын 57-70% нь дэмжиж байхад 45-60 насны хүмүүсийн 40% орчим нь дэмжсэн байна.
 - Санал асуулгад хариулагсдын 72% нь цөмийн эрчим хүчний тухай мэдээллийг телевизээс, 54% нь интернэтээс, 30% орчим нь сонин сэтгүүлээс авдаг гэжээ. Мөн цөмийн аюулгүй байдлын талаар итгэлтэй мэдээллийг сэтгүүлчдээс л авч болно гэж хариулагсдын 46% нь үзжээ. Гэтэл Цөмийн энергийн газар 41%, цөмийн технологи ашигладаг хүмүүс 36%, эрдэмтэд 36% санал авсан байна.
 - Цөмийн эрчим хүчний эрсдэлийг бусад эрсдэлүүдтэй харьцуулахад хэт их буюу их гэж 48% нь үзсэн байхад, мэдэхгүй буюу зөв ойлгох хэрэгтэй гэж 38% нь хариулсан байна.
4. Цөмийн эрчим хүчний үндэсний боловсон хүчнийг системтэйгээр бэлтгэх ажлыг эрчимжүүлэх хэрэгтэй байна. Цөмийн эрчим хүчний өндөр технологитой улс орнуудад сургагч-багш нарыг юуны түрүүнд бэлтгээд, тэд нар эх орондоо ирж үндэсний боловсон хүчин бэлтгэх ажилд зүтгэх ёстой.
5. Цөмийн эрчим хүчний ашигтай тал, эрсдэл, дэлхийн улс орнуудын чиг хандлага ирээдүйн тухай үнэн зөв мэдээллийг тухайн мэргэжлийн хүмүүс, энэ талын чиг үүрэг бүхий төрийн албаны түшмэдүүд, эрдэмтэн багш нар идэвхтэй ажиллаж, ард нийтэд хүргэж байх хэрэгтэй байна. Энд ялангуяа телевиз, радио, сонин сэтгүүлийн сурвалжлагчид чухал үүрэгтэй болох нь харагдлаа.
6. Цаашид ард олон нийтийн иймэрхүү судалгааг цөмийн эрчим хүчийг ашиглах талаар үе үе явуулж байх нь зүйтэй гэж үзэж байна. Үүний тулд:
 - Манай орны онцлог байдал, ард түмний боловсрол мэдлэгт тохирсон, сайтар бодож боловсруулсан, цөөн тооны асуултыг бэлтгэх хэрэгтэй.
 - Ард түмэнд цөмийн эрчим хүчний тухай үнэн зөв мэдээллийг хэвлэл мэдээллийн бүх хэрэгслээр системтэй тогтмол өгч байх шаардлагатай.
 - Мэргэжлийн хүмүүс, эрдэмтэд, багш нар албан хаагчид энэ асуудлаар нэгдсэн нэг ойлголтын зөвшилцөлд хүрч, хэн дуртай хүн юу дуртайгаа ярьдаг биш, зөвхөн ажил хэрэгч байдлаар хариуцлагатай хандах нь чухал. Үүний тулд эрдэмтэн мэргэжилтнүүдийн зөвлөмжид тулгуурлан төрийн холбогдох байгууллагаас шийдвэр зөвлөмж гаргах нь зүйтэй.

Талархал

Дэлхийн цөмийн их сургууль (World Nuclear University), Солонгосын Цөмийн энергийг дэмжих газар (Korea Nuclear Energy Promotion Agency)-аас зохион байгуулсан Олон улсын цөмийн энергийн анхны олимпиадад оролцох сэдвээр ард олны санал бодлыг судлахад шаардагдах санхүүгийн дэмжлэг үзүүлсэн Монгол улсын Засгийн газрын байгууллага-

Цөмийн энергийн газрын дарга академич С.Энхбат, төслийн ажлыг хариуцагч П.Баттөр нарт гүнээ талархаж байна.

Олон нийтээс санал асуулга авах нүсэр ажилд Цөмийн судалгааны төвийн багш, ажилтан, оюутнууд хамтран ажилласандаа баяртай байна. Судлаач Д.Даваасүрэнгийн тусламж их байсныг онцлон тэмдэглэе.

АШИГЛАСАН НОМ ЗҮЙ

1. Эрдэс баялаг, эрчим хүчний яам, 2011. Монгол орны эрчим хүчний секторын өнөөгийн байдал, <http://www.mmre.energy.mn>
2. R. W. Allen, Enkhjargal Gombojav, Baldorj Barkhasragchaa, Tsogtbaatar Byambaa, Oyuntogos Lkhasuren, Ofer Amram, T. K. Takaro, and C. R. Janes, “An assessment of air pollution and its attributable mortality in Ulaanbaatar, Mongolia” *Air Qual Atmos Health*, DOI 10.1007/s11869-011-0154-3, 2011
3. V. Ramanathan and Y. Feng, Air pollution, greenhouse gases and climate change: Global and regional perspectives, *Atmospheric Environment*, 43, 37–50, 2009
4. Улсын их хурал, 2009. “Монгол Улсын төрөөс цацраг идэвхт ашигт малтмал ашиглах болон цөмийн энергийн талаар баримтлах бодлого”, УБ, Монгол. www.parliament.mn
5. Улсын их хурал, 2009. “Монгол Улсын төрөөс цацраг идэвхт ашигт малтмал болон цөмийн энергийн талаар баримтлах бодлогыг хэрэгжүүлэх хөтөлбөр”, УБ, Монгол. www.parliament.mn
6. Улсын их хурал, 2009. Цөмийн энергийн тухай хууль. УБ, Монгол. www.parliament.mn
7. 2010 оны Монголын хүн ам, орон сууцны тооллого. Үндэсний статистикийн газар.
8. Creative Research Systems Survey Software <http://www.surveysystem.com/sscalc.htm>
9. SPSS Statistics 17.0, <http://www.spss.com>

Gaining Public Acceptance of Nuclear Energy in Mongolia

S.Odmaa, S.Davaa, T.Delgersaikhan, Ts.Amartaivan, G.Khuukhenkhuu

Nuclear Research Center, National University of Mongolia, University Street-1, Ulaanbaatar-210646, Mongolia

A standard survey questionnaire to identify the general attitude of the public towards nuclear energy was conducted for the first time in Mongolia. The survey results and analyses were used to establish the basis for developing a strategy to gain public acceptance of nuclear energy in Mongolia.

Термолюминесцийн хувийн дозиметрийн хэрэглээ

Б.Мөнхтогтох¹, Г.Манлайжав¹, Н.Норов², Г.Мягмарсүрэн^{2*}

¹Монгол Улсын Цөмийн Энергийн Газар

²Монгол Улс, Улаанбаатар, Монгол Улсын Их Сургууль, Цөмийн судалгааны төв

*Э-шуудан: myaga_gen@yahoo.co.jp

I.ОРШИЛ

Төрөл бүрийн рентген төхөөрөмж, судалгааны цацраг идэвхт материал, цөмийн тоног төхөөрөмж ашиглаж буй байгууллагуудын цацрагтай ажиллагчид нь шарлагад өртөх магадлал ихтэй тул цацрагийн хяналтанд зайлшгүй хамрагдах шаардлагатай. Иймээс цацрагтай ажиллагчдын цацрагийн аюулгүй байдлыг хангах, тэдний авах мэргэжлийн тунг хянах термолюминесценцийн хувийн дозиметрийг хэрэглэснээр манай улсад мэргэжлийн шарлагын хяналт үүсч хөгжсөн болно [1].

Цацрагтай ажиллагчид нь өдөр тутам цацрагийн аюулгүй байдлыг хянах хувийн дозиметрийг хувцсандаа албан ёсоор зориулалтын дагуу зүүж хэвшсэн байхаас гадна өөрийн авч байгаа тунгийн хэмжээнд байнга хяналт тавьж байх хэрэгтэй. Ионжуулах цацрагийн бага хэмжээний тун бие махбодид бодит аюул учруулдаггүй боловч ионжуулах цацрагийн тунгийн зөвшөөрөгдөх хязгаараас их үед өвчлөх, хорт хавдар үүсэх, төрөлтийн гажиг үүсэх зэрэг тохиолдол илэрнэ. Тиймээс мэргэжлийн шарлагын удаан хугацааны тогтмол хяналт маш чухал юм.

Манай улсад 1978 оноос ОУАЭА-ийн Техник хамтын ажиллагааны төслүүд МУИС-ийн Цөмийн шинжилгээний лаборатори, ЭАХНСУИ-ийн Цацрагийн хяналтын төв лаборатори, Цацраг туяа эмнэлэг (бүгд хуучин нэрээр) зэрэг газруудад хэрэгжсэнээр цацрагийн хяналт, судалгааг орчин үеийн түвшинд явуулах Термолюминесценцийн дозиметр (ТЛД), Хоёрдогч стандартын дозиметр зэрэг багаж төхөөрөмжтэй[мэргэжилтэй боловсон хүчинтэй болсноор энэ чиглэлийн хяналтыг системтэй явуулах үндэс тавигдсан болно [4,5].

II.ТЛД-ИЙН ФИЗИК ҮНДЭС, БАГАЖ ТӨХӨӨРӨМЖ

Ионжуулах цацрагийн дозиметрт термолюминесценцийн дозиметр (ТЛД) өргөн хэрэглэгддэг [6, 7].

Термолюминесценци нь урьдчилан цацрагаар шарагдсан термолюминофор гэж нэрлэгдэх органик биш кристаллыг халаах үед гэрэл цацруулах үзэгдэл юм.

Дозиметрийн хяналт, судалгаанд шинж чанар сайтай $\text{CaSO}_4(\text{Dy})$, $\text{CaSO}_4(\text{Tb})$, $\text{CaF}_2(\text{Dy})$, $\text{CaF}_2(\text{Mn})$, $\text{LiF}(\text{Mg,Ti})$ зэрэг онцгой цэвэр термолюминофоруудыг ихэд өргөн ашигладаг. Термолюминофор тодорхой температурт хамгийн их утгатай дулааны гэрэлтэлтийн муруйгаар тодорхойлогдоно. Ионжуулах цацрагийн шингэсэн тунгийн хэмжээ нь муруй талбай (S)-тай шууд хамааралтай термолюминесценцийн энергийн урсгалын нягт болно. $S=\int I(T)dT$ –интеграл арга. Өгөгдсөн хугацаанд заалт бага буурах үед (фединг) хувийн дозиметрт интеграл арга хэрэглэгдэнэ. Дулааны гэрэлтэлтийн муруйн ашиглаж байгаа максимум температур $T_{\text{макс}}=200^\circ\text{C}$, дулааны гэрэлтэлтийн муруйд бага пик байхгүй $\text{LiF}(\text{Mg,Ti})$ дээх шаардлагыг сайн хангана.Тунгийн хэмжилтийн өргөн мужид энэ аргын алдаа 5 % байна. $I_{\text{макс}}(T_{\text{макс}})$ -муруйн арга нь интеграл аргаас хялбар, шарагдах агшингаас хэмжих хүртлэх хугацаа, нам температурын шугамын унтралт зэргээс хамаардаггүй. Энэ арга бага тунг хэмжихэд илүү тохиромжтой бөгөөд 8 %-ийн алдаатай байдаг. Термолюминесценцийн энергийн гаралт (η) дараах харьцаагаар тодорхойлогдоно:

$$\eta=E/m\cdot D$$

Үүнд: D= LiF -т шингэсэн тун; E= LiF -ын гэрэлтэлтийн энерги; m= LiF -ын масс.

Тунгийн үзүүлэлт:

$$S = a_s \cdot \eta \cdot D \quad \text{буюу} \quad I = a_i \cdot \eta \cdot D$$

Үүнд: a_s , a_i – тогтмол коэффициент, S – нийлбэр гэрэл, I – дулааны муруйн хамгийн их эрчим.

Манай улсын ионжуулах цацрагийн үүсгүүртэй ажиллагчдын мэргэжлийн шаралтын хяналтанд LiF-термолуминофор бүхий 1-р зурагт үзүүлсэн TLD-100 карт ашиглаж байна.

Цөмийн энергийн газрын Цацрагийн хяналтын лабораторид мэргэжлийн шарлагын



Зураг 1. Термолуминесценцийн дозиметр

Ш.ХУВИЙН ДОЗИМЕТРИЙН ХЯНАЛТ

Мэргэжлийн шарлагын хувийн тунгийн хяналтын төвлөрсөн систем нь хяналтын байгууллагаас хяналтанд хамрагдах байгууллуудад хувийн дозиметрийг илгээж ажиллагчид ионжуулах цацрагийн үүсгүүр ажиглах үед авч буй тунг хэмжих, нэгтгэн дүгнэж анализ хийх болон дозиметрийн мэдээллийг хадгалах хэлбэрээр хяналт тавихад үндэслэдэг юм. Ажиллагчдын томоохон бүлгийн жилийн тунгийн хэмжээний өгөгдлөөс мэргэжлийн янз бүрийн бүлгийн коллектив болон жилийн дундаж тунг үнэлэх бололцоо олгохын зэрэгцээ ажиллагчдын өндөр эрсдэлтэй бүлэг илрүүлэх, цацрагийн аюулгүй байдлыг цаашид сайжруулах зайлшгүй арга хэмжээг үндэслэхэд хувийн дозиметрийн төвлөрсөн хяналт хийх нь зайлшгүй хэрэгтэй юм.

Дозиметрийн төвлөрсөн хяналтын үйл ажиллагааг авч үзвэл: Цацрагийн хяналтын лабораторид дозиметрүүдийг цэнэглэж, тохируулга хийж, хэрэглэгч буюу цацрагтай

хувийн тунг тодорхойлоход ашиглаж байгаа “Harshaw-4500” дозиметрийн систем нь TLD карт, халаагч, гэрлийг цуглуулах оптик фото-электрон үржүүлэгч (ФЭУ), ФЭУ-ээс ирсэн импульс бүртгэх хэсгээс тогтох TLD уншигч, ОУАЭА-аас термолуминесценцийн дозиметрийн хэмжилтэнд зориулан гаргасан TLD-REMS (Radiation Evaluation and Management System), WinREMS (Windows Radiation Evaluation and Management System) программ хангамж зэрэг иж бүрдэл юм.



Зураг 2. Дозиметрийн тохируулгын шарлагын багаж

ажиллагчдад хүргэж, ажиллагч дозиметрийг зүүж хэрэглэснээс хойш тодорхой хугацаа өнгөрсний дараагаар зүүсэн хугацаан дахь шарлагын тунг тогтоон мэдээллийн санд бүртгэнэ. Хэрэв шарлагын төвшин аюулгүйн төвшин дотор байвал үргэлжлүүлэн ажиллахыг зөвшөөрч, дозиметрийг эргүүлэн явуулна. Ийнхүү өдөр болгон дозиметрийг зүүх нь бодит шарлагын төвшинг тогтоох нэг арга зам бөгөөд цацрагтай ажиллагчид шарлагын тухай мэдээллийг мэдэж байх хэрэгтэй.

IV. ТЕРМОЛЮМИНЕСЦЕНЦИЙН ХУВИЙН ДОЗИМЕТРИЙН ХЯНАЛТЫН ДҮН

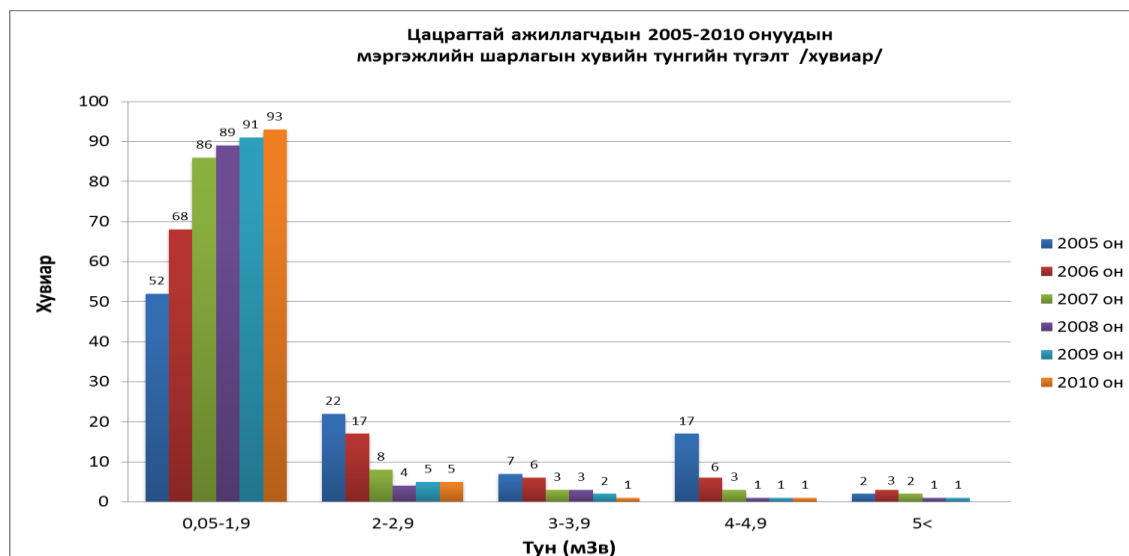
Термолуминесценцийн хувийн дозиметрээр цацрагтай ажиллагчдын тунг үнэлсэн хяналтын дүнг 1-р хүснэгт болон 3-р зурагт харуулав. Хяналтын сүүлийн жилүүдийн хяналтын дүнгээс үзвэл цацрагтай ажиллагчийн 79% нь 0.05-1,9 мЗв, 10% нь 2-2,9 мЗв, 5% нь 3-3.9, 4.5% нь 4-4.9, 1.5 % нь 5-

17 мЗв тун авсан байна. Дээрх хэмжилтүүдийн дүнг харьцуулж үзэхэд бага хэмжээний тун авсан тохиолдол 79 орчим хувь, дунд зэргийн тун авсан тохиолдол 19.5 орчим хувь, зөвшөөрөгдөх хэмжээнд боловч харьцангуй их хэмжээний тун авсан тохиолдол 1.5%-тай байна. 2005-2010 оны хэмжилтийн дүнгээс үзэхэд 2-2,9 мSv тунг авсан цацрагтай

ажиллагчдын тоо 22%-аас 5%, 3,-3,9 мSv тун авсан цацрагтай ажиллагчдын тоо 7%-аас 1%, 4-4,9 мSv тун авсан цацрагтай ажиллагчдын тоо 17%-аас 1% болж буурсан байна. Харин бага хэмжээний буюу 0,05-1,9 мSv тун авсан цацрагтай ажиллагчдын тоо 52-93% болж өссөн дүнтэй байна.

Хүснэгт 1. Цацрагтай ажиллагчдын хувийн тун /2005-2010 он/

	2005	2006	2007	2008	2009	2010	Бүгд	Хувиар	
0.05-1.9 мSv	52	68	86	89	91	93	479	79	79
2-2.9 мSv	22	16	8	4	5	5	60	10	19.5
3-3.9 мSv	7	6	3	3	2	1	22	5	
4-4.9 мSv	17	6	3	1	1	1	29	4.5	
5 мSv-20 мSv	2	3	2	1	1	-	9	1.5	1.5



Зураг 3

V. ДҮГНЭЛТ

- Манай улсын цацрагтай ажиллагчдын цацрагийн хяналтанд LiF-термолюминофор бүхий ТЛД хувийн дозиметрийг ашиглаж байгаа бөгөөд цаашид дулааны нейтроныг бүртгэх LiF болон дулааны нейтронд мэдрэмж муутай хоёрдогч дозиметр LiF-г ашиглан нейтрон, гамма цацрагийн өгөх тунг ялгаж тодорхойлох шаардлагатай.
- Цацрагтай ажиллагчдын 1 жилд авч буй тунгийн хэмжээ нь жилд зөвшөөрөгдөх дээд хэмжээ (50мЗв)-ээс хэтэрсэн тохиолдол илрээгүй болно. Энэ нь “Хүн ам түүний дотор цацрагтай ажиллагчийг шарлагын тунгийн тогтоосон хязгаараас

илүүгээр өртүүлэхгүй байх” цацрагийн хамгаалалт, аюулгүй байдлыг хангах үндсэн зарчмыг хангаж байна. Зарим тохиолдолд анхаарвал зохих нэмэгдэл өөрлөг авсан ажиллагч илэрсэн ч энэ нь цацрагийн хамгаалалт, аюулгүй ажиллагааны журам зөрчсөн, дозиметрийг санаатай болон санамсаргүй шарсан тохиолдол байв.

- Цацрагтай ажиллагчдын сард авч болох тунгийн дундаж хэмжээ (1,6 мЗв)-ээс хэтэрсэн тохиолдол бүрд тухайн ажилтны ажлын байранд цацрагийн эрүүл ахуй дозиметрийн хяналтыг тусгайлан хийж гүйцэтгэж байна.

АШИГЛАСАН ХЭВЛЭЛ

1. "Occupational Radiation Protection", № RS-G-1.1, International Atomic Energy Agency, 1999
2. International Basic Safety Standards for Protection against ionizing Radiation and for the Safety of Radiation Sources, IAEA, Vienna, 1996
3. "Recommendations for Limiting exposure to ionizing radiation, National Health and Medical Research Council, 1995
4. "Цацрагийн хамгаалалтыг эрчимжүүлэх төслийн хэрэгжилт", ЭАХНСҮТ-ийн ЦХТЛ, MON/9/004 төслийн тайлан.
5. "Улаанбаатар хотын зарим рентген кабинетуудын эмч, лаборант нарын цацрагийн аюулгүй ажиллагаанд хийсэн хувийн дозиметрийн хяналтын товч дүн", 1981, Х.Нямцэрэн
6. Голубев Б.П. Дозиметрия и защита от ионизирующих излучения. Изд. 3-е. перераб. и доп. Под ред. Е.Л. Столяровой. Учебник для вузов. М.: Энергоатомиздат, 1986.
- 7, Knoll Glenn F. Radiation Detection and Measurement. Third edition, 2000, John Wiley & Sons Inc.

Улаанбаатар орчмын байгалийн гэрэлтүүлгийн судалгааны үр дүн

О.Энхнасан, Ц.Баатарчулуун, Г.Батсүх*

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

Физик электроникийн сургууль, Геофизикийн тэнхим

*Э-уудан batsukh@num.edu.mn

The trends of total and diffuse natural illumination have been determined at Ulaanbaatar city by using the measurements with the BGBB-2 instrument during last 10 years. Results of the mean daily course of total and diffuse natural illumination for each season, the dependence of natural illumination on the solar elevation angle and the yearly trend of natural illumination have been presented in this paper.

Түлхүүр үг Байгалийн гэрэлтүүлэг, агаар мандлын төлөв, нарны өндөр

I. ОРШИЛ

Иргэний болон бусад зориулалттай барилга байгууламжийн зураг төслийг зохиох, таримал ургамлын ургацанд гэрлийн нөлөөлөх хүчин зүйлсийг тодорхойлох зэрэг улс ардын аж ахуйн олон асуудлыг шийдвэрлэхэд байгалийн гэрэлтүүлгийн талаарх мэдээллүүд зайлшгүй шаардлагатай болдог. Гэвч байгалийн гэрэлтүүлгийн шууд хэмжилтийн сүлжээ улс орон бүрт байдаггүй тул түүнийг тодорхойлох тооцооны энгийн бөгөөд найдвартай аргыг тухайн бүс нутаг бүрт боловсруулан хэрэглэх болжээ.

МУИС-ийн геофизикийн судалгааны төвийн судлаачид Москвагийн их сургуулийн цаг уурын обсерваторийн мэргэжилтэнүүдтэй хамтран “байгалийн гэрэлтүүлэг бүртгэгч багаж-2” (БГББ-2) нэртэй багажийг 1987 онд зохион бүтээж шинэ бүтээл оновчтой саналын 18215 тоот гэрчилгээ бүхий энэхүү багажаар хэвтээ гадаргад тусах нийлбэр ба сарнисан гэрэлтүүлгийг өдөр бүр цаг тутамд бүртгэх тасралтгүй хэмжилтийг хийж эхэлсэн юм. Энэ багаж нь Москвагийн Их сургуулийн БГББ-1-тэй ижил хэмжээ хийцтэй.

II. СУДАЛГААНЫ ҮР ДҮН

Энэ ажлаар Улаанбаатар хотод өдөр бүр цаг тутамд сүүлийн 10 жил хийсэн байгалийн гэрэлтүүлгийн хэмжилтийн материалд тулгуурлан

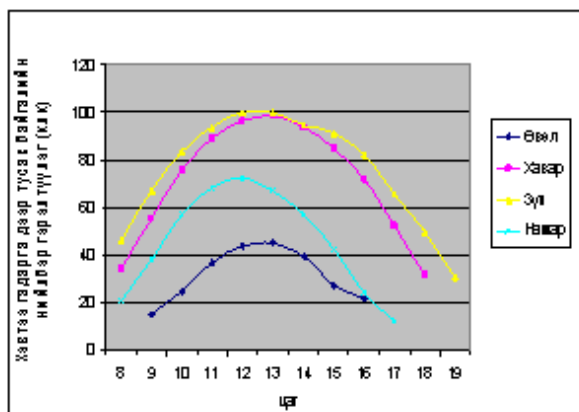
- Байгалийн сарнисан ба нийлбэр гэрэлтүүлгийн хоногийн явцыг жилийн улирал бүрээр гаргасан дүн
- Байгалийн сарнисан ба нийлбэр гэрэлтүүлгийн нарны өндрөөс хамаарах хамаарлыг жилийн улирал бүрээр гаргасан дүн

- Байгалийн гэрэлтүүлгийн сарын нийлбэрийг жилийн улирал бүрээр гаргасан дүнг тус тус гаргав. Улаанбаатар хотод хийсэн байгалийн гэрэлтүүлгийн судалгааны дүнг Москвагийн Их Сургуулийн цаг уурын обсерваторийн болон бусад судлаачдын хийсэн байгалийн гэрэлтүүлгийн судалгааны дүнтэй харьцуулан холбогдох дүгнэлтүүдийг хийсэн болно.

А. Хэвтээ гадарга дээр тусах байгалийн гэрэлтүүлгийн хоногийн явц

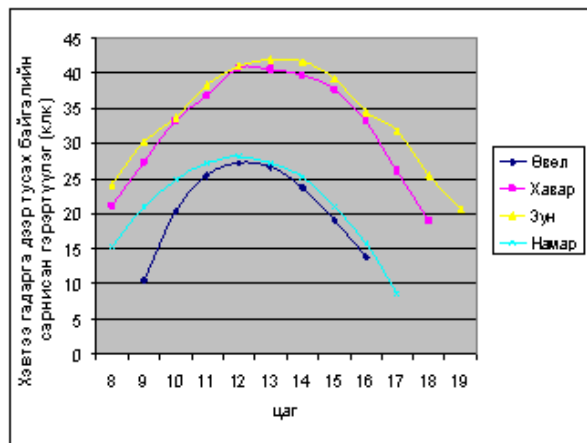
Хэвтээ гадарга дээр тусах байгалийн нийлбэр ба сарнисан гэрэлтүүлгийн хоногийн явцыг тодорхойлохын тулд МУИС-ын Геофизикийн Судалгааны Төвд сүүлийн 10 жил өдөр бүр цаг тутамд хийсэн байгалийн гэрэлтүүлгийн ажиглалтын материалаар жил бүрийн тухайн саруудад хэвтээ гадарга дээр тусах нийлбэр ба сарнисан гэрэлтүүлгийн харгалзах цаг тус бүрийн дундажуудаар хоногийн явцыг тодорхойлон гаргав. Жилийн улирал бүрийг төлөөлүүлэн 1,4,7,10 сарын байгалийн нийлбэр гэрэлтүүлгийн хоногийн явцыг 1-р зурагт, байгалийн сарнисан гэрэлтүүлгийн хоногийн явцыг 2 –р зурагт тус тус графикаар харуулав.

1-р зургаас харахад өвөл 1-р сард өглөө 9 цагт байгалийн нийлбэр гэрэлтүүлгийн утга 15клк байснаа үдийн орчимд 45клк хүртэл өсөөд 16 цагт 21клк болтлоо багасдаг бол хавар 4-р сард өглөө 8 цагт гэрэлтүүлгийн утга 32клк байдаг ба үдийн орчимд 90клк хүртэл өсөөд 18 цагт 30клк болтлоо багасдаг ажээ.



Зураг 1. Хэвтээ гадарга дээр тусгах байгалийн нийлбэр гэрэлтүүлгийн хоногийн явц

Үүнчлэн зун 7-р сард байгалийн нийлбэр гэрэлтүүлгийн утга өглөө 8 цагт 42клк байснаа үдийн орчимд 92клк хүртэл өсөөд орой тийшээ 19 цагт 30клк болтлоо багасдаг, харин намар 10-р сард өглөө 8 цагт гэрэлтүүлгийн утга 20клк орчим байснаа үдийн орчимд 67клк хүртэл өсөөд 17 цагт 13клк болтлоо багасдаг ажээ.



Зураг 2. Хэвтээ гадарга дээр тусгах байгалийн сарнисан гэрэлтүүлгийн хоногийн явц

2-р зургаас харахад өвөл 1-р сард өглөө 9 цагт байгалийн сарнисан гэрэлтүүлгийн утга 11клк байснаа үдийн орчимд 27клк хүртэл өсөөд 16 цагт 14клк болтлоо багасдаг бол хавар 4-р сард өглөө 8 цагт гэрэлтүүлгийн утга 20клк байдаг ба үдийн орчимд 38клк хүртэл өсөөд 18 цагт 19клк болтлоо багасдаг ажээ. Үүнчлэн зун 7-р сард байгалийн сарнисан гэрэлтүүлгийн утга өглөө 8 цагт 23клк байснаа үдийн орчимд 39клк хүртэл өсөөд орой тийшээ 19 цагт 21клк болтлоо багасдаг, харин намар 10-р сард өглөө 8 цагт гэрэлтүүлгийн утга 15клк орчим байснаа үдийн орчимд 27клк хүртэл өсөөд 17 цагт 9клк болтлоо багасдаг ажээ.

Б. Байгалийн нийлбэр ба сарнисан гэрэлтүүлгийн хэмжээ нарны өндрөөс хамаарах зүй тогтол

Байгалийн нийлбэр гэрэлтүүлгийн хэмжээ нарны өндрөөс хамаарах зүй тогтолыг тодорхойлохын тулд нарны өндрийн янз бүрийн утганд хэвтээ гадаргад тусах нийлбэр ба сарнисан гэрэлтүүлгийн сүүлийн 10 жилийн хэмжилтийн сар бүрийн дундаж утгыг тодорхойлон гаргасан. Жишээ болгон 7-р сарын нийлбэр ба сарнисан гэрэлтүүлгийн хэмжээ нарны өндрөөс хэрхэн хамаарч байгааг 1-р хүснэгтэнд үзүүлэв.

Эндээс харахад нарны өндөр 10^0 –аас 55^0 хүртэл өсөхөд байгалийн нийлбэр гэрэлтүүлгийн хэмжээ 18.6клк –ээс 81.8клк хүртэл, сарнисан гэрэлтүүлгийг хэмжээ нь 13.8клк –ээс 37.6клк хүртэл өсөлтийн хурд нь ойролцоогоор шугаман байхаар өсдөг байна.

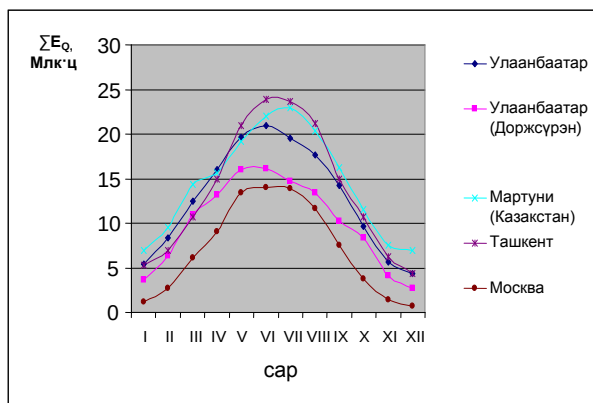
В. Нийлбэр ба сарнисан цацрагаар үүсгэгдэх гэрэлтүүлгийн сарын нийлбэр

Нийлбэр ба сарнисан цацрагаар үүсгэгдэх гэрэлтүүлгийн сарын нийлбэрийг тодорхойлохдоо актинометрт өргөн хэрэглэгддэг трапецын аргыг [1] хэрэглэн дараах томъёогоор сарын нэг өдөрт тусах хоногийн дундажийг олоод тухайн сар дахь хоногийн тоогоор үржүүлж сарын нийлбэрийг тооцоолов.

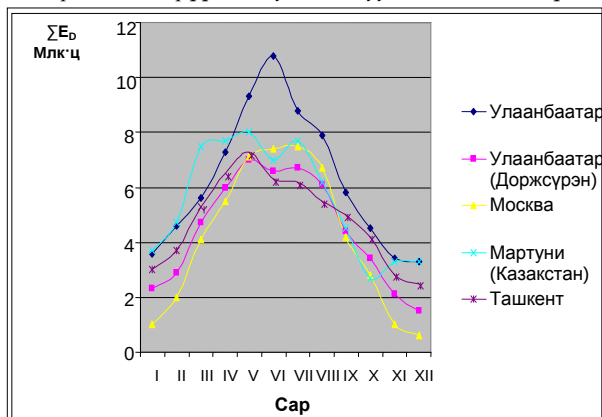
$$\sum E = \frac{E_1}{2} \cdot \tau_1 + \left(\frac{E_1}{2} + E_2 + \dots + E_{n-1} + \frac{E_n}{2} \right) \cdot 3 + \frac{E_n}{2} \cdot \tau_2$$

Үүнд τ_1, τ_2 нь харгалзан сар бүрийн 15-нд нар нар мандахаас анхны хэмжилт хүртлэх, сүүлийн хэмжилтээс нар шингэх хүртлэх цагаар илэрхийлсэн хугацаа, $E_1, E_2, \dots$ нь хэмжилтийн цаг бүрийн гэрэлтүүлгийн хэмжилтийн сарын дундажууд. Сар дутмын нийлбэр ба сарнисан гэрэлтүүлгийн сарын нийлбэрийг Млк.цаг-нэгжээр гаргасан дүнг 2 ба 3-р хүснэгтэнд үзүүлэв. Энэхүү дүнг ижил багажаар судалгаа хийсэн Москва [2], ойролцоо өргөрөгт орших Ташкент, Казакстаны Мартуни [2,3] болон Улаанбаатарт цацрагийн хэмжилтээс гэрэлтүүлэгт шилжих коэффициентийг ашиглан тодорхойлсон дүн [4] зэрэг бусад судлаачдын хийсэн ижил төрлийн судалгааны дүнтэй

жишиж харгалзах хүснэгтүүдэд хавсаргав. 2 ба 3-р хүснэгтийн мэдээллийг 3 ба 4-р зурагт графикаар харуулав..



Зураг 3. Сарнисан цацрагаар үүсгэгдэх гэрэлтүүлгийн сарын нийлбэрүүдийг бусад хотуудтай жишсэн дүн



Зураг 4. Сарнисан цацрагаар үүсгэгдэх гэрэлтүүлгийн сарын нийлбэрүүдийг бусад хотуудтай жишсэн дүн

Эдгээрээс үзэхэд Улаанбаатар орчмын нийлбэр цацрагаар үүсгэгдэх нийлбэр гэрэлтүүлгийн сарын нийлбэр 11,12 ба 1-р саруудад 4.4-5.6Млк.ц орчим хамгийн бага утгатай байдаг бол 5,6,7-р сард 19-20 Млк.ц хүртэл хамгийн их утгатай болдог нь зуны улиралд Ташкент ба Мартуни станцынхаас бага боловч ерөнхийдөө эдгээр газартай нилээд ойролцоо жилийн явц бүхий нийлбэр гэрэлтүүлэгтэй ажээ.

Харин Улаанбаатар орчмын сарнисан гэрэлтүүлгийн сарын нийлбэр 11,12 ба 1-р саруудад 3.3-3.6Млк.ц орчим хамгийн бага утгатай байдаг бол 5, 6, 7-р сард 8.8-10.8Млк.ц хүртэл хамгийн их утгатай болдог нь зуны улиралд Ташкент ба Мартуни зэрэг байгалийн гэрэлтүүлэг сайнтай газаруудынхаас ч мэдэгдэхүйц их болдог жилийн явц бүхий сарнисан гэрэлтүүлэгтэй ажээ.

III. ДҮГНЭЛТ

1. Улаанбаатарын орчим хэвтээ гадарга дээрх нийлбэр (сарнисан) гэрэлтүүлгийн хэмжээ өглөөнөөс хойш эхлээд хурдан дараа нь аажуу нэмэгдэж үдийн орчимд, 1-р сард 45клк (27клк), 4-р сард 90клк (38клк), 7-р сард 92клк (39клк), 10-р сард 67клк (27клк), орчим болтол хамгийн их утганд хүрээд цаашид эхлээд аажуу дараа нь хурдтай буурдаг хоногийн явцтай ажээ.

2. Байгалийн нийлбэр гэрэлтүүлгийн хэмжээ нарны өндөр 10^0 –аас 55^0 хүртэл өсөхөд 18.6клк –ээс 81.8клк хүртэл, сарнисан гэрэлтүүлгийг хэмжээ нь 13.8клк –ээс 37.6клк хүртэл ойролцоогоор шугаман хуулиар өсдөг байна

3. Улаанбаатар орчмын нийлбэр цацрагаар үүсгэгдэх нийлбэр гэрэлтүүлгийн сарын нийлбэрийн жилийн турш дахь хамгийн бага утга 12-р сард (4.4Млк.ц), хамгийн их утга (5-р сард 21Млк.ц,) ажиглагдаж байна.

Улаанбаатар орчмын сарнисан цацрагаар үүсгэгдэх сарнисан гэрэлтүүлгийн сарын нийлбэрийн жилийн турш дахь хамгийн бага утга 12-р сард (3.3 Млк.ц), хамгийн их утга 6-р сард (10.8Млк.ц), ажиглагдаж байна.

Дээр гаргасан үр дүнгүүдийг барилгын зураг төсөл, таримал ургамлын ургацыг нэмэгдүүлэх зэрэг бусад практик хэрэгцээнд ашиглах боломжтой.

Талархал: Энэхүү судалгааны ажлыг Монгол Улсын ШУТСангаас санхүүжүүлсэн “Агаар мандалд явагдах оптик үзэгдлийн судалгаа”сэдэвт ажлын хүрээнд гүйцэтгэсэн болно.

ХАВСРАЛТ

1-р хүснэгт

7 сарын нийлбэр гэрэлтүүлэг, нарны өндрийн хамаарал

Нарны өндөр, $\alpha_{\text{д} \alpha \alpha \text{о} \text{н} \alpha \text{ар}}$	10	15	20	25	30	35	40	45	50	55
Нийлбэр гэрэлтүүлэг, клк	18.6	25.6	35.4	42.5	52.9	58.8	64.7	70.3	77.7	81.8
кв.хазайлт	4.2	2.3	3.8	4.2	3.7	5.9	10.5	18.2	9.7	9.1

7 сарын сарнисан гэрэлтүүлэг нарны өндрийн хамаарал

Нарны өндөр, $\alpha_{\text{д} \alpha \alpha \text{о} \text{н} \alpha \text{ар}}$	10	15	20	25	30	35	40	45	50	55
Сарнисан гэрэлтүүлэг, клк	13.8	16.3	20.0	23.8	27.5	28.5	33.0	33.9	36.4	37.6
кв.хазайлт	3.0	2.4	1.6	3.7	2.3	4.2	2.7	1.8	3.2	3.9

2-р хүснэгт

Нийлбэр цацрагаар үүсгэгдэх гэрэлтүүлгийн сарын нийлбэрүүд, Млк · цаг

Пункти	сарууд												
		I	II	III	IV	V	V	VII	VIII	IX	X	XI	XII
Улаанбаатар	Eq	5.4	8.4	12.5	16	19.7	21.0	19.5	17.6	14.2	9.7	5.6	4.4
Улаанбаатар (Доржсүрэн)	Eq	3.6	6.3	11	13.2	16	16.1	14.7	13.4	10.2	8.4	4.1	2.7
Мартуни (Казакстан)	Eq	7.0	9.5	14.3	15.7	19.2	22.0	23.0	20.3	16.2	11.5	7.5	7.0
Ташкент	Eq	5.3	7	10.7	15	21	23.9	23.7	21.2	15	10.7	6.2	4.3
Москва	Eq	1.2	2.7	6.1	9.1	13.4	14.0	13.9	11.7	7.5	3.8	1.4	0.7

3-р хүснэгт

Сарнисан цацрагаар үүсгэгдэх гэрэлтүүлгийн сарын нийлбэр., Млк · цаг

Пункти	сарууд												
		I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII	IX	X	XI	XII
Улаанбаатар	Ed	3.6	4.6	5.6	7.3	9.3	10.8	8.8	7.9	5.8	4.5	3.4	3.3
Улаанбаатар (Доржсүрэн)	Ed	2.3	2.9	4.7	6	7	6.6	6.7	6.1	4.4	3.4	2.1	1.5
Москва	Ed	1	2	4.1	5.5	7.1	7.4	7.5	6.7	4.2	2.8	1	0.6
Мартуни (Казакстан)	Ed	3.7	4.7	7.5	7.7	8	7	7.7	6.2	4.5	2.7	3.3	3.3
Ташкент	Ed	3	3.7	5.3	6.5	7.3	6.3	6.2	5.5	5	4.2	2.8	2.5

НОМ ЗҮЙ

1. Евневич Т. В., Никольская Н.П., Методы расчета естественной освещенности земной поверхности, Метеорология и Гидрология 1976. №2. , с 54-58
2. Г.М. Абакумова, Е.В. Горбаренко, Е.И.Незваль, О.А. Шиловцева Влияние дымной мглы на прозрачность атмосферы , солнечную радиацию и естественную освещенность в Москве в 2002 г.,

Метеорология и Гидрология 2005, №4. , с 18-29

3. Бартенева О. Д ., Полякова Е. А., Русин Н.П. Режим естественной освещенности на территории СССР., Л., Гидрометеиздат, 1971,238 с
4. Б.Доржсүрэн, Исследование светового климата в некоторых районах Монголии, Докторын диссертаци.1992

Улаанбаатар хотын аэрозолийн оптик зузааны жилийн болон хоногийн явц

Г. Батсүх*, Ц. Баатарчулуун, Б. Даариймаа

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

Физик электроникийн сургууль, Геофизикийн тэнхим

*Э-уудан batsukh@num.edu.mn

We've determined that there is an approximately linearly increasing trend for the aerosol optical thickness (AOT) of the earth's atmosphere when the solar elevation angle increases and the trend have been estimated for each season of a year. The sun's elevation angle is dependent on a season and it also varies during day. In order to remove the dependence of AOT on solar elevation angle, we have introduced an idea that converting the aerosol optical thicknesses at given solar elevation angle to that of at a fixed elevation angle because the AOT has almost linear dependence on solar elevation angle. That scheme makes possibility of estimating daily and yearly trend of AOT and other optical parameters of air pollution.

Түлхүүр үгс: агаар мандлын бохирдол, аэрозолийн оптик зузаан, нарны өндөр

I. ОРШИЛ

МУИС-ийн Геофизикийн судалгааны төвөөс Улаанбаатар хотод 1984-2004 онд, Монгол орны төвийн бүсэд орших Угтаалцайдам сумын нутагт 1987-1996 онуудад өдөр бүр цаг дутамд БС-8, КС-19 шилэн шүүлтүүр бүхий актинометрээр хийсэн нарны шулуун цацрагийн 16900 орчим хэмжилтийн материалыг ашиглан фотосинтезийн идэвхит цацрагийн муж дахь аэрозолийн оптик зузаан (АОЗ)-ыг Москвагийн Их Сургуулийн Цаг Уурын Хүрээлэнд боловсруулсан аргачлалаар [1] тодорхойлон аэрозолийн оптик зузааны хоногийн ба жил, олон жилийн явцыг тодорхойлон гаргасан билээ [2].

Дээрх ажилд тухайн бүс нутгуудад олон жилийн туршид хийсэн нийт хэмжилтийн хувьд аэрозолийн оптик зузаан нь нарны өндөр нэмэгдэхэд бараг шугаман хуулиар ихсэж байгааг харуулсан юм. Тухайн ажилд гаргасан дүнгээс үзэхэд нарны өндөр 5° - 65° хүртэл өсөхөд Улаанбаатар хотод АОЗ-ны утга 0.15-0.31 хүртэл, Угтаалд 0.07-оос 0.14 хүртэл бараг 2 дахин ихсэж байгаа нь харагдаж байна.

Үүнээс гадна Улаанбаатар хотод БС-8, ЖС-18, КС-15, КС-19 шилэн шүүлтүүр бүхий актинометрээр 1979-2009 онд хийсэн 15600 орчим хэмжилтийн материалыг ашиглан Буге-Ламбертийн хуулийг хэрэглэн тодорхойлсон агаар мандлын ерөнхий оптик зузааныг спектрийн $380\text{nm} < \lambda < 710\text{nm}$ буюу фотосинтезийн идэвхит цацраг (ФИЦ), $\lambda > 710\text{nm}$ буюу инфра улаан цацраг (ИУЦ), $\lambda < 510\text{nm}$ буюу биологийн идэвхит цацраг (БИЦ)-ийн

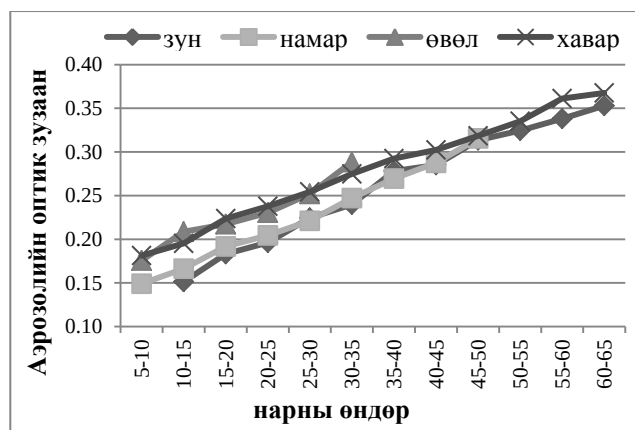
мужид тодорхойлон гаргасан дүнгээр агаар мандлын ерөнхий оптик зузаан (ЕОЗ) нь дээрхийн адил нарны өндрөөс хамааран өсөж байгаа нь ажиглагдсан байна [3]. Дээрх 2 ажилд хэмжилтийн шууд үр дүнгээр тодорхойлсон АОЗ-ны ба ЕОЗ-ны жилийн явц нь зуны улирлуудад хамгийн их, хоногийн явц нь үд дундын үед хамгийн их утгатай байхаар гарсан нь бодит нөхцөл байдалтай тохирч байгаа эсэх нь эргэлзээтэй юм. Өөрөөр хэлбэл, нарны өндөр хамгийн их байдаг үд дундын орчимд хамгийн их утгатай хоногийн явц, нарны хөөрөх өндөр их болдог зуны улиралд хамгийн их утгатай болдог жилийн явц ажиглагдахад нарны өндрийн өсөлтийг даган АОЗ ба ЕОЗ нь 2 дахин хүртэл хэмжээгээр өсдөг нь нөлөөлсөн байх үндэстэй. Учир нь хавар, зуны улиралд нарны өндөр өдрийн туршид харьцангуй их хурдтайгаар 60° - 65° хүртэл ихэсдэг, үүнтэй холбоотойгоор нарны өндрийн бага утганд хийсэн хэмжилтийн тоо харьцангуй цөөрч АОЗ нарны өндрийн өсөлтөөс хамаарах байдал нь түүний дундаж утга өсөхөд хүргэдэг, мөн нарны хөөрөх өндөр ихэсдэг нь түүнд давхар нөлөө үзүүлж улмаар АОЗ-ны жилийн явцыг бодитоор тодорхойлоход нөлөөлж байна гэж үзэв.

Мөн жилийн аль ч улиралд нарны өндөр үд дундын үед хамгийн их утгандаа хүрдэг. Энэ өсөлт нь улирал бүрд харилцан адилгүй хурдтай явагддаг дундаж өргөрөгийн Монгол орны бүс нутгийн хувьд АОЗ-ны хоногийн явцын өөрчлөлтөнд АОЗ- нарны өндрөөс

хамаардаг байдал илт нөлөөлдөг нь харагдаж байна.

II. СУДАЛГААНЫ ҮР ДҮН

Энэхүү ажилд АОЗ-ны жилийн ба хоногийн явцыг тодорхойлохдоо АОЗ-ны нарны өндрөөс хамаарах шугаман хамаарлыг ашиглан АОЗ-ны утгуудыг нарны нэг ижил өндөрт (30^0) шилжүүлэх замаар түүний нарны өндрийг даган өөрчлөгдөх байдлын нөлөөг арилгав. Энэ зорилгоор АОЗ – нарны өндрөөс хамаарах хамаарлыг жилийн улирал бүрд тогтоох шаардлагатай гэж үзэв. Аэрозолийн оптик зузааны утгыг өмнө дурьдсан Москвагийн Их Сургуулийн Цаг Уурын Хүрээлэнд боловсруулсан аргачлалаар тодорхойлон АОЗ-ны нарны өндрөөс хамаарах хамаарлыг жилийн улирал бүрээр гаргасан дүнг 1-р зурагт үзүүлэв. Энд АОЗ-ыг нарны өндрийн 5 градусын завсар бүр дэх дундаж утгаар тодорхойлсон ба эдгээр завсарт байх хэмжилтийн тоо хамгийн багадаа 71, хамгийн ихдээ 813 байсан болно.

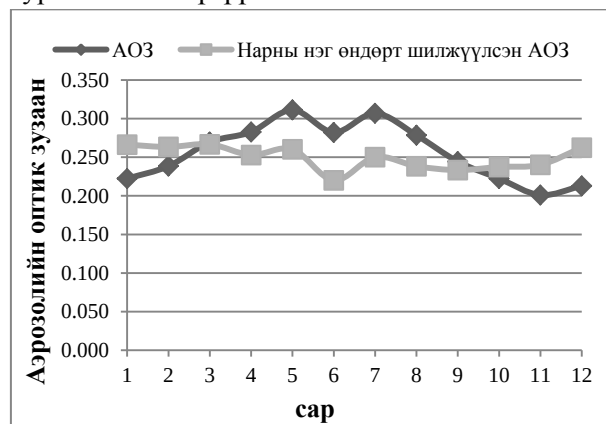


Зураг 1. Аэрозолийн оптик зузааны нарны өндрийн хамаарал

Эндээс үзэхэд Улаанбаатар хот орчмын агаар мандлын АОЗ нь жилийн улирал бүрд нарны өндрөөс хамааран (0.15-0.17) орчмоос (0.30-0.35) хүртэл бараг 2 дахин өсөж байх ойролцоогоор шугаман хамааралтай хуулиар өсдөг нь ажиглагдаж байгаа ба хамаарлын шугаман коэффициент нь өвлийн улиралд 0.0035 (1/град), намрын улиралд 0.0033 (1/град), хаврын улиралд 0.0033 (1/град), зундаа 0.0030 (1/град) утгатай байгаа нь Д.Очирваань нарын нийт жилийн дундажаар гаргасан 0.0032 (1/град) [2] хамааралтай ойролцоо байна.

Эдгээр шугаман хамаарлыг ашиглан нарны өндрийн янз бүрийн утганд тодорхойлсон АОЗ-

ны утгыг 30^0 -ын нарны өндөрт шилжүүлсэн утгаар АОЗ-ны жилийн явцыг гаргасан дүн болон нарны нэг өндөрт шилжүүлээгүй үеийн АОЗ-ны утгаар гаргасан жилийн явцыг 2-р зурагт жишин үзүүлэв.

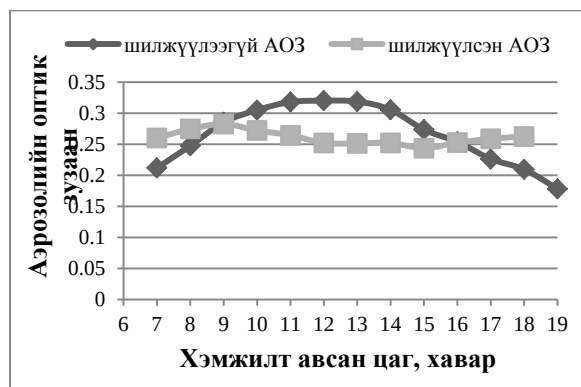


Зураг 2. Аэрозолийн оптик зузааны жилийн явц

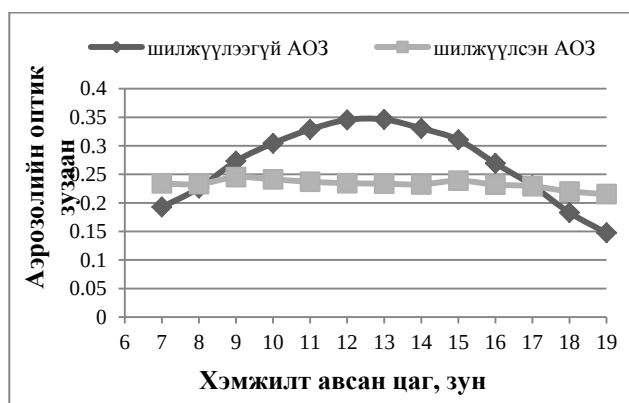
Нарны нэг өндөрт шилжүүлээгүй АОЗ-ны утгаар гаргасан жилийн явц нь зуны улиралд өвлийн улирлынхаас барагцаалбал 1.5 дахин өсдөг байхаар гарсан нь Улаанбаатар хотод хүйтний улиралд олон тооны жирийн галлагааны намхан яндантай зуухнаас үүсэх утаа болон бусад шалтгаанаар агаарын бохирдол ихэсдэг бодит байдлыг тусгаж чадахгүй байна. АОЗ-ны утгыг нарны нэг өндөрт шилжүүлсэн утгаар гаргасан жилийн явцад АОЗ-ны хамгийн их утгууд нь хүйтний улиралд буюу 12, 1, 2, 3-р сард болон хаврын 5-р сард 0.270 хүртэл хамгийн их утгатай, 6-р сард хамгийн бага буюу 0.220 утгатай, бусад саруудад 0.250-аас хэтрэхгүй утгатай гарч жилийн турш дахь өөрчлөлтийн хэмжээ 1.25 дахин утгаас хэтрэхгүй байгаа нь бодит нөхцлийг илүү тусгаж байна гэж үзэж байна.

Нарны өндрийн нэг утгад шилжүүлсэн болон шилжүүлээгүй тохиолдлуудад тодорхойлсон АОЗ-ны хоногийн явцыг улирал бүрээр гарган 3-р зурагт үзүүлэв.

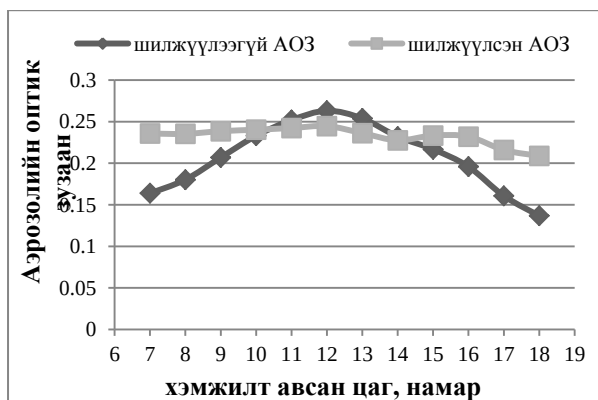
Эдгээрээс харахад нарны нэг өндөрт шилжүүлээгүй АОЗ-ны хоногийн явц нь нарны өндөр харьцангуй бага нэмэгддэг өвлийн улирлаас бусад улиралд үдийн орчимд өглөө ба оройныхоос 1.7-1.9 дахин өсдөг байхаар гарсан байна.



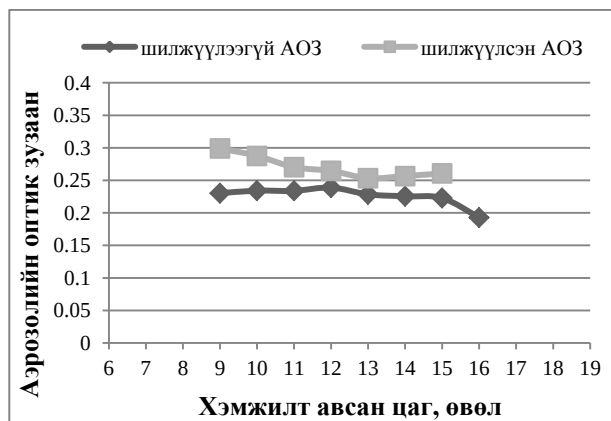
Зураг 3а. Аэрозолийн оптик зузааны хоногийн явц



Зураг 3б. Аэрозолийн оптик зузааны хоногийн явц



Зураг 3в. Аэрозолийн оптик зузааны хоногийн явц



Зураг 3г. Аэрозолийн оптик зузааны хоногийн явц

Үүний зэрэгцээгээр хавар, зуны улиралд АОЗ-ны утгын хамгийн их хэмжээ 0.320-0.350 орчим, хамгийн бага утга нь 0.180 орчим байхад өвлийн улиралд хамгийн их утга 0.240, хамгийн бага утга 0.190 байгаа зэрэг нь АОЗ-ы хоног ба жилийн явцад АОЗ нь нарны өндрөөс хамаарч бараг 2 дахин өсдөг байдал нөлөөлж байгааг илтгэнэ.

Нарны нэг өндөрт шилжүүлсэн АОЗ-ны утгаар гаргасан хоногийн явц нь зун, намрын улиралд (0.210-0.240)-ийн хооронд, хаврын улиралд (0.240-0.280)-ийн хооронд, өвлийн улиралд (0.250-0.300)-ийн хооронд өглөөнөөс орой хүртэл ерөнхийдөө 1.1-1.2 дахин багасдаг онцлогтой байна.

III. ДҮГНЭЛТ

1. Аэрозолийн оптик зузаан нь нарны өндрөөс хамаарч өсдөг зүй тогтол нь жилийн бүх улиралд ажиглагдаж байна.
2. Улаанбаатар хотод АОЗ нь хүйтний улиралд ихсэж, зуны улиралд ойролцоогоор хүйтний улирлынхаас 1.25 дахин орчмоор багасдаг жилийн явцтай байна.
3. Улаанбаатар хотод АОЗ нь жилийн бүх улиралд өглөөнөөс орой (нар шингэх) хүртэл 1.1-1.2 дахин буурдаг ерөнхий хандлагатай байна.

Талархал: Энэхүү судалгааны ажлыг Монгол Улсын ШУТСангаас санхүүжүүлсэн “Агаар мандалд явагдах оптик үзэгдлийн судалгаа”сэдэвт ажлын хүрээнд гүйцэтгэсэн болно.

АШИГЛАСАН НОМ

1. Тарасова.Т.А.,Абакумова.Г.М., Ярхо.Е.В “Определение аэрозольной оптической толщины атмосферы по прямой фотосинтетически активной радиации”, Метеорология и гидрология, 1992, №10
2. Д.Очирваань., Г.Батсүх “Монгол орны зарим нутаг дахь агаар мандлын аэрозолийн оптик зузаан”, МУИС эрдэм шинжилгээний сэтгүүл, Физик, №225, 2005, хууд. 75-77
3. Т.Нарангарав.,Г.Батсүх “Улаанбаатар орчмын агаар мандлын оптик зузааны судалгааны зарим үр дүн”, МУИС, Эрдэм шинжилгээний бичиг, Физик, №355(16), 2011, хууд. 96-99

Соронзон орны хоногийн тайван хувьсал S_q -д хийсэн судалгаа

Ү.Сүхбаатар¹, Л.Мөнхбат².

¹Монгол Улс, Шинжлэх Ухааны Академи Одон Орон Геофизикийн Судалгааны Төв

²Монгол Улс, Ховд аймаг, Ховд Их Сургууль.

Монгол оронд соронзон орны өөрчлөлтийг байнга бүртгэж байдаг хоёр соронзон оргил ажиллаж байгаа. Соронзон мандлын физикийн судалгаа хийх. Соронзон орны цаг хугацааны өөрчлөлтийн онцлогийг илрүүлэх боломжтой болно.

Түлхүүр үгс: Соронзон орон, соронзон орны хоногийн хувьсал, улирал

1.ОРШИЛ

Дэлхийн хувьсах соронзон орон нь өөрийн үнэмлэхүй хэмжээгээрээ тогтмол соронзон орны 1%-иас хэтэрдэггүй боловч Дэлхийн агаар мандал, цэнэгт мандал, соронзон мандалд болдог физик үзэгдлүүдтэй нягт уялдаж тэдгээрийг таньж мэдэх, тайлбарлах, нар дэлхийн физик холбоог судлахад гол хэрэглэгдхүүн болдог учраас соронзон судлалд онцгой байр суурийг эзэлдэг.

Хэрэв дээрх өөрчлөлтийг богино хугацааны туршид ажиглахад хүнд хамгийн түрүүнд мэдрэгдэх нь нарны хоногийн эрэмбэтэй байдаг бөгөөд тэдгээр нь үет шинжтэй мөртлөө үе, далайц, фаз нь газар орон бүрд олон янз байдгийг олж тогтоосон байдаг ба соронзон орны ийм өөрчлөлтийг соронзон орны хоногийн хувьсал ($S=S_q+S_d$) гэж нэрлэх [1] ба эх үүсгэгч нь Дэлхийн гадна цэнэгт мандалд оршдог. Хэрэв ажиглалтыг олон жилийн турш үргэлжилсэн хугацаанд явуулан, жил бүрдээ элементүүдийн жилийн дундаж утгуудыг тодорхойлох юм бол олон жилийн дундаж утгууд нь бас өөрчлөгддөг болохыг харж болно. Гэхдээ өөрчлөлт нь монотон шинжтэй бөгөөд тэдгээрийн үет чанар нь хэдэн зуун жилийн эрэмбэ бүхий ажиглалтын маш их хугацаанд л илэрдэг байна. Ийм өөрчлөлт нь Дэлхийн гүнд эх үүсгэвэр бүхий байдаг бөгөөд эрний хувьсал гэж нэрлэгддэг.

Учраас соронзон орны өөрчлөлтийг тод ажиглагдах байдлаар нь хоёр төрөлд ангилж болно. Үүнд:

Нэгдүгээрт: Түргэн явагдах богино үетэй онцлогтой хувьсал (вариаци)

Хоёрдугаарт: Эриний гэж нэрлэгдэх урт үет хувьсал (вариаци)

Энэ хоёр төрлийн хувьсал нь зөвхөн онцлогоороо биш гарал үүслээрээ ялгаатай гэдгийг бид дээр дурьдсан. Энэ нь ажиглагдаж буй соронзон оронг хэвийн соронзон орон (T_n) ба гаж соронзон орон (T_a) хоёрын нийлбэр байдлаар илэрхийлэгдэх тогтмол соронзон орон (T_n+T_a), хувьсах

соронзон орон (δT) гэсэн хоёр ангилалд хуваан судлах нь тодорхой тодорхой үндэслэлтэй болохыг харуулж байна.

Дэлхийн соронзон орны хувьсах хэсэг нь тогтмол соронзон орон дээр нэмэгдэж дэлхийн ерөнхий соронзон орныг цаг хугацааны туршид өөрчлөгдөхөд хүргэнэ. Эдгээр өөрчлөлтийн хэмжээ нь тогтмол хэсгийн хэмжээтэй харьцуулахад маш бага боловч, геофизикийн бусад үзэгдлүүдтэй холбогдож, тэр нь эдгээр үзэгдэл, шалтгааны тухай тайлбарлах боломжийг олгоно.

Дэлхийн хувьсах соронзон оронг урт хугацааны туршид судлахдаа заримдаа үелсэн байдлаар нь, заримдаа ажиглагдах хэлбэрээр нь, заримдаа хаана энэ физик процесс явагдаж байгаагаар нь гэх мэт олон янзаар ангилах оролдлого хийж байв[2]. Сүүлийн жилүүдэд судлаачдын олонхи хүлээн зөвшөөрч байгаа дэлхийн хувьсах соронзон оронг дараахь хэсгүүдээс тогтоно гэж үзэж болно. Үүнд:

$$\delta T = S + L + DP + DR + DCF + DT \quad (1)$$

S-нарны хэт ягаан туяаны үйлчлэлээр улмаас үүсэх соронзон орны регуляр хэсэг, түүний статистик төсөөлөл нь S_q -хувьсал ба энэ нь нар гийсэн тал бөмбөрцгийн цэнэгт мандлын (ионосферийн) E давхрагад хамгийн их утгатай байдаг цахилгаан гүйдлээр үүсдэг. L-агаар мандлын дээд давхрагад сарны таталт, түлхэлтийн хүчний нөлөөгөөр үүсэх регуляр хэсэг. DP-нарны салхи, дэлхийн соронзон орны харилцан үйлчлэлийн улмаас үүсэх регуляр бус хэсэг бөгөөд түүний үүсгэгч нь цэнэгт мандлын дээд давхрага F-д урсаж байгаа, туйлийн туяаны бүс дэх цахилгаан гүйдлийн систем юм.

DR-гаригийн зиндааны соронзон шуурганы үед онцгой эрчимждэг цагирган гүйдлийн орон ба түүний статистик төсөөлөл D_{St} -хувьслын гол хэсэг. DCF-нарны салхины протон, электрон дэлхийн соронзон орны хүчний шугамын үйлчлэлийг давж чадахгүй соронзон мандлын гадаргууг даган хөдлөх үеийн соронзон мандал дээр үүсэх гүйдлийн улмаас буй болдог регуляр бус хэсэг, түүний

статистик төсөөлөл нь D_{st} -вариацийн эхний фаз. DT- нарны салхины үүсэлтэй, соронзон мандлын сүүл хэсэг дэх гүйдлийн орон.

II. СУДАЛГААНЫ МАТЕРИАЛ, АРГА ЗҮЙ

Соронзон оргилуудад байрлуулсан багажууд нь дэлхийн соронзон орны харьцангуй өөрчлөлтийг бүртгэж байдаг. Ихэвчлэн соронзон орны H, D, Z-байгуулагчуудыг бүртгэдэг. Энэхүү судалгааны ажилд Улаанбаатар ба Ховд соронзон оргилд бүртгэж авсан материалыг ашигласан. Манай соронзон оргилууд соронзон орны босоо байгуулагч Z, хэвтээ байгуулагч H, хазайлтын өнцөг D-ийн утгуудыг 5 секунд тутамд тоон системд бичиж авдаг. Бичигдсэн материалын 5 секундын утгаа хүснэгт 1 үзүүлсэн Гауссын шүүлтүүр ашиглан 1 минутын утгад шилжүүлэнэ.

Хүснэгт 1

A0 =0.00229315	A1=0.00531440	A2 =0.01115655
A3 =0.02121585	A4=0.03654680	A5=0.05702885
A6 =0.08061140	A7 =0.10321785	A8 =0.11972085
A9=0.12578865	A10=0.11972085	A11=0.10321785
A12=0.08051140	A13=0.05702885	A14=0.03654680
A15=0.02121585	A16=0.01115655	A17=0.000531440
A18=0.00229315		

Минутын утгаас ердийн дунчилах аргаар цагийн утга гарган авна. Соронзон оргилуудад бичлэг дэлхийн цагаар (UT) хийгдэх ба хоногийн хувьсалыг судлахад орон нутгийн (LT) цагийг ашиглах шаардлагатай байдаг. Ийм учраас UT цагаас доорх илэрхийлэл ашиглан LT цагруу шилждэг.

$$LT=UT-(\lambda/15)-D \quad (2)$$

Энд: λ -тухайн цэгийн уртрагийн утга, D- дискрет цаг.

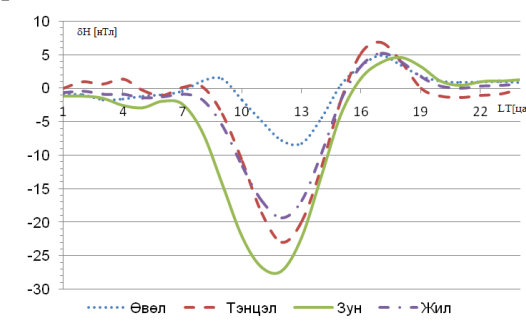
Хоног бүрийн дундач утгыг цаг бүрийн нь утгаас хасаж хоногийн явц буюу хоногийн хувьсалыг гарган авч болно. Хоногийн хувьсалын нэг онцлог нь соронзон орны идэвхжилээс ихээхэн хамаардаг. Ийм учраас нарны хоногийн хувьсалыг хоногийн тайван хувьсал (S_q), хоногийн бусниун хувьсал (S_d) гэж ялган судалдаг. [2,4]

Хоногийн тайван хувьсалыг олон улсаас зарладаг тухайн сарын 5 тайван өдрийн дундачаар тодорхойлдог бол хоногийн бусниун хувьсалыг мөн олон улсаас зарладаг 5 буснилтай өдрүүдийн дундажаар тодорхойлдог.

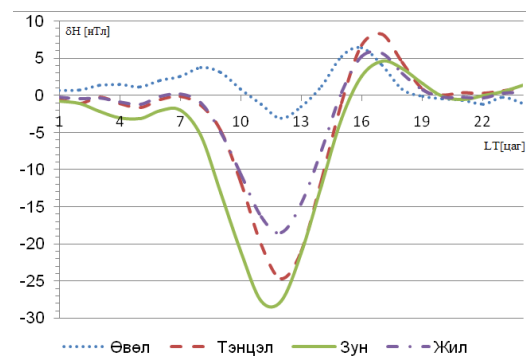
байгуулагч Z-ийн хоногийн хувьсал δZ нь шөнө, орой, өглөөгүүр бараг өөрчлөлтгүй байснаа 13-14 цагийн хооронд минимумтай

Улиралыг тооцохдоо соронзон орны судалгаанд өргөн хэрэглэдэг Ллойдын 3 улирал буюу 11, 12, 1, 2-р саруудыг өвлийн, 3, 4, 9, 10 -р саруудыг тэнцлийн (хавар, намрын), 5, 6, 7, 8-р саруудыг зуны сар гэж авч үзсэн.[3,4] Улаанбаатар ба Ховд соронзон оргилын мэдээлэл ашиглан соронзон орны S_q хувьсалыг ялгахдаа хоногийн дундаж утгаас бус, цагуудын (23, 24, 1, 2) цэнэгт мандлын хамгийн бага хувиралттай үе болох шөнийн дундаж утгыг авсан. Соронзон оргилын материалуудын боловсруулалтаас харахад хоногийн хувьсалын далайц, хэлбэр нь цаг хугацаа, улирал, жил, соронзон идэвхжил зэргээс хамаардаг болох нь харагдаж байна.

Соронзон орны нарны хоногийн хувьсалын үүсгэгч нь агаар мандлын дээд давхрага цэнэгт мандалд (ионсферт) гүйх гүйдлийн систем байдаг.



Зураг1. Улаанбаатар соронзон оргил



Зураг2. Ховд соронзон оргил

Зурагт соронзон орны хэвтээ байгуулагч H-ийн 2009 оны хоногийн тайван хувьсал S_q -г үзүүлэв. Х тэнхлэгийн дагуу орон нутгийн цаг, Y тэнхлэгийн дагуу соронзон орны хэвтээ байгуулагчийн (δH) өөрчлөлтийг нТл нэгжээр илэрхийлэн харуулав.

Хэвтээ байгуулагчийн хоногийн хувьсал (δH) -нь хоёр соронзон оргилын хувьд 12 цагт минимумтай үдээс хойш 16-18 цагийн хооронд максимумтай харин босоо байна. Соронзон орны хоногийн хувьсал нь жилийн туршид өдрөөс өдөрт өөрчлөгдөж байдаг ба ингэхдээ далайц нь илүү

өөрчлөгдөж фаз нь бараг өөрчлөгддөггүй. Хоногийн хувьслын далайц нь бүх байгуулагчийн хувьд нарны хазайлтын өнцөг хамгийн бага байх (-23.5°) өвлийн сараас нарны хазайлт хамгийн их болдог (23.5°) зуны улирал хүртэл өсөж байна.

III. ДҮГНЭЛТ

Зуны улирал, тэнцлийн үед хоногийн хувьслын туйл-экваторын (Т-Э) хавсарсан хэлбэр зонхилж өөрөөр хэлбэл манай соронзон оргил гүйдлийн системийн төвөөс хойш туйлын чиглэлд оршиж, өдрөөс өдөрт зөвхөн далайц нь өөрчлөгдөж байна..

Өвлийн улиралд $S_q(H)$ -ын хэлбэр ихээхэн хувирамтгай бөгөөд зонхилон экватор-туйл-экваторын (Э-Т-Э) хэлбэр давамгайлах байдал ажиглагдаж байгаа боловч завсрын болох экватор-туйлын (Э-Т) мөн туйлын (Т) хэлбэр ажиглагддаг болохыг олон улирлын дундачаар тогтоов.

Нарны идэвхжлийн нам ба өндөр үед S_q -хувьслын өөрчлөлтөнд 27 хоногийн давталт ажиглагдахгүй байна. Энэ нь наран дээрхи идэвхтэй мужуудын нөлөө хоногийн тайван хувьсалд шууд илэрдэггүй болохыг харуулж байна. Жилийн дундач далайц, нарны идэвхжлийн индекс Вольфын тоо хоёрын хооронд ($R=0.6$) корреляц ажиглагдаж байна.

АШИГЛАЛСАН МАТЕРИАЛ

[1]. Яновски Б.М.

Земной магнетизм Ленинград 1964г

[2]. Мишин. В. М. Спокойные

геомагнитные вариации и токи в магнитосфере Новосибирск 1976г

[3]. Г.Аюушжав Геомагнитное поле Монголии Москва 1982г

[4] Ү.сүхбаатар, А.Гүнчин-Иш

Анализ S_q вариаци на обсерватории Улаанбаатар за 1966г.

ШУА. ФТХ-ийн бүтээл. 1972он №10, 11

Соронзон орныг бөмбөлөг координатаар задлаж байгуулалт хийх арга

Ү.Сүхбаатар¹. Л.Мөнхбат². С.Ганцогт³.

¹Монгол Улс, Шинжлэх Ухааны Академи, Одон Орон Геофизикийн Судалгааны Төв

²Монгол Улс, Ховд аймаг, Ховд Их Сургууль.

³Монгол Улс, Шинжлэх Ухааны Академи, Физик Техникийн Хүрээлэн

Монгол нутагт соронзон орны газрын хэмжилтүүд тодорхой цэгүүдэд хийгдэж байсан боловч нягтрал багатай, тухайн бүс нутгийн тогтоц, геологийн онцлогуудтай холбон судлах боломжгүй зэрэг нь газрын соронзон хэмжилтийг тусгай зорилго, шийдэх асуудлуудтай уялдуулан хийж орон зайн тархалтыг нь тогтоох шаардлагатайг харуулж байгаа юм.

Түлхүүр үгс: Соронзон орон, жишиг орон, потенциал, бөмбөлөг задаргаа, координат

1. ОРШИЛ

Тогтмол соронзон оронг бөмбөлөг координатаар задалж зураглал хийх, онолын бодолтын хэмжилтийн утгатай жиших.

Физикийн зарим вектор хэмжигдхүүнээс гадна орны тухай адил мэдээлэл агуулсан скаляр оронг өргөн хэрэглэдэг. Заримдаа векторыг скаляр хэмжигдхүүний градиент хэлбэрээр илэрхийлж болох ба энэ тохиолдолд скалярыг векторын потенциал буюу скаляр потенциал гэж нэрлэдэг.

Соронзон орны хүчлэг **H**, соронзон индукц **B**-д харгалзах скаляр потенциалуудыг доорхи байдлаар бичиж болдог.

$$H = -\nabla W \quad (1)$$

$$B = -\nabla U \quad (2)$$

Хэрэв эх соронзон орныг судлахад зориулагдсан соронзон хэмжилтүүд агаар мандлын доод хэсэгт буюу шууд Дэлхийн гадарга дээр хийгдэж байгаа ба агаар мандал нь үл дамжуулагч, соронзон чанартай бус орчин гэсэн бүрэн үндэслэлтэй таамаглал дэвшүүлбэл өгөгдсөн нөхцлөөр соронзжилт

$$U(r, \theta, \phi) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=0}^n \frac{r^n}{a^{n-1}} (b_n^m \cos m\phi + c_n^m \sin m\phi) P_n^m(\cos\theta) + \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=0}^n \frac{a^{n+2}}{r^{n+1}} (g_n^m \cos m\phi + h_n^m \sin m\phi) P_n^m(\cos\theta) \quad (5)$$

а-дэлхийн радиус, $b_n^m, c_n^m, g_n^m, h_n^m$ – ажиглагдсан соронзон оронд сайн дөхүүлэх коэффициентүүд. $P_n^m(\cos\theta)$ – Лежандрин олон гишүүнт.

$$U = U_i + U_e \quad (6)$$

Энд U_i, U_e нь R_1 ба R_3 мужид тус тус эх үүсгэвэр нь орших орны потенциал. 5, 6-р томъёоноос ажиглагдаж байгаа соронзон орны потенциалыг дотоод, гадаад хэсэгт хувааж үзэж болохыг хялбар харж болно.

($M = 0$) ба гүйдлийн нягт ($J = 0$) тэгтэй тэнцүү. Ийм учраас соронзон индукцийн вектор орны скаляр потенциал U нь Лапласын тэгшитгэлийг хангана.

$$\nabla^2 U = 0 \quad (3)$$

Эх нь Дэлхийн төвтэй давхцсан бөмбөлөг солибцолын (r, θ, ϕ) системд Лапласын тэгшитгэлийн тухайн шийд доорхи хэлбэртэй байдаг. Үүнд:

$$\begin{aligned} & \cos(m\phi) \\ & r^k P_n^m(\cos\theta) \\ & \sin(m\phi) \end{aligned} \quad (4)$$

Энд k нь n буюу $(n+1)$ -тэй тэнцүү ба $m \leq n$,

Бүх орон зайг 3 мужид хувааж болно. Үүнд: R_1 – доод хагас хавтгай, R_2 – Дэлхийн гадаргуутай нийлсэн дээд хагас хавтгайн нимгэн давхрага R_3 – дээд хагас хавтгайн муж ба R_2 -ийн гадна оршино. R_2 – мужид ямар ч эх үүсгэвэр байхгүй учир энэ мужид U – потенциалыг доорхи байдалтай бичиж болно.[1]

Практикт потенциал U шууд ажиглагддаггүй бөгөөд соронзон орны ажиглагддаг соронзон индукцийн утгатай 2-р томъёогоор холбогддог. Хэрэв бөмбөрцөгийн дурын цэгт соронзон орны X, Y, Z – байгуулагчуудыг хэмжсэн гэвэл

$$\begin{aligned} x = B_\theta &= -\left(\frac{1}{r}\right) \frac{\partial U}{\partial \theta} \\ y = B_\phi &= -\left(\frac{1}{r \sin \theta}\right) \frac{\partial U}{\partial \phi} \\ z = B_r &= -\frac{\partial U}{\partial r} \end{aligned} \quad (7)$$

Ийм илэрхийлэлийг бичиж болно. Эндээс 7-р илэрхийлэлээс дифференциал авч $r = a$. гэвэл өөрөөр хэлбэл дэлхийн гадарга дээр

$$X = -\sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=0}^n [(b_n^m + g_n^m) \cos m\phi + (c_n^m + h_n^m) \sin m\phi] (d P_n^m(\cos\theta) / d\theta) \quad (8)$$

$$Y = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=0}^n [m(b_n^m + g_n^m) \sin m\phi - m(c_n^m + h_n^m) \cos m\phi] P_n^m(\cos\theta) / \sin\theta \quad (9)$$

$$Z = -\sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=0}^n [\{n b_n^m - (n+1) g_n^m\} \cos m\phi + \{n c_n^m - (n+1) h_n^m\} \sin m\phi] P_n^m(\cos\theta) \quad (10)$$

ингэж бичиж болно. Хэрэв X , Z -ийн утга дэлхийн гадаргуугийн цэгүүдэд тодорхой бол $\cos m\phi$, $\sin m\phi$ үржигдхүүнүүдийг тодорхойлж, $b_n^m, c_n^m, g_n^m, h_n^m$ —коэффициентүүдийг олж болно. Үүнийг соронзон орны бөмбөлөг задаргаа (СОБЗ) гэж нэрлэдэг. g , h коэффициентүүдийн утга нь b , c коэффициентүүдийн утгаас олон дахин их байдаг. Эндээс үзэхэд эх соронзон орны эх үүсгэгч нь Гилбертийн таамагласнаар дэлхийн дотоодод батлагдаж байгаа юм. Зарим судлаачид гадаад эх үүсгэгчтэй орны далайц ойролцоогоор 20нТл хүрдэг гэж тогтоосон байдаг.

Геофизикт ажиглагддаг янз бүрийн хэмжигдэхүүнд олон улсын жишиг тогтоох нь заримдаа ихээхэн ач тустай байдаг. Жишээлбэл Олон улсын хэвийн (нормал) таталцлын орон, чичирхийлэлийн долгионы гүйлтийн хугацааны Джеффрис-Буллены загвар, агаар мандлын стандарт загвар гэх мэт. Эх соронзон орны стандарт дөхсөн орныг *Олон улсын жишиг* (эталон) *соронзон орон* (International Geomagnetic Reference Field-IGRF) гэж нэрлэдэг. Хүснэгт 1-д Жишиг соронзон орны коэффициентүүдийн утгыг 1990 оныг үзүүлэв.

Олон улсын жишиг соронзон орны коэффициентүүдийн утга 1990 оны үеэр

II. СУДАЛГААНЫ МАТЕРИАЛ, АРГА ЗҮЙ

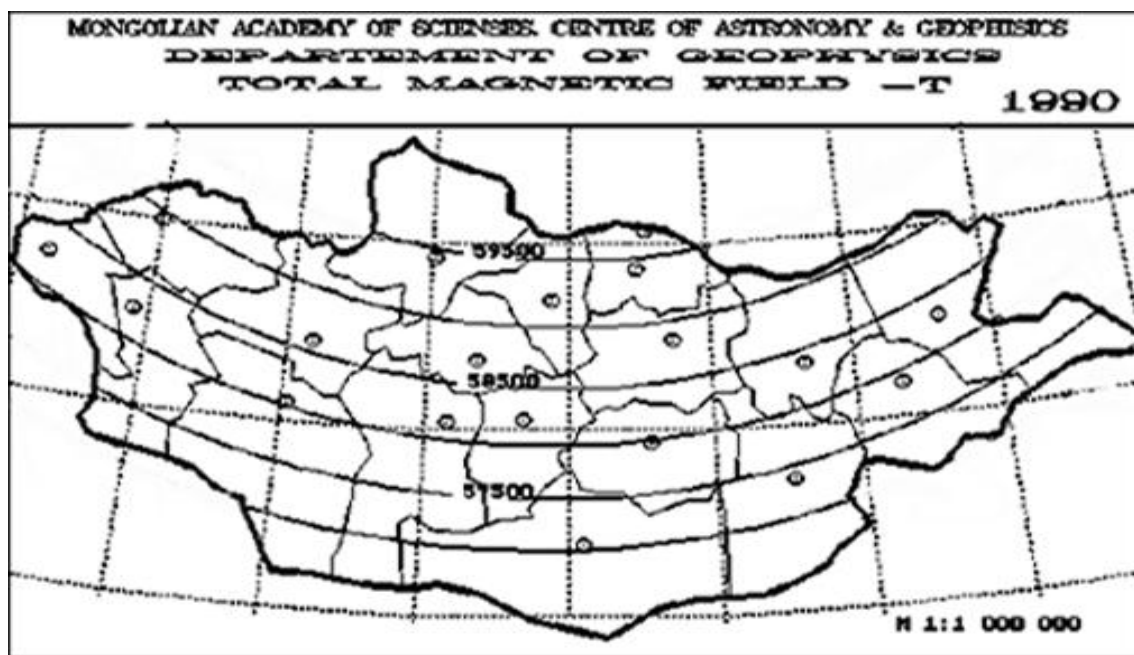
Хүснэгт 1

-29682	-1789	5318	-2197	3074	-2356	1685	-425	1329	-2268
-263	1249	302	769	-406	941	782	262	291	-232
-421	98	116	-301	-210	352	44	237	157	-122
-152	-167	-64	-26	99	66	64	-16	65	77
-172	67	2	-57	17	4	-94	28	78	-67
-77	1	-25	29	3	4	22	8	16	10
-23	-2	-3	24	4	12	-1	-20	-9	7
-14	-21	4	12	5	10	0	-17	-7	-10
4	9	-19	1	15	-12	11	9	-7	-4
-7	-2	9	7	7	0	-8	-6	1	-3
-4	2	2	1	-5	3	-2	6	4	-4
3	0	1	-2	3	3	3	-1	0	-6

Тухайн улс орны хувьд янз бүрийн нутаг дэвсгэрт хийгдсэн соронзон хэмжилтүүдийг нэгэн түвшинд оруулах, нэг суурьтай болгоход ОУЖСО чухал ач холбогдолтой бөгөөд манай улсад энэ орны тархалтыг тооцоолох нь практикийн чухал ач холбогдолтой.

III. ДҮГНЭЛТ

Зурагаас үзэхэд манай орны нутаг дэвсгэрт хэвийн соронзон орны утга ихээхэн хэмжээгээр өөрчлөгддөг болох нь харагдаж байна. Тухайлбал соронзон орны бүтэн байгуулагч T манай орны өмнө хэсгээс хойд хэсэгт $\approx 56500 \div \approx 60000$ нТл хувирч байна. Ийм учраас ажиглагдсан соронзон орноос гаж орныг ялгахад хэвийн соронзон орны утгыг зөв тооцох зайлшгүй шаардлагатай болох нь харагдаж байна.



Зураг.1 Боловсруулсан арга зүйг үндэс болгон Паскал хэл дээр программ бичиж бодолт хийж манай орны нутаг дэвсгэрийн хэвийн соронзон орны тархалтыг T-байгуулагчуудаар 1990 оны үеэр тооцоолсоныг харуулав.

АШИГЛАЛСАН МАТЕРИАЛ

1. Яновский Б.М. Земной магнетизм, Ленинград, 1964г

On the Mechanism of Particle Motion in Space and Time

Z.Omboo

Department of Applied Physics, School of Physics and Electronics,
National University of Mongolia, University Street-1, Mongolia
E-mail Omboo_ifas@yahoo.com

On the basis of a hypothesis about spiral motion of particles in space and time, It is derived from the theoretical expression for Planck constant and the De Broglie wave formulas and suggested a new physical constant.

Keywords: Quantum mechanics, field theories and spatial relativity

PACS 03.30.+p

Let's consider the particle rotating at the speed of light along a circle with radius r_0 centered on the origin of a frame of reference K_0 . Then the coordinates of the particle can be written as parametrical equation of complex cylindrical spiral:

$$x' = r_0 \cos \omega_0 t_0 \quad (1)$$

$$y' = r_0 \sin \omega_0 t_0 \quad (2)$$

$$ct' = ct_0 \omega_0 h_0 \quad (3)$$

Here h_0 —a coefficient with a dimension that is the time. It is obvious that h_0 is equal to the period of rotation of the particle in frame of reference K_0 .

Let's consider the motion of particle in frame of reference K_0 moving along the x axis of frame of reference K at velocity V . Then the coordinates of the particle in frame of reference K according to Lorentz transformations:

$$x = \frac{r_0 \cos \omega_0 t_0 + V ct_0 \omega_0 h_0}{1 - \frac{V^2}{c^2}} \quad (4)$$

$$y = r_0 \sin \omega_0 t_0 \quad (5)$$

$$ct = \frac{ct_0 \omega_0 h_0 + \frac{V}{c} r_0 \cos \omega_0 t_0}{1 - \frac{V^2}{c^2}} \quad (6)$$

In this case the components of energy momentum 4-vector can look like as follows¹:

$$p_x = \frac{-m_0 r_0 \omega_0 \sin \omega_0 t_0 + V m_0 \omega_0 h_0}{1 - \frac{V^2}{c^2}} \quad (7)$$

$$p_y = r_0 m_0 \omega_0 \cos \omega_0 t_0 \quad (8)$$

Here h_0 —a coefficient with a dimension that is the of time. It is obvious that h_0 is equal to the period of rotation of the particle in frame of reference K_0 .

Let's consider the motion of particle in frame of reference K_0 moving along the x axis of frame of reference K at velocity V . Then the coordinates of the particle in frame of reference K according to Lorentz transformations:

$$x = \frac{r_0 \cos \omega_0 t_0 + V ct_0 \omega_0 h_0}{1 - \frac{V^2}{c^2}} \quad (4)$$

$$y = r_0 \sin \omega_0 t_0 \quad (5)$$

$$ct = \frac{ct_0 \omega_0 h_0 + \frac{V}{c} r_0 \cos \omega_0 t_0}{1 - \frac{V^2}{c^2}} \quad (6)$$

In this case the components of energy momentum 4-vector can look like as follows[2]:

$$p_x = \frac{-m_0 r_0 \omega_0 \sin \omega_0 t_0 + V m_0 \omega_0 h_0}{1 - \frac{V^2}{c^2}}$$

$$p_y = r_0 m_0 \omega_0 \cos \omega_0 t_0 \quad (8)$$

$$p_t = \frac{m_0 c \omega_0 h_0 + m_0 \frac{V}{c} r_0 \omega_0 \sin \omega_0 t_0}{1 - \frac{V^2}{c^2}} \quad (9)$$

Wave length of particle in frame of reference K_0 is equal

$$\lambda = ch_0 = c \frac{2\pi r_0}{c} = 2\pi r_0; \quad (10)$$

and the wave number of the particle:

$$k_0 = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{1}{r_0} \quad (11)$$

Using these relations, we obtain:

$$m_0 r_0 \omega_0 = m_0 r_0 \frac{2\pi}{h_0} = m_0 c; \quad (12)$$

and

$$m_0 r_0 \omega_0 = \frac{m_0 c r_0}{r_0} = m c r_0 k_0 = \frac{m_0 c^2 k_0 h_0}{2\pi} \quad (13)$$

$$m_0 h_0 = \frac{m_0 c^2 h_0}{c^2} \quad (14)$$

Let's introduce a denotation

$$\hbar = m c^2 h_0$$

Substituting this in (7)-(9) we obtain:

$$p_x = \frac{\hbar k_0 \sin \omega_0 t_0 + \hbar \omega_0 \frac{v}{c^2}}{1 - \frac{v^2}{c^2}} \quad (15)$$

$$p_y = \hbar k_0 \cos \omega_0 t_0 \quad (16)$$

$$p_t = \frac{\hbar \omega_0 c + \hbar k_0 \frac{v}{c} \sin \omega_0 t_0}{1 - \frac{v^2}{c^2}} \quad (17)$$

Let's define values ω_0, h_0, k_0 in frame of reference K

$$\omega = \frac{\omega_0}{1 - \frac{v^2}{c^2}}; \quad (18)$$

$$k = \frac{k_0}{1 - \frac{v^2}{c^2}} \quad (19)$$

$$h = \frac{h_0}{1 - \frac{v^2}{c^2}} \quad (20)$$

It is necessary to notice that a projection of a vector k on the Ox axis in the frame of reference K equals

$$k'_0 = \frac{k_0 \frac{v}{c}}{1 - \frac{v^2}{c^2}} \quad (21)$$

following expression, for module of energy momentum 4-vector:

$$|p|^2 = h^2 - c^2 k'^2_0 + \omega^2 \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right) = m_0^2 c^4 \quad (22)$$

In Eq.(22) $h^2 \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right) = h_0$ and h_0 remains to a constant at any frame of reference. Thus the $\hbar$ can be identified with Planck constant. Then expression (22) it is possible to consider as a theoretical derivation of the De Broglie formulas:

$$E = h_0 \omega \quad u \quad p = h_0 k$$

For length of a wave of the resting particle, we shall receive following expression

$$\hbar = m_0 c^2 h_0 = m_0 c^2 \frac{\lambda_k}{c} = m_0 c \lambda_k$$

So we have received the well-known formula for the Compton[2] wave length of particle

$$\lambda_k = \frac{h_0}{m_0 c^2} \quad (23)$$

From (12) we obtain

$$m_0 r_0 c = m_0 c^2 \frac{h_0}{2\pi} = \hbar;$$

It means that

$$m_0 r_0 = \text{const}$$

or, that the center of mass of the moving particle is constant.

Results received from this work can be useful for understanding the mechanism of wave-particle duality and the quantum nature of motion following expression, for module of energy momentum 4-vector:

$$|p|^2 = h^2 - c^2 k'^2_0 + \omega^2 \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right) = m_0^2 c^4 \quad (22)$$

In Eq.(22) $h^2 \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right) = h_0$ and h_0 remains to a constant at any frame of reference. Thus the $\hbar$ can be identified with Planck constant. Then expression (22) it is possible to consider as a theoretical derivation of the De Broglie formulas:

$$E = h_0 \omega \quad u \quad p = h_0 k$$

For length of a wave of the resting particle,
we shall receive following expression

$$\hbar = m_0 c^2 h_0 = m_0 c^2 \frac{\lambda_k}{c} = m_0 c \lambda_k$$

So we have received the well-known
formula for the Compton wave length of
particle

$$\lambda_k = \frac{h_0}{m_0 c^2} \quad (23)$$

From (12) we obtain

$$m_0 r_0 c = m_0 c^2 \frac{h_0}{2\pi} = \hbar;$$

It means that

$$m_0 r_0 = \text{const}$$

or, that the center of mass of the moving
particle is constant. Results received from
this work can be useful for understanding
the mechanism of wave-particle duality
and the quantum nature of motion of
particles.

REFERENCES

- 1.L.D.Landau, E.M.Lifshitz ,The Classical
theory of Fields, Vol.2 (4th ed.), 1975
- 2.A.H.Compton, Phys.Rev., 22, p.409,
1923

Монгол орны зарим нутаг дахь агаар мандлын оптик зузааны хоногийн болон жилийн явц

Т. Нарангарав^{1*}, Г. Батсүх¹

¹ Монгол Улс, Улаанбаатар-210646, Их сургуулийн гудамж-1, Монгол Улсын Их Сургууль, Физик Электроникийн Сургууль, Геофизикийн тэнхим

*Э-уудан: t.narangarav@num.edu.mn

Энэ ажлаар Угтаал болон Сайншанд хийсэн нарны шулуун цацрагийн хэмжилтийн материалыг ашиглан нарны өндрийн нэг завсар (20^0 - 25^0)-т шилжүүлсэн агаар мандлын ерөнхий оптик зузааны утгаар түүний хоногийн болон жилийн явцыг спектрийн фотосинтезийн идэвхит цацраг (ФИЦ, $380\text{nm} \leq \lambda \leq 710\text{nm}$), биологийн идэвхит цацраг (БИЦ, $\lambda \leq 510\text{nm}$) болон инфра улаан цацраг (ИУЦ, $\lambda \geq 710\text{nm}$)-ийн мужид тодорхойлж, улмаар Улаанбаатар орчмын агаар мандлын ерөнхий оптик зузааныг тодорхойлсон дүнтэй харьцуулан жишиг.

1. ОРШИЛ

Буге-Ламбертийн хууль буюу агаар мандалд нарны шулуун цацрагийн эрчим сулрах хуулийг ашиглан Улаанбаатар хот орчмын агаар мандлын ерөнхий оптик зузаан (ЕОЗ)-ыг жилийн улирал бүрт нарны өндрийн янз бүрийн утганд тодорхойлж, нарны хөөрөх өндөр өсөх дутам ЕОЗ ихэсдэг болохыг тогтоосон. [1]

Нарны хөөрөх өндөр зуны улиралд хамгийн их, өвлийн улиралд хамгийн бага байдаг тул Улаанбаатар хот орчмын агаар мандлын ерөнхий оптик зузааны жилийн турш дахь өөрчлөлтийг тодорхойлохын тулд ЕОЗ-ны утгыг нарны өндрийн нэг завсар (20^0 - 25^0)-т шилжүүлэн жишиг үзүүлсэн билээ. Эндээс Улаанбаатар орчмын агаар мандлын ЕОЗ нь спектрийн БИЦ, ФИЦ болон ИУЦ-ийн муж бүрт өвлийн улиралд их байгаа нь Улаанбаатар хотод гэр хорооллын галлагаанаас үүсдэг аэрозолийн нөлөөг илтгэж байна.

Энэхүү ажилд Улаанбаатар хот орчмын агаар мандлын ерөнхий оптик зузааныг тодорхойлсон аргачлалаар Угтаал болон Сайншанд орчмын агаар мандлын ерөнхий оптик зузааныг үнэлэн жишиг.

II. СУДАЛГААНЫ ҮР ДҮН

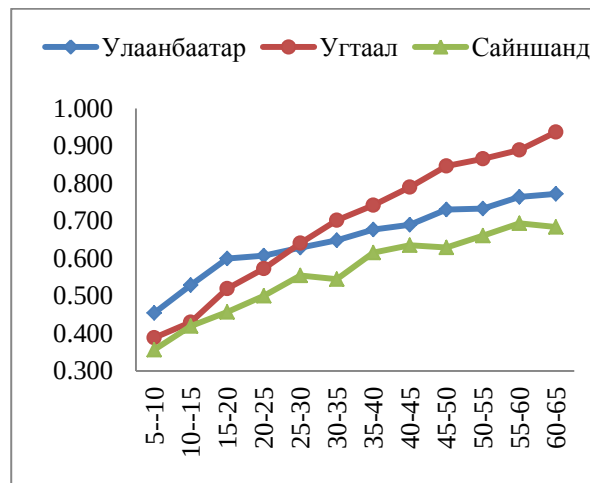
Энэ ажилд МУИС-ийн Геофизикийн Судалгааны Төвд тэнгэр цэлмэг үед БС-8, ЖС-18, КС-19 шилэн шүүлтүүр бүхий АТ-50 актинометрээр цаг тутамд Угтаалд 1986-1996 онд, Сайншандад 1993-1997 онуудад хийсэн нарны шулуун цацрагийн харгалзан 4417 ба 2245 хэмжилтийн дүнг ашиглаж [2].

Угтаал болон Сайншанд орчмын агаар мандлын ерөнхий оптик зузааныг спектрийн ФИЦ, ИУЦ болон БИЦ-ийн муж тус бүрт тодорхойлж, түүний олон жилийн дундаж

утгаар нарны өндрөөс хамаарах хамаарлыг гарган Улаанбаатар орчмынхтой жишин Зураг 1 /а, б, в/-д үзүүлэв.

Энэ зургаас үзэхэд агаар мандлын ерөнхий оптик зузаан Биологийн идэвхит цацрагийн мужид Угтаалд 0.400 орчмоос 0.950 орчим хүртэл, Сайншандад 0.350 орчмоос 0.650 орчим хүртэл ихэсдэг.

Фотосинтезийн идэвхит цацрагийн мужид Угтаалд 0.200 орчмоос 0.650 орчим хүртэл, Сайншандад 0.150 орчмоос 0.250 орчим хүртэл ихэсдэг байна. Инфра улаан цацрагийн мужид агаар мандлын ерөнхий оптик зузаан Угтаалд 0.100 орчмоос 0.500 орчим хүртэл, Сайншандад 0.110 орчмоос 0.300 орчим хүртэл ихэсч байна.

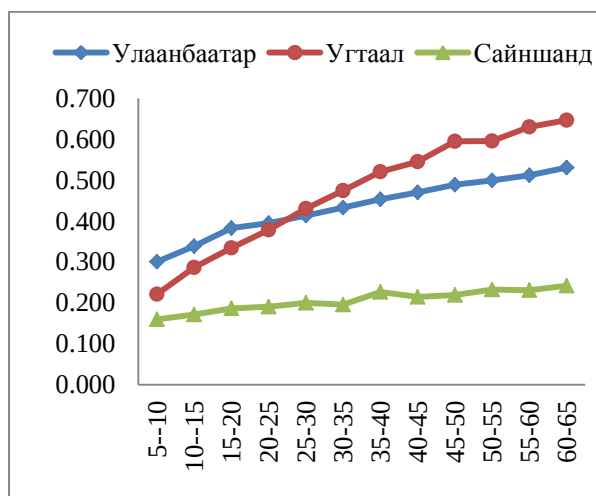


Зураг 1. а. БИЦ-ийн муж дахь агаар мандлын оптик зузааны нарны өндрөөс хамаарах хамаарал

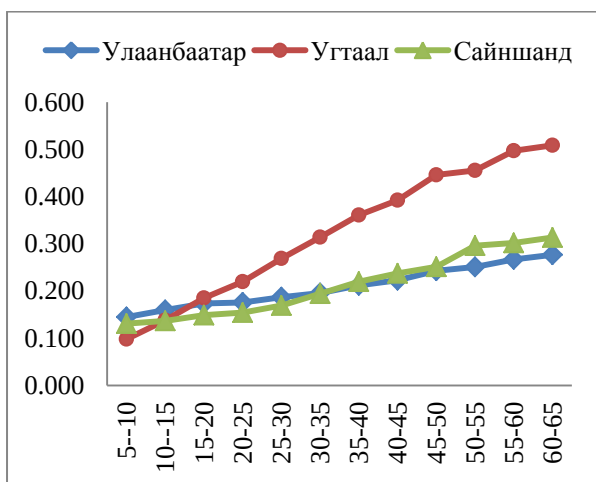
Эндээс харахад Монгол орны бүс нутаг бүрт нарны өндөр өсөхөд агаар мандлын ЕОЗ ихэсдэг зүй тогтолтой байна.

Дээрх бүс нутгуудын агаар мандлын ЕОЗ-ны хоногийн болон жилийн явцыг тодорхойлохын тулд агаар мандлын ЕОЗ-ны нарны өндрөөс хамаарах хамаарлыг зорилгоор

ЕОЗ-ны утгыг нарны өндрийн нэг завсар (20^0 - 25^0)-т шилжүүлэн гаргав. Улаанбаатар, Угтаал болон Сайншанд орчмын нарны нэг өндөрт шилжүүлсэн агаар мандлын ЕОЗ-ны хоногийн явцыг Зураг 2 /а, б, в/-т харуулав.



Зураг 1. б. ФИЦ-ийн муж дахь агаар мандлын оптик зузааны нарны өндрөөс хамаарах хамаарал

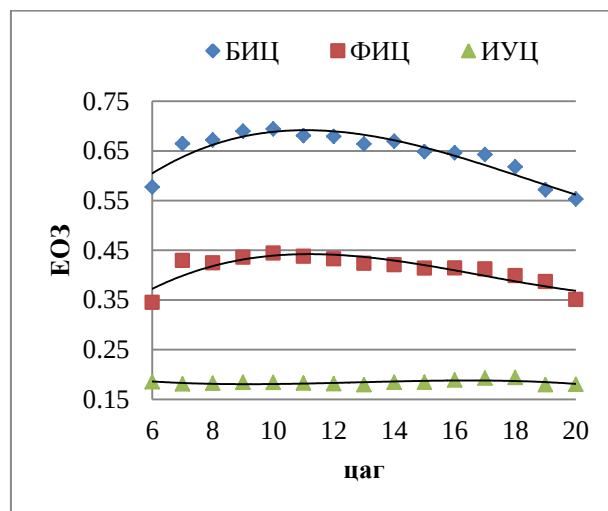


Зураг 1. в. ИУЦ-ийн муж дахь агаар мандлын оптик зузааны нарны өндрөөс хамаарах хамаарал

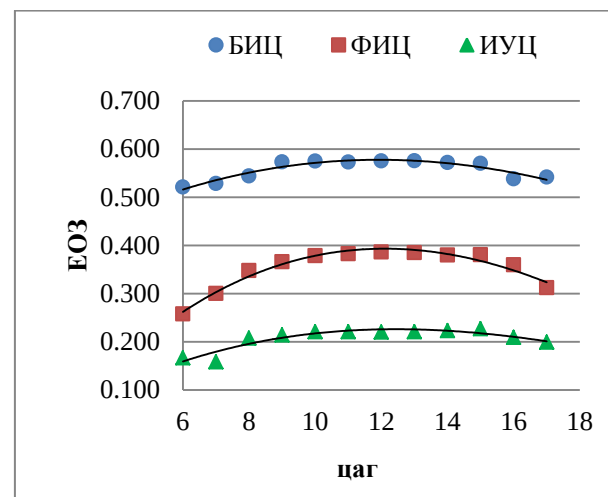
Дээрх зургуудаас үзэхэд Улаанбаатар орчмын агаар мандлын ЕОЗ нь спектрийн БИЦ болон ФИЦ-ийн мужид өглөөнөөс үд хүртэл ихэсч, оройдоо багасдаг, харин ИУЦ-ийн мужид өдрийн туршид бараг тогтмол байна. Угтаал орчмын агаар мандлын ЕОЗ нь спектрийн муж тус бүрт өглөөнөөс үд хүртэл ихэсч, оройдоо буурах хандлагатай байна. Харин Сайншанд орчмын агаар мандлын ЕОЗ нь спектрийн муж тус бүрт өглөөнөөс үд хүртэл буурч, оройдоо ихэсдэг болох нь харагдаж байна.

Угтаал болон Сайншанд орчмын агаар мандлын оптик зузааны жилийн турш дахь өөрчлөлтийг спектрийн муж бүрт тодорхойлон,

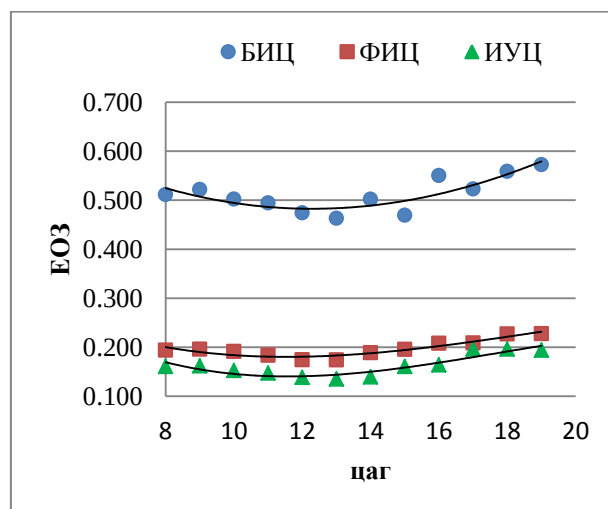
Улаанбаатар орчмынхтой жишин Зураг 3 /а, б, в/-т харуулав.



Зураг 2. а. Улаанбаатар орчмын агаар мандлын оптик зузааны хоногийн явц

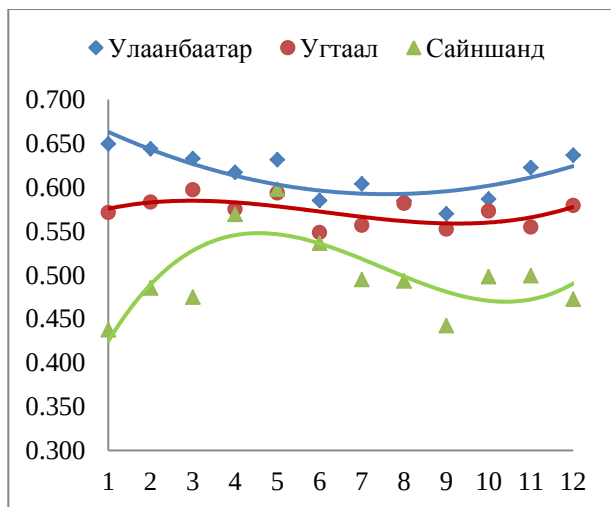


Зураг 2. б. Угтаал орчмын агаар мандлын оптик зузааны хоногийн явц

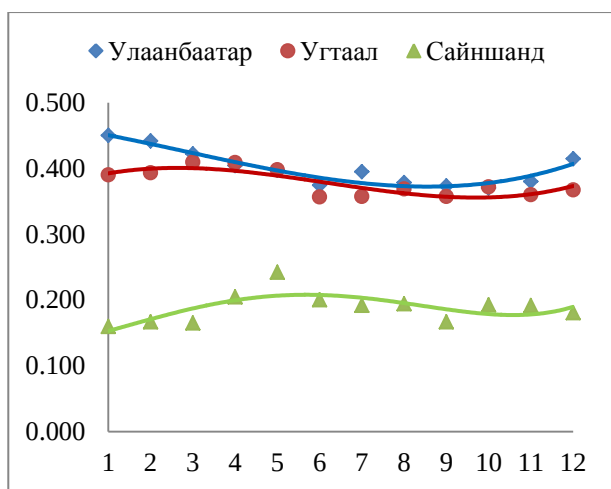


Зураг 2. в. Сайншанд орчмын агаар мандлын оптик зузааны хоногийн явц

Эдгээрээс үзэхэд Угтаал, Сайншанд орчмын агаар мандлын ерөнхий оптик зузаан спектрийн БИЦ болон ФИЦ-ийн мужид намрын улиралтай харьцуулахад хаврын улиралд их байна.



Зураг 3. а. БИЦ-ийн муж дахь агаар мандлын ерөнхий оптик зузааны жилийн явц

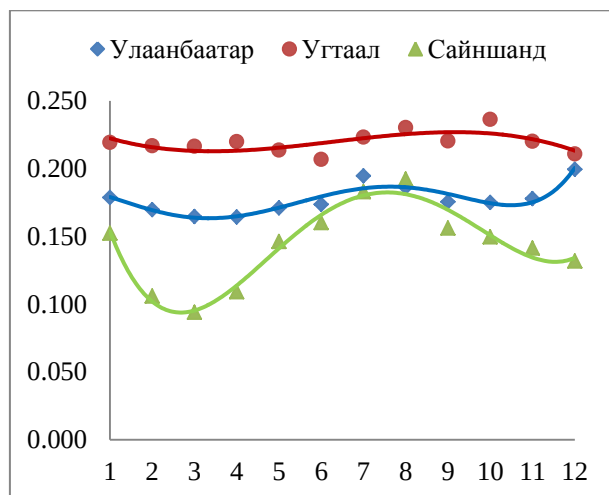


Зураг 3. б. ФИЦ-ийн муж дахь агаар мандлын ерөнхий оптик зузааны жилийн явц

Угтаал болон Сайншанд орчимд манай орны цаг агаарын онцлогтой холбоотойгоор хаврын улиралд салхи шуурга ихтэй, үүний улмаас агаарт тоос шороо их дэгддэг тул агаар мандлын оптик зузаан ихэсдэг гэж үзэж болно.

ИУЦ-ийн мужид агаар мандлын оптик зузаан Угтаалд өвлийн улиралтай харьцуулахад намрын улиралд их, Сайншандад хаврын улиралтай харьцуулахад зуны улиралд их байна.

Спектрийн энэ мужид усны уурын шингээлт байдагтай холбоотойгоор Улаанбаатар, Сайншанд орчимд агаар мандлын ерөнхий оптик зузааны дундаж утга зуны улиралд их болох хандлагатай байна.



Зураг 3. в. ИУЦ-ийн муж дахь агаар мандлын ерөнхий оптик зузааны жилийн явц

Ш.ДҮГНЭЛТ

Угтаал болон Сайншанд орчмын агаар мандлын ерөнхий оптик зузааныг спектрийн БИЦ, ФИЦ болон ИУЦ-ийн мужид тодорхойлсон дүнгээс дараах дүгнэлтүүдийг хийж болно. Үүнд:

- Спектрийн БИЦ, ФИЦ болон ИУЦ-ийн муж дахь агаар мандлын оптик зузаан нарны хөөрөх өндөр өсөхөд дагаж ихэсдэг зүй тогтол бүс нутаг бүрт ажиглагдаж байна.
- Улаанбаатар орчмын агаар мандлын ерөнхий оптик зузаан БИЦ болон ФИЦ-ийн мужид өглөөнөөс үд хүртэл ихсэх, оройдоо багасдаг, ИУЦ-ийн мужид өдрийн туршид өөрчлөлт багатай байна. Угтаал орчмын агаар мандлын ерөнхий оптик зузаан спектрийн муж бүрт өглөөнөөс үд хүртэл ихэсч, оройдоо багасч байна. Сайншанд орчмын агаар мандлын ерөнхий оптик зузаан спектрийн муж бүрт өглөөнөөс үд хүртэл багасч, оройдоо ихсэх хандлага ажиглагдаж байна.
- БИЦ болон ФИЦ-ийн муж дахь агаар мандлын ерөнхий оптик зузаан жилийн бусад улиралтай харьцуулахад Улаанбаатарт өвлийн улиралд их утгатай, Угтаал болон Сайншанд хаврын улиралд их утгатай байна. Спектрийн дээрх 2 муж дахь агаар мандлын ерөнхий оптик зузаан Улаанбаатар хотод өвлийн улиралд их байгаа нь энэ улиралд гэр хорооллын галлагаанаас үүсэх аэрозолийн нөлөөтэй холбоотой байх боломжтой. Угтаал болон Сайншанд орчмын агаар мандлын оптик зузаан хаврын улиралд харьцангуй их байгаа нь хаврын улиралд тухайн хоёр нутагт салхи шуурганы давтагдал их, үүний улмаас агаарт тоос шороо их дэгддэгтэй холбоотой.

- Усны уурын шингээлт бүхий ИУЦ-ийн мужид агаар мандлын ерөнхий оптик зузаан бусад улиралтай харьцуулахад Улаанбаатар болон Сайншанд зуны улиралд их утгатай, Угтаалд намрын улиралд их утгатай байна.

Талархал

Энэхүү судалгааны ажлыг Монгол Улсын ШУТСангаас санхүүжүүлсэн “Агаар мандалд явагдах оптик үзэгдлийн судалгаа” сэдэвт ажлын хүрээнд гүйцэтгэсэн болно.

АШИГЛАСАН МАТЕРИАЛ

- [1] Т.Нарангарав, Г.Батсүх “Улаанбаатар орчмын агаар мандлын оптик зузааны судалгааны зарим үр дүн”. МУИС, Эрдэм Шинжилгээний бичиг, Физик, №355(16), УБ, 2011, хууд. 96-99
- [2] МУИС-ийн Геофизикийн Судалгааны Төвийн нарны шулуун цацрагийн хэмжилтийн 1979-2009, 1986-1996, 1993-1997 оны материалууд

Appendix I to the paper published in transactions of Scientific Journal Physics, 2011 355(16) , pages 133-138.

A solution of initial value problem for finding amplitude of every field component in arbitrary polarized light waves in totally reflected from self focusing kerr media, as function of dielectric function, is given by power series accurate to the 6th order.

O. Nyamsuren and G. Ochirbat

Negative kerr media's dielectric function is

$\epsilon = \epsilon_p + x$, where $x > 0$, ϵ_p - dielectric constant, x - the term proportional to intensity, considered as independent variable

Square of amplitude of y component of the electric field is presented by power series accurate to the 6th order :

$$h^2 = h_0 x + h_1 x^2 + h_2 x^3 + h_3 x^4 + h_4 x^5 + h_5 x^6;$$

CoefficientList : $\{h_0, h_1, h_2, h_3, h_4, h_5\}$ is found with elements expressed in the term of initial value, h_0 .

$$h_1 = h_0 \left(\frac{1}{2\epsilon_p} + \frac{2b_0 h_0}{\epsilon_p^3} \right);$$

$$h_2 = h_0 \left(\frac{b_0}{48 b_1 \epsilon_p^2} + h_0 \frac{-50 b_0^2 + 49 b_0 \epsilon_p}{48 b_1 \epsilon_p^4} + h_0^2 \frac{4 b_0^2}{\epsilon_p^6} \right);$$

$$h_3 = -\frac{1}{3\epsilon_p^2} h_0 \left(\frac{-2 b_0^2 - 5 b_0 \epsilon_p}{384 (b_0 - \epsilon_p)^2 \epsilon_p} + \frac{(-1276 b_0^3 + 2440 b_0^2 \epsilon_p - 1157 b_0 \epsilon_p^2) h_0}{384 (b_0 - \epsilon_p)^2 \epsilon_p^3} + \frac{(56 b_0^3 - 55 b_0^2 \epsilon_p) h_0^2}{3 (b_0 - \epsilon_p) \epsilon_p^5} - \frac{24 b_0^3 h_0^3}{\epsilon_p^7} \right);$$

$$h_4 = \frac{(156 b_0^3 - 332 b_0^2 \epsilon_p - 13 b_0 \epsilon_p^2) h_0}{92160 \epsilon_p^4 (-b_0 + \epsilon_p)^3} + \frac{(104560 b_0^4 - 304360 b_0^3 \epsilon_p + 292162 b_0^2 \epsilon_p^2 - 92173 b_0 \epsilon_p^3) h_0^2}{92160 \epsilon_p^6 (-b_0 + \epsilon_p)^3} + \frac{(199828 b_0^4 - 388964 b_0^3 \epsilon_p + 188317 b_0^2 \epsilon_p^2) h_0^3}{23040 \epsilon_p^8 (-b_0 + \epsilon_p)^2} + \frac{(7486 b_0^4 - 7343 b_0^3 \epsilon_p) h_0^4}{360 \epsilon_p^{10} (-b_0 + \epsilon_p)} +$$

$$\frac{16 b_0^4 h_0^5}{\epsilon_p^{12}};$$

$$h_5 = \frac{(1036 b_0^4 - 3540 b_0^3 \epsilon_p + 3983 b_0^2 \epsilon_p^2 - 786 b_0 \epsilon_p^3) h_0}{921600 \epsilon_p^5 (-b_0 + \epsilon_p)^4} +$$

$$\begin{aligned}
& ((3205904 b_0^5 - 12507352 b_0^4 e p + 18193382 b_0^3 e p^2 - 11656455 b_0^2 e p^3 + 2762442 b_0 e p^4) \\
& \quad h_0^2) / (2764800 e p^7 (-b_0 + e p)^4) + \\
& \quad \frac{(7799564 b_0^5 - 22780884 b_0^4 e p + 22055815 b_0^3 e p^2 - 7065480 b_0^2 e p^3) h_0^3}{691200 e p^9 (-b_0 + e p)^3} + \\
& \quad \frac{(1689740 b_0^5 - 3298016 b_0^4 e p + 1602485 b_0^3 e p^2) h_0^4}{43200 e p^{11} (-b_0 + e p)^2} + \frac{(8758 b_0^5 - 8579 b_0^4 e p) h_0^5}{150 e p^{13} (-b_0 + e p)} + \\
& \quad \frac{32 b_0^5 h_0^6}{e p^{15}};
\end{aligned}$$

CoefficientList in the power series of square of amplitude of x component of the electric field is

$$\begin{aligned}
\{A_0, A_1, A_2, A_3, A_4, A_5\} = & \left\{ \frac{(b_0 - e p) h_0}{e p^2}, \frac{(-2 b_0 + e p) h_0}{2 e p^3} + \frac{(2 b_0 e p - 2 e p^2) h_1}{2 e p^3}, \right. \\
& \frac{(3 b_0 - e p) h_0}{3 e p^4} + \frac{(-4 b_0 e p + 2 e p^2) h_1}{3 e p^4} + \frac{(3 b_0 e p^2 - 3 e p^3) h_2}{3 e p^4}, \\
& \frac{(-4 b_0 + e p) h_0}{4 e p^5} + \frac{(6 b_0 e p - 2 e p^2) h_1}{4 e p^5} + \frac{(-6 b_0 e p^2 + 3 e p^3) h_2}{4 e p^5} + \frac{(4 b_0 e p^3 - 4 e p^4) h_3}{4 e p^5}, \\
& \frac{(5 b_0 - e p) h_0}{5 e p^6} + \frac{(-8 b_0 e p + 2 e p^2) h_1}{5 e p^6} + \frac{(9 b_0 e p^2 - 3 e p^3) h_2}{5 e p^6} + \frac{(-8 b_0 e p^3 + 4 e p^4) h_3}{5 e p^6} + \\
& \frac{(5 b_0 e p^4 - 5 e p^5) h_4}{5 e p^6}, \frac{(-6 b_0 + e p) h_0}{6 e p^7} + \frac{(10 b_0 e p - 2 e p^2) h_1}{6 e p^7} + \frac{(-12 b_0 e p^2 + 3 e p^3) h_2}{6 e p^7} + \\
& \left. \frac{(12 b_0 e p^3 - 4 e p^4) h_3}{6 e p^7} + \frac{(-10 b_0 e p^4 + 5 e p^5) h_4}{6 e p^7} + \frac{(6 b_0 e p^5 - 6 e p^6) h_5}{6 e p^7} \right\};
\end{aligned}$$

CoefficientList in the power series of square of amplitude of y component of the electric field is

$$\begin{aligned}
\{e_0, e_1, e_2, e_3, e_4, e_5\} = & 1 + \left(-\frac{b_0}{e p^2} + \frac{-b_0 + e p}{e p^2} \right) h_0, \left(\frac{3 b_0}{e p^3} - \frac{1}{2 e p^2} \right) h_0 + \left(-\frac{2 b_0}{e p^2} + \frac{1}{e p} \right) h_1, \\
& \left(-\frac{4 b_0}{e p^4} + \frac{1}{3 e p^3} \right) h_0 + \left(\frac{10 b_0}{3 e p^3} - \frac{2}{3 e p^2} \right) h_1 + \left(-\frac{2 b_0}{e p^2} + \frac{1}{e p} \right) h_2, \\
& \left(\frac{5 b_0}{e p^5} - \frac{1}{4 e p^4} \right) h_0 + \left(-\frac{9 b_0}{2 e p^4} + \frac{1}{2 e p^3} \right) h_1 + \left(\frac{7 b_0}{2 e p^3} - \frac{3}{4 e p^2} \right) h_2 + \left(-\frac{2 b_0}{e p^2} + \frac{1}{e p} \right) h_3, \\
& \left(-\frac{6 b_0}{e p^6} + \frac{1}{5 e p^5} \right) h_0 + \left(\frac{28 b_0}{5 e p^5} - \frac{2}{5 e p^4} \right) h_1 + \left(-\frac{24 b_0}{5 e p^4} + \frac{3}{5 e p^3} \right) h_2 + \\
& \left(\frac{18 b_0}{5 e p^3} - \frac{4}{5 e p^2} \right) h_3 + \left(-\frac{2 b_0}{e p^2} + \frac{1}{e p} \right) h_4, \left(\frac{7 b_0}{e p^7} - \frac{1}{6 e p^6} \right) h_0 + \left(-\frac{20 b_0}{3 e p^6} + \frac{1}{3 e p^5} \right) h_1 + \\
& \left(\frac{6 b_0}{e p^5} - \frac{1}{2 e p^4} \right) h_2 + \left(-\frac{5 b_0}{e p^4} + \frac{2}{3 e p^3} \right) h_3 + \left(\frac{11 b_0}{3 e p^3} - \frac{5}{6 e p^2} \right) h_4 + \left(-\frac{2 b_0}{e p^2} + \frac{1}{e p} \right) h_5;
\end{aligned}$$

CoefficientList in power series of square of amplitude of x component of the magnetic field is calculated through e0, e1, e2, e3, e4 and e5 .

Notation : b1 = b0 - ep;

$$\{b_1 e_0, -e_0 + 2 b_1 e_1, -2 e_1 + 3 b_1 e_2, -3 e_2 + 4 b_1 e_3, -4 e_3 + 5 b_1 e_4, -5 e_4 + 6 b_1 e_5\};$$

CoefficientList in the power series of square of amplitude of z component of the electric field is

$$\left\{ \frac{b_0 h_0}{e p^2}, \frac{-2 b_0 h_0 + b_0 e p h_1}{e p^3}, \frac{3 b_0 h_0 - 2 b_0 e p h_1 + b_0 e p^2 h_2}{e p^4}, \right. \\ \left. \frac{-4 b_0 h_0 + 3 b_0 e p h_1 - 2 b_0 e p^2 h_2 + b_0 e p^3 h_3}{e p^5}, \right. \\ \left. \frac{5 b_0 h_0 - 4 b_0 e p h_1 + 3 b_0 e p^2 h_2 - 2 b_0 e p^3 h_3 + b_0 e p^4 h_4}{e p^6}, \right. \\ \left. \frac{-6 b_0 h_0 + 5 b_0 e p h_1 - 4 b_0 e p^2 h_2 + 3 b_0 e p^3 h_3 - 2 b_0 e p^4 h_4 + b_0 e p^5 h_5}{e p^7} \right\};$$

CoefficientList in the power series of square of amplitude of z component of the magnetic field is equal to {e0, e1, e2, e3, e4, e5} multiplied by b0 :

$$\{e_0, e_1, e_2, e_3, e_4, e_5\} b_0;$$

Any of coefficientLists is expressed in the term of initial value , h0, for the explicit dependence of h1, h2, h3, h4 and h5 from h0

**Appendix II to the paper published in transactions of Scientific Journal Physics,
2011 355(16) , pages 133-138.**

How approximate solution of an initial value problem of finding amplitude of every field component in light waves in self focused kerr media as function of dielectric function is obtained is demonstrated in the second approximation.

O. Nyamsuren and G. Ochirbat

Seeks to determine square amplitude of y component of magnetic field using equations formulated by us. After second approximation the expressions for square of amplitude of y component of magnetic field and Dd-package will look as

$h^2 = h_0 x + h_1 x^2 + h_2 x^3$ and $Dd = Dd_0 + Dd_1 x + Dd_2 x^2$ (see formulas : (18a) - (18c) and (17) in the paper)

where h_2 and Dd_2 should be determined, in the second approximation, in the term of initial value, h_0 . we have extensively used several commands of symbolic calculus of mathematic 6 and our presentation below was given in the form of a notebook of mathematic 6

Notation: $b_0 = \beta^2$, $\epsilon_p = \text{dielectric constant}$.

$h_0 = ; h_1 = ; h_2 = ; x_1 = ; x_2 = ; x_3 = ; b_{11} = ; b_{21} = ; b_{12} = ; b_{22} = ;$

Clear[Dd0, Dd1, Dd2]

Quantities h_1 and Dd_0, Dd_1 have been calculated, from previous approximations, in the term of initial value, h_0 .

$$h_1 = \frac{h_0}{2\epsilon_p} + \frac{2b_0 h_0^2}{\epsilon_p^3}; Dd_0 = -\epsilon_p \left(\frac{1}{h_0} + \frac{\epsilon_p - 2b_0}{\epsilon_p^2} \right); Dd_1 = 0;$$

{Aa0, Aa1, Aa2} is coefficientList in power series of square of amplitude of x - component of the electric field, A^2 . To express elements of this list in terms of h_0, h_1, h_2 we use equation :

$$\frac{d}{d\epsilon} A^2 = \frac{(b_0 - \epsilon)}{\epsilon^2} \frac{d}{d\epsilon} h^2$$

$$b_1 = b_0 - \epsilon_p;$$

$$x_1 = \frac{(b_1 - x)(h_0 + 2h_1 x + 3h_2 x^2)}{(\epsilon_p + x)^2};$$

$$x_2 = \text{Normal}[\text{Series}[x_1, \{x, 0, 2\}]];$$

$$Aa = \text{CoefficientList}[x_2, x] \{1, 1/2, 1/3\};$$

$$\{Aa_0, Aa_1, Aa_2\} = \text{Collect}[Aa, \{h_0, h_3\}];$$

To decompose Dd_2 we need following list

$$\{Aa_0, Aa_1, Aa_2\} / Aa_0;$$

$$\{Aa0a, Aa1a, Aa2a\} = \text{Normal}[\text{Series}[\%, \{h0, 0, 12\}]]$$

$$\left\{1, -\frac{b0}{2(b0 - ep)ep} + \frac{2b0h0}{ep^3}, \frac{b0}{3(b0 - ep)ep^2} - \frac{4(2b0^2 - b0ep)h0}{3(b0 - ep)ep^4} + \frac{h2}{h0}\right\}$$

$$Aa2a$$

$$\frac{b0}{3(b0 - ep)ep^2} - \frac{4(2b0^2 - b0ep)h0}{3(b0 - ep)ep^4} + \frac{h2}{h0}$$

Discarding terms with factor h2 from this expression.

$$h2 = 0; Aa2a; h2 = .;$$

$e_y^2 = e0x + e1x^2 + e2x^3$. To get $\{e0, e1, e2\}$ – list, in terms of $h0, h1, h2$, we use

$$\text{equation: } e_y^2 = \epsilon - ep - A^2 - \frac{b0}{\epsilon^2} h^2.$$

$$x3 = 1 - \text{Normal}[\text{Series}[\frac{b0}{(ep + x)^2} (h0 + h1x + h2x^2), \{x, 0, 2\}]];$$

$$\text{CoefficientList}[\%, x] - Aa;$$

$$\{e0, e1, e2\} = \text{Collect}[\%, \{h0, h2\}]$$

$$\begin{aligned} &\left\{1 + \left(-\frac{2b0}{ep^2} + \frac{1}{ep}\right)h0, \frac{2b0h0}{ep^3} + \left(-\frac{4b0^2}{ep^5} + \frac{2b0}{ep^4}\right)h0^2, \right. \\ &\quad \left. -\frac{7b0h0}{3ep^4} + \left(\frac{20b0^2}{3ep^6} - \frac{4b0}{3ep^5}\right)h0^2 + \left(-\frac{2b0}{ep^2} + \frac{1}{ep}\right)h2\right\} \\ &\left\{1 + \left(-\frac{2b0}{ep^2} + \frac{1}{ep}\right)h0, \frac{2b0h0}{ep^3} + \left(-\frac{4b0^2}{ep^5} + \frac{2b0}{ep^4}\right)h0^2, \right. \\ &\quad \left. -\frac{7b0h0}{3ep^4} + \left(\frac{20b0^2}{3ep^6} - \frac{4b0}{3ep^5}\right)h0^2 + \left(-\frac{2b0}{ep^2} + \frac{1}{ep}\right)h2\right\} \end{aligned}$$

For decomposition of Dd3 we need $\{e0e, e1e, e2e\} = \{e0, e1, e2\}/e0$ - list. let us express this list in terms of $e0$ and $h2$.

$$e0 = .$$

$$h0 = (1 - e0)ep^2 / (2b0 - ep);$$

$$\{e0, e1, e2\} / e0;$$

$$\{e0e, e1e, e2e\} = \text{Normal}[\text{Series}[\%, \{e0, 0, 12\}]];$$

$$e_2 e$$

$$\frac{4 e_0 (5 b_0^2 - b_0 e p)}{3 e p^2 (-2 b_0 + e p)^2} + \frac{-26 b_0^2 + b_0 e p}{3 (2 b_0 - e p)^2 e p^2} + \frac{2 b_0^2 + b_0 e p - 8 b_0^3 h_2 + 12 b_0^2 e p h_2 - 6 b_0 e p^2 h_2 + e p^3 h_2}{e_0 (2 b_0 - e p)^2 e p^2}$$

Discard from this expression , terms with factor h_2 and the terms with pole $1/e_0$. Then

$$e_2 e = \frac{4 e_0 (5 b_0^2 - b_0 e p)}{3 e p^2 (-2 b_0 + e p)^2} + \frac{-26 b_0^2 + b_0 e p}{3 (2 b_0 - e p)^2 e p^2};$$

$$e_2 e p = \frac{2 b_0^2 + b_0 e p}{(2 b_0 - e p)^2 e p^2};$$

$H^2 = H_{h0} x + H_{h1} x^2 + H_{h2} x^3$ and $e_y^2 =$

$e_0 x + e_1 x^2 + e_2 x^3$. Both expansions are related each other by the following equation

$$\frac{d}{d\epsilon} H^2 = (b_0 - \epsilon) \frac{d}{d\epsilon} e_y^2$$

```
Clear[b1, e0, e1, e2, e3]
```

```
x1 = (b1 - x) (e0 + 2 e1 x + 3 e2 x^2);
```

```
Normal[Series[x1, {x, 0, 2}]];
```

```
{Hh0, Hh1, Hh2} = CoefficientList[%, x] {1, 1/2, 1/3}
```

```
{b1 e0, 1/2 (-e0 + 2 b1 e1), 1/3 (-2 e1 + 3 b1 e2)}
```

Take following list

```
{Hh0, Hh1, Hh2} / Hh0;
```

```
{Hh0H, Hh1H, Hh2H} = Collect[%, {e1, e2}];
```

Dd2 can be written in following form:

Dd2 = $h_3 \frac{ep}{h_0^2} - \frac{ep}{h_0} e_2 ep + Dd0 * Dd2d$, where the first term is proportional to h_3 , the second term is due to $1/e_0$ -pole and the last is the other terms.

Seeks explicit expression for $Dd2d$ which is, in turn, of three parts: the first corresponds TM waves, the second part corresponds TE waves and third part describes interactions between TM and TE waves..

Notation:

$$b_{11} = 2 e_1 e - \frac{1}{2 b_1}; b_{12} = -\frac{7}{6} e_1 e / b_1 + e_1 e^2 + 2 e_2 e;$$

$$h_2 = 0; h_1 = \frac{h_0}{2\epsilon p} + \frac{2b_0 h_0^2}{\epsilon p^3};$$

$$b_1 = b_0 - \epsilon p; b_2 = b_1 + b_0;$$

$$b_{21} = h_1/h_0 + Aa_1a; b_{22} = Aa_1a h_1/h_0 + Aa_2a;$$

$$e_0 =.$$

Choose from Dd2d the terms which correspond to T E waves.

$$x_1 = \frac{1}{8} (-b_{11}^2 + 4 b_{12});$$

$$\text{Normal}[\text{Series}[x_1, \{e_0, 0, 10\}]]$$

$$\frac{2e_0(10b_0^3 - 10b_0^2\epsilon p + b_0\epsilon p^2)}{3(b_0 - \epsilon p)(2b_0 - \epsilon p)^2\epsilon p^2} + \frac{-832b_0^4 + 1568b_0^3\epsilon p - 716b_0^2\epsilon p^2 - 20b_0\epsilon p^3 - 3\epsilon p^4}{96(b_0 - \epsilon p)^2(2b_0 - \epsilon p)^2\epsilon p^2}$$

$$\{x_{10}, x_{11}\} = \text{CoefficientList}[\%, e_0];$$

Choose from Dd2d the terms which correspond to T M waves.

$$x_2 = \frac{1}{8} (3b_{21}^2 - 4b_{22});$$

$$\text{Normal}[\text{Series}[\%, \{h_0, 0, 10\}]];$$

$$\text{CoefficientList}[\%, h_0]$$

$$\left\{ \frac{-4b_0^2 + 4b_0\epsilon p + 9\epsilon p^2}{96\epsilon p^2(-b_0 + \epsilon p)^2}, \frac{4b_0^2 - 5b_0\epsilon p}{3(b_0 - \epsilon p)\epsilon p^4}, \frac{4b_0^2}{\epsilon p^6} \right\}$$

$$\{x_{20}, x_{21}, x_{22}\} = \%;$$

$$h_0 =.$$

$$e_0 = 1 + \frac{\epsilon p - 2b_0}{\epsilon p^2} h_0;$$

The mixed terms in Dd2d are:

$$x_3 = -\frac{1}{4} b_{11} b_{21};$$

$$\text{Normal}[\text{Series}[\%, \{h_0, 0, 10\}]];$$

$$\{x_{30}, x_{31}, x_{32}\} = \text{CoefficientList}[\%, h_0]$$

$$\left\{ -\frac{1}{16(b_0 - \epsilon p)^2}, \frac{b_0}{(b_0 - \epsilon p)\epsilon p^3}, -\frac{4b_0^2}{\epsilon p^6} \right\}$$

Expressing TE terms in the term of h0

$$zz = \frac{1}{8} (-b_{11}^2 + 4 b_{12});$$

```

Normal[Series[%, {h0, 0, 10}]];
CoefficientList[%, h0]
{

$$\frac{-64 b_0^4 + 96 b_0^3 \text{ep} - 4 b_0^2 \text{ep}^2 - 28 b_0 \text{ep}^3 - \text{ep}^4}{32 (b_0 - \text{ep})^2 (2 b_0 - \text{ep})^2 \text{ep}^2}, -\frac{2 (10 b_0^3 - 10 b_0^2 \text{ep} + b_0 \text{ep}^2)}{3 (b_0 - \text{ep}) (2 b_0 - \text{ep}) \text{ep}^4}
}
{z0, z1} = %;
x20 + x30 + z0;
Simplify[%];
g0 = %

$$\frac{b_0 (-52 b_0^2 + 28 b_0 \text{ep} + 23 \text{ep}^2)}{24 (b_0 - \text{ep}) \text{ep}^2 (-2 b_0 + \text{ep})^2}$$

x21 + x31 + z1;
Simplify[%];

g1 = %

$$-\frac{4 b_0^2}{(2 b_0 - \text{ep}) \text{ep}^4}$$

x22 + x32;
Simplify[%];
g2 = %
0$$

```

So, for Dd2d we have got explicit expression: $Dd2d = g_0 + g_1 h_0 + g_2 h_0^2$

```

h0 =.;
Clear[h0, h1, h2];
b1 = b0 - ep; Dd0 = -ep ( 1/h0 + (ep - 2 b0)/ep^2 ); Dd1 = 0;

h1 = h0/(2 ep) + (2 b0 h0^2)/ep^3;

```

Let us imagine that the equation(see equation (15a) in the paper), in which Dd3 figures, has been written in the form, where terms with factor h_3 were to the left side of equal sign and the other terms were to the right side of equals sign. If you omit the Dd3d terms and pole term then right side of the equation looks like

$$x_1 = -(\text{ep} + x)^2 - (h_0 x + h_1 x^2) 2 b_0 / (\text{ep} + x) - (\text{ep} - 2 b_0 + x + (\text{ep} + x) (Dd0 + Dd1 x)) (h_0 + 2 h_1 x);$$

Normal[Series[x1, {x, 0, 2}]]

$$\left(\frac{3 b_0 h_0}{e p^2} - \frac{12 b_0^2 h_0^2}{e p^4} \right) x^2$$

Note that, in this expansion there is only x^2 factor, which indicates the correctness of previous approximations.

$$Brx = \% / x^2;$$

$$e_0 = 1 + \frac{e p - 2 b_0}{e p^2} h_0;$$

Returning back to the right side of the equation, the discarded before Dd_2 terms and the pole term we write

$$Br = Brx + e p^2 e_2 e p + e p^2 e_0 (g_0 + g_1 h_0 + g_2 h_0^2);$$

$$h_2 = - \frac{h_0}{2 e p^2} Br;$$

Normal[Series[%, {h0, 0, 8}]]

$$- \frac{b_0 h_0}{48 e p^2 (-b_0 + e p)} + \frac{(50 b_0^2 - 49 b_0 e p) h_0^2}{48 e p^4 (-b_0 + e p)} + \frac{4 b_0^2 h_0^3}{e p^6}$$

It is that we looking for.

$$h_2 = - \frac{b_0 h_0}{48 e p^2 (-b_0 + e p)} + \frac{(50 b_0^2 - 49 b_0 e p) h_0^2}{48 e p^4 (-b_0 + e p)} + \frac{4 b_0^2 h_0^3}{e p^6};$$

$$h_0 = .$$

Dd_2 is now calculated as

$$Dd_3 = Dd_0 (g_0 + g_1 h_0 + g_2 h_0^2) + h_2 \frac{e p}{h_0^2} - \frac{e p}{h_0} e_2 e p;$$

Normal[Series[%, {h0, 0, 8}]]

$$\frac{-2 b_0^2 + b_0 e p}{16 (b_0 - e p) e p^3} + \frac{b_0}{16 (b_0 - e p) e p h_0}$$

$$Dd_2 = \frac{-2 b_0^2 + b_0 e p}{16 (b_0 - e p) e p^3} + \frac{b_0}{16 (b_0 - e p) e p h_0};$$

This result will be used in next steps of approximations.

Verification of the obtained solution.

$$x_1 = -(e p + x)^2 - (h_0 x + h_1 x^2) 2 b_0 / (e p + x) - (e p - 2 b_0 + x + (e p + x) (Dd_0 + Dd_1 x + Dd_2 x^2)) (h_0 + 2 h_1 x + 3 h_2 x^2);$$

Normal[Series[%, {x, 0, 2}]]

$$0$$

Гарчиг

1.	Сөрөг керр суурь орчин дахь эллипс туйлширалтай хавтгай долгионд харгалзах анхны интегралын тогтмолыг факторизацлах нь О.Нямсүрэн, Г. Очирбат, Д.Улам-Оргих	1-2
2.	Эерэг керр илтэс дэх гэрлийн дурын туйлшралтай стационар долгионы оронгийн амплитуд бүр диэлектрикийн функцээс хамаарах хамаарлыг тодорхойлох бүрэн систем тэгшитгэл О. Нямсүрэн, Г. Очирбат	3-5
3.	Сөрөг керр илтэс дэх гэрлийн дурын туйлшралтай стационар долгионы оронгийн амплитуд бүр диэлектрикийн функцээс хамаарах хамаарлыг тодорхойлох бүрэн систем тэгшитгэл О.Нямсүрэн, Г.Очирбат	6-7
4.	Сөрөг керр суурь орчинд бүрэн ойх гэрлийн дурын туйлшралтай долгио О. Нямсүрэн, Г. Очирбат, Д.Улам-Оргих	8-16
5.	Geant4 багцаар нейтроны сарнилын дүрслэлт тооцоо үйлдэхүй О. Лхагва, М. Батмөнх, П. Батзул	17-22
6.	Устөрөгчийн атомыг хүчтэй лазерын аттосекундын пульсээр өдөөх магадлалыг диполийн ойролцоололд бодох нь Ч.Алдармаа, Л.Хэнмэдэх, О.Лхагва	23-25
7.	Давхар вольфрамит $\text{NaFe}(\text{WO}_4)_2$, $\text{NaCr}(\text{WO}_4)_2$ кристалл дахь солилцлын үйлчлэл ба квант корреляц Х.Цоохүү, Л.Ням-Очир	26-29
8.	First-principles Study of Magnetism and Electronic Structure of Li_xFePO_4 D. Odkhuu, T. Tsevelmaa, N. Tsogbadrakh and S. C. Hong	30-37
9.	First-principles Electronic Structure Calculation of Topological Insulator Bi_2Te_3 P.Taivansaikhan, N.Tsogbadrakh and S.C.Hong	38-40
10.	Влияние сезонного изменения химического состава оборотной воды Горно-обогатительного комбината Эрдэнэт на обогатимость молибденита Р. Галбадрах, Ц. Даржаа, Д. Дорж, Н. Цогбадрах, Т. Мянганбаатар, Л. Энхтөр, Ж. Баатархүү, Ц. Туяа, С. Эрдэнэсүх	41-47

11. **Нүүрстөрөгчийн нано хоолойг уураас суулгах химийн арга болон нуман цахилалтын аргаар гарган авах боломж** 48-51
Р.Галбадрах, Э.Тэмүжин, Тон Ён Ли, Л.Энхтөр, Г.Шилагарди, Н.Төвжаргал, Б.Батцэнгэл
12. **Улаанбаатар хотод борлуулагдаж буй барилга ба тавилгын будгийн хар тугалга, кадмий, хром, селен, хүнцэл зэрэг хүнд элементүүдийг шинжилсэн дүнгээс** 52-57
М. Мөнгөншагай, Т. Мянганбаатар, Ч. Дашжаргал, Х. Балт-Эрдэнэ, Л. Ням-Очир, Л. Энхтөр, Р. Галбадрах
13. **Электрофизические свойства полупроводниковых структур $n\text{-InSb}_{1-x}\text{Bi}_x\text{-i-GaAs}$ и $n\text{-InSb}_{1-x}\text{Bi}_x\text{-i-GaAs/Te}$** 58-60
Шилагарди. Г, Ярмолевич В.А, Прокошин В.И, Төмөрбаатар. Д, Цооху. Х, Эрдэнэбаатар.Д, Хандма.Ц
14. **Метод синтеза полупроводниковых структур $n\text{-InSb}_{1-x}\text{Bi}_x\text{-i-GaAs}$, $n\text{-InSb}_{1-x}\text{Bi}_x\text{-i-GaAs/Te}$, перспективных для изготовления высокостабильных элементов холла** 61-66
Шилагарди. Г, Ярмолевич. В.А, Прокошин.В.И, Төмөрбаатар. Д, Цооху .Х, Эрдэнэбаатар.Д, Хандма.Ц
15. **Нейтронографические исследования внутренних деформаций, текстуры и свойств горных пород** 67-76
Т.И.Иванкина, Т. Локаичек, А.Н.Никитин, Д. Сангаа
16. **Современная структурная нейтронография на импульсных источниках нейтронов** 77-86
А.М. Балагуров, Д. Сангаа
17. **Расчет энергии упорядочения сплава Cu_3Au по формуле Каули** 87-90
В.М.Силонов, Л.Энхтур, Х.Балт-Эрдэнэ, Н.Тувжаргал, Р.Галбадрах, Х.Цоохуу
18. **$\alpha\text{-NPD}$ нимгэн хальсны талсжилт ба бүтцийн эвдрэл** 91-955
Х. Балт-Эрдэнэ, Р. Галбадрах, Л. Энхтөр, Д. Амгаланбаатар
19. **Эрдэнэт үйлдвэрийн хүдэр болон зэс, молибдений баяжмалын рентген дифракцын судалгаа** 96-100
Л.Ням-Очир, Ч.Дашжаргал, Р.Галбадрах, Н.Цогбадрах, Ц.Даржаа, Д.Дорж
20. **Нунтаг дээжийн рентген дифрактометр D500 төхөөрөмжөөр усны бүтцийг судлах боломж** 101-103
Л.Ням-Очир, Л.Алтайбаатар, Ч.Дашжаргал, Н.Цогбадрах, Д.Сангаа
21. **Халтмар эрдсийн рентген дифракц ба молекулын хэлбэлзлийн спектрийн судалгаа** 104-107
Л.Алтайбаатар, Л.Ням-Очир, Ш.Мөнхжаргал

22.	Li₂FePO₄-ийн фазын салалтын кинетик болон соронзон шинж чанарын судалгаа Н.Төвжаргал, Б.Бат-Отгон, Ж.Даваасамбуу, Г.Еколд	108-110
23.	Study of Convection using the Kain-Fritsch Convective Scheme of WRF Numerical Model L. Jambajamts, M. Tsoozol, Kh. Tsookhuu	111-115
24.	Pt/PANI катализаторын XRD болон XAS судалгаа Б.Бумаа, Э.Уянга, Г. Сэвжидсүрэн, П.Алтанцог	116-119
25.	Улаанбаатар хотын автозамын дагуух тоосонцорын бөөмийн хэмжээ, түүний тархалтын судалгаа Г.Оюунгэрэл, Г.Батдэмбэрэл, Ш.Чадраабал, П.Мөнхбаатар, П.Алтанцог	120-124
26.	Усанд суспензлэгдсэн перовскит төрлийн La_{1-x}Cu_xMnO₃ (x≤0.1)-ийн кристалл бүтэц ба бөөмийн хэмжээсийн судалгаа Г.Батдэмбэрэл, Г.Оюунгэрэл, Ш.Чадраабал, Г.Цэрмаа, П.Мөнхбаатар	125-129
27.	Long Term Performance Analysis of Photovoltaic Modules in the Sainshand of Dornogobi Province Amarbayar Adiyabat, Bat-Erdene Ganbaatar, Kenji Otani, Naruush Enkhmaa	130-134
28.	Гамма спектрометрийн аргаар байгалийн дээжид ²³⁸U тодорхойлох П.Зузаан, Б.Отгоолой, Р.Маахүү	135-140
29.	Атомын цацаргалтын спектрийн шинжилгээнд шилждэг электрод ашигласан нь Т.Батбаяр, П.Зузаан, Д.Нямаа	141-143
30.	Нейтрон идэвхжилийн аргаар уран тодорхойлох Б.Отгоолой, П.Зузаан*, Ж.Амгалан, Г.Дамдинсүрэн, Д.Баатархүү	144-147
31.	“Гамма-Нейтрон” төхөөрөмж дээрх гамма цацрагийн болон дулааны нейтроны урсгалын харьцаа Б.Отгоолой, П.Зузаан, Г.Дамдинсүрэн, Д.Баатархүү	148-152
32.	Атомын шингээлтийн спектр судлалын арга боловсруулж хэрэглэсэн Т.Батбаяр, П.Зузаан, Д.Нямаа	153-157
33.	Цөмийн потенциал саадыг (n,α) урвалаас гарах альфа-бөөм нэвтрэх факторын тооцоо Т.Дэлгэрсайхан, Г.Хүүхэнхүү, М.Одсүрэн, Ж.Мөнхсайхан	158-164
34.	Ураны Уурхайн Цацрагийн Аюулгүй Байдал Н.Энхбат, Н.Норов, Б.Отгоолой	165-169

35. Монгол Орны Эмийн Ургамлын Судалгаанд Цөмийн Анализын Аргыг Хэрэглэх нь Н.Балжинням, Н.Норов, Б.Жүгдэр, М.В.Фронтасьева, С.С.Павлов	170-173
36. Ураны Далд Уурхайн Агааржуулалтаар Хаягдах Радоны Тархалт Н.Энхбат, Н.Норов*, Г.Хүүхэнхүү	174-182
37. Ураны Хүдэр дэх Цацраг Идэвхийн Тэнцвэр Г.Цэмбэлмаа, Н.Норов, Н.Энхбат	183-189
38. Монгол улсад цөмийн энерги ашиглахад олон нийтийн хүлээн зөвшөөрлийг бий болгох нь С.Одмаа, С.Даваа, Т.Дэлгэрсайхан, Ц.Амартайван, Г.Хүүхэнхүү	190-197
39. Термолюминесцийн хувийн дозиметрийн хэрэглээ Б.Мөнхтогтох, Г.Манлайжав, Н.Норов, Г.Мягмарсүрэн	198-201
40. Улаанбаатар орчмын байгалийн гэрэлтүүлгийн судалгааны үр дүн О.Энхнасан, Ц.Баатарчулуун, Г.Батсүх	202-205
41. Улаанбаатар хотын аэрозолийн оптик зузааны жилийн болон хоногийн явц Г. Батсүх, Ц. Баатарчулуун, Б. Даариймаа	206-208
42. Соронзон орны хоногийн тайван хувьсал S_q-д хийсэн судалгаа Ү.Сүхбаатар, Л.Мөнхбат	209-211
43. Соронзон орныг бөмбөлөг координатаар задлаж байгуулалт хийх арга Ү.Сүхбаатар, Л.Мөнхбат, С.Ганцогт	212-214
44. On the Mechanism of Particle Motion in Space and Time Z.Omboo	215-217
45. Монгол орны зарим нутаг дахь агаар мандлын оптик зузааны хоногийн болон жилийн явц Т. Нарангарав, Г. Батсүх	218-221
46. Appendix I to the paper published in transactions of Scientific Journal Physics, 2011 355(16), page 133-138	222-224
47. Appendix II to the paper published in transactions of Scientific Journal Physics, 2011 355(16), page 133-138	225-230

МУИС-ийн Эрдэм шинжилгээний ФИЗИК сэтгүүлд өгүүлэл бичих журам

1. Бичиглэлийн хэлбэр

Цаасны хэмжээ А4 байна. Бичиггэл дээд талаасаа 0.845 inch (2.15см), доод талаасаа 0.845 inch (2.15см), зүүн талаасаа 0.845 inch (2.15см), баруун талаасаа 0.845 inch (2.15см), буюу хэвлэгдсэн материалын нийт өндөр 10 inch (25.4см), өргөн 6.27 inch (15.93см), (хамгийн ихдээ өндөр 25.5см, өргөн 16см-ээс хэтрэхгүй) байна.

2. Хэл

Өгүүллийг Англи, Монгол, Орос хэлний аль нэгээр **Latex, MS Word, Word perfect** профамм 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
- Талархал
- Ишлэл буюу ном зүй
- Товч утгын орчуулга (үлдсэн хоёр хэлээр бичнэ)

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

5. Бичиглэл хийх үсэгний хэв маяг:

- 5.1. Header (хуудасны толгой)- 9p, *italic*, Тэгш талын зүүн үзүүрт нь хуудасны дугаар, 0.5 inch зай аваад зохиогчийн нэр, цэг тавиад гарчиг бичнэ. (хоёроос дээш зохиогчтой 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 (2.54см) 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 0.251inch=6.35mm)
- 5.8. Бүлгийн (section) гарчиг - 11 pt, ALL CAPITAL, Bold, дугаарлавал Ром тоо хэрэглэнэ.
- 5.9. Дэд бүлгийн (subsection) гарчиг- 11 pt, 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

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