

МОНГОЛ УЛСЫН ИХ СУРГУУЛЬ ШИНЖЛЭХ УХААНЫ СУРГУУЛЬ

МУИС-ийн Эрдэм шинжилгээний бичиг

ФИЗИК

№24 (468)



МУИС ПРЕСС ХЭВЛЭЛИЙН ГАЗАР
2017 он

Редакцийн зөвлөл:

Зөвлөлийн дарга:

Др, Проф. Х.Цоохүү
Монгол Улсын Их Сургууль

Гишүүд:

- | | |
|----------------------------------|--------------------------|
| 1. Док. Проф. Б.Бурмаа | Монгол Улсын Их Сургууль |
| 2. Др. О.Чулуунбаатар | ЦШНИ, Дубна, ОХУ |
| 3. Док. дэд проф. Р.Галбадрах | Монгол Улсын Их Сургууль |
| 4. Док. дэд проф. Ж.Ванчинхүү | Монгол Улсын Их Сургууль |
| 5. Док. дэд проф. Ц.Баатарчулуун | Монгол Улсын Их Сургууль |
| 6. Док. дэд проф. М.Цогбадрах | Монгол Улсын Их Сургууль |
| 7. Док. П.Алтанцог | Шинжлэх Ухааны Академи |
| 8. Док. Ж.Нямжав | Монгол Улсын Их Сургууль |
| 9. Док. Н.Төвжаргал | Монгол Улсын Их Сургууль |
| 10. Док. Б.Мөнхбат | Монгол Улсын Их Сургууль |
| 11. Док. П.Мөнхбаатар | Монгол Улсын Их Сургууль |

Дугаарыг эмхтгэсэн:

Редакцын зөвлөлийн нарийн бичгийн дарга

Док. Г.Эрдэнэ-Очир

Монгол Улсын Их Сургууль

МУИС-ийн ШУС-ийн Физикийн тэнхим,
© Монгол улсын их сургууль,
Их сургуулийн гудамж-1, Сүхбаатар дүүрэг,
Улаанбаатар – 210646, Монгол улс, 2017

ISSN 2311-1097

ГАРЧИГ

1. Органик полимер нарны элементийн А.Ү.К-ийг сайжруулах боломжийн судалгаа Ц.Нямаа, Т.Болорцэцэг, Н.Төвжаргал, Алата, Алтанбулаг, Ж.Даваасамбуу	1-6
2. Benchmark study of combustion model of premixed gas by using LBM L.Khenmedek, Y.Obikane, E.Khatanbold	7-12
3. Фемтосекундын лазерын пульсээр атомыг иончлох магадлалыг тооцоолох Ч.Алдармаа, Л.Хэнмэдэх, Г.Зоригт	13-16
4. Судалгааны реакторыг дэмжих үндэсний дэд бүтцэд хийсэн урьдчилсан үнэлгээ Г.Цэмбэлмаа, Бя.Мөнхбат, Н.Норов	17-23
5. Бороон дахь микродолгионы унтралын шинж төрх М.Батпүрэв, Ж.Нямжав	24-27
6. Цэгэн дефект бүхий усанболорын электрон бүтцийн судалгаа Н.Төвжаргал, Ж.Даваасамбуу, Д.Баатархүү, Н.Цогбадрах	28-34
7. Утааны механик шинж чанарыг судлах хялбар арга Ж.Ванчинхүү, Ж.Даваасамбуу, Б.Бат-Эрдэнэ	35-41
8. Улаанбаатар хот орчмын агаар мандлын бохирдлын оптик параметруудийг өвлийн улиралд болон түймрийн утаатай байх хугацаанд харьцуулан судалсан дүн Б.Ганбат, Ц.Баатарчулуун, Т.Нарангарав, Б.Даариймаа	42-48
9. Influence of raindrop size distribution variations on the rain specific attenuation coefficients Nyamjav.J, Batpurev.M, Jamiyan.S	49-51
10. Улаанбаатар хотын агаар дахь радоны хэмжилт Б.Булгансайхан, Н.Норов	52-54
11. Electric Dipole Transition of the First Excited State of ^9Be M.Odsuren, K.Katō, G.Khuukhenkhuu, S.Davaa	55-59
12. (n,α) Reaction Cross Sections and Angular Distributions for Several MeV Neutrons Ts.Zolbadral, Ts.Bilguun, G.Khuukhenkhuu	60-64
13. Seasonal Variations of Surface Radio Refractive Index in Mongolia Jamiyan.S, Battogtokh.J, Tsendayush.O, Nyamjav.J	65-69
14. Нарны титмийн плазм дахь электроны нягтыг радио гялбааны ажиглалтаар тодорхойлох Д.Мөнхманлай, Б.Түвшинжаргал, Б.Батбаяр, Ч.Мөнхжаргал	70-72
15. Creation of Ohmic contact on InGaAs/InAlAs quantum well detector for broad range photon detection Tamiraa Ganbold, Matias Antonelli, Ralf .H. Menk, Giorgio Biasiol	73-76

Органик полимер нарны элементийн А.Ү.К-ийг сайжруулах боломжийн судалгаа

Ц.Нямаа¹, Т.Болорцэцэг¹, Н.Төвжаргал^{1,*}, Алата², Алтанбулаг², Ж.Даваасамбуу¹

¹Монгол Улсын Их Сургууль, Шинжлэх ухааны сургуулийн

Физикийн тэнхим, Улаанбаатар хот 210646, Монгол улс

²Физик, электроник, мэдээллийн технологийн сургууль,

Өвөр монголын багийн их сургууль, Хөх хот, БНХАУ

Бид энэ ажлаар РЗНТ/PCBM (poly(3-hexylthiophene)/1-(3-methoxycarbonyl) propyl-1-phenyl-[6, 6]-methanofullerene) холимог полимер материалд суурилсан органик нарны элементийн ашигт үйлийн коэффициент (А.Ү.К) -ийг сайжруулах судалгааг түүний идэвхт давхарга РЗНТ/PCBM -ийг тогтоож хатаах горимоос хамааруулан судлав. Эндээс идэвхт давхаргын гэрлийн шингээлт, гадаргуун морфологи, кристалжилт нь идэвхт давхарга тогтоох хугацаа болон дулааны боловсруулалтын горимоос хамааран хэрхэн өөрчлөгдөж байгааг үзүүлэв. Хамгийн сайн үр дүн үзүүлсэн дээжүүдээ ашиглан нарны элемент хийж түүний А.Ү.К-ийг хэмжив. Идэвхт гадаргууг богино хугацаанд суулгаж хатаагаад, дараа нь шаталсан горимоор халааж боловсруулсан идэвхт давхарга бүхий нарны элементийн үр ашиг нэмэгдэж байгааг үзүүлэв.

PACS numbers: 81.05.Fb, 78.66.Qn, 88.40.hj, 88.40.jr

I. Удиртгал

Энергийн шинэ үүсгүүр, түүнийг хувиргах, хадгалах нь дэлхий нийтийн өмнө тулгамдсан нэгэн томоохон асуудал болж байгаагаар холбоотойгоор сүүлийн жилүүдэд эрчим хүчний системд ашиглагддаг материалын судалгаа эрчимтэй хийгдэж байна. Бидний өнөөгийн амьдралыг цахилгаан эрчим хүчгүйгээр төсөөлшгүй билээ. Одоогийн байдлаар нүүрс, байгалийн хий, газрын тос зэрэг үл нөхөн сэргээгдэх эрчим хүчний эх үүсгүүрүүдийг түлхүү ашиглаж байгаа ч ойрын ирээдүйд эдгээрийг байгаль орчинд ээлтэй үүсгүүрээр солих шаардлага тулгарч байна. Учир нь эдгээр эрчим хүчний эх үүсгүүрүүд нь шавхагдахаас гадна хүлэмжийн хий, утаа, орчны бохирдол зэрэг асуудлууд үүсгэж байна. Иймээс нөхөн сэргээгдэх эрчим хүчний үүсгүүрт ашиглагддаг материалыг сайжруулах судалгааг хийх шаардлагатай болж байна [1]. Ялангуяа нарны эрчим хүчийг үр дүнтэй ашиглах, өндөр А.Ү.К бүхий нарны элемент гарган авах судалгааны ажил түлхүү хийгдэж байна. Мөн сүүлийн жилүүдэд органик полимер хагас дамжуулагч материалд суурилсан уян нарны элементийг гарган авах, түүнийг сайжруулах боломжийн судалгаа судлаачдын сонирхлыг ихээхэн татаж байгаа сэдэв юм. Манай орны хувьд өргөн уудам нутаг дэвсгэрт нүүдэлчин ахуйгаа дагаад тархан суурьшсан бүх айл өрхийг төвийн цахилгаан эрчим хүчний нэгдсэн системд холбох боломжгүй. Хэдий ийм боловч нарны цахилгаан эрчим хүчний үүсгүүрийг ашиглах замаар асуудлыг шийдэж

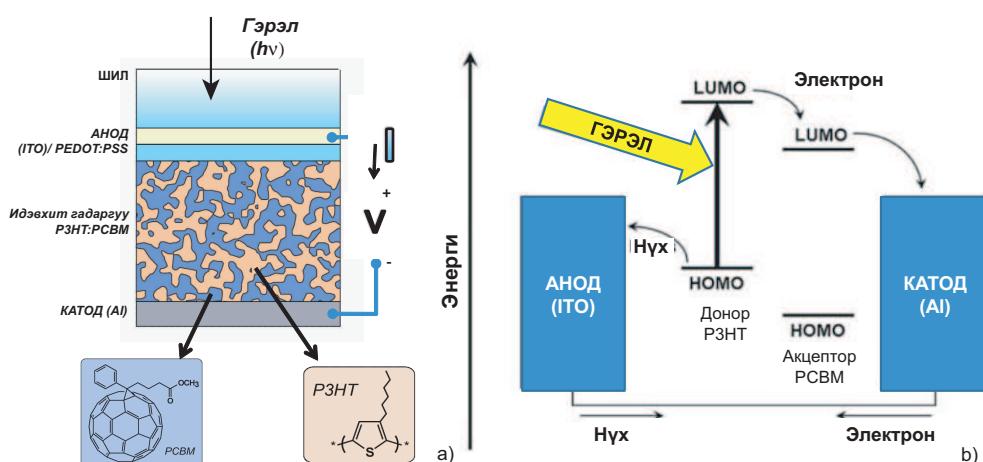
байна. Гэвч сүүлийн жилүүдэд малчин иргэдийн хэрэглэх цахилгаан хэрэгслийн тоо нэмэгдэж эрчим хүчний хэрэглээ өсөх хандлага байгаагаар холбоотойгоор илүү том талбайтай нарны самбар ашиглах хэрэгцээ гарч байна. Энэ нь овор хэмжээ их, хэрэглээний горимоосоо шалтгаалан төдийлөн сайн шийдэл биш юм. Хэрэв хямд төсвөөр уян хатан, бат бөх, өндөр үр ашигтай нарны элемент хийж чадвал өдөр тутмын энгийн хэрэглээ (хувцас, цүнх, тээврийн хэрэгсэл, гэр орон г.м) болон нүүдэлчин ахуйд зохицсон тохиромжтой хэлбэрээр ашиглах боломжтой. Одоогоор олон төрлийн уян хатан органик нарны элемент гарган авч байгаа боловч түүний А.Ү.К бага байгаа учраас төдийлөн хэрэглээнд бүрэн гүйцэд нэвтрэхгүй байна. Сүүлийн жилүүдэд органик полимер хагас дамжуулагч материалд суурилсан нарны элементүүдийн үр ашгийг нэмэгдүүлэх судалгаа эрчимтэй хийж байгаа бөгөөд цаашлаад практик хэрэглээнд ашиглаж болох хүртэл сайжруулсаар байна. Ингэхдээ органик нарны зайн идэвхт гадаргуу болгон ашиглах материалын өөрчлөх замаар үр ашгийг сайжруулах нь илүү үр дүнтэй байдаг [2, 3]. РЗНТ/PCBM холимог хагас дамжуулагч полимер нь органик нарны зайн идэвхт гадаргуу болгон ашигладаг онцгой материал юм. Энд PCBM (1-(3-methoxycarbonyl) propyl-1-phenyl-[6, 6]-methanofullerene) нь 1990 онд синтезлэн гаргаж авсан [4], хориотой бүсийн өргөн 3.9 эВ электроны акцептор хагас дамжуулагч материал бөгөөд органик нарны элемент, уян электрон төхөөрөмжүүдэд РЗНТ болон бусад донор полимер материалуудтай хослуулан ашиглаж байна. РЗНТ (poly(3-hexylthiophene)) нь холимог полимер хагас дамжуулагч нь цэнэг зөөгчийн хөдлөх чадвар сайн болон хориотой бүсийн өргөн 1.9-2 эВ байдаг нь нарны элементээр ашиглах

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

хагас дамжуулагчийн шинж чанарыг үзүүлж байгаа юм [6]. Органик нарны элементийн идэвхт давхарга хийхэд РЗНТ-ийг донор, РСВМ-ийг акцептор болгон ашигласан нарны зайн цахилгаан орчныг өөрчлөх, РЗНТ/РСВМ-ийн хольцын концентрацийн харьцааг өөрчлөх болон дулаан боловсруулалт хийсний дүнд одоогоор А.Ү.К-ийг 3.5%-д хүргээд байна[7].

Олон төрлийн хийц хэлбэр бүхий органик нарны элементүүд байдаг. Үүнд: дан болон олон давхарга бүтэцтэй нарны элементүүд багтдаг [10]. Бидний хийх нарны элемент бол донор акцептор холимог давхаргаас тогтох олон үет

(multilayer) бүтэцтэй нарны элемент юм. Зураг.1-т хөнгөн цагаан (Al) анод, хоорондоо фазын ялгаа бүхий донор акцептор (РЗНТ буюу p- төрлийн донор хагас дамжуулагч, РСВМ буюу n- төрлийн акцептор хагас дамжуулагч) идэвхт давхаргатай, нүхэн дамжуулалтыг дэмжих PEDOT:PSS (poly(3,4 ethylenedioxythiophene):poly(styrene sulfonate) полимер давхаргатай, ИТО (Indium tin oxide) бүхий тунгалаг шилэн катодтай органик полимер нарны зайн бүтэц болон тэнд гэрлийн шингээлтээр донор, акцептор фазуудын дагуу электрон болон нүх шилжих энергийн төвшний диаграммыг үзүүлэв.



Зураг 1: Олон давхарга бүхий органик полимер нарны зай: а) Бүтцийн диаграмм, энд гэрлийн шингээлтээр донор, акцептор фазуудын дагуу электрон болон нүх шилжинэ. б) Энергийн төвшний диаграмм.

Бид энэхүү ажлаар органик нарны элементийн идэвхт давхарга хийх материал РЗНТ/РСВМ-ийн гэрлийн шингээлт, кристалжилт, гадаргуун морфологи зэрэг түүнийг тогтоох горимоос хамааруулан судлах замаар нарны зайн ашигт үйлийн коэффициентийг сайжруулах боломжийг судалж, олон давхаргатай полимер нарны зай хийж түүний А.Ү.К хэмжих зорилготой.

II. Туршилт

РЗНТ/РСВМ холимог дээж бэлтгэх, түүний гэрлийн шингээлт, гадаргуун морфологи, кристалжилт зэргийг судлах, нарны элемент хийж А.Ү.К-ийг хэмжих туршилтын үйл ажиллагааг дараах дарааллаар гүйцэтгэнэ. Үүнд:

- РЗНТ болон РСВМ нунтаг бодисыг 1:1

жингийн харьцаатай хольж 2мл o-DCB(1, 2 Dichlorobenzene) уусгагчид хийн glove box-т 120°C температурт 3 цаг соронзон хутгуурт хутгаад, дараа нь орчны температурт 24 цагийн турш нэгэн төрөл болтол хутгаж РЗНТ/РСВМ холимог уусмал бэлтгэсэн.

- ИТО контакт бүхий шилэн бэлдцээ цэвэрлэгч уусмалууд (Ethanol absolute ($\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$), Isopropyl alcohol ($(\text{CH}_3)_2\text{CHOH}$), Acetone (CH_3COCH_3))-д хийж хэт авианы цэвэрлэгч болон озоны орчинд хэт ягаан туяагаар шарж цэвэрлэнэ. Шилний гадаргуу дээрх бохирдлыг бүрэн цэвэрлэж байгаа нь тоосны жижиг мөхлөгөөр дамжин богино холбоо үүсэж нарны элемент эвдрэхээс сэргийлсэн.

- РЗНТ/РСВМ идэвхт давхарга тогтоох: Spin Coater ашиглан цэвэрлэсэн шилэн дээрээ өмнө

бэлтгэсэн РЗНТ/PCBM уусмалаа жигд тарааж идэвхт давхарга тогтооно. Ингэхдээ дараах горимуудаар суулгасан болно. Үүнд:

1. Spin coater-т 600 эрг/мин эргэлтийн хурдтайгаар 30секунд, 60секунд, 90секунд эргүүлж азотын орчинд glove box-т 24 цаг хатаав.
2. Энэ гурван дээжээс хамгийн сайн шинж чанар үзүүлсэн горимыг сонгож дахин хоёр дээж бэлтгэв.
3. Дахиж идэвхт давхарга тогтоож хатаасан хоёр дээжээ дараах горимоор дулааны боловсруулалтад оруулав:
 - Нэгийг нь шууд 150°C температурт 20 минут халаагаад зугуухан хөргөв.
 - Нөгөөг нь шаталсан горимоор буюу 70°C –т 20 минут → 110°C –т 20 минут → 150°C –т 20 минут халаагаад аажуухан хөргөв.
4. Ингээд ердийн нөхцөлд хатаасан, шууд болон шатлалтай горимоор халааж хатаасан гурван өөр дээж бэлэн болно.

- Ердийн нөхцөлд хатаасан, шууд болон шатлалтай горимоор халааж хатаасан дээжүүдийн гэрлийн шингээлтийг хэт улаан туяа-үзэгдэх гэрлийн спектрометр (UV/VIS spectrometer Lambda 35) –ээр, талстжилтыг рентген дифракцийн аргаар (XRD), гадаргуун морфологийг атомын хүчний микроскоп (AFM) ашиглан судлав.

- Нарны элемент хийх: Идэвхт давхаргын шинж чанарыг судалсны үндсэн дээр хамгийн сайн үр дүн үзүүлсэн дээжүүдээр нарны элемент хийсэн. Дээр дурдсан ИТО-тэй шил цэвэрлэх аргаар 3 ширхэг шилийг цэвэрлэж бэлтгэсэн. Spin coater-т 2000 эрг/мин хурдтай 30секунд хугацаанд PEDOT:PSS-ийн үе давхарга тогтоосны дараа шил тус бүрийг 120°C-д 20 минут хатааж тогтоосон үеийг бэхжүүлэв. Дараа нь шил тус бүрийг дахин spin coater-д хийж 54000-75000 молекулын жинтэй РЗНТ/PCBM уусмалаа дусааж 600 эрг/мин хурдтай 30 секунд эргүүлж идэвхт гадаргууг тогтоосон бэлдэц бэлэн болно.

- Эндээс 2 бэлдцийг сонгон авч нэгийг нь 70°C –т 20 минут → 110°C –т 20 минут → 150°C –т 20 минут шаталсан горимоор, нөгөөг нь 150°C –ийн температурт шууд халааж дулааны боловсруулалт хийж бэлтгэнэ.

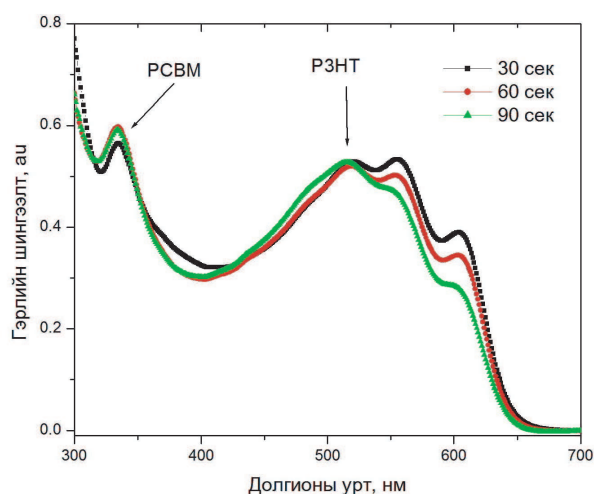
- Идэвхт давхарга суулгаж бэлтгэсэн бэлдэц тус бүрийг 10⁻⁴Па вакуум орчинд ууршуулах аргаар хөнгөн цагаан анодын давхарга суулгаж өгнө. Нарны элемент хийх бүх бэлтгэл болон

боловсруулалт нь азотын орчин бүхий glove box- д хийгдсэн. Ингээд 3 өөр горимоор идэвхт давхарга тогтоож хийсэн гурван ширхэг нарны зай бэлэн болов.

- Нарны зай тус бүрийг нарны гэрлийн эрчимтэй тэнцүү эрчим бүхий гэрэл гаргагч XENON Lamp controller (AM 1.5G Conditions) багаж ашиглан тэдгээрийн А.Ү.К-ыг тодорхойлсон.

III. Үр дүн

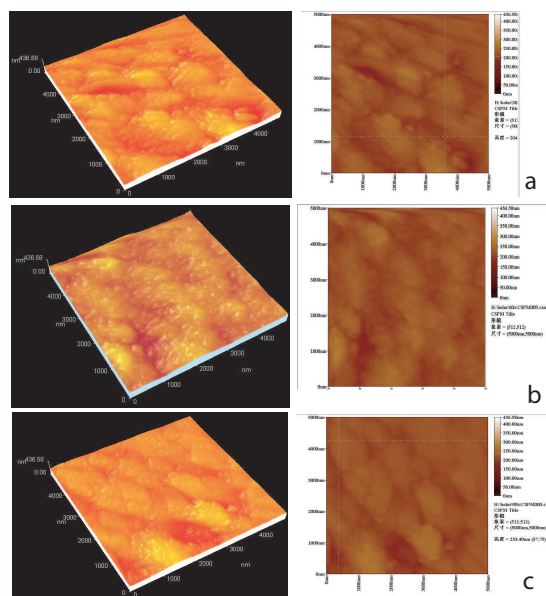
Бид олон үе давхарга бүхий органик нарны элементийн идэвхт давхарга болох РЗНТ/PCBM -ийг ИТО бүхий шилэн гадаргуу дээр тогтоож дээжийн гэрлийн шингээлт, гадаргуун морфологи, талстжилт зэргийг судалсан. Эхлээд РЗНТ/PCBM идэвхт давхарга тогтоох хугацааг 30 секунд, 60 секунд, 90 секунд байхаар аваад ердийн орчинд хатаасан дээжүүдийн хувьд гэрлийн шингээлтийн хэмжилтийн үр дүнг зураг.2 үзүүлэв.



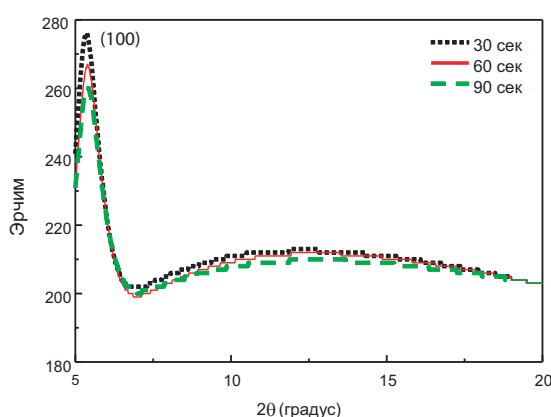
Зураг 2: Ердийн горимоор хатаасан РЗНТ/PCBM нэгдлийн үзэгдэх гэрлийн муж дахь гэрлийн шингээлтийн спектр

Эндээс үзэхэд 30 секундын хугацаанд идэвхт давхарга тогтоож бэлтгэсэн дээжүүдийн үзэгдэх гэрлийн мужид илүү сайн гэрлийн шингээлт үзүүлсэн байна. РЗНТ фазын хувьд 400-650 нм үзэгдэх гэрлийн мужид гэрэл шингээлт өгдөг бол PCBM фазын хувьд 300-350 нм хэт ягаан туяаны мужид гэрэл шингээлт өгдөг. Энэ нь эдгээр материалуудын электрон бүтэцтэй холбоотой. Мөн эдгээр дээжүүдийн гадаргуугийн морфологийг атомын хүчний микроскоп ашиглан дүрсэлснийг зураг.3-т үзүүлэв.

Идэвхт гадаргуун морфологи нь самны шүд шиг арзгар, фаз хоорондын үе ялгарсан барзгар гадаргуутай байвал сайн. Учир нь донор болон



Зураг 3: Идэвхт гадаргуу P3HT/PCBM -ийн гадаргуун морфологи: а) 30 секунд тогтоосон, б) 60 секунд тогтоосон, в) 90 секунд тогтоосон дээжүүд



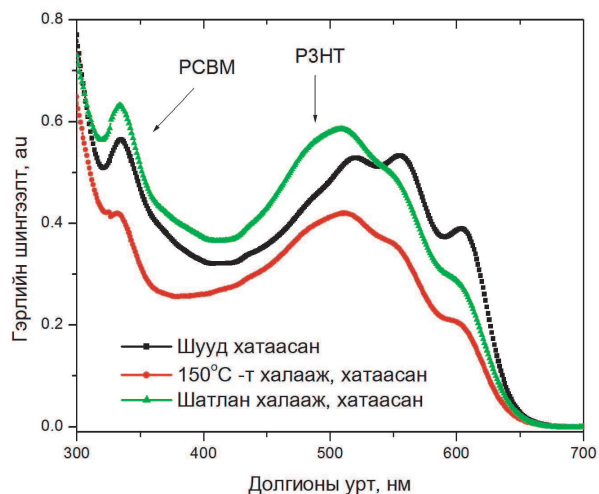
Зураг 4: Ердийн горимоор хатаасан P3HT/PCBM нэгдлийн рентген спектр.

акцептор фазын дагуу электрон болон нүхний шилжилт явагдах тул фазуудын түгэлт нь жигд тархалттай байх хэрэгтэй. Эндээс үзэхэд идэвхт давхаргыг 30 секунд тогтоосон дээжийн гадаргуу арзгар бөгөөд фазууд нэгэн төрөл хэмжээтэй тархан суусан болох нь харагдаж байна. Идэвхт гадаргуу тогтоох хугацаа нэмэгдэх тутам гадаргуу нь гөлгөр, фаз нь ялгагдахгүй жигд болж байгаа нь харагдаж байна.

Зураг.4-т дээжүүдийн талстжилтын рентген дифракцын аргаар хэмжсэн үр дүнг үзүүлэв. Полимер материал боловсруулалтын горимоос хамааран тодорхой хувийн талст болон аморф фазаас тогтдог. Фазын харьцааг тухайн материалын талстжилтийн зэргээр илэрхийлдэг.

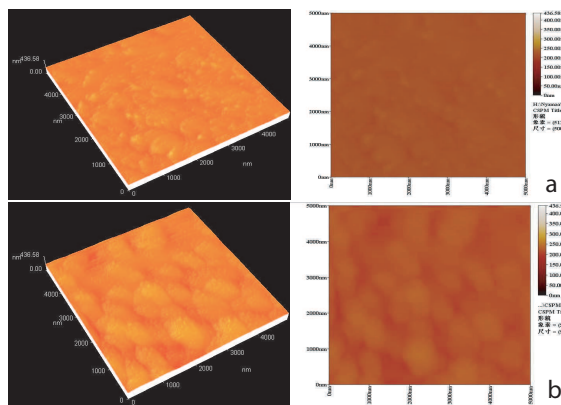
Талст фазын рентген дифракцын спектр нь хурц эрчим өндөртэй пик өгдөг бол аморф фазын рентген спектр сул, эрчим муутай байна. P3HT:PCBM холимог полимер нэгдэл дэх PCBM-ийн хувьд $2\theta = 22^\circ$ орчим өргөн, эрчим султай пик бүхий рентген спектр өгдөг аморф шинж чанар бүхий материал бол P3HT-ийн хувьд $2\theta = 5.37^\circ$ орчим кристаллаграфын $\langle 100 \rangle$ чиглэлд хурц, өндөр эрчим бүхий пик бүхий рентген спектр өгдөг материал юм. Энэ нийлмэл материалд P3HT нь талстжсан сүлжсэн морфологи бүхий эффект үзүүлэн тогтдог бол түүний завсараар PCBM аморф фаз холбоос болон суусан бүтэцтэй байдаг[11]. Хатуу полимер материал ихэвчлэн тунгалаг биш байдаг бол талстжилтийн зэрэг нь нэмэгдэх тусам тунгалаг чанар нь сайжирна. Зураг.4- ээс үзэхэд идэвхт гадаргууг 30 секунд тогтоож хатаасан дээжийн талст фазад харгалзах пик ($2\theta = 5.37^\circ$) бусдаасаа илүү эрчим өндөртэй байгаа нь илүү талстжисан болохыг харуулж байна.

Дээрх хэмжилтийн үр дүнгүүдээс үзэхэд 30 секундний хугацаанд идэвхт гадаргуу тогтоож хатаасан дээж илүү сайн үр дүн үзүүлж байна. Иймээс бид уг дээжийг сонгон авч шууд 150°C температурт 20 минут халаагаад аажуухан хөргөх болон шаталсан горимоор буюу 70°C –т 20 минут $\rightarrow 110^\circ\text{C}$ –т 20 минут $\rightarrow 150^\circ\text{C}$ –т 20 минут халаагаад аажуухан хөргөх замаар дулааны боловсруулалтад оруулж дээжийн гэрлийн шингээлт, гадаргуун морфологи, кристалжилт зэргийг дахин хэмжиж үзсэн.



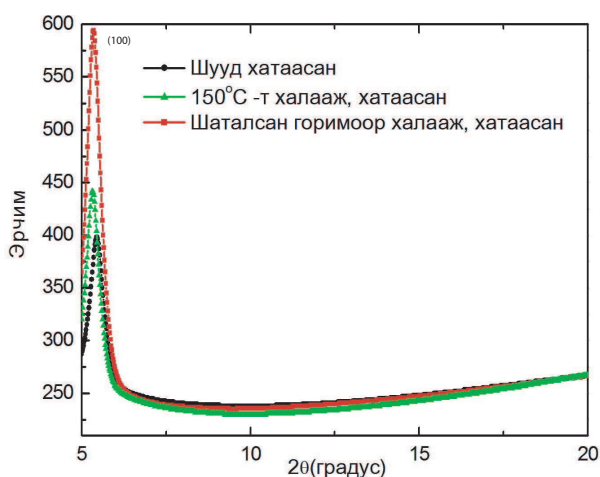
Зураг 5: Ердийн горимоор шууд хатаасан, 150°C температурт 20 минут халаагаад хатаасан, 70°C –т 20 минут $\rightarrow 110^\circ\text{C}$ –т 20 минут $\rightarrow 150^\circ\text{C}$ –т 20 минут шаталсан горимоор халаагаад, хатаасан P3HT/PCBM нэгдлийн үзэгдэх гэрлийн муж дахь гэрлийн шингээлтийн спектр.

Дулааны боловсруулалт хийсэн дээжүүдийн гэрлийн шингээлтийг хэмжсэн



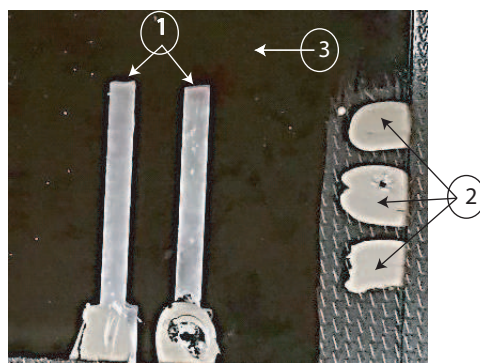
Зураг 6: Идэвхт гадаргуу P3HT/PCBM -ийн гадаргуун морфологи: а) 150°С температурт 20 минут халаагаад хатаасан, б) 70°С –т 20 минут → 110°С –т 20 минут → 150°С –т 20 минут шаталсан горимоор халаагаад хатаасан дээжүүд.

үр дүнг зураг.5 -т үзүүлэв. Эндээс үзэхэд шаталсан горимоор халааж, хатаасан дээжийн хувьд илүү сайн гэрэл шингээлт үзүүлсэн байна. Мөн гадаргуугийн морфологийн бүтцийн AFM хэмжилтийн үр дүнг зураг.6-т үзүүлэв. Шаталсан горимоор халааж хатаасан дээжийн хувьд гадаргуу нь арзгар, фазуудын хувьд нэгэн жигт тархалттай байгаа нь харагдаж байна.



Зураг 7: Дулааны боловсруулалтанд оруулсан идэвхт гадаргуу P3HT/PCBM -ийн рентген спектр.

Зураг.7-т дулааны боловсруулалт хийсэн дээжүүдийн талстжилтийг рентген дифракцын аргаар хэмжсэн үр дүнг үзүүлэв. Шаталсан горимоор халааж бэлтгэсэн дээж кристалжилт өндөртэй байгаа нь $2\theta = 5.37^\circ$ -т харгалзах талст фазын пикээс харагдаж байна. Дээрх туршилтын үр дүнгүүд дээрээ үндэслэн P3HT/PCBM идэвхт гадаргууг 600 эрг/мин эргэлтийн хурдтайгаар 30 секунд тогтоож хатаасан болон хоёр өөр горимоор дулаан



Зураг 8: Идэвхт гадаргуу P3HT/PCBM -д суурилсан олон давхарга бүхий нарны элемент: Энд 1. катод (Al), 2. анод (ITO), 3. идэвхт гадаргуу (P3HT/PCBM).

боловсруулалт хийж бэлтгэсэн дээжүүдээ ашиглаж гурван өөр нарны элемент хийсэн загварыг зураг.8 -д үзүүлэв.

Ердийн нөхцөлд хатаасан, шууд болон шатлалтай

Үүр	Дулааны боловсруулалт		Ердийн хатаалт
№	Шууд 150°С	Шаталсан	30 секунд
1	3.2 %	3.6%	2.4%
2	3.1%	3.4%	2.55%
3			2.6%

Хүснэгт I: Нарны элементүүдийн А.Ү.К-ийн хэмжилтийн үр дүн.

горимоор халааж хатаан идэвхт давхарга тогтоосон дээжүүдээ ашиглан хийсэн гурван нарны элемент тус бүрийн А.Ү.К -ийг нэг нарны гэрэл гаргагч XENON Lamp controller (AM 1.5G Conditions) багаж ашиглан тодорхойлсон үр дүнг хүснэгт.1-т үзүүлэв.

Хүснэгтээс үзэхэд органик нарны элементийн А.Ү.К -ийг идэвхт давхарга тогтоох горимыг өөрчлөх замаар сайжруулж болох нь харагдаж байна.

IV. Дүгнэлт

Бид энэ ажлаар органик полимер материалд суурилсан нарны элементийн идэвхт давхарга P3HT/PCBM -ийн гэрлийн шингээлт, гадаргуун морфологи болон талстжилт нь давхарга тогтоох горим болон дулааны боловсруулалтаас хэрхэн хамааран өөрчлөгдөж байгааг үзүүлэв. Эндээс үзэхэд 30 секунд идэвхт гадаргуу тогтоосон дээжийн гадаргуун морфологийн хувьд фазууд нь илүү арзгар, жигт тархацтай, гэрлийн шингээлт үзэгдэх гэрлийн мужид өндөр, талстжилт нь сайн байна. Иймээс энэ дээжээ шууд болон шаталсан горимоор халааж дулааны

боловсруулалтад оруулж судлахад шаталсан горимоор халаах нь илүү үр дүнтэй болох нь туршилтын үр дүнгээс харагдаж байна. Идэвхт гадаргуун гэрлийн шингээлт, гадаргуун морфологи, талстжилт зэрэг нь ашигт үйлийн коэффициентыг сайжруулах гол үзүүлэлт болох нь хүснэгт.1-т үзүүлсэн хэмжилтийн үр дүнгээс харагдаж байна.

санхүүжүүлсэн ШУТС болон БСШУС -ийн яам, МУИС болон туршилт боловсруулалтыг хийх материал болон багаж төхөөрөмжөөр хангаж, үнэтэй зөвлөгөө өгч тусалж байсан БНХАУ-ийн ӨМӨЗО-ний Багшийн их сургуулийн Функционал материалын физик химийн лабораторийн хамт олонд гүн талархал илэрхийлье.

Талархал

Энэхүү ажлыг гүйцэтгэхэд дэмжлэг үзүүлж суурь судалгааны SST_018/2015 төслийг

-
- [1] A. Goetzberger, C. Hebling, and H.-W. Schock, *"Photovoltaic materials, history, status and outlook"* Materials Science and Engineering R 40, 1 (2003)
 - [2] Kim, H. et al., *"Organic solar cells based on conjugated polymers: history and recent advances"* Korean J. Chem. Eng. 31, 1095-1104 (2014)
 - [3] G. Yu, J.Gao et al., Science 258, (1992) 1474
 - [4] Jan C.; Knight, Brian W.; Lepeq, F.; Wudl, Fred; Yao, Jie; Wilkins, Charles L., *"Preparation and Characterization of Fulleroid and Methanofullerene Derivatives"*. The Journal of Organic Chemistry. 60 (3): 532-538
 - [5] N.S. Sariciftci, L.Smilowitz, et al., Science 270 (1995) 1789.
 - [6] Vishal Shrotriya, Jianyong Ouyang, Ricky J. Tseng, Gang Li, Yang Yang., *"Absorption spectra modification in poly(3-hexylthiophene):methanofullerene blend thin films"* Chemical Physics Letters 411 (2005), 138-143
 - [7] F.Padinger, R.S.Rittberger, N.S.Sariciftci., Adv.Funct. Mater. 13, (2003) 85
 - [8] Van Franeker, J. J., Turbiez, M., Wienk, M. M. Janssen, R. A. J., *"A real-time study of the benefits of co-solvents in polymer solar cell processing"* Nat. Commun. 6, 6229 (2015)
 - [9] C.J. Brabec, V. Dyakonov, J. Parisi, N.S. Sariciftci., *Organic Photovoltaics: concepts and Realization*, Springer-Ver-Lag, Heidelberg, 2003.
 - [10] Wertz JE, Bolton JR., J. Mater. Res. 19, 1924 (2004)
 - [11] Sanjay Sahare, Naresh Veldurthi, Suwarna Datar and Tejashree Bhawe., RSC Adv., 5, 102795 (2015)

Benchmark study of combustion model of premixed gas by using LBM

L. Khenmedekh^{1,*}, Y. Obikane² and E. Khatanbold¹

¹ School of Applied Science, Mongolian University of Science and Technology, Ulaanbaatar, Mongolia

² Nagaoka University of Technology, Niigata, Japan

The propane gas combustion in a combustor was calculated using a two-dimensional LBM method that used pressure, temperature, and the distribution function f_p of chemical components: f_T , $f_{C_3H_8}$, f_{O_2} , f_{CO_2} , f_{N_2} , and f_{H_2O} . WOLFRAM MATHEMATICA was used in the calculation and three cases were calculated— Case1: one dimension combustion flame of a uniform mixed gas ($Re = 124$) to obtain an average reaction rate ω ; Case2: A two-dimensional problem, without the influx, where ignition occurred in the center of the area; and Case3: calculate the combustion of the air-fuel mixture from fuel jets ejected from both upper and lower boundary. The flow field simulation area in the axial symmetry was $1/4$. The shape of the flame front consisted of a curved surface, and then a nearly horizontal flame front was formed at the end of the simulation. For the one-dimensional case, the propagation speed was 0.25m/sec , which was larger than the results reported by Huidan Yue [9]. The flame propagation speed roughly matched that of the two-dimensional simulation by Yamamoto [7].

Key Words: LBM, Combustion, Flame Front

Nomenclature

$f_{p,q}$	: pressure distribution function
$f_{T,\alpha}$	: temperature distribution function
$f_{Y_i,\alpha}$	: Y^i specy distribution function
τ_v	: relaxation time for variable
ρ	$v=p,T,Y^i$
ω	: density
cp	: reaction rate
	: Specific heat coefficient for air
x	: Cartesian coordinate
y	: Cartesian coordinate

Subscripts

p	: pressure
T	: Temperature
Y^i	: concentration of species
f	: distribution

INTRODUCTION

There are several stages in the combustion process in the engines. The problem of atomization of the injected fuel and the problem of vaporization from liquid particles to gas, the problem of mixing of small particles and air, the problem of mixing of fuel gas and air, ignition and detonation problem, stabilization of flames. These are fluid dynamics problems. For the combustion process there are very complicated chemical reactions between interacting species. Although the engine is tested at high pressure (automobile, gas turbine) and low pressure (ramjet engine), the conditions of combustion are required for low NO_x generation and low fuel consumption regarding the specification of the engine. These are common requirements of design. However, in practice a large number parameters of

thermo-aerodynamics parameters and chemical reaction parameters are needed to be considered.

Although experience has precedence, it takes time and great expense to develop a combustion system. For this reason, in recent years, experiments and numerical simulations of elementary processes are conducted as much as possible; designers use the results, and use high-speed parallel computers as possible as they can.

The high speed simulation is used, not only for the research on elementary process but also the entire simulation of the actual machine. It is desired to develop numerical simulators of fundamental processes with higher accuracy.

Currently three methods are used as high precision numerical simulations: Direct Compressible NS equation, high precision LBM method, and particle method which are performed with accuracy of tertiary or higher order. NS is valid for Kudson Number less than 0.1 , and LBM method is valid for less than 10 , and can be used Ku, the particle method is not limited.

1. The compressible NS was developed by TVD method and high precision scheme, but the boundary conditions are complicate, thus the code becomes is extremely long.

The reason why LBM has attracted attention in recent years is that it is being said that the simulation algorithm is simple and it is suitable for parallel programming. At the beginning of the development of LBM was from LGA model like particle method used for gas, it was too noisy, and then the distribution function method from Boltzmann equation is set as a basic equation. Most people have used the BGK approximation. This method is common LBM simulation method. Although there

* Electronic address: khenmed@must.edu.mn

is no similarity in the form of the NS equation and the Boltzmann equation, it is known that the Euler equation and the NS equation are derived from the Boltzmann equation. Therefore, the LBM simulation must agree with NS for small Knudsen number. The discretization of LBM has two methods:

- 1) Qian & Zho (1998) streaming and collision method [1],
 - 2) Differential equation method Kataoka (2004) [2],
- The Streaming-Collision method is often used in low Mach approximation. The successful direct simulations by He and Doolen [4] and Martin [5] are known. For research on boundary conditions for small Reynolds number, He and Zou showed samples of boundary settings.
- The problem of combustion has the following problems;
1. Stability of combustion,
 2. High Mach number computation [compressible flow],
 3. Computation of flow including variables of various chemical substances (large capacity)
 4. Mechanism of ignition

Most engineer compute averaged combustion flames by using RANS with turbulent flow models, but the mechanism of detonation accompanying shock, are omitted, and it is used as post-diction of experimental results.

Apart from the question of whether it is possible to achieve the correct prediction by accumulate the simplified benchmarks. There are many benchmark computations for combustion:

LES[8] was carried out under simplified counter flow combustion with a simpler shape and perfectly premixed gas for verification [8] Legier, JP, Poinson, T., et al)

The most commonly used LBM in combustion computation is a two dimensional model of low Mach number approximation (incompressible). There is a pioneer work by Yamamoto, He & Doolen:. Their stable simulations were made with this approximation even for thermal expansion and intense change in density since the temperature equation and velocity equations are uncoupled.

Under un-coupling condition, there were undershoot and overshoot pointed by S. Chen et al [10] Therefore, if we use un-coupling system, we need careful consideration to evaluate benchmark simulations. In the present work we use uncoupling method, and will test three benchmark simulations, The first test is one dimensional tube where we can obtain the spreading speed of the flame-front. For the first two-dimensional problem, the mean flow velocity is zero, and the flame is spread cylindrically. In the next two-dimensional problem,

the mixed gas ejects from the upper and lower surfaces at the center of the blowout. Since it is a laminar flow problem, it is expected that the flame side will be steady, but in the experiment it becomes unsteady. In this research, we may know the detail mechanism of the combustion process with the present computation by comparing with the previous work.

METHOD

We use the distribution function f_p of the pressure, though most researchers use the distribution function f_v of the velocity. The representative length is less than 1cm, where the flow is stable from convection by gravity. The functions of temperature f_T and chemical components, $f_{C_3H_8}$, f_{O_2} , f_{CO_2} , f_{N_2} , f_{H_2O} were used. We use MATHEMATICA for checking the equations and performing simulations. Three cases are selected: Case1: The computational domain is in a one-dimensional channel, and initially it is filled with a uniform gas mixture (lean) and the inlet also has a uniform flow of the mixture shown in Fig.1. We calculate the propagation velocity of flame in the region, the peak flame temperature, and the average reaction rate. Case2: The flame is ignited at the center of the domain, and the domain is two-dimensional without the inflow, as shown in Fig. 2. Case3: The configuration is that used in [6],[7]. We use the same parameters of [7]. The mixed gas is ejected from both upper and lower boundaries to the central line, and the air-fuel mixture starts to burn at the center of the domain, spreading horizontally and attaining steady combustion. We compute the ignition to the steady state to determine the overall rate of combustion ω_{ov} shown in Fig.3.

The geometry shown in Fig.1 is similar to [7]. The mesh size is $N_x=500$ and $N_y=3$. The computer code was written for two dimensional problems. The initial flow velocity and the concentrations of chemicals are uniform. We expect that the flame surfaces move in the flow-wise direction since the combustion propagation speed is smaller than the speed of flow. So, we will find both front and back of the flame body in the flow wise direction. Figure 2 shows two dimension problem without the mean flow velocity, thus there is no convection $U=0$ at initial and on boundaries. The flame will spread in radial direction, thus the propagation speed will be slower than one of the plane wave in one dimensional case. Figure 3 shows the configuration of the typical benchmark computations. The mixed fuel springs from both top and bottom, and merges near the center line. The ignition point is at the center of the domain. Though the size is 10mm, it is not clear the gravity effect will be counted or not if

we compare with the high temperature experimental data. The flow is symmetric in x axis and also y axis, thus we need only quarter of the domain. The mixed gas is impinged slow velocity $u=0.1\text{m/sec}$.

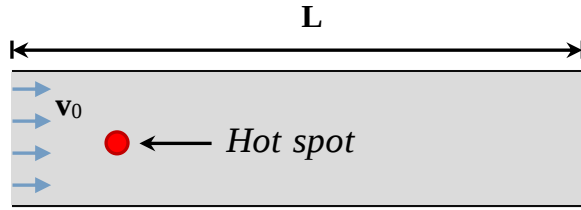


Figure 1. Schematic of 1D simulation.

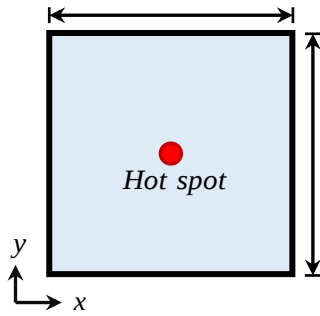


Figure 2. Schematic of 2D simulation.

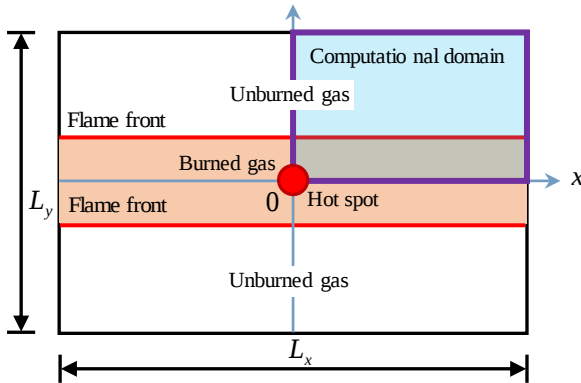


Figure 3. Schematic of symmetric burner flow, Mesh (80x48).

GOVERNING EQUATION FOR D2Q9

The governing equation is based on D2Q9 Lattice Boltzmann model [1]. Flow field equation for distribution function:

$$f_{p,\alpha}(x + e_\alpha \Delta t, t + \Delta t) - f_{p,\alpha}(x, t) = -\frac{1}{\tau_u} [f_{p,\alpha}(x, t) - f_{p,\alpha}^{eq}(x, t)] \quad (1)$$

Temperature field equation:

$$f_{T,\alpha}(x + e_\alpha \Delta t, t + \Delta t) - f_{T,\alpha}(x, t) = -\frac{1}{\tau_T} [f_{T,\alpha}(x, t) - f_{T,\alpha}^{eq}(x, t)] + w_\alpha Q_T \quad (2)$$

Species equations are:

$$f_{Y^i,\alpha}(x + e_\alpha \Delta t, t + \Delta t) - f_{Y^i,\alpha}(x, t) = -\frac{1}{\tau_u} [f_{Y^i,\alpha}(x, t) - f_{Y^i,\alpha}^{eq}(x, t)] + w_\alpha Q_{Y^i} \quad (a)$$

(3)

w_α , Q_T is the reaction rate and heat energy by combustion.

The pressure p , temperature T and the species fractions Y_i can be found by summation of the corresponding distribution functions on α .

$$p = \sum_\alpha f_{p,\alpha}, \quad T = \sum_\alpha f_{T,\alpha}, \quad Y^i = \sum_\alpha f_{Y^i,\alpha} \quad (4)$$

The overall chemical reaction rate depends on species fractions and gas density, is defined as follows;

$$\omega_{ov} = k_{ov} \rho^2 \frac{Y_{C_3H_8}}{M_{C_3H_8}} \frac{Y_{O_2}}{M_{O_2}} e^{-\frac{E}{RT}} \quad (5)$$

The source term due to heat production is given as

$$Q_T = \frac{Q \Delta t}{\rho C_p T_0} \omega_{ov} \quad (6)$$

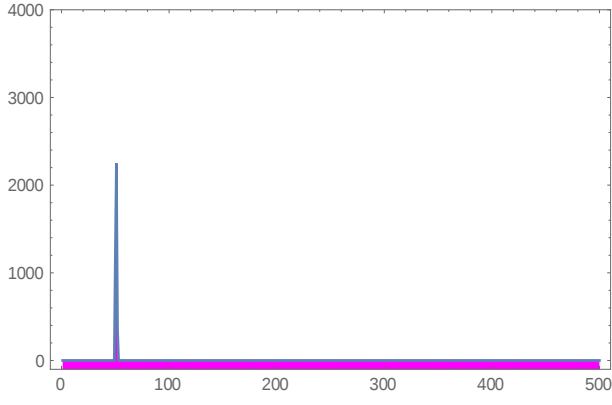
where $T_0=300\text{K}$ is the reference temperature unit. The heat source terms due to chemical reactions are

$$Q_{Y^i} = a_i \frac{M_i \Delta t}{\rho} \omega_{ov} \quad (7)$$

where $T_0=300\text{K}$ is the reference temperature unit. The heat source terms due to chemical reactions are Q_{Y^i} . The stoichiometric coefficients are: $a_{C_3H_8} = -1$, $a_{O_2} = -5$. It's worth noting that, the reaction product of species does not give contributions to simulation, so their field equations may be dropped for reducing CPU time.

BENCHMARK COMPUTATION RESULTS

For the case1, one dimensional uniform mixed gas flow problem is following. We set the equilibrium distribution with the given velocity u_0 on the boundary conditions for both the inlet and the outlet, and also set periodic conditions on the sidewalls boundary shown in Fig.1. The results in Fig.4 shows that the spike of the flame is shown at $t=7$, and the spike split in to two at $t=200$ since the flame spread out from the ignition point to both the upstream and downstream directions with the burning velocity. The inlet velocity of a propane/air mixture is $U_0 = 1\text{ m/s}$, the temperature $T_0=300\text{K}$ and the equivalence ratio is 0.6. The length $L=16.7\text{ mm}$ and the Reynolds number $Re=124$ as same as one of [7]. The present simulation yields the front speed of the combustion flame, the resultant burning velocity is 0.25 m/s that is greater than the result of [7].



(b)

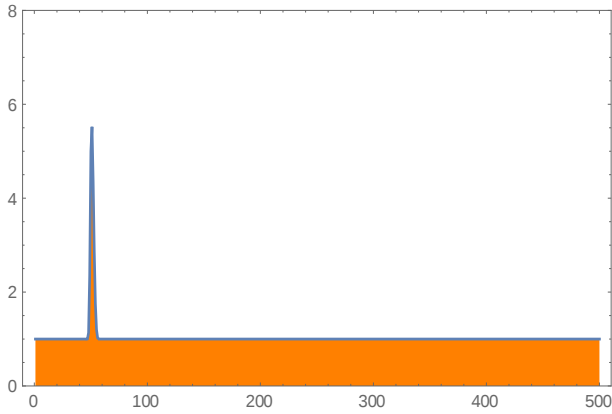
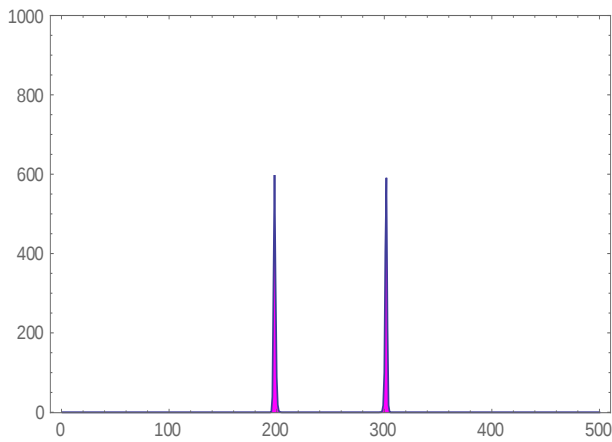


Figure 4. (a) The combustion rate and the temperature at the moment of ignition one dim problem. I.e. 7 times iteration. Combustion rate, at $t=7$. (b) The combustion rate and the temperature at the moment of ignition one dim problem. I.e. 7 times iteration. Temperature at $t=7$.

For the case2, two dimensional uniform mixed gas problem with no inlet is following. We took $N_x=60$, $N_y=60$ in 2D case. The physical parameters are the same as the 1D case. It is clear that the flame has a circular front, and propagates with the burning velocity $S_L = 0.1$ m/s that agrees with [7] in Fig.5.

(a)



(b)

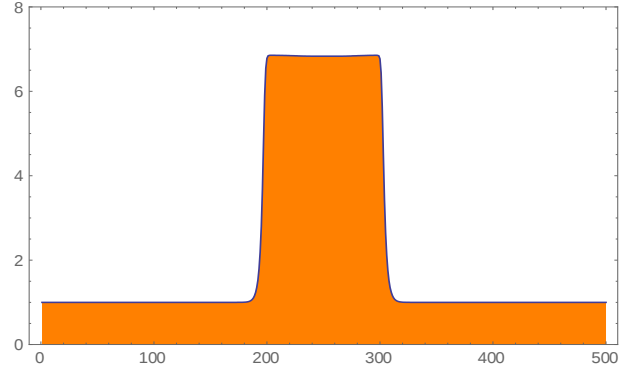
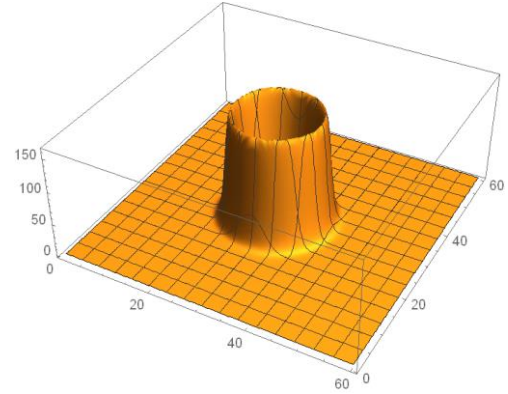


Figure 5. (a) The combustion rate at $t = 2000$ (one dim problem). (b) Temperature at $t = 2000$ (one dim problem).

We used Cartesian coordinate, so the solution does not depend on the geometry. It is not clear there is a similarity law of the combustion. The speed of propagation will depend on the ignition point and distance from the ignition point.

(a)



(b)

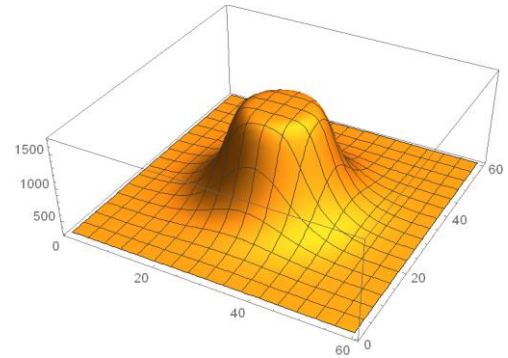


Figure 6. (a) The combustion rate at $t = 1000$ for case 2. (b) The temperature at $t = 1000$ for case 2.

For the case3, two dimensional uniform symmetry mixed gas combustor problem is following. The configuration is shown in Fig.3. The computational results show the detail flame propagation process clearly. It started from the center of the domain, and first formed an oblong around the center and was getting flat flame front in Fig.6, and formed nearly two dimensional flame body. The reaction rate

became zero near the center line ($y=0$), and the temperature remained constant around the centerline. The remained oxygen was 11% that is slightly larger than 9% of [7]. The temperature on the centerline was about 1990K that is larger than 1910K of [7]. The present computation results almost agree with [7] within CFD errors.

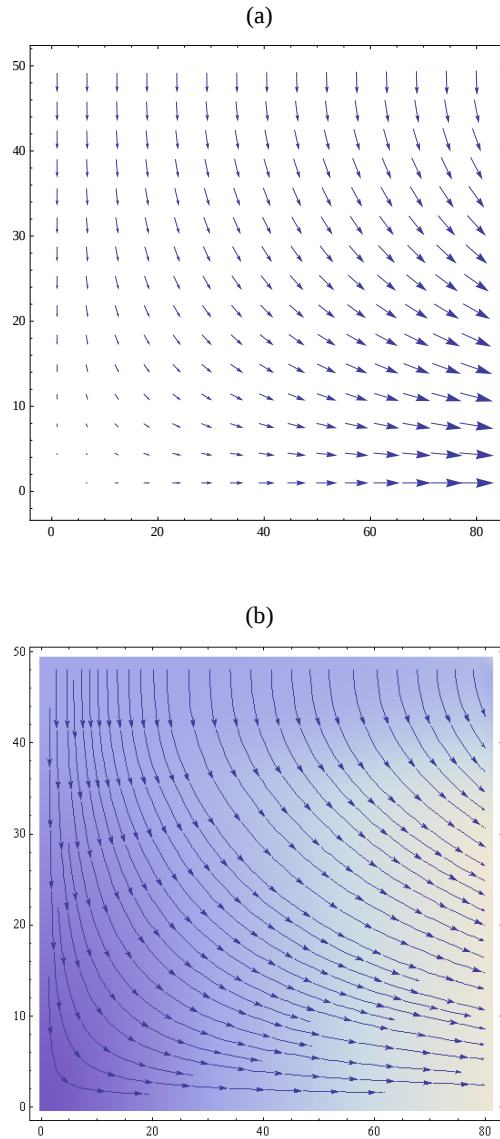


Figure 7. Converged Velocity vectors (a) and Streamline (b).

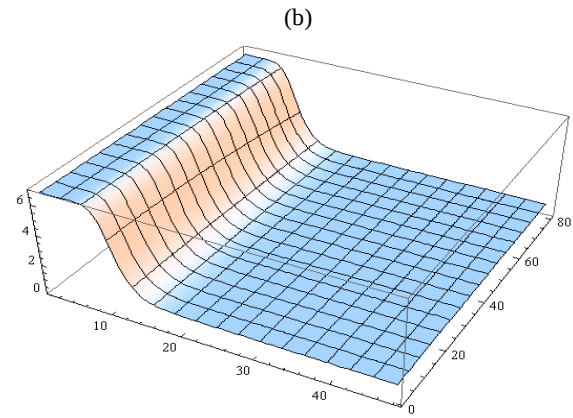
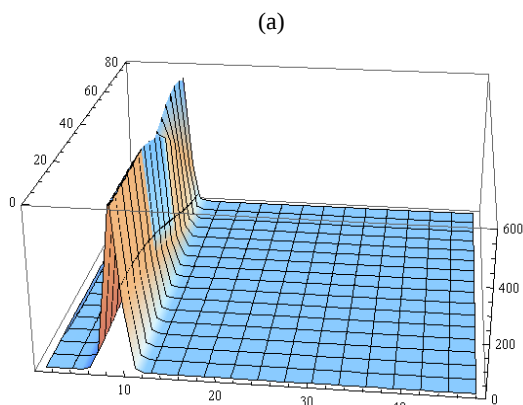


Figure 8. (a) Converged reaction rate. (b) Converged temperature.

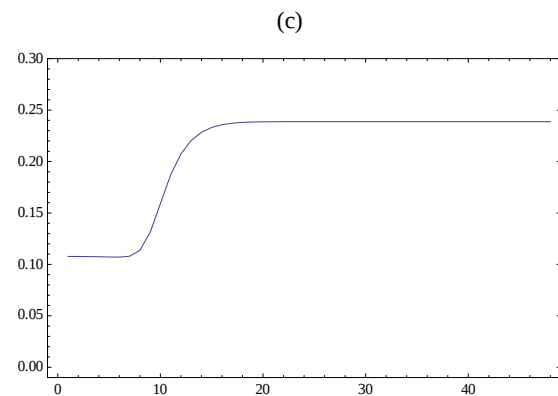
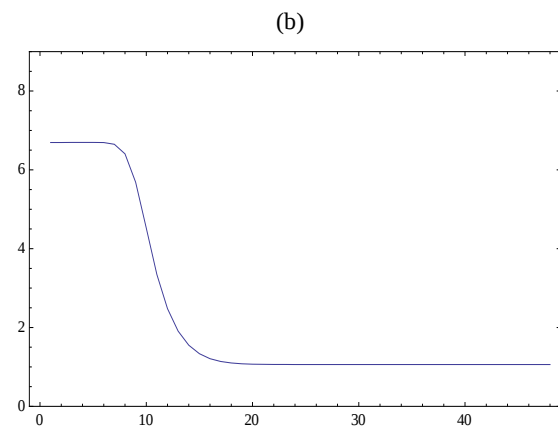
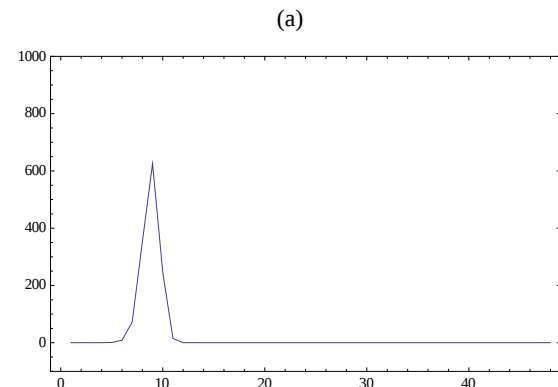


Figure 9. Reaction rate (a), Temperature (b), and Oxygen (c).

In the summary of the computational results, first regarding physical point of view we found the clear movements of two flame fronts in one dimensional case. The results are different from the results from 7) and 10) that has single flame front. In the second simulation when the gas is at rest and the flame forms a ring in the radial direction like a spherical wave: the cross section has two peaks like one dimensional case. From this computation we estimated the burning velocity correctly which is close to the experiment [10]. Third case, counter flow combustion problem, as the extension of the second computation since the ignition point is fixed, so it reduces to the second problem at initial time where the blowing velocity is zero. The results show that it had also a ring at the initial stage. When the flow was stationary, the velocity at the combustion line was 0.25m/sec at the line where vertical velocity is 0.25m/sec as the same flame velocity of the one dimensional case ($U=0.25\text{m/sec}$). Regarding software we used WOLFRAM MATHEMATICA, miscalculations would be small.

Regarding the numerical simulation, the overall computations were steady with this set of parameters. However, a negative reaction rate was observed in the early stage of the computation and the small oscillation of the solutions remained until the end of the computation. More challenging attempt was done: used 1) larger Reynolds number, and used 2) a coupled-viscosity to temperature and found these attempts always caused instability problems.

CONCLUSION

We obtained a similar combustion flame speed to the results to [9], but obtained two combustion flame fronts which are different from [7] and [10]. We need to develop compressible LBM method that is stable at higher Reynolds number and stronger detonation and shockwave.

ACKNOWLEDGEMENTS

We gratefully acknowledge Prof. T. Hosoyamada for discussions. This study was fulfilled within the framework of the Sky-Infra project.

REFERENCES

- [1] Qian, Y.H., Zhong, Y., "Completely Galilean-invariant Lattice BGK Models for the Navier-Stokes Equation", NASA/CR-1998-208701, ICASE Report No.98-38, 1998.
- [2] Kataoka, T. and Tsutahara, M., "Lattice Boltzmann Model for the compressible Navier Stokes equations with flexible specific-heat ratio", Physical Review E, 69(3):035701 R, 2004-03.
- [3] Meng, J. and Zhang, Y., "Gauss-Hermite quadrature and accuracy of lattice Boltzmann models for non-equilibrium gas flows", Physical Review E, Statistical physics, Plasmas, fluids, and related interdisciplinary topics, 83(3), Article 0367, ISSN 1063-651X, 2011.
- [4] Chikatanmama, S.S., and Karlin, I., "Entropy and Galilean Invariance of Lattice Boltzmann Theories", Physical Review Letters, PRL 97, 190601 (2006), 10 Nov, 2006.
- [5] Lui, L., "Theory of the Lattice Boltzmann Method: Lattice Boltzmann Models for Non-ideal Gas", NASA/CR-2001-210858, ICASE Report No. 2001-8.
- [6] Bennett, S., "A Lattice Boltzmann Model for Diffusion Binary Gas Mixtures", University of Cambridge, Ph.D. Dissertation, King's College, 2010.
- [7] Yamamoto, K., He, X., and Doolen, G.D., "Simulation of combustion field with lattice Boltzmann method", J. Stat. Phys., 107 (2002), 367-383.
- [8] Legier, J.P., Poinot, T., and Veynante, D., "Dynamically thickened flame LES model for premixed and non-premixed turbulent combustion", Center for turbulence research, Proceedings of the Summer Program 2000, pp157-168, 2000.
- [9] Yu, H., Luo, L., and Grimaud, S.S., "Scalar Mixing and Chemical Reaction Simulations using Lattice Boltzmann Method", Imperial College Press, International Journal of Computational Engineering Science, Vol.3, No.1(2002) 73-87.
- [10] Chen, S., Liu, Z., Tian, Z., Shi, B., and Zheng, "A Simple Lattice Boltzmann Scheme for Combustion Simulation", Computers and Mathematics with Applications 55(2008)1423-1432.
- [11] Gao, Y., and Chow, W.K., "A Review on Combustion Modeling", International Journal on Architectural Science, Volume 6, Number 2, p38-69, 2005.
- [12] Obikane, Y., and Khenmedekh, L., "Direct Simulation of the Instability of the Pilot Flame in a Turbo-Engine Combustor", AIAA paper, July, 2015 Propulsion Conference, Orlando, FL.

Фемтосекундын лазерын пульсээр атомыг иончлох магадлалыг тооцоолох

Ч. Алдармаа*, Л. Хэнмэдэх, Г. Зоригт

ШУТИС, Хэрэглээний Шинжлэх Ухааны Сургууль, Физикийн тэнхим

Энэхүү ажилд фемтосекундын лазерын пульс, атомтай харилцан үйлчлэлийг хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлээр илэрхийлж Кулоны дискрет хувьсагчийн аргаар шийдсэн. Үндсэн төлөвт байгаа устөрөгчийн атом хүчтэй лазерын пульсын үйлчлэлээр иончлогдох магадлал сугаран гарах электроны кинетик энергиэс хэрхэн хамаарах хамаарлыг тооцоолж, Alexei N. Grum-Grzhimailo нарын ажил болон Хүчтэй орны ойролцоолол, Кулон Волковын ойролцоолол аргуудаар бодсон үр дүнтэй харьцуулан дүн шинжилгээ хийлээ.

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

I. ОРШИЛ

Лазерын богино хүчтэй пульсийг тулгуур болон технологийн судалгаанд өргөн хэрэглэж байна. Атом, молекулд явах үзэгдэл хувирал нь асар богино фемто болон аттосекундын эрэмбэтэй буюу хугацаанд үргэлжилдэг. Иймд химийн урвалын өрнөл хувирлын процессын шинж чанарыг лазерын богино пульсээр тандан судлах нь атом молекулын судалгааны шинэ чиглэл болоод байна [1,2]. Лазерын пульсийн уртыг хэдхэн аттосекундын хэмжээнд хүртэл богиносгож чадвал молекул төдийгүй, атом дотор явагдах процессын дөрвөн хэмжээст дүрслэлийг гарган авах боломжтой болно. Хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлийг тоон аргаар шийдэх замаар лазер атомын харилцан үйлчлэлийг зүй тогтлыг илэрхийлэх нь онолын тулгуур арга юм. Хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлийг орчин үед хөгжиж буй гурван хэмжээст торын арга, бас бааз функцээр задлах аргаар бодож байна. Бааз функцыг сонгохдоо Лежандрын олог гишүүнт [3] эсвэл Волковын [4] функц болон бусад [5,6] функцыг ашиглан хугацаанаас хамаарсан хоёрдугаар эрэмбийн дифференциал тэгшитгэл гарган авч, уг радиал систем тэгшитгэлийн шийдийг тооцооллын аргаар тодорхойлж байна. Торын аргаар бодохдоо төгсгөлөг ялгавар [7,8] тоон базис [9], төгсгөлөг элемент [10], В-сплайныг [11] ашиглан тооцоог хийсэн байна. Энэхүү ажилд фемтосекундын лазерын пульсээр, устөрөгчийн атомыг иончлох процессыг хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлээр илэрхийлж, уг тэгшитгэлээ Кулоны Дискрет хувьсагчийн аргаар шийдсэн. Тооцоололын үр дүнг Хүчтэй орны ойролцоолол, Кулон

Волковын ойролцоо аргуудаар ойролцоолж бодсон үр дүнтэй харьцуулав.

II. ОНОЛ

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

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

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

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

$E(t)$ -лазерын цахилгаан орон. Лазерын цахилгаан орныг синус квадрат хүрээтэйгээр сонгон авбал [13].

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

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

A. ДИСКРЕТ ХУВЬСАГЧЫН АРГА (ДХА)

Шредингерийн тэгшитгэлээс хугацааны t эгшинээс $t + \Delta t$ эгшинд долгион функцыг олбол [14]:

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

Энэхүү итерацийн алхамуудаар долгион функцын хугацааны хамаарал тодорхойлогдоно. Тухайн алхмыг гүйцэтгэхэд Δt хугацааны алхам бага үед хугацааг хуваах Странгийн аргыг хэрэглэх боломжтой юм. Хугацааг хуваах аргыг ашиглан хугацаанаас хамаарсан ба хамаараагүй

* Electronic address: aldaraa2004@yahoo.com

операторуудыг салган бөмбөлөг координатын системд долгион функцыг тодорхойлбол [3]:

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

Долгион функцыг бөмбөлөг координатын системд координатуудыг дискретчилэн сфер гармоник функцын баазаар задлан бичвэл

$$\Psi(r_i, \theta_j, \varphi_k, t) = \sum_{l=0}^{lmax} \sum_{m=-l}^l R_{l,m}(r_i, t) Y_{l,m}(\varphi_k, \theta_j) \quad (6)$$

$Y_{l,m}(\varphi_k, \theta_j)$ сфер гармоник, $R(r_i, t)$ радиал функц. Энэхүү функцээ (1) тэгшитгэлд орлуулбал бөмбөлөг координатын системд өнцгийн ба радиал тэгшитгэлүүд болон задарна. Өнцгийн тэгшитгэлийн хувьд $\hat{L}^2$ операторын хувийн функцүүд нь $Y_{l,m}(\varphi, \theta)$ сфер гармоник ба хувийн утгууд нь $l(l+1)$ болно [15]. Радиал тэгшитгэл нь хугацаанаас хамаарах ба зөвхөн радиал функцийг тодорхойлно. Радиал функц буюу долгион функцын сфер функцээр задалсан задаргааны коэффициентыг өнцгийн интегралаар тооцоолон гаргах ба энд интегралыг квадратур ашиглан бичвэл:

$$R_{l,m}(r_i, t) = \sum_{k=1}^{kmax} \sum_{j=1}^{jmax} \psi(r_i, \theta_j, \varphi_k, t) Y_{l,m}^*(\varphi_k, \theta_j) w_k w_j \quad (7)$$

w_k, w_j эдгээр нь Симпсоны ба Гаусс-Лежандрын жингүүд $jmax$ θ өнцгийн зангилааны тоо, $kmax$ φ өнцгийн зангилааны тоо болно. Кулоны функц сонгон язгууруудаар нь радиал зангилааны цэгүүдийг авч радиал функцыг кардинал функцүүдээр илэрхийлсэн интерполяцын функцыг гарган авъя. Интерполяцын функцыг радиал тэгшитгэлд орлуулан тооцоолно. Кулоны функцыг $F(r)$ түүний уламжлалыг $F'(r)$ гээд $\frac{R_{l,m}(r_i, t)}{F'(r)} = \phi_{k,j}$ гэвэл атомын гамилтанионтой стационар тэгшитгэлээс нь дараах шугаман тэгшитгэлийг гаргаж болно.

$$\sum_{j=1}^N \left[-\frac{1}{2} D_{i,j} + V_l(r_j) \delta_{i,j}\right] \phi_{k,j} = \varepsilon_k \phi_{k,i} \quad i = 1 \dots N \quad (8)$$

Энд: $\phi_{k,i}$ хувийн функцын (k -р спектрийн j -р) утга, ε_k хувийн утга (k -р спектрийн энерги) $D_{i,j}$ координатын 2-р эрэмбийн уламжлалыг тодорхойлох матриц

$$D_{i,j} = \frac{1}{3} \left(E + \frac{Z1}{r_i}\right) \delta_{i,j} + (1 - \delta_{i,j}) \frac{1}{(r_i - r_j)^2} \quad (9)$$

E электроны кинетик энерги, $Z1$ кулоны функцын цэнэг, $V_l(r_j)$ координатаас хамаарсан потенциал. $V_l(r_j) = \frac{l(l+1)}{2r_j^2} - \frac{Z}{r_j}$, l - орбитын квант тоо. (8) нь шугаман тэгшитгэлийн систем үүсгэх учир l -н утга бүрд харгалзах тэгшитгэлийн системийг бодож, радиал зангилааны тоотой тэнцүү тооны хувийн утга ба хувийн векторуудыг олно. Энэхүү хувийн векторууд нь псевдоспектрүүдэд харгалзах бүрэн бааз болно. Хугацаанаас хамаарсан долгион функцын радиал функцыг координатын төлөөллөөс псевдоспектриал бааз дээр задлах буюу энергийн төлөөлөлд шилжүүлээд $\hat{H}_0$ оператороор үйлчлэхэд задаргааны гишүүн бүрийн хувьд харгалзах хувийн утга үржигдэн гарах ба буцааж координатын төлөөлөлд шилжих үйлдэл нь тогтмол утгатай хувьслын матрицаар үйлчилсэнтэй адил болно. Иймд (5) тэгшитгэлийн $\hat{H}_0$ операторын үйлчлэлийг тооцоолохдоо долгион функцээс (6) илэрхийллээр радиал функцын утгуудыг тодорхойлон (10) илэрхийллээр гүйцэтгэх ба $S_{ij}(l)$ хувийн утгуудаар тодорхойлогдох хувьсалын матриц болно.

$$\exp(-iH_l^0 \Delta t) R_{l,m}(r_j, t) \big|_i = \sum_{j=1}^N S_{ij}(l) R_{l,m}(r_j, t), \quad (10)$$

Хувьсалын матриц нь:

$$S_{ij}(l) = \sum_k \phi_{k,j}(l) \phi_{k,i}(l) \exp(-i\varepsilon_k(l) \Delta t) \quad (11)$$

χ_{ki} хувийн функцын (k -р спектрийн j -р) утга, ε_k хувийн утга (k -р спектрийн энерги).

Б. ХҮЧТЭЙ ОРНЫ ОЙРОЛЦООЛОЛ (ХОО)

Цөмийн үүсэх цахилгаан орон нь лазерын цахилгаан орноос олон дахин бага үед $\left|\frac{Z}{r}\right| \ll |\vec{r} \cdot \vec{E}(t)|$ Кулоны потенциалыг (1) тэгшитгэлд тооцохгүй орхиж болно [16]. Энэ тэгшитгэл нь лазерын хүчтэй орон дахь чөлөөт бөөмийн Шредингерийн тэгшитгэл бөгөөд тэгшитгэлийн шийдийг Волковын долгион функцээр илэрхийлж болно. Волковын долгион функц:

$$\Psi_f(\vec{r}, t) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left\{i\left[\vec{k} + \vec{A}(t)\right] \cdot \vec{r} - i \cdot S(\vec{k}, t)\right\} \quad (12)$$

$\vec{k}$ - электроны импульс, $S(\vec{k}, t)$ - фаз

$$S(\vec{k}, t) = \frac{1}{2} \int_0^t dt' \left[\vec{k} + \vec{A}(t')\right]^2 = \quad (13)$$

$$\frac{k^2}{2} + \int_0^t dt' \left(\vec{k} \cdot \vec{A}(t') + \vec{A}(t')^2\right)$$

$\varepsilon_f = \frac{k^2}{2}$ - электроны кинетик энерги,

$a(\vec{k}, \tau)$ - иончлолын амплитуд

$$a(\vec{k}, \tau) = -(2\pi)^{-3/2} \int_0^\tau dt \vec{E}(t) \langle \Psi_f | \vec{r} | \Psi_i \rangle \quad (14)$$

(14) –т байгаа матрицын элементийг бодохын тулд Фурье хувиргалтыг ашиглая. Эхний төлөвийн долгион функцын Фурье дүр нь:

$$\Psi_i(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{r} \Psi_i(r) e^{i\vec{p}\vec{r}} = \frac{2\sqrt{2}}{\pi(p^2 + 1)^2}. \quad (15)$$

Матрицын элементийг энэхүү Фурье дүрийн уламжлалаар илэрхийлж болно.

$$(2\pi)^3 \frac{d}{d\vec{p}} \Psi_i(\vec{p}) = i \int e^{i\vec{p}\vec{r}} \vec{r} \Psi_i d^3r \quad (16)$$

(15)-аас р хувьсагчаар уламжлал авбал:

$$a(\vec{k}, \tau) = \frac{d}{d\vec{p}} \Psi_i(\vec{p}) = \frac{-4(\vec{k} + \vec{A}(t))2\sqrt{2}}{\pi((\vec{k} + \vec{A}(t))^2 + 1)^3}. \quad (17)$$

илэрхийлэл гарна. Энд

$$\frac{dP}{dEd\Omega} = 2k |a(\vec{k}, \tau)|^2. \quad (18)$$

В. КУЛОН-ВОЛКОВЫН ОЙРОЛЦООЛОЛ (КВО)

Цөмийн үүсгэх цахилгаан орон нь лазерын цахилгаан оронтой ойролцоо $\left| \frac{Z}{r} \right| \approx |\vec{r} \cdot \vec{E}(t)|$ үед (1) тэгшитгэлийн шийдийг Кулон-Волковын долгион функцээр илэрхийлж болно. Кулон-Волковын долгион функц [17].

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) = \Phi_{\vec{k}}(\vec{r}) \Psi_V(\vec{k}, \vec{r}, t) \quad (19)$$

$\Psi_V(\vec{k}, \vec{r}, t)$ - Волковын долгионы функц, $\Phi_{\vec{k}}(\vec{r})$ - Кулоны үржигдэхүүн

$$\Phi_{\vec{k}}(\vec{r}) = N_k F\left(-\frac{i}{k}, 1, -ikr - i\vec{k} \cdot \vec{r}\right) \quad (20)$$

$$N_k = (2\pi)^{-3/2} \exp\left(\frac{\pi}{2k}\right) \Gamma\left(1 + \frac{i}{k}\right) \text{ нормчлолын}$$

коэффициент. Кулон – Волковын ойроцоололд иончлолын амплитуд:

$$a^{CV}(t) = -iN_k N_i \int_0^t dt \exp\left\{i(\varepsilon_f - \varepsilon_i)t + i \int_0^t dt' \vec{k} \cdot \vec{A}(t')\right\} \vec{E}(t) \cdot \int d^3r e^{-i\vec{r}} e^{i(\vec{k} + \vec{A}(t))\vec{r}} F\left(-\frac{i}{k}, 1, -ikr - i\vec{k} \cdot \vec{r}\right) \quad (21)$$

$N_i = \frac{1}{\sqrt{\pi}}$ эхний төлөвийн нормчлолын коэффициент. Матрицын элементэд орж буй координатын интеграл нь

$$\vec{I}_0(\vec{k}, t) = \int d^3r e^{i(\vec{k} + \vec{A}(t))\vec{r} - Zr} F\left(-\frac{i}{k}, 1, -ikr - i\vec{k} \cdot \vec{r}\right) \quad (22)$$

(22)-т дараах интегралыг ашиглавал: [18]

$$K_0 = \int d^3r \cdot \frac{1}{r} e^{i\vec{q}\vec{r} - i\lambda r} F(i a_1; 1; i p_1 r - i \vec{p}_1 \vec{r}) F(i a_2; 1; i p_2 r - i \vec{p}_2 \vec{r}) = \frac{2\pi}{\alpha} e^{-\pi a_1} \left(\frac{\alpha}{\gamma}\right)^{i a_1} \left(\frac{\alpha}{\alpha + \beta}\right)^{i a_2} F\left(i a_1; i a_2; 1; \frac{\beta\gamma - \alpha\delta}{\gamma(\alpha + \beta)}\right) \quad (23)$$

дээрх интеграл нь $a_1 = 0$ үед гарч ирнэ.

$$K_0 = \int d^3r \cdot \frac{1}{r} e^{i\vec{q}\vec{r} - i\lambda r} F(i a_2; 1; i p_2 r - i \vec{p}_2 \vec{r}) = \frac{2\pi}{\alpha} \left(\frac{\alpha}{\alpha + \beta}\right)^{i a_2} F\left(0; i a_2; 1; \frac{\beta\gamma - \alpha\delta}{\gamma(\alpha + \beta)}\right) \quad (24)$$

$$\text{Энд } \alpha = \frac{1}{2}(q^2 + \lambda^2), \quad \beta = \vec{p}_2 \vec{q} - i\lambda p_2, \quad a_2 = \frac{i}{k}$$

$$K_0 = \frac{2\pi}{\alpha'} \left(\frac{\alpha'}{\alpha' + \beta}\right)^{i a_2} = \frac{2\pi}{\frac{1}{2}(q^2 + \lambda^2)} \cdot \left(\frac{\frac{1}{2}(q^2 + \lambda^2)}{\frac{1}{2}(q^2 + \lambda^2) + \vec{p}_2 \vec{q} - i\lambda p_2}\right)^{i a_2} \quad (25)$$

(25)-ыг (22)- тай харьцуулбал:

$$\vec{I}_0(\vec{k}, t) = -\frac{\partial^2 K_0}{\partial \lambda \partial \vec{q}} \quad (26)$$

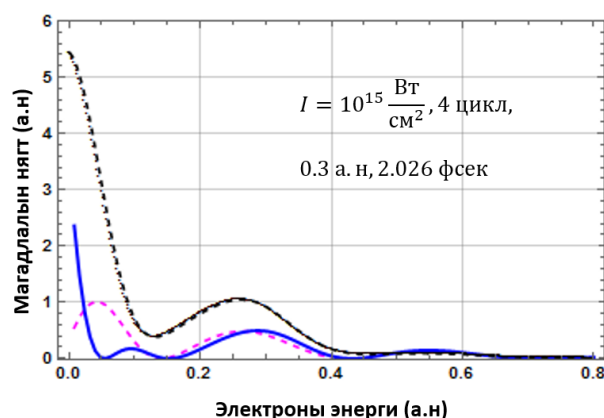
болно. Эдгээр уламжлалыг авч (21)-т орлуулахад Кулон-Волковын ойролцоололоор амплитуд:

иончлолын

$$a^{CV}(\vec{k}, t) = -\frac{32\pi(2i\vec{k}(i + \vec{k})^2 + 2(1 + i\vec{k})(i + \vec{k})\vec{A}(t) + (-4 + 2i \cdot \vec{k})\vec{A}(t)^2 - 2i\vec{A}(t)^3)}{(i + \vec{k} - \vec{A}(t))^2(1 + \vec{k}^2 + 2\vec{k} \cdot \vec{A}(t) + \vec{A}(t)^2)^3} \quad (27)$$

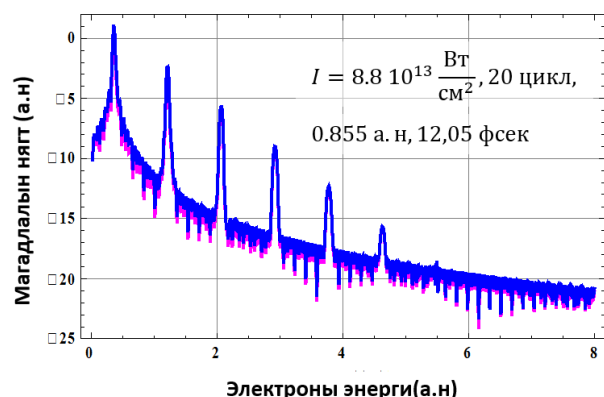
III. ҮР ДҮН

Атомыг $I = 10^{15}$ Вт/см² эрчимтэй, 4циклтэй, 0.3 а.н давтамжтай 2.026 фемтосекундын лазерын пульсээр иончлох процессыг Кулоны долгион функцээр бааз хийсэн дискрет хувьсагчаар илэрхийлэх аргаар хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлийг гурван хэмжээст Математика програмаар тооцоолоход дараах үр гарлаа. Үр дүнгээс харахад Дискрет хувьсагчийн арга нь маш сайн үр дүн өгсөн буюу [13] ажлын үр дүнтэй тохирч байна. Хүчтэй орны ба Кулон- Волковын ойролцоолол бага энергийн мужид зөрүүтэй гарсан. Дээрх гурван арга их энергийн мужид дөхөлт сайтай байна.



Зураг 1. Иончлолын магадлалын нягт электроны энергиэс хамаарах хамаарал (шулуун-ХХО, тасархай шугам-КВО, цэг-ДХА).

Мөн лазерын пульсын уртыг 6 дахин нэмэгдүүлсэн 12.05 фемтосекундын пульсээр устөрөгчийн атомын үндсэн төлөвийг иончлох магадлалын нягтыг хүчтэй орны ба Кулон-Волковын ойролцооллоор бодсон үр дүнгүүдийг харьцуулахад их энергитэй электрон сугаран гарах үед дээрх ойролцоолууд тохирч байна.



Зураг 2. Иончлолын магадлалын нягт электроны энергиэс хамаарах (ХХО, КВО).

ХХО ба КВО аргуудаар тооцоолсон иончлолын магадлалын нягтыг тооцоолсон үр дүнгүүдийг харьцуулахад олон фотоны зэрэг шингээх магадлал нь жигд бууралттай байна.

IV. ДҮГНЭЛТ

Лазерын пульсээр атомыг иончлох бодлогод Кулоны долгион функцээр бааз хийсэн дискрет хувьсагчаар илэрхийлэх аргаар хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлийг гурван хэмжээст тохиолдолд бодлоо. Дискрет хувьсагчийн арга нь бусад аргуудтай харьцуулахад Шредингерийн тэгшитгэл бодох нарийчлал сайтай арга болох нь харагдлаа. Бидний тооцоо Alexei N. Grum-Grzhimailo [13] нарын матриц-итерацийн аргаар бодсон үр дүнтэй харьцуулахад тохирч байна. Хүчтэй орны ба Кулон-Волковын ойролцоо аргууд нь

их энергитэй мужид тооцоолол хийхэд тохиромжтой байна.

V. АШИГЛАСАН МАТЕРИАЛ

- [1] J.L.Hansen, L.Holmegaard, J.H.Nielsen, H.Stapelfeldt and L.B.Madsen, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **45**, 015101 (2012).
- [2] C.D.Lin, T.Morishita, R.Lucchese, A-T. Le, Z.Chen, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **43**, 122001(2010).
- [3] Xiao-Min Tong, Shih-I Chu, Chemical physics **217** (1997), 119-130
- [4] L.A.Collins, A.L.Merts, J.Opt.Soc.Am. **B7**, 647 (1990).
- [5] Xiaoxin Zhou and C.D.Lin, Phys.Rev.Lett.**64**, 862 (1990).
- [6] Q.Su, J.H.Eberly and J.Javanainen, Phys. Rev. Lett. **64**, 862 (1990).
- [7] V.C.Reed, K.Burnett, Phys. Rev. A**42**, 3152 (1990).
- [8] J.H.Eberly, J.Javanainen and Q.Su, J. Opt. Soc. Am. **B6**, 1289 (1989).
- [9] B.I.Schneider, Phys. Rev. A, **55**, 3417 (1997).
- [10] M.Gavrila, J.Shertzer, Phys. Rev. A, **53**, 3431 (1996).
- [11] Jian Zhang, Lambropoulos, Phys. Rev. Lett., **77**, 2186 (1996).
- [12] Л.Д.Ландау, Е.М. Лифшиц, Физика III, Москва (1974).
- [13] Alexei N. Grum-Grzhimailo, Brant Abeln, Klaus Bartschat and Daniel Weflen, Phys. Rev. A., **81**, 043408 (2010).
- [14] Liang-You Peng, and Anthony F Starace, J. Chem. Phys., **125**, 154311(2006).
- [15] Liang-You Peng, and Anthony F. Starace, 2008. arXiv:physics/0604181v1/
- [16] Keldysh.L.V (1965) "Ionization in the field of a strong electromagnetic wave" Soviet physics JETP, volume20, Number1.
- [17] Jain M and Tzoar N (1978) Phys. Rev. A, **18**, 538-45.
- [18] Nordsieck.A, (1953) "Reduction of an Integral in the Theory of Bremsstrahlung" Physical review volume 93, number 4.

Судалгааны реакторыг дэмжих үндэсний дэд бүтцэд хийсэн урьдчилсан үнэлгээ

Г.Цэмбэлмаа^{1,*}, Бя.Мөнхбат^{1,2}, Н.Норов^{1,2}

¹Цөмийн физикийн судалгааны төв, Монгол улсын их сургууль

²Хэрэглээний шинжлэх ухааны инженерчлэлийн сургууль, Монгол улсын их сургууль

Энэ судалгааны ажлын зорилго нь Олон Улсын Атомын Энергийн Агентлагийн арга зүйд тулгуурлан Монголын цөмийн анхны судалгааны реакторын төслийг дэмжих үндэсний цөмийн дэд бүтцийн зарим асуудалд өөрийн үнэлгээг хийж, Олон Улсын Атомын Энергийн Агентлагийн шаардлагуудтай харьцуулалт хийж цаашид хийгдэх шаардлагатай ажлуудын талаар зарим дүгнэлтүүдийг гаргасан.

I. ОРШИЛ

Монгол Улсын төрөөс цөмийн энерги, цацраг идэвхит ашигт малтмал ашиглах талаар баримтлах төрийн бодлого болон Цөмийн энергийн хуулийг 2009 онд УИХ-аар соёрхон баталсан.[1,2]. Энэхүү төрөөс баримтлах бодлого, хөтөлбөрүүдэд ирээдүйн өсөн нэмэгдэх эрчим хүчийг хангах эх үүсвэрүүдийн нэг нь цөмийн эрчим хүч байх болно гэж заасан. Эдгээр нь цөмийн энергийг ашиглах эрх зүйн үндэс болж байна. Цөмийн энерги ашиглаж эхлэх гэж байгаа улсад тулгардаг томоохон асуудлын нэг бол хүний нөөцийн асуудал байдаг. Ихэнхи орны туршлагаас харахад цөмийн эрчим хүчний хүний нөөцийг бэхжүүлэх гол арга зам нь судалгааны реактор барьж байгуулах юм. Үүссэн нөхцөл байдалд тулгуурлан судалгааны реактортой болох шаардлага гарч ирсэн. Үүнээс гадна эрүүл мэнд, хөдөө аж ахуй гэх мэт бусад салбарт хэрэглэдэг бүх цацраг идэвхит изотопоо импортоор авдаг манай улсын хувьд судалгааны реакторд эдгээр изотопуудаа өөртөө үйлдвэрлэх боломж бүрдэх юм. Эдгээр хэрэгцээнүүддээ тулгуурлан манай улс судалгааны реактортой болох төсөл эхлүүлэхээр төлөвлөж байна. Энэ төслийн зорилго нь изотопын дотоод хэрэгцээг хангах, цөмийн шинжлэх ухаан ба технологийн үндэсний чадамжийг нэмэгдүүлэх мөн үндэсний хүний нөөцийн хөгжилд дэмжлэг үзүүлэх юм. Судалгааны реакторын төсөл нь хууль эрх зүйн тогтолцоо, хяналтын тогтолцоо, хүний нөөц үндэсний бодлого гэх мэт цөмийн дэд бүтцүүдээр үндэсний хэмжээнд дэмжигдэх ёстой. Судалгааны реакторын дэд бүтцийн одоогийн төлөв байдал ба хөгжлийг Олон Улсын Атомын Энергийн Агентлаг (ОУАЭА)-ийн гаргасан замын зураглалын дагуу 3 үе шатад хуваах ба үе шат бүрд 19 асуудлыг нарийвчлан хэлэлцдэг[3,4]. Төслийг эхлүүлэхээс өмнө одоогийн нөхцөл байдлаа үнэлж, ОУАЭА-ийн

ерөнхий шаардлагуудтай харьцуулж тэдгээрийн хоорондын зөрүүг тогтоон цаашид дутагдалтай байгаа асуудлуудаа тодорхой болгодог. Энэхүү ажлаар Монголд анхны судалгааны реакторын төсөл эхлүүлэхэд зориулан дэд бүтцийн зарим асуудлын өөрийн үнэлгээг ОУАЭА-ийн гаргасан арга зүйн дагуу боловсруулсан үр дүнг үзүүлнэ. Үр дүнд замын зураглалын 1-р үе шат дах одоогийн ерөнхий нөхцөл байдал ба цаашид анхааралдаа авах зарим дүгнэлтүүдийг гаргав.

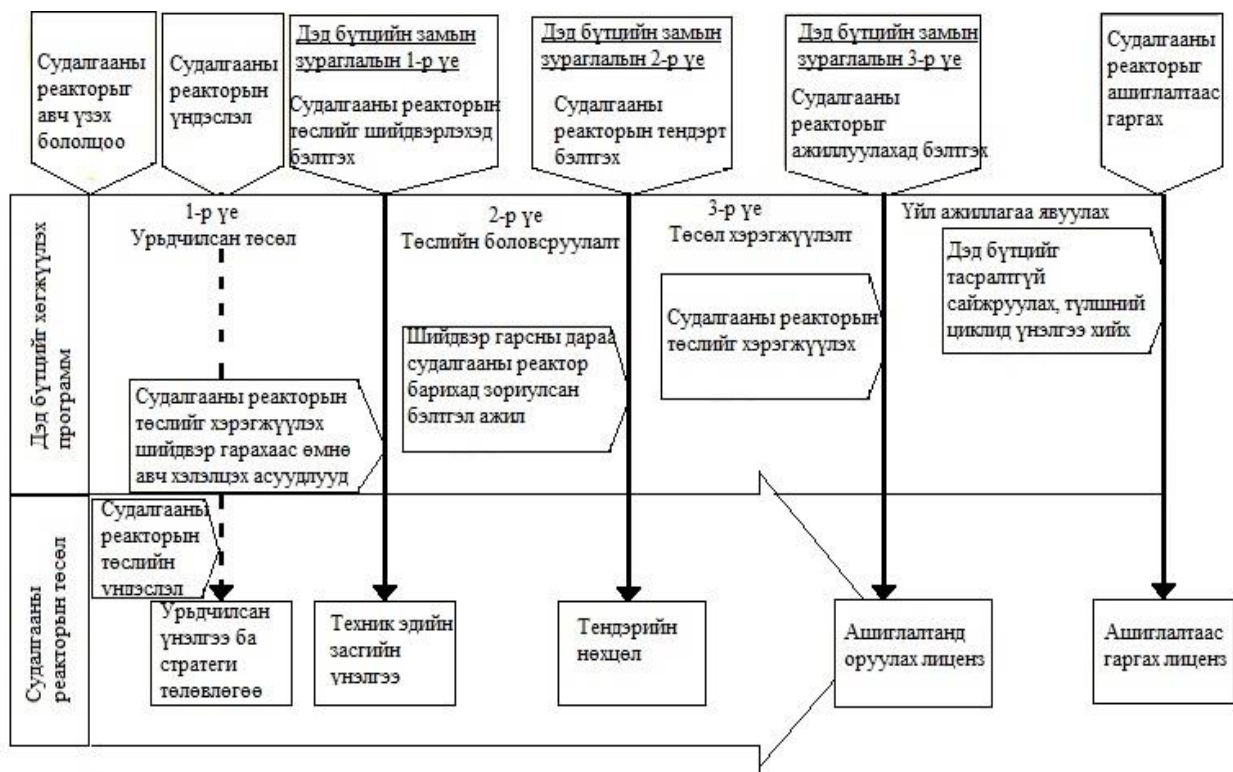
II. АРГАЗҮЙ

A. Судалгааны реакторын төслийн үе шат ба замын зураглал

Судалгааны реактортой болсноор цөмийн шинжлэх ухаан ба технологийн хөгжилд томоохон ахиц гарах болно. Гэвч анхны судалгааны реактор танилцуулахын тулд барьж байгуулах, үйл ажиллагаа явуулах, ашиглалтаас гаргах үеийн аюулгүй ажиллагаа, хамгаалалт, аюулгүй байдал ба ослын бэлэн байдал зэргийг тусгасан техникийн өргөн салбарыг бататгах үндэсний болон олон улсад хүлээх үүрэг, гэрээг хамрах дэд бүтцийн асуудлаа маш сайн шийдвэрлэх хэрэгтэй. ОУАЭА-аас 2012 онд “Судалгааны реакторын төслийн замын зураглал ба тусгай асуудлууд” цөмийн энергийн цувралын NP-T-5.1 хэвлэн гаргасан[3]. Тус хэвлэлийг судалгааны реакторын хөгжлийн үе шатыг хугацааны интервалаар үзүүлсэн замын зураглал хийхэд гарын авлага болгон ашиглана. Энэхүү хэвлэл нь дэд бүтцийн асуудлын шат бүрдэх хүлээгдэж буй үр дүнгийн нарийвчилсан тодорхойлолтыг багтаасан. 1-р зурагт судалгааны реакторын замыг зураглалыг харуулж байна. Хөгжлийн явц ба биелэлтэд үнэлгээ хийж дараагийн шат руу шилжих шийдвэр гаргахад зориулсан шат бүрийн гүйцэтгэлийг тусгай зураглалаар тэмдэглэнэ.

* Electronic address: tsembelmaa2005@gmail.com

Судалгааны реакторын төслийн 3 шат ба тэдгээрт харгалзах асуудлуудыг 1-р хүснэгтэд дүрслэн харууллаа.



Зураг 1. Судалгааны реакторын замын зураглал.

ХҮСНЭГТ 1. Цөмийн дэд бүтцийн хөгжлийн асуудлууд

Дэд бүтцийн асуудлууд	Замын зураглалын I үе	Замын зураглалын II үе	Замын зураглал III үе
Үндэсний байр суурь	Судалгааны реакторын төслийг хэрэгжүүлэх шийдвэр гарахаас өмнө хэрэгжүүлэх асуудлуудыг хангах нөхцөлүүд	Шийдвэр гарсны дараа судалгааны реактор барихад зориулан бэлтгэл ажлыг хангах нөхцөлүүд	Судалгааны реакторын төслийг хэрэгжилтийг хангах нөхцөлүүд
Цөмийн аюулгүй ажиллагаа			
Менежемент			
Хөрөнгө оруулалт ба санхүү			
Хууль эрх зүйн тогтолцоо			
Аюулгүй байдал			
Хяналтын тогтолцоо			
Цөмийн хамгаалалт			
Ашиглалт			
Хүний нөөцийн хөгжил			
Хэрэглэгч талуудын оролцоо			
Барих газрын судалгаа, сонголт, үнэлгээ			
Байгаль орчны хамгаалал			
Ослын бэлэн байдал, хариу арга хэмжээ			
Цөмийн аюулгүй байдал			
Цөмийн түлшний менежмент			
Цацраг идэвхит хаягдал			
Аж үйлдвэрийн оролцоо			
Худалдан авалт			

В. Өөрийн үнэлгээний аргачлал

Өөрийн үнэлгээ нь цөмийн дэд бүтцийн хөгжлийн дараагийн үе шат руу шилжихэд бэлэн эсэхийг тогтоох анхны алхам болох ба цаашилбал үйл ажиллагаагаа байнга сайжруулахад чухал үүрэг гүйцэтгэнэ. ОУАЭА-аас “Шинэ судалгааны реактор төслийг дэмжихэд зориулсан үндэсний цөмийн дэд бүтцийн үнэлгээ” [5] гэсэн нэр бүхий шинэ гарын авлага гаргаж байгаа. Энэхүү гарын авлага нь үндэсний цөмийн дэд бүтцийн өнөөгийн нөхцөл байдлыг ерөнхий шаардлагуудтай харьцуулан тэдгээртэй үл нийцэх зөрүүг тогтоож цаашдын үйл ажиллагааны чиглэлийг тодорхойлно.

Үнэлгээ хийх дараалал

Энэхүү өөрийн үнэлгээгээр цөмийн дэд бүтцийн зарим асуудлыг авч хэлэлцэн өнөөгийн статусын зураглал ба үндэсний дэд бүтцийн хөгжлийн явцыг харуулах болно. Өөрийн үнэлгээг хэзээ ч хийж болох ба бид энэ удаа 1-р үе эхлэл үеийн үнэлгээг хийхээр төлөвлөсөн.

- 1-р шатны нөхцөлүүдийн дагуу судалгааны реакторын дэд бүтцийн хөгжлийн статусыг үнэлэх,
- Цаашид анхаарал хандуулах шаардлага бүхий ерөнхий шаардлагуудтай үл нийцэх зөрүүг тодорхойлох,
- Ерөнхий шаардлагуудтай нийцэх санал зөвлөмж гаргах

Үнэлгээний явц

Дэд бүтцийн асуудал бүр нэг ба түүнээс дээш нөхцөлүүдээс бүрдэх ба эдгээр нөхцөлүүд нь тохирох нотлох баримтуудаар батлагдана. Нотлох баримтуудад хууль, зарлиг, албан гэрээ, тайлан, уулзалтын тэмдэглэл, харилцаа холбоо, яриа ба илтгэл, хурал оролцох, зөвлөгөө, байгуулгын ба ажлын тодорхойлол зэрэг багтана. Үр дүн нь дэд бүтцийн асуудал бүрийн нөхцөл шалгуурийг хангах өөрийн үнэлгээний үр дүн ба тайлбарыг нэгтгэсэн хүснэгтээр илэрхийлэгдэнэ. 2-р хүснэгтэд үнэлгээ хийх зааврын жишээг харууллаа. Нотлох баримтуудад үндэслэн үр дүнг гаргаж, цаашид арга хэмжээ авах хэрэгтэй эсэхийг тогтооно.

ХҮСНЭГТ 2. Өөрийн үнэлгээ хийх загвар

Үндэсний байр суурь	I-Үе шат	
СРТХК ба ҮМТБ үүсгэн байгуулагдсан, бие бүрэлдэхүүнтэй, эрх мэдэлтэй, санхүүжилттэй байх		
Үнэлгээний үндэслэл	Нотолгоо	Ажиглалт
Судалгааны реакторийн хөтөлбөрийг тууштай хэрэгжүүлэхийн тулд шийдвэр гаргахтай холбоотой бүх асуудлыг цогцоор нь үнэлж дүгнэх үйл ажиллагааны тодорхой цар хүрээтэй байна.		
Зохих хэмжээний санхүүжилттэй (шаардлагатай бол гадны мэргэжилтэнд зориулсан нэмэлт санхүүжилтыг багтаасан), тодорхой тооны ажилтан, мэргэжилтнээс бүрдсэн байна.		
Үнэлгээ:		
СРТХК-Судалгааны реакторын төсөл хэрэгжүүлэх комисс ҮМТБ-Үнэлгээ, маркетинг, төслийн баг	ЦФСТ- Цөмийн физикийн судалгааны төв ЦЭК- Цөмийн энергийн комисс	

Үнэлгээний ерөнхий явц ба тодорхой чиглэлүүдэд зориулан нөхцөл бүрийн статус дараах байдлаар илэрхийлэгдэнэ. Эдгээр нь:

- Маш их үйл ажиллагаа шаардлагатай
- Бага зэргийн үйл ажиллагаа шаардлагатай
- Үйл ажиллагаа шаардлагагүй

III. МОНГОЛЫН ЦӨМИЙН ДЭД БҮТЦИЙН ӨӨРИЙН ҮНЭЛГЭЭНИЙ ҮР ДҮН**А. Үндэсний байр суурь**

Судалгааны реакторд урт хугацааны үндэсний ба олон улсын үүрэг хариуцлага шаардлагатай.

Тиймээс үндэсний байр суурийн асуудал судалгааны реакторын төсөл хэрэгжүүлэхэд маш чухал. СРТХК ба ҮМТБ-ийг засгийн газрын дэмжлэгтэйгээр байгуулах ёстой. Одоогоор монголд СРТХК ба ҮМТБ байгуулагдаагүй боловч тус ажлын хэсгүүдийг байгуулах санал дэвшигдэж хэлэлцэх шатандаа явж байгаа болохыг 3-р хүснэгтээс харагдаж байна.

ХҮСНЭГТ 3. Үндэсний байр суурь

Нөхцөлүүд	Үнэлгээний статус	Ажиглалт	Цаашид анхаарлаа хандуулах
1.1. СРТХК ба УМТБ үүсгэн байгуулагдсан, бие бүрэлдэхүүнтэй, эрх мэдэлтэй, санхүүжилттэй байх	Маш их үйл ажиллагаа шаардлагатай.	СРТХК ба УМТБ-ийг байгуулах саналыг ЦФСТ-өөс ЦЕК-д гаргасан.	СР-ийн төсөл хэрэгжүүлэх ба үнэлгээ, маркетинг, төслийн багийг үүсгэх байгуулах
1.2. Аюулгүй ажиллагаа, аюулгүй байдал, хамгаалал ба үл дэлгэрүүлэх гэсэн ойлголтуудыг засгийн газрын юмуу түүний агентлагуудын түвшинд хүлээн зөвшөөрсөн байх	Бага зэргийн үйл ажиллагаа шаардлагатай.	Цөмийн энергийн хууль батлагдсан. Зарим олон улсын гэрээ, конвенцэд нэгдсэн. Судалгааны ба эрчим хүчний гэх мэт цөмийн төхөөрөмжүүдтэй холбоотой аюулгүй байдал стандарт, дүрэм журамыг төслийн хугацаанд хөгжүүлэх хэрэгтэй.	Холбогдох байгууллуудад аюулгүй ажиллагаа, аюулгүй байдал, хамгаалал зэргийн соёл ба менежементийн төлөвшүүлэх бодлого ба стратеги төлөвлөгөө
1.3. Олон улсын Цөмийн Аюулгүй Байдлын Дэглэмийг таньж ойлгон, түүнд оролцоход тавигдах шаардлагууд	Бага зэргийн үйл ажиллагаа шаардлагатай.	Судалгааны реакторын аюулгүй байдлын дүрмийг батлуулах санал дэвшигдсэн.	Шаардлагатай олон улсын гэрээ конвенцуудад цаг тухайд нь нэгдэх
1.4. СР-ийн төсөл боловсруулахад урьдчилсан стратеги төлөвлөгөө шаардлагатай ба шаардагдах үүрэг даалгаврыг ойлгосон байх	Маш их үйл ажиллагаа шаардлагатай.	СР-ийн төсөл боловсруулах урьдчилсан стратеги төлөвлөгөө боловсруулахад ЦЕК-ийн дэмжлэг маш чухал.	ОУАЕА-ийн зөвлөгөөний дагуу судалгааны реакторын урьдчилсан стратеги төлөвлөгөө ба үндэслэлийг боловсруулах
1.5. Засгийн газар хоорондын шаарлагатай гэрээ хэлэлцээрүүд тодорхой болсон байх.	Бага зэргийн үйл ажиллагаа шаардлагатай.	ЦЕК ба РОСАТОМ-ийн хооронд судалгааны реакторын төслийн талаарх анхны санамж бичиг хийгдсэн.	Судалгааны реактор ба хүний нөөцтэй холбоотой гэрээ ба санамж бичгийг тодорхой болгож, хэрэгжилтэнд анхаарах

В. Хууль эрх зүйн тогтолцоо

Хууль эрх зүйн тогтолцоог хангах шаардлагуудыг замын зураглалын 1-р үе шатад засгийн газар, агентлагууд ба холбогдох бусад байгууллагуудтай хэлэлцэж тохиролцох хэрэгтэй. Монголд одоогийн байдлаар цацраг идэвхит үүсгүүрийн хяналтын хууль эрх зүйн тогтолцоо шаардлагатай түвшинд бүрдсэн.

Иймд цөмийн тоног төхөөрөмжтэй холбоотой зарим өөрчлөлтийг хийх шаардлагатай. 4-р хүснэгтэд хууль эрх зүйн тогтолцоог үнэлсэн үнэлгээний товч үр дүнг харууллаа. Үр дүнгээс харахад нилээд хэдэн олон улсын гэрээ, конвенци, дүрэм журмууд хэлэлцэх шатандаа явж байна. Бүх үйл ажиллагаа цөмийн энергийн хуулиар зохицуулагдах ёстой.

ХҮСНЭГТ 4. Хууль эрх зүйн тогтолцоо

Нөхцөлүүд	Үнэлгээний статус	Ажиглалт	Цаашид анхаарлаа хандуулах
2.1. СРТХК-ийн тогтоосон олон улсын эрх зүйн баримт бичиг, тэдгээрийг засгийн газартай зөвшилцөж, төлөвлөн дагаж мөрдөх	Бага зэргийн үйл ажиллагаа шаардлагатай.	Ихэнхи шаардлагатай гэрээ конвенцуудад нэгдсэн ба зарим нь засгийн газраар хэлэлцэх түвшинд явж байгаа. Судалгааны реакторын аюулгүй байдлын дүрмийг батлуулахаар ЦЕК-д хүсэлт гаргасан.	Дараах бичиг баримтуудыг батлуулахад анхаарлаа хандуулах: Цөмийн аюулгүй байдал, ашигласан түлшний болон цацраг идэвхит хаягдлын менежементын аюулгүй байдал, цөмийн материалын биет хамгаалалтын тухай конвенци, бага хэмжээний цөмийн материалын шинэчлэсэн протокол.

2.2. Засгийн газрын цөмийн тухай хууль тогтоомжийг батлан гаргах төлөвлөгөө.	Бага зэргийн үйл ажиллагаа шаардлагатай.	ЦЕК холбогдох байгууллагуудтай хамтран цөмийн энергийн хуулийг батлуулсан ба цөмийн болон цацрагийн аюулгүй байдал, хамгаалалтын бодлого ба дүрмийг боловсруулж байгаа.	Цаашид боловсруулах баримт бичгүүдээ цөмийн төхөөрөмжийн талаарх заалтуудыг тодорхой оруулж өгөх.
2.3. Одоогийн хууль тогтоомжид нэмэлт өөрчлөлт оруулах Засгийн газрын төлөвлөгөө.	Бага зэргийн үйл ажиллагаа шаардлагатай.	Одоогийн хууль, дүрэм журмууд ихэвчлэн цацраг идэвхит ашигт малтмал ба цацраг идэвхит изотопод чиглэсэн хандлагатай байгаа тул зарим нэмэлт өөрчлөлт шаардлагатай.	Төслийн ажлийг эхлүүлэхээс өмнө зохих нэмэлт өөрчлөлтийг хийх хэрэгтэй.
2.4. Хууль эрх зүйн хүрээний талаар оролцогч талуудтай зөвлөлдөх.	Маш их үйл ажиллагаа шаардлагатай.	Оролцогч талуудыг эцэслэн шийдээгүй байгаа ба тэдэнтэй Хууль эрх зүйн хүрээний талаар албан ёсоор зөвлөлдөөгүй байгаа.	Оролцогч талуудын эрх үүргийг хуулийн хүрээнд тодорхой болгох.

С. Хяналтын тогтолцоо

юм. 5-р хүснэгтэд хяналтын тогтолцооны үр дүнг харууллаа.

Хяналтын тогтолцооны үндсэн хэсэг нь тусгаар, өрсөлдөх чадвар бүхий хяналтын байгууллага

ХҮСНЭГТ 5. Хяналтын тогтолцоо

Нөхцөлүүд	Үнэлгээний статус	Ажиглалт	Цаашид анхаарлаа хандуулах
3.1. СРТХК-ын хяналтын тогтолцооны хэрэгцээ шаардлага болоод хамрах хүрээг судлаж харгалзан тусгай төлөвлөгөө боловсруулах хэрэгтэй.	Бага зэргийн үйл ажиллагаа шаардлагатай.	Одоогоор техникийн зөвлөх байгуулга байхгүй, мөн зөвшөөрөл олгох, хяналт шалгалт, дүрэм журам хэрэгжүүлэх баримт бичгүүдэд цөмийн төхөөрөмжийн тухай заалт бараг ороогүй.	Хяналтын байгууллагаас гадна техникийн талаас дэмжигч байгууллага байгуулах шаардлагатай. Хяналтын байгуулгынхаа хүчин чадал боломж бололцоо, үйл ажиллагааны чиглэл, хариуцлагыг тодорхой болгож хүчин чадлаа нэмэгдүүлэхэд анхаарах.

Д. Судалгааны реакторын ашиглалт

бүдүүвч байдлаар гаргасан боловч нарийвчилсан хэрэглээний жагсаалт ба оролцогчдыг эцсийн байдлаар тогтоогүй болох нь харагдаж байна.

6-р хүснэгтэд судалгааны реакторын ашиглалтын үнэлгээг харууллаа. Манай улсын хувьд судалгааны реакторын ашиглалтаа

ХҮСНЭГТ 6. Судалгааны реакторын ашиглалт

Нөхцөлүүд	Үнэлгээний статус	Ажиглалт	Цаашид анхаарлаа хандуулах
4.1. Оролцогч талуудыг тогтоох, зөвшилцөх.	Бага зэргийн үйл ажиллагаа шаардлагатай.	Оролцогч талуудын тоймлон гаргасан боловч нарийвчлалсан жагсаалт гараагүй.	Цаашид оролцогч талуудыг эцэслэн шийдэж, тэдэнтэй албан ёсоор зөвшилцөх.
4.2. Судалгааны реакторын хэрэглээний цар хүрээг судласан байх.	Бага зэргийн үйл ажиллагаа шаардлагатай.	Одоогийн шаардлагадаа үндэслэн боломжит хэрэглээг урьдчилсан байдлаар тодорхойлсон.	Судалгааны реакторын хэрэгцээгээ хангах боломжит чадалдаа үнэлгээ хийх.

4.3. Судалгааны реакторын ашиглалтанд оролцогч талуудын байнгын оролцоог тодорхойлох.	Маш их үйл ажиллагаа шаардлагатай.	Энэ талаар одоогоор зөвлөлдөөгүй байна.	4.3. Судалгааны реакторын ашиглалтанд оролцогч талуудын байнгын оролцоог тодорхойлох.
4.4. Бүсийн нутгийн болон олон улсын хамтын ажиллагааг авч үзэх	Маш их үйл ажиллагаа шаардлагатай.	Одоогийн байдлаар бусад улс орнуудтай ашиглалтын асуудлаар хийсэн тодорхой гэрээ хэлэлцээр байхгүй.	Цаашид судалгааны реакторын ашиглалтын талаар бүс нутгийн ба олон улсын түвшиний боломжит оролцогчдыг судлах.
4.5. Урьдчилсан төслийн үнэлгээний тайланг (PPAR) СРТХК-д танилцуулах.	Маш их үйл ажиллагаа шаардлагатай	Урьдчилсан үнэлгээ боловсруулж байгаа ч СРТХКхараахан байгуулагдаагүй байгаа.	СРТХК-ийг даруйхан байгуулах шаардлагатай.
4.6. Судалгааны реактор ба түүний дагалдах төхөөрөмжүүдийн үндэслэл нь СРТХК-оор хүлээн зөвшөөрөгдөх	Маш их үйл ажиллагаа шаардлагатай.	Дагалдах төхөөрөмжүүдийг хэрэглээнд үндэслэн судлаж байна.	Оролцогчдын хэрэгцээг тусгах хэрэгтэй ба хэрэгцээг эцэслэсний дараа тэдгээрийн техникийн үзүүлэлтийг тодорхой болгох хэрэгтэй.
4.7. Тогтвортой ашиглалтын талаар судалгааны реакторт зориулсан урьдчилсан стратеги төлөвлөгөөнд (PSP) тусгайлан заах	Маш их үйл ажиллагаа шаардлагатай	Одоогоор тодорхой авч үзсэн зүйл байхгүй. Урьдчилсан стратеги төлөвлөгөө нь тоног төхөөрөмж ба багаж хэрэгсэл, мэргэшсэн боловсон хүчин, зэргийг багтаасан байна.	Төхөөрөмжийн тогтвортой ажиллагааны талаар урьдчилсан стратеги төлөвлөгөөнд заавал авч үзэх хэрэгтэй.

Е. Хүний нөөц

7-р хүснэгтэд хүний нөөцийн хөгжлийн үр дүнг харууллаа. МУИС-ийн сургалтын хөтөлбөрийн дагуу цөмийн инженерчлэлийн баклавр магистр докторын түвшний мэргэжилтэнүүдийг жил бүр бэлтгэж байна. Мөн ОХУ, Япон, Солонгос зэрэг орнуудад тодорхой тооны мэргэжилтнүүдийг

бэлтгэж байна. Үр дүнгээс харахад мэргэшсэн боловсон хүчний чадавхийг сайжруулах улсын хэмжээний цогц бодлого шаардлагатай нь харагдаж байна.

Одоо үйл ажиллагаа явуулж байгаа байгууллагууд тус бүрдээ өөрсдийн хүний нөөцийн бодлоготой хэдий ч хоорондын нэгдсэн бодлого бүхий хамтын ажиллагаа сул байна.

ХҮСНЭГТ 7. Хүний нөөц хөгжил

Нөхцөлүүд	Үнэлгээний статус	Ажиглалт	Цаашид анхаарлаа хандуулах
5.1. Үндэсний хэмжээнд шаардагдах хүний нөөцийг хөгжүүлэх төлөвлөгөөтэй байх.	Бага зэргийн үйл ажиллагаа шаардлагатай.	Одоогийн байдлаар улсын хэмжээний нэгдсэн бодлого байхгүй цөмийн чиглэлээр үйл ажиллагаа явуулдаг байгууллагууд тус тусдаа өөрсдийн хүний нөөц дээр тулгуурлах ажиллаж байна.	ЦФСТ цөмийн инженерчлэлийн мэргэжилтнүүдээ мэргэшүүлэх тал дээрх анхаарч цогц сургалтын хөтөлбөрийг хэрэгжүүлэх, мөн цаашид хэрэгцээ нэмэгдэнэ гэдгийг анхаарах.
5.2. СР-ын төсөлд дэмжлэг үзүүлэхэд шаардагдах үндэсний хэмжээний мэдлэг, ур чадварыг ҮМТБ-аас тогтоож, СРТХК- ээр хүлээн зөвшөөрүүлсэн байх.	Маш их үйл ажиллагаа шаардлагатай.	Одоо үйл ажиллагаа явуулж байгаа байгууллагуудынхаа хүний нөөцөд хийсэн нэгдсэн үнэлгээ хийх.	Үе шат бүрд шаардагдах хүний нөөцийн үнэлгээг гаргаж, оролцогч байгууллагуудтайгаа хамтран улсын хэмжээнд нэгдсэн бодлогоор хүний нөөцдөө анхаарч, борлуулагч талтай хамтрасан сургалт хөтөлбөр зохион байгуулах.

IV. ДҮГНЭЛТ

Судалгааны реакторын төсөл хэрэгжүүлэх үндэсний байр суурийг бий болгох зорилгоор СРТХК баҮМТБ-ийг үүсгэн байгуулах анхны саналыг Монгол Улсын Их Сургуулийн харьяа ЦФСТ-өөс ЦЭК-д гаргасан.

Монгол Улсын цөмийн энергийн тухай хууль болон дүрэм журмууд голчлон цацраг идэвхит ашигт малтмал ба цацраг идэвхит изотопын зохицуулалтанд зориулагдсан байна. Иймд манай улс цөмийн төхөөрөмж барьж байгуулахын тулд цөмийн хууль эрхзүйн орчноо сайжруулж, тохирох нэмэлт өөрчлөлтүүдийг хийх шаардлагатай.

Манай улсын цөмийн болон цацрагийн хяналтын тогтолцоо 2015 онд өөрчлөгдөж, үндсэн хяналтын байгууллага нь мэргэжлийн хяналтын ерөнхий газрын харьяа цөмийн ба цацрагийн мэргэжлийн хяналтын хэлтэс болсон. Цөмийн ба цацрагийн мэргэжлийн хяналтын хэлтэс нь цацраг идэвхит үүсгүүрийн зөвшөөрөл, хяналт, дүрэм журам боловсруулах хэрэгжүүлэх зэрэг үйл ажиллагааг гүйцэтгэж байна. Одоогоор манай улсад техникийн зөвлөх байгууллага байхгүй, мөн зөвшөөрөл олгох, хяналт шалгалт хийх, дүрэм журам хэрэгжүүлэх баримт бичгүүдэд цөмийн төхөөрөмжийн тухай заалт ороогүй байгаа ба цаашид зарим нэмэлт өөрчлөлт хийхдээ энэ тал дээр анхаарах хэрэгтэй.

Урьдчилсан судалгаанаас харахад манай улсад судалгааны реакторыг сургалт судалгаа, эрүүл мэнд, хөдөө аж ахуй гэх мэт салбаруудад хэрэглэх тооцоо гаргаж оролцогч байгууллагуудыг тогтоох ажил хийгдэж байгаа ба эцэслэн шийдэгдээгүй байна. Зарим тодорхой болсон оролцогч байгууллагууд тэдгээрийн хэрэгцээнд үндэслэн дагалдах төхөөрөмжүүдийн судалгаа хийгдэж байна. Урьдчилсан стратеги төлөвлөгөөг боловсруулахдаа тоног төхөөрөмж ба багаж хэрэгсэл, мэргэшсэн боловсон хүчин, төслийн хэрэгжилтийн явц зэргийг багтаасан тогтвортой ажиллагааны асуулдлыг заавал авч үзэх хэрэгтэй.

ТАЛАРХАЛ

Энэхүү ажил нь Солонгос цөмийн аюулгүй байдлын институт (KINS) ба Солонгосын шинжлэх ухаан, технологийн дэвшилтэд институт (KAIST)-ийн хамтарсан магистрийн хөтөлбөрийн хүрээнд хийгдсэн болно. Энэхүү ажлыг гүйцэтгэхэд бүх талаар туслаж дэмжин судалгааны ажлыг удирдсан Солонгос цөмийн аюулгүй байдлын институтын реакторын

лицензийн салбарын судалгааны реактор барих төслийн менежер доктор Суанжэй Ким-д гүн талархал илэрхийлье.

АШИГЛАСАН МАТЕРИАЛ

- [1] Монгол Улсын төрөөс цацраг идэвхит ашигт малтмал болон цөмийн энерги ашиглах талаар баримтлах бодлого, УИХ, Улаанбаатар, Монгол Улс, 2009.
- [2] Цөмийн энергийн тухай хууль, УИХ, Улаанбаатар, Монгол Улс, 2009.
- [3] Судалгааны реакторын төслийн тусгай асуудлууд ба замыг зураглал, No. NP-T-5.1, ОУАЭА, Вена, 2012.
- [4] Судалгааны реакторын аюулгүй үйл ажиллагаа, NS-R-4, ОУАЭА, Вена, 2005.
- [5] Шинэ судалгаан реактор төслийг дэмжихэд зориулсан үндэсний цөмийн дэд бүтцийн үнэлгээ, ОУАЭА, Вена, 2016, (draft).

Бороон дахь микродолгионы унтралын шинж төрх

М. Батпүрэв¹, Ж. Нямжав^{2*}

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

²Электроник, холбооны инженерчлэлийн тэнхим, Хэрэгээний шинжлэх ухаан, Инженерчлэлийн сургууль, Монгол Улсын их Сургууль, Улаанбаатар, Монгол Улс

Сансарын болон газрын холбооны системд ашиглаж байгаа микродолгионыг унтраадаг сөрөг хүчин зүйлсийн нэг нь бороо юм. Бороо нь микродолгионы хувьд 0.1-ээс 7 хүртэлх мм диаметртэй, орон зайд тархан байрласан усны дуслууд юм. Микродолгионы мужид долгионы урт нь борооны дуслын хэмжээтэй жишихүйц болж ирдэг бөгөөд 30 мм болон түүнээс бага долгионы урттай микродолгионы унтралт мэдэгдэхүйц их, өөрөөр хэлбэл холбооны системийн ажиллагаанд муугаар нөлөөлөхүйц болдог. Бид микродолгионы уртын 3-30 мм (давтамжийн 10-100 ГГц) мужид микродолгионы унтралыг үүсгэж байгаа борооны дуслын сарнил болон шингээлтийг дуслын хэмжээ болон долгионы уртаас хэрхэн хамаарч байгааг Мигийн онолын хүрээнд тооцоо хийж судлав.

I. ОРШИЛ

Микродолгион саадыг тойрон тархах чадвар муу учир түүнийг ашигладаг радио холбооны станцуудыг шууд бие биеэ харахаар байршуулдаг бөгөөд энэ тохиолдолд радио холбооны тасралтгүй найдвартай ажиллагаа цас, бороо, манан, мөндөр, өтгөн үүлшилт, шороон шуурга гэх мэт цаг агаарын үзэгдлээс ихээхэн хамаардаг. Борооны дуслууд шингэн, дуслын хэмжээ нь микродолгионы урттай жишихүйц тул бусад цаг агаарын үзэгдэлтэй харьцуулахад микродолгионыг илүү унтраадаг [1]. Иймд микродолгионы радио холбооны системийн найдвартай тасралтгүй ажиллагааг хангахын тулд микродолгионд борооны үүсгэх унтралыг (цаашид борооны унтрал гэнэ) зайлшгүй тооцох шаардлагатай болдог. Ихэнхи судлаачид микродолгионы борооны унтралын онолын тооцоо хийхдээ сарнил болон шингээлт хоёрын нийлбэрээр илэрхийлэгддэг унтралыг шууд бодсон байдаг [1]. Иймд бид микродолгионы унтралын шинж төрхийг улам тодруулах үүднээс түүний бүрдүүлэгч хэсэг болох борооны дуслын сарнил болон шингээлийг тус тусад нь Мигийн онолоор бодож борооны дуслын хэмжээ болон микродолгионы уртаас хэрхэн хамаарч байгааг судлав.

II. МИКРОДОЛГИОНЫ ТАРХАЛТАНД БОРООНЫ ДУСАЛ НӨЛӨӨЛӨХ НЬ

Бороо нь радио долгионы хувьд агаарт тархан байрласан 0.1-ээс 7 мм хүртэлх диаметртэй усны унаж байгаа дуслууд юм. Унаж байгаа тул агаарын эсэргүүцлийн улмаас дуслын хэмжээ ихсэх тусам хэлбэр нь бөмбөрцөгөөс гажиж

хэвтээ зуйван болдог. Үүнээс гадна дуслууд дусал хоорондын мөргөлдөөн болон салхины нөлөөгөөр хэлбэлзэх хөдөлгөөнд ордог тул нэг ижил эзэлхүүнтэй борооны дуслууд өөр өөр хэлбэртэй болдог [3]. Микродолгионы борооны унтралд маш олон тооны борооны дуслууд оролцдог тул борооны нэг дуслын үүсгэх унтралыг тооцоолохдоо нэг ижил эзэлхүүнтэй дуслын дундаж хэлбэрийг авч үзэхэд хангалттай бөгөөд энэ хэлбэр нь бөмбөрцөгт ойрхон байдаг [4]. Борооны нийт унтрал борооны дусал бүрийн унтрал ба борооны дуслын хэмжээний түгэлтээс хамаардаг. Бид энэ ажлын хүрээнд зөвхөн борооны дуслын унтралыг авч үзлээ. Борооны дуслын үүсгэх микродолгионы унтралын шинж төрхийг судлахдаа борооны дуслыг бөмбөрцөг хэлбэртэй гэж үзэн Мигийн онолыг ашиглав. Борооны дуслууд микродолгионыг тархалтын чиглэлээс нь өөр зүгт сарниулахын зэрэгцээ өөртөө шингээж унтрал үүсгэдэг. Долгионы сарнилын онолд нэг дуслын унтралыг унтралын огтлол гэдэг хэмжигдэхүүнээр илэрхийлдэг бөгөөд энэ нь нэг дуслын унтраасан чадлыг түүнд туссан долгионы эрчимд харьцуулсан харьцаатай тэнцүү байна. Нэг дуслын унтралын огтлолыг дуслын геометр хөндлөн огтлолын талбайд хуваасныг дуслын унтраах чадвар гэдэг. Яг үүнтэй адилаар дуслын сарниулах ба шингээх чадварыг тодорхойлдог бөгөөд эдгээрийн нийлбэр унтраах чадвартай тэнцүү байна. [1,2]

III. БОРООНЫ ДУСЛЫН САРНИЛ

Борооны дусал микродолгионыг зүг бүрт тараан сарниулах ба энэ нь θ сарнилын өнцөгөөс хэрхэн хамаарч байгааг сарнилын

* Electronic address: nyamjav@seas.num.edu.mn

диаграммаар илэрхийлдэг. Сарнилын диаграммыг сарнилын хавтгай (сарнилын өнцөгийг агуулсан) болон түүнд перпендикуляр хавтгай дээр байгуулдаг бөгөөд энэ нь сарнилын далайцын функц гэж нэрлэгддэг $S_2(\theta)$ ба $S_1(\theta)$ -ийн квадратаар харгалзан илэрхийлэгдэнэ. Эдгээр сарнилын функц дараах хэлбэртэй байна [2]

$$\begin{aligned} S_1(\theta) &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(2n+1)}{n(n+1)} \left\{ a_n \frac{P_n(\cos(\theta))}{\sin(\theta)} + b_n \frac{dP_n(\cos(\theta))}{d\theta} \right\} \\ S_2(\theta) &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(2n+1)}{n(n+1)} \left\{ a_n \frac{dP_n(\cos(\theta))}{d\theta} + b_n \frac{P_n(\cos(\theta))}{\sin(\theta)} \right\} \end{aligned} \quad (1)$$

энд θ – сарнилын өнцөг. P_n – Лежандрийн өргөтгөсөн олон гишүүнт ба a_n , b_n – Мигийн коэффициент бөгөөд үүнийг Matlab орчинд програмчлахад дөхөмтэй, матриц байдлаар

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \psi_{n-1}(q) & -\psi_n(q) \\ \zeta_{n-1}(q) & -\zeta_n(q) \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ n+m\xi_n & n+\frac{\xi_n}{m} \end{bmatrix} \quad (2)$$

$$a_n = \frac{a_{11}}{a_{21}}; \quad b_n = \frac{a_{12}}{a_{22}}$$

гэж бичиж болно. Энд ψ_n ба ζ_n – харгалзан Риккати-Бесселийн ба Риккати-Нейманы функц, m – усны хугарлын илтгэгч, $q = \pi D / \lambda$ – борооны дуслын хэмжээний параметр, D – борооны дуслын диаметр ба λ – микродолгионы урт, $\xi_n = \psi'_n(mq) / \psi_n(mq)$ болно.

Микродолгионы мужид усны хугарлын илтгэгчийг илэрхийлдэг хэд хэдэн загвар байдаг бөгөөд бид Рейгийн загварыг ашиглав [5].

$$m = \sqrt{\varepsilon(\lambda, t^0)}; \quad \varepsilon(\lambda, t^0) = \varepsilon_0 + \frac{\varepsilon_s(t^0) - \varepsilon_0}{1 + i \frac{c}{\lambda \tau(t^0)}} \quad (3)$$

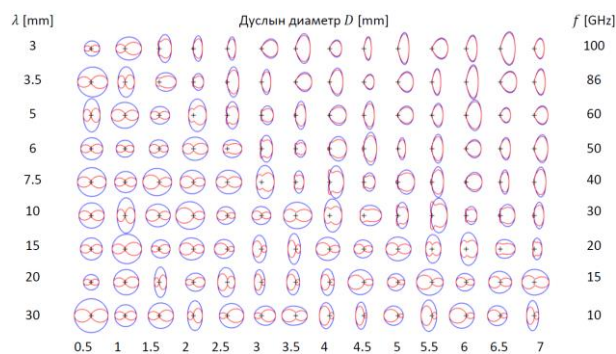
$$\varepsilon_0 = 5.5$$

$$\varepsilon_s(t^0) = 88.2 - 0.408 t^0 + 0.0008 t^{0^2}$$

$$\tau(t^0) = 8.395 + 0.4632 t^0 + 0.0051708 t^{0^2}$$

Бид борооны дуслын сарнилын диаграммыг 3-30 мм (100-10 ГГц давтамжийн) долгионы уртын мужид бодож Зураг 1-д харуулав. Сарнилын хавтгай дээрх сарнилын диаграммыг улаан өнгөөр, түүнд перпендикуляр хавтгай дээрх сарнилын диаграммыг хөх өнгөөр харуулав.

Сарнилын хавтгайд хэвтээ наймын тоотой төстэй түүнд перпендикуляр хавтгайд дугуй хэлбэртэй сарнилын диаграмм нь Релейн буюу диполийн сарнил болохыг харуулдаг.



Зураг 1. Борооны дуслын сарнилын диаграмм.

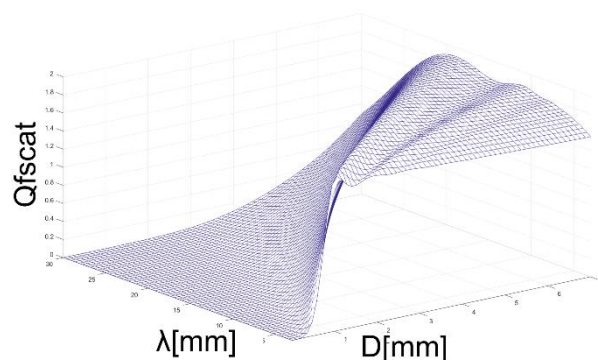
Зураг 1-ээс харахад дуслын хэмжээ долгионы уртаас олон дахин бага ($D < 1$ мм) мужид цэвэр диполийн буюу Релейн сарнил болж байгаа нь харагдаж байна. Долгионы уртын $15 < \lambda < 30$ мм мужид дуслын хэмжээ томрох тусам сарнилын диаграмм эхлээд гэдрэг чиглэлд (тархалтын эсрэг чиглэлд) дараа нь шууд чиглэлд илүү цүлхийж байна. Гэдрэг чиглэлд цүлхийсэн хэсэгт диэлектрик резонансийн шингээлт ажиглагдаж байгаа нь дуслын шингээх чадварын тооцооноос харагдсан болно. Харин долгионы урт үүнээс цааш бага болох $10 > \lambda > 3$ мм мужид дуслын хэмжээ томрох тусам туссан долгион шууд чиглэлдээ сарних нь ихсэж улмаар хоёр хавтгай дээрх долгионы сарнил адилхан болж байна. Үүнийг Мигийн үзэгдэл гэж нэрлэдэг.

Сарнилын өнцөгийн 0° (шууд) болон 180° (гэдрэг) чиглэл дэх дуслын сарниулах чадварыг

$$Q_{\text{шүүд}} = \frac{2}{q^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) (|a_n|^2 + |b_n|^2) \quad (4)$$

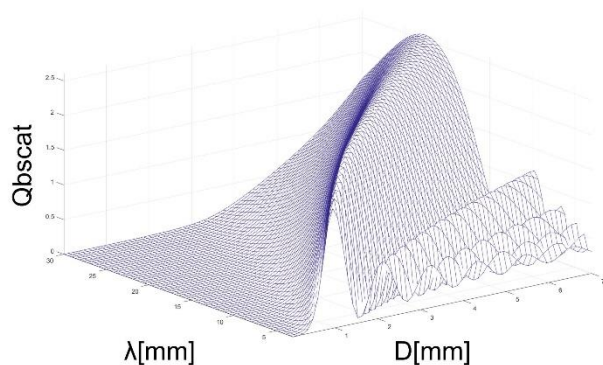
$$Q_{\text{гэдрэг}} = \frac{1}{q^2} \left| \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) (-1)^n (a_n - b_n) \right|^2$$

томъёогоор бодож зураг 2 ба 3-д харуулав.



Зураг 2. Борооны дусал микродолгионыг шууд чиглэлд сарниулах чадвар.

Эндээс харахад борооны дуслын шууд чиглэлд сарниулах чадвар долгионы урт бага байх тусам дуслын хэмжээнээс хамаарч хурдан өсч тогтворжсон утгадаа бага зэрэг хэлбэлзэн дөхөж байна.



Зураг 3. Борооны дусал микродолгионыг гэдрэг чиглэлд сарниулах чадвар.

Харин борооны дусал микродолгионыг гэдрэг чиглэлд сарниулах чадвар долгионы урт бага байх тусам дуслын хэмжээнээс хамаарч маш хурдан өсөөд эргээд хурдан буурч хэлбэлзэж байна. Өөрөөр хэлбэл борооны гэдрэг сарнил борооны дуслыг хэмжээг сонгож 'хардаг' байна. Иймд радарын мэдээллээс борооны дуслын хэмжээг үнэлэхдээ үүнийг зайлшгүй тооцох шаардлагатай.

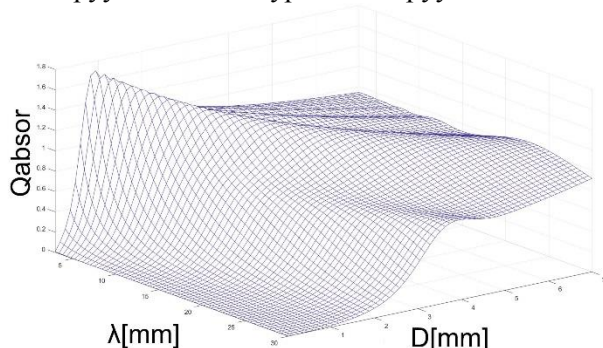
IV. БОРООНЫ ДУСЛЫН ШИНГЭЭЛТ

Борооны дуслын микродолгионыг шингээх чадварыг унтраах чадвараас сарниулах чадварыг хасаж олж болно.[2] Дуслын унтраах чадварыг

$$Q_{\text{унт}} = \frac{2}{q^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \text{Re}(a_n + b_n) \quad (5)$$

$$Q_{\text{шинг}} = Q_{\text{унт}} - Q_{\text{сарн}}$$

Борооны дуслын микродолгионыг шингээх чадварыг 3-30 мм (100-10 ГГц давтамжийн) долгионы уртын мужид дуслын хэмжээнээс хамааруулан бодож Зураг 4-д харуулав.



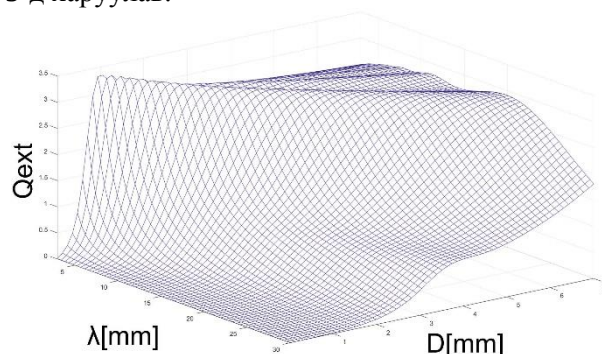
Зураг 4. Борооны дусал микродолгионыг шингээх чадвар.

Энд долгионы уртын (15-30) мм буюу усны хугарлын илтгэгчийн бодит хэсэг их байх мужид диэлектрик резонансийн шингээлт илэрч байна. Энэ мужид борооны дусал доторхи дотоод бүрэн ойлтын коэффициент их болж улмаар $q \cdot \text{Re}\{m\} = \pi$ буюу $D = \lambda / \pi \text{Re}\{m\}$ нөхцлийг хангах диаметртай дуслын дотор микродолгионы зогсонги долгион үүсэх нөхцөл бүрдэж дусалд долгион

шингээгдэнэ. Хэрэв хугарлын илтгэгч цэвэр бодит бол зогсонги долгион огт унтрахгүй маш хүчтэй резонансын шингээлт үүсгэдэг. Харин усны хувьд түүний дамжууллаас (хугарлын илтгэгчийн хуурмаг хэсгээс) болж зогсонги долгион унтарсанаар резонансын шингээлт хүчтэй биш илэрч байна. Ерөнхийдээ микродолгионы урт багасах тусам дуслын хэмжээнээс хамааран хурдан өсч хамгийн их утгадаа хүрээд бууран бага зэрэг хэлбэлзээд тогтворжиж байна.

V. БОРООНЫ ДУСЛЫН УНТРАЛ

Борооны дуслын микродолгионыг унтраах чадвар шууд сарниулах ба шингээх чадварын нийлбэртэй тэнцүү байдаг бөгөөд түүнийг Зураг 5-д харуулав.



Зураг 5. Борооны дусал микродолгионыг унтраах чадвар.

Борооны унтрал бага байгаа мужид Релейн сарнил ($q \ll 1$), харин унтрал их байх мужид Гюйгенс-Кирхгофын дифракцийн сарнил ($q \gg 1$) ажиглагдаж байна. Унтрал өсч байгаа завсрын мужид Мигийн сарнил байна. Долгионы уртын 3-30 мм буюу давтамжийн 10-100 ГГц цараанд борооны дуслын хэмжээнй параметр q нь 0.02-7.33 хооронд байх учир радиодолгион борооны дуслаас сарних бодлогыг (4, 5) томъёогоор бодохоос өөр аргагүй юм. Энэ нийлбэр хугарлын илтгэгчтэй комплекс байх тохиолдолд удаан нийлдэг учир үүнийг бодохдоо ядаж q хүртэлх эрэмбийн гишүүдээр нийлбэр авах шаардлагатай [1,2]. Бид 20 гишүүнээр нийлбэр авсан болно.

VI. ДҮГНЭЛТ

Борооны дусал микродолгионы унтралыг үүсгэх үндсэн гурван механизм ажиглагдаж байна. Үүнд:

1. $q < 0.25$ байхад нийт унтрал зөвхөн шингээлтээс үүсэх ба долгионы уртаас бараг хамаарахгүй бага байна. Энэ мужид Мигийн коэффициентээс a_1 буюу цахилгаан диполийн цацаргалтын далайцыг илэрхийлдэг коэффициент

- хамгийн их утгатай болж унтраах чадварыг дангаараа илэрхийлдэг байна. Энэ нь Релейн сарнилийн муж юм.
2. $0.25 < q < 0.5$ байхад сарнилийн нөлөө ихсэж байгаа боловч диэлектрик резонансын шингээлт давамгайлж байна. Энэ мужид Мигийн коэффициентээс b_1 буюу соронзон диполийн цацаргалтын далайцыг илэрхийлдэг коэффициент хамгийн их утгатай болж унтраах чадварыг дангаараа илэрхийлдэг. Энэ мужид мөн диэлектрик резонанс ажиглагдана.
 3. $q > 0.5$ мужид сарнилийн унтралд оруулах хувь нэмэр ихсэж $q=1$ орчимд сарнил шингээлт хоёр тэнцэж ирээд түүнээс цааш сарнил давамгайлах болж байна. Энэ мужид унтралын огтлолд Мигийн дээд эрэмбийн коэффициентуудын оруулах хувь нэмэр ихсэх учир энэ Мигийн сарнилын муж болно.

VII. НОМ ЗҮЙ

- [1] Medeiros Filho, F., S., Cole, R., S., Sarma, A., D., “Millimetre Wave Rain Induced Attenuation: Theory and Experiments”, IEEE Proc., 1986, 133, (4) pp 308-314.
- [2] Van De Hust, H.C. “Light Scattering by Small Particles” New York, Wiley. 1957.
- [3] Kenneth V. Beard, V.N. Bringib, M. Thurai “A new understanding of raindrop shape” Atmospheric Research, Volume 97, Issue 4, September 2010, Pages 396–415
- [4] Miklós Szakall, Subir K. Mitra, Karoline Diehl, Stephan Borrmann. “Shapes and oscillations of falling raindrops - A review”, Atmospheric Research, Volume 97, Issue 4, September 2010, Pages 416–425.
- [5] Liebe, H.J, G.A. Hufford and T. Manabe. “A model for the complex permittivity of water at frequencies below 1 THz.” Int. J. IR & MM, V.12, pp659-674, 1991.

Цэгэн дефект бүхий усанболорын электрон бүтцийн судалгаа

Н.Төвжаргал^{1,*}, Ж.Даваасамбуу¹, Д.Баатархүү², Н.Цогбадрах¹

¹Монгол Улсын Их Сургууль, Шинжлэх ухааны сургуулийн
физикийн тэнхим, Улаанбаатар хот 210646, Монгол улс

²Монгол Улсын Их Сургуулийн Цөмийн физикийн судалгааны төв, Монгол улс

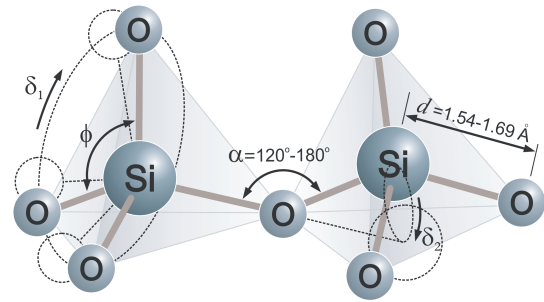
Янз бүрийн үнэт болон хагас үнэт чулууны өнгийг өөрчилж хүссэн өнгө хэлбэрт оруулах асуудал үргэлж судлаачид төдийгүй хэрэглэгчдийн сонирхлыг татаж байдаг. Байгалийн хагас үнэт чулуу болох усанболорыг гамма цацрагаар шарахад цацраг бодисын харилцан үйлчлэлийн дүнд түүнд олон тооны дефект үүссэнээс материалын оптик шинж чанар өөрчлөгдөж өнгөний хувиралд ордог. Энэ өнгөний өөрчлөлтийг атомын төвшинд тайлбарлах нь шинжлэх ухаан болон технологид чухал ач холбогдолтой. Иймд бид энэ ажлаар усанболор (SiO_2)-т гамма цацрагийн үйлчлэлээр үүсэж болох цэгэн дефектүүд болох нейтрал хүчилтөрөгчийн нүх, Френкелийн хос дефект зэргийг үүсгэж түүний электрон бүтэцэд хэрхэн нөлөөлөхийг *ab-initio* квант механикийн аргаар CRYSTAL14 программ ашиглан судлав.

PACS numbers: 42.70.Ce, 61.80.-x, 61.72.J-, 31.15.A-

I. Удиртгал

Байгалийн үнэт болон хагас үнэт чулуунуудыг гоёл чимэглэл, ахуйн зориулалтаар өргөн хэрэглэдэг. Зарим байгалийн хагас үнэт чулуунуудыг гамма (γ) цацрагаар шарахад тэдгээр нь өнгөний хувиралд ордог[1]. γ цацраг хатуу биетэй харилцан үйлчлэхэд тэнд цацрагийн энергиэс хамааран Комптоны сарнил, фото-цахилгаан эффект, электрон позитроны хос үүсэх гэх мэт үзэгдлүүд явагдах боломжтой. Эдгээр үзэгдлүүдийг дагалдан явагдаж байгаа олон процессуудын дүнд дээжийн өнгө хувирч байгаа болно. Энд үүсэж байгаа өнгөний хувирлын үүсэл шалтгааныг тайлбарлах нь чухал ач холбогдолтой. Ийм өнгөний хувиралд ордог хагас үнэт чулуу болох болор нь байгаль дээр усан болор, утаат болор, сүүн болор гэж нэрлэгдэх хэлбэрүүдээр элбэг тохиолддог. Усанболор (SiO_2) –ын үндсэн бүтэц нь SiO_4 тэтреадрийн юм [2]. Тэтреадрийн дөрвөн гурвалжин талаас тогтох олон талт бөгөөд тэдгээр нь гурав гурваараа оройгоороо холбогдоно. Энд дөрвөн хүчилтөрөгчийн атом нь нэг нэгээрээ тэтреадрийн оройнууд дээр байрлах бөгөөд нэг цахиурын атом тэтреадрийн төвд байрлана. SiO_4 тэтреадрийн бүтцийг зураг.1-д үзүүлэв.

Цахиурын атомын электрон бүтэц нь sp^4 орбитал дээр байрлах валентын 4 электронтой бөгөөд 3p орбитал холбоост орсон атомуудаас дөрвөн электроныг хуваалцаж аваад гадаад бүрхүүл нь бүрэн дүүрэх боломжтой болно. Хэрэв нэг цахиурын атомын эргэн тойронд дөрвөн хүчилтөрөгчийн атом байрлаж байвал хүчилтөрөгчийн атом бүр гадаад бүрхүүлийн нэг электроноо цахиурын атомд алдаад хүчилтөрөгчийн гадаад бүрхүүл бүрэн дүүрч



Зураг 1: Цэвэр усанболорын (SiO_2)-ийн гурван хэмжээст бүтэц. Бүтэц нь дараах параметруудээр тодорхойлогдоно. Үүнд Si-O холбоосны урт (d), тэтреадрийн өнцөг (ψ), тэтреадруудын дотоод холбоосны өнцөг (α), холбоосны мурийлтын өнцөг (δ_1, δ_2)[3].

тогтвортой бүтэц үүсэх боломжтой. Үүний үр дүнд $\text{Si}^{+4}\text{O}_2^{-2}$ силикатын кристалл бүтэц бүрэлддэг. Хүчилтөрөгчийн хувьд гадаад бүрхүүлд үлдсэн нэг электрон нь өөр цахиурын атомуудтай холбогдон бусад тэтреадруудыг үүсгэнэ. Тэтреадрууд нь хоорондоо хүчилтөрөгчийн атомуудаар холбогдоно. Хэрэв тэтреадрууд хоорондоо холбогдоогүй тус тусдаа оршин байвал энэ төрлийн материалыг незосилкатын гэдэг. Хэрэв хоёр тэтреадрийн хоорондоо шууд холбогдсон байвал сорасилкатын материал гэнэ. Хэрэв бүх тэтреадрууд буцаад бие биетэйгээ битүү цагираг үүсгэн холбогдсон байвал циклосилкатын материал болно. SiO_2 –ийн холбоос бол комплекс шинж чанартай. Si-O холбоосийн энерги (4.5эВ) Si-Si холбоосийн энерги (2.3эВ) –тэй харьцуулахад маш их ба иймээс Si-O холбоос нь 50:50 хувийн ионы ба ковалент хосолсон шинжтэй[4]. Ихэнх тохиолдолд SiO_4 тэтреадрийн бол маш хатуу бат бөх бүтэц байдаг.

Усанболорыг γ -цацрагаар шарахад түүний өнгө

*Electronic address: tuvjargal@num.edu.mn

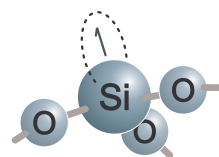
өөрчлөгдөн утаат болор болдог нь цацраг бодисын харилцан үйлчлэлийн дүнд кристаллд олон янзын урвал процессууд явагдсаны дүнд үүсэх эффектүүдтэй холбоотой. Эдгээр эффектүүдийн нэг нь цэгэн дефект юм [5]. Цэгэн дефектүүд нь үүсгэж байгаа шалтгаанаасаа хамаараад олон янз байх боломжтой. Цэгэн дефектүүд нь эгэл торд атомын шилжилт үүсэх, атомуудын холбоос тасрах болон гаднын өөр хольцын атомууд орж ирснээс шалтгаалан атомын бүтцэд гажилт үүсгэдэг [6]. Цэгэн дефектүүдийг тэдгээрийн электроны конфигурацид нь үндэслэн хослоогүй электронуудаас тогтож байвал *парасоронзон* дефект, бусад тохиолдлуудыг нь *диасоронзон* дефект гэж ангилдаг.

II. Усан болорын хувийн дефектүүд

Усанболорт үүсэж байгаа дефектүүд нь түүний бүтэц, цахилгаан болон оптик шинж чанаруудад илэрхий өөрчлөлтүүдийг үзүүлдэг. Үйлдвэрлэлийн процесс, цацрагийн үйлчлэл, механик хүчлэг, температур болон даралтын өөрчлөлт, хольц зэргээс шалтгаалан маш олон янзын дефект үүсэх боломжтой. Гэвч нийтлэг тохиолдолд дефект нь цэгэн, шугаман болон хавтгай дефект байдаг[7]. Цэгэн дефектүүдийг хувийн (intrinsic) болон гадны (extrinsic) гэж ангилдаг. Хувийн цэгэн дефект нь зөвхөн өөрийн үндсэн атомуудын оролцоотойгоор үүсдэг өөрөөр хэлбэл нүх үүсэх (үндсэн атом сугарч нүх үүсэх, Schotky defect эсвэл Frenkel хос үүсэх) болон өөрийн завсар суух (өөрийн нэмэлт атом завсрын байрлалд суух) зэрэг болно. Гадны цэгэн дефект нь тухайн кристаллын үндсэн атомуудаас өөр атом гаднаас хольц хэлбэрээр суухад үүсэх болно. Цэвэр усанболорын хувьд хүчилтөрөгч болон цахиурын нүх үүсэх, тэдгээрийн атомууд өөрийн завсар суух болон Si-Si ба O-O холбоос тасрах зэрэг дефект үүсэх боломжтой. Si-O холбоосийн энерги их (4.5eV) тул химийн өгөршил болон зэврэлтэд тэсвэртэй байдаг[8]. Түүнчлэн хатуу (Mohs' hardness 7), хэврэг болон маш өндөр хайлах температуртай (1710°C) байдаг[9]. Энергийн хориотой бүсийн өргөн 9eV орчин байдаг тул оптик шинж чанарын хувьд тунгалаг, цахилгаан дамжуулалт муу байдаг[10]. Ерөнхийдөө, Si-Si ба O-O холбоо нь цахилгаан саармаг боловч холбоос тасрах үед эерэг цэнэг баригч нүхнүүд үүсэх болно. Эдгээр харьцангуй чөлөөтэй цэнэгүүд нь диасоронзон болон парасоронзон дефектүүдийг үүсгэнэ. Бүх тогтвортой парасоронзон дефектүүд нь оптик шингээлтийн бүсэд нөлөөлөх учраас тэдгээр хагас дүүрсэн энергитэй төлөвүүд валентын бүсийг шилжүүлэх болон электроныг дамжуулалтын бүсэд шилжүүлэх зэрэг аль аль нь боломжтой.

Цэгэн дефектүүд

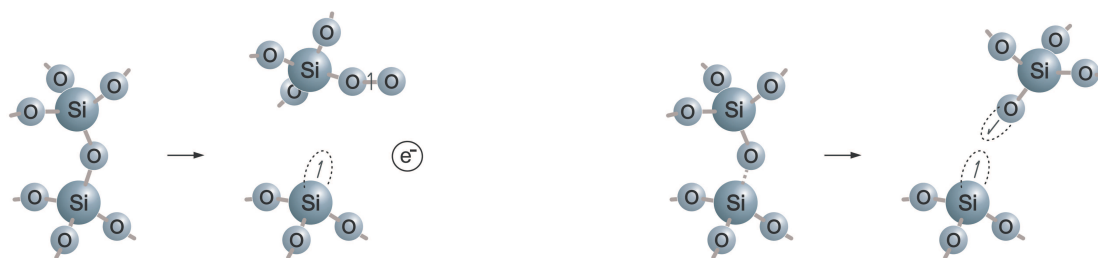
Хувийн цэгэн дефектүүд нь үүсгэж байгаа шалтгаанаасаа хамаараад олон янз байх боломжтой. Цэгэн дефектүүдийн жишээ гэвэл: нүх үүсэх (торын зангилаа цэгт атом алга болох), завсрын (торын зангилаа биш завсарт атом байрлах) болон валентын ($Si - O$ холбоос эвдрэх) дефектүүд болно. Усанболорт үүсэх цэгэн дефектүүд нь дараах хэлбэрүүдтэй байна. Үүнд: нейтрал хүчилтөрөгчийн нүх [11]: $O \equiv Si - Si \equiv O$, перокси гүүрэн: $O \equiv Si - O - O - Si \equiv O$, гүүрэн биш хүчилтөрөгчит: $O \equiv Si - O^\bullet$, гурван координаттай цахиуран: $O \equiv Si^\bullet$ (ихэвчлэн E' төв гэж нэрлэдэг), хоёрлосон координаттай цахиуран: $O = Si^{\bullet\bullet}$. Эдгээр дефектүүд нь электрон эсвэл нүхийг барих зарим энергийн төлөвүүдийг үүсгэдгийг тэмдэглэх хэрэгтэй. Энд $\bullet$ -ээр холбоос нь эвдэрсэн хослоогүй электроныг дүрслэв. Цэгэн дефектийн үндсэн болон өдөөгдсөн электроны төлөвүүд нь усанболорын хаалттай бүсийн энергиэс бага энергийн завсартай байна. Иймээс $O \equiv Si - O^\bullet$ болон $O \equiv Si^\bullet$ дефектүүдийг валентын болон дамжуулалтын бүсийн хооронд байрлах төлөвүүдтэй холбоотой үүсдэг тул эвдэрсэн холбоосон төлөв гэж нэрлэдэг. Цахилгаан соронзон долгионы үйлчлэлээр үүсэж байгаа электроны төлөвийн шилжилттэй холбоотой дефектүүд тухайн материалын шингээлтийн болон цацаргалтын бүсийн энергийн завсарыг өөрчлөгдөх бөгөөд энэ нь тухайн материалын тунгалаг чанар өөрчлөгдөх шалтгаан болдог. Энд SiO_2 -ийн парасоронзон дефектийн нэг болох E' -төвийг электроны парасоронзон резонансын (ЭПР) спектрометр ашиглан тэртээ 50 гаран жилийн өмнө хэмжсэн байдаг[12]. ЭПР спектрээр хэт нарийн бүтцийн судалгаанаас E' -төв гэдэг нь голд нь цахиурын атом байрласан тэтраэдрийн оройнууд дээр суусан хүчилтөрөгчийн атомуудын гурав нь Si -тэй холбоотой нэг нь тасарсан хослоогүй электроноос бүрдэг болохыг мэдэх билээ [13]. E' -төв дефектийн ерөнхий хэлбэрийг зураг.2-т үзүүлэв. Энэ дефектийг $\equiv Si^\bullet$ гэж тэмдэглэдэг бөгөөд энд параллель шугамууд нь цахиуртай холбогдсон хүчилтөрөгчийн 3 холбоосыг илэрхийлж байгаа бол цэг нь хослоогүй электроныг илэрхийлнэ. ЭПР судалгаанаас



Зураг 2: E' -төв дефектийн загвар .

үзэхэд цацрагийн үйлчлэлд орсон SiO_2 -ийн хувьд E' -төвийн хэд хэдэн ялгаатай хэлбэрүүд үүсдэг[14]. Эдгээр E' -төвүүд нь цацрагийн үйлчлэлийн горим, дулааны боловсруулалт, тухайн материал дэх усны агууламж зэргээс хамаараад өөр өөр байна. Үндсэндээ дөрвөн төрлийн E' -төв байдаг тогтоосон бөгөөд

тэдгээрийг E'_α , E'_β , E'_γ , E'_s гэж тэмдэглэдэг[15]. E'_α хэлбэрийн дефект нь гамма цацрагийн үйлчлэлээр явагдах радиолитик процессийн дүнд $\equiv \text{Si}-\text{O}-\text{Si} \equiv$ холбоос дэх хүчилтөрөгчийн атом өдөөгдөөд тодорхой энергитэй болсноор химийн холбоос тасарсны дүнд үүснэ[16]. Зураг.3-т E'_α дефект үүсэх процессыг үзүүлэв.



Зураг 3: Цэвэр SiO_2 -т E'_α төв үүсэх схем. Сумтай шулуунаар хослоогүй электроны спин ба тасархай шугамаар түүний орбиталийг үзүүлэв.

Зураг.3 –д үзүүлсэн хүчилтөрөгч-хүчилтөрөгч ($\text{peroxy} \equiv \text{Si}-\text{O}-\text{O}$) холбоос харьцангуй тогтвортой төлөв болохыг онолын судалгаагаар үзүүлсэн байдаг[17][18]. Энд $\bullet\text{O}-\text{Si} \equiv$ гэж тэмдэглэгдсэн нь гүүрэн биш хүчилтөрөгчийн нүхэн төв (NBOHC) бөгөөд ЭПР судалгаанаас үзэхэд энэ төрлийн дефект цацрагийн үйлчлэлээр мөн үүсэх боломжтой. Иймээс бид гамма цацрагийн үйлчлэлээр усанболорт үүсэх зарим хувийн цэгэн дефектүүдийг үүсгэж түүний электрон бүтэц, хориотой бүсийн өргөнд хэрхэн нөлөөлөхийг *ab-initio* квант механикийн аргаар CRYSTAL14 програм[19] ашиглан судлах зорилготой.

III. Тооцооны програм болон арга

CRYSTAL код нь электроны долгионы функц, үндсэн төлөвийн энерги, энергийн градиент болон шинж чанарын *ab-initio* квант механикийн тооцооллыг гүйцэтгэдэг бөгөөд Хартре-Фок эсвэл Кохн-Шамийн гамельтониануудыг хэрэглэдэг. Уг программ нь кристаллын бүх симметрийн хувьд квант механикийн тооцоог хийж хувийн утга болон хувийн функцийг олсоноор дараах физик шинж чанаруудыг онолоор тооцоолох боломжийг олгодог. Үүнд материалын электрон бүтэц, дефект, соронзон болон диэлектрик шинж чанар, хэлбэлзэлийн давтамж, фононы дисперс, харимхай, пьезоцахилгаан болон фотоцахилгаан шинж чанар гэх мэт олон шинж чанаруудыг

тооцоолох боломжтой. Ингэхийн тулд тухайн судлах системийн геометр болон симметрийн өгөгдөлүүд мөн түүнд орж байгаа атомуудын базис олонлогууд, тоон тооцооны нарийвчлал зэргийг агуулсан оролтын файлыг бэлдэж өгөх шаардлагатай.

Хатуу биеийн физикийн судалгаанд ихэвчлэн хоёр өөр төрлийн *ab-initio* үелэх гамильтонианы фракцуудыг хэрэглэдэг. Энэ нь Хартре-Фок болон Нягтын функцийн аргууд юм. Нягтын функцийн аргад электрон электроны харилцан үйлчлэлийн хэсэгт корреляцын болон солилцолын энергийг ойролцоолох аргаар тооцож боддог бол Хартре-Фокийн аргад электроны солилцолын энергийг тооцдог боловч корреляцын хэсгийг үл тооцдог. Бид энэ ажлыг нягтын функцийн арга (DFT) ашиглан тооцоолсон бол атомын орбиталаар GTO (Gaussian type functions) авсан ба энэ нь бодит хатуу биеийн сфер гармоникийг Гауссын функцээр үржүүлсэн функц юм. Түүнчлэн гамильтонианаар B3LYP (Becke -ийн гурван-параметрт солилцолын функц[20] болон шугаман биш Lee-Yang-Parr корреляцын функц[21]) -ийг хэрэглэсэн. Тооцооны нарийвчлалыг сайжруулахын тулд $2x2x2$ хэмжээст супер тор дээр тооцоог гүйцэтгэв.

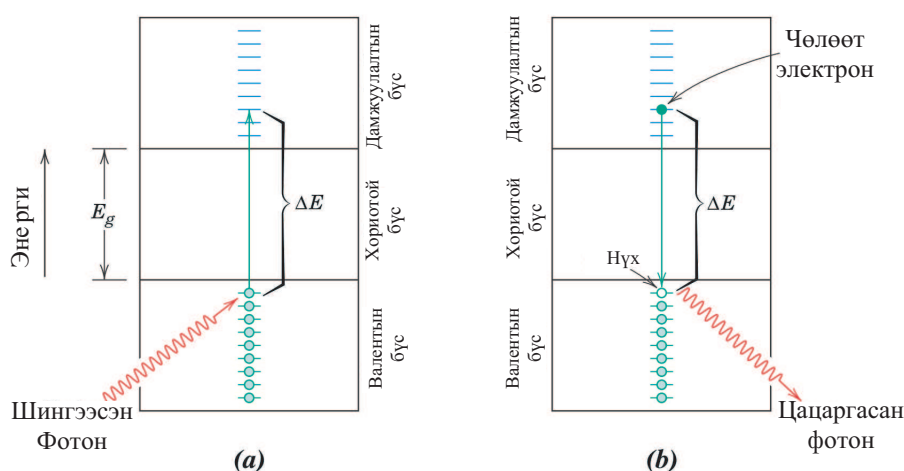
IV. Тооцооны үр дүн

Металл биш материалууд нь түүний электрон бүтцээс хамааран үзэгдэх гэрлийн

мужид ихэвчлэн тунгалаг байдаг. Түүнчлэн, гэрлийн ойлт, шингээлт, хугарал болон нэвтрэлтийг авч үзэх хэрэгтэй. Электроны зоны бүтэц болон төлөвийн нягт нь материалын оптик шинж чанарыг тодорхойлох үндсэн ойлголтууд юм[22].

Материалын электрон бүтцийг судалснаар түүний хаалттай бүсийн өргөн, электрон бүтцэд атомуудын үзүүлж байгаа нөлөө зэргийг тодорхойлох боломжтой. Материалын гэрлийн цацрагийн шингээлтэд электроны туйлшрал болон валентын болон дамжуулалтын бүсийн

хооронд электрон шилжих гэсэн үндсэн хоёр механизм нөлөөлдөг. Үндсэндээ материалын электрон бүтцээс хамаарна. Дүүргэгдсэн валентын бүс дэх электронууд гэрлийн фотоны өдөөлтөөр хориотой бүсийг давж хоосон дамжуулалтын бүсэд шилжихдээ гэрэл шингээдэг бөгөөд энэ процессын загварыг зураг.4 -д үзүүлэв. Үүний дүнд дамжуулалтын бүсэд чөлөөт электрон, валентын бүсэд нүх үүсдэг. Өдөөлтийн энерги ΔE нь шингээсэн фотоны давтамжтай $\Delta E = h\nu$ гэсэн хамааралтай.



Зураг 4: (a) Металл биш материалын фотоны шингээлтийн механизм. Энд өдөөгдсөн электрон хориотой бүсийг давахад валентын бүсэд нүх үүснэ. Шингээсэн фотоны энерги ΔE нь хориотой бүсийн энерги E_g -ээс их байх шаардлагатай. (b) Өдөөгдсөн төлөвөөс хориотой бүсийг давж шилжсэн электрон гэрлийн фотон цацаргана.

Электроныг өдөөж байгаа фотоны энерги нь хориотой бүсийн энерги E_g -ээс их байх хэрэгтэй.

$$h\nu > E_g, \quad (1)$$

буюу долгионы уртаар илэрхийлбэл,

$$\frac{hc}{\lambda} > E_g. \quad (2)$$

Үзэгдэх гэрлийн хамгийн бага долгионы урт $\lambda(min)$ нь $0.4\mu\text{м}$, гэрлийн хурд $c = 3 \cdot 10^8 \text{м/с}$, Планкийн тогтмол $h = 4.13 \cdot 10^{-15} \text{эВ}\cdot\text{с}$ болохыг тооцон үзэгдэх гэрлийг шингээж болох хамгийн их хориотой бүс $E_g(max)$ -ийг тооцох боломжтой.

$$E_g(max) = \frac{hc}{\lambda(min)} = 3.1\text{эВ} \quad (3)$$

Өөрөөр хэлбэл, металл биш материалын хориотой бүсийн энерги 3.1эВ -аас их бол үзэгдэх гэрэл шингээхгүй гэсэн үг бөгөөд хэрэв ийм материал өндөр цэвэршилтэй байвал өнгөгүй тунгалаг байна. Мөн үзэгдэх гэрлийн хамгийн их долгионы урт $\lambda(max)$ нь $0.7\mu\text{м}$ болохыг тооцон үзэгдэх гэрлийг шингээж болох хамгийн бага хориотой бүс $E_g(min)$ -ийг тооцвол,

$$E_g(min) = \frac{hc}{\lambda(max)} = 1.8\text{эВ}. \quad (4)$$

Эндээс үзэхэд, хориотой бүсийн энерги нь 1.8эВ -аас бага байх хагасдамжуулагч материалуудын хувьд валентын бүсээс дамжуулалтын бүсэд электрон шилжихдээ бүх үзэгдэх гэрлийг шингээх бөгөөд эдгээр материалууд нь тунгалаг биш байдаг. Хориотой бүсийн энерги нь 1.8эВ

-аас 3,1эВ -ийн хооронд байх материалуудын хувьд үзэгдэх гэрлийн тодорхой спектрийн мужид гэрлийг шингээх бөгөөд янз бүрийн өнгөтэй байх боломжтой.

Бид энэ ажлаар цэвэр усанболор болон гамма цацрагийн үйлчлэлээр усанболорт үүсэх боломжтой нейтрал хүчилтөрөгчийн нүх (V_O^x), Френкелийн хос дефект зэрэг хувийн цэгэн эффектүүдийг үүсгэж түүний электрон бүтэц, өнгөний өөрчлөлтөд хэрхэн нөлөөлөхийг судалсан.

Ферми төвшний ойролцоох төлөвийн нягт нь материалын физик шинж чанарыг үзүүлэх чухал хэсэг юм. Эндээс хориотой бүсийн энергийг тодорхойлох, цэгэн эффектүүдийн нөлөөгөөр электрон бүтэц хэрхэн өөрчлөгдөж байгааг харуулах боломж олгодог. CRYSTAL кодын хувьд нийт төлөвийн нягт $\rho_{tot}(\epsilon)$ нь атомын $\rho_A(\epsilon)$ болон орбиталийн $\rho_\mu(\epsilon)$ -ийн нягтаар дараах

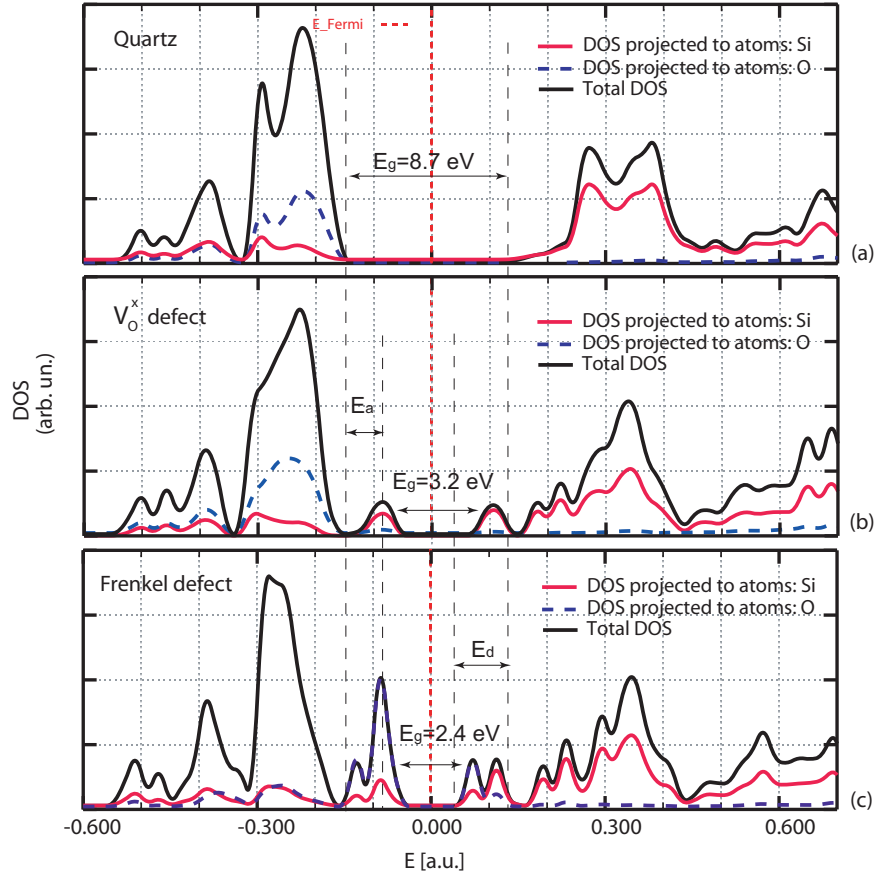
байдалтай илэрхийлэгддэг.

$$\rho_\mu = 2/V_{BZ} \sum_j \sum_\nu \sum_{\underline{g}} \int_{BZ} d\underline{k} S_{\mu\nu}(\underline{k}) a_{\mu j}(\underline{k}) a_{\nu j}(\underline{k}) e^{i\underline{k}\underline{g}} \delta[\epsilon - \epsilon_j(\underline{k})]$$

$$\rho_A(\epsilon) = \sum_{\mu \in A} \rho_\mu(\epsilon)$$

$$\rho_{tot}(\epsilon) = \sum_A \rho_A(\epsilon) \quad (5)$$

Системийн төлөвийн нягт (DOS) нь электрон суух боломжтой төвшин бүрийн энергийн интервал дэх төлөвийн тоог илэрхийлдэг.



Зураг 5: Усанболор (SiO_2)-ын төлөвийн нягтын зураг. Энд: (a) Цэвэр усанболор, (b) Нейтрал хүчилтөрөгчийн нүхэн дефекттэй усанболор, (c) Френкелийн хос дефекттэй усанболор, E_g хориотой бүсийн энерги, E_a акцептор төлөвийн энерги, E_d донор төлөвийн энерги.

Системийн төлөвийн нягтын зургийг
байгуулснаар хориотой бүсийн өргөнийг

тооцоолох болон электрон бүтцийг харах

боломжтой. Бид энд цэвэр усанболор, Френкелийн дефект болон хүчилтөрөгчийн нейтрал нүх бүхий усанболорын төлөвийн нягтыг тооцоолсон үр дүнг зураг.5 -т үзүүлэв. Эндээс бид гамма цацрагийн үйлчлэлээр усанболорт үүсэх зарим хувийн цэгэн дефектийн нөлөөгөөр түүний электрон бүтэц, хориотой бүсийн өргөн хэрхэн өөрчлөгдөхийг харах боломжтой. Зураг.5(a)-аас цэвэр усанболорын хориотой бүсийн өргөнийг 8.7эВ болохыг үзүүлэв, энэ нь бусад судалгааны үр дүнтэй сайн тохирч байна. Иймээс цэвэр кристалл усанболор нь тусгаарлагч шинж чанартай, тунгалаг өнгөтэй байдаг.

Зураг.5(b)-д нейтрал хүчилтөрөгчийн нүхэн(V_O^x) дефект бүхий усанболорын төлөвийн нягтыг үзүүлэв. SiO_4 тетраэдрин хувьд төвд нь Si^{+4} катион болон оройнууд дээр нь O^{-2} анион суусан байдаг. Эндээс нэг O -ийн атом сугараад анионы нейтрал нүх үүсэхэд катион Si^{+3} болно. Энд цахиурын 3s төлөв дээрх нэг электрон суларч үлдэх бөгөөд дамжуулалтын бүсийн орчим донор төлөв үүсгэн сууна. Цахиурын 3s төлөвт нэг электроны дутагдалтай болж валентын бүсийн орчим акцептор төлөв үүсэх болно. Түүнчлэн энд акцептор төлөвийн энерги $E_a = 1.36эВ$, донор төлөвийн энерги $E_d = 1.63эВ$ байна. Энд гэрлийн үйлчлэлээр валентын бүсээс акцептор төлөв рүү, донор төлөвөөс дамжуулалтын төлөв рүү электрон шилжиж гэрлийг шингээнэ. Мөн энэ эффектийн нөлөөгөөр усанболорын хориотой энергийн бүсийн өргөн 3.2эВ болж нарийсаж байна.

Зураг.5(c)-д Френкелийн хос дефект бүхий усанболорын төлөвийн нягтыг үзүүлэв. Френкелийн дефект нь нейтрал хүчилтөрөгчийн нүх болон цацрагийн үйлчлэлээр сугарсан холбоост ороогүй завсар суусан хүчилтөрөгчийн атомаас тогтоно. Энд нейтрал хүчилтөрөгчийн нүх үүсэх болон электрон бүтцэт орох өөрчлөлт нь зураг.5(b)-тэй адил байна. Харин холбоост ороогүй завсар суусан хүчилтөрөгчийн атомын хувьд 2p орбиталь нэмээд 2 электрон суух боломжтой тул валентын бүсийн орой орчим акцептор төлөв үүснэ. Френкелийн хос үүсэх дефектийн нөлөөгөөр усанболорын хориотой энергийн бүсийн өргөн 2.4эВ болж нарийсан

хагасдамжуулагч шинж чанартай болж өөрчлөгдөж байна. Түүнчлэн энд акцептор төлөвийн энерги $E_a = 1.36эВ$, донор төлөвийн энерги $E_d = 2.17эВ$ байна. Энд гэрлийн үйлчлэлээр валентын бүсээс акцептор төлөв рүү, донор төлөвөөс дамжуулалтын төлөв рүү электрон шилжиж гэрлийг шингээнэ. Эдгээр дефектийн тохиолдолуудад үзэгдэх гэрлийн мужид гэрлийг бүрэн шингээх нөхцөл бүрдэж байгаа тул тунгалаг биш хар өнгөтэй болж харагдаж байгаа болно.

V. Дүгнэлт

Байгалийн хагас үнэт чулуу болох усанболорыг гамма цацрагаар шарсны үр дүнд түүнд олон тооны дефект үүссэнээс материалын өнгө өөрчлөгддөг. Иймд бид энэ ажлаар усанболор (SiO_2)-т гамма цацрагийн үйлчлэлээр үүсэж болох хувийн цэгэн эффектүүд болох нейтрал хүчилтөрөгчийн нүх, Френкелийн хос дефект зэргийг үүсгэж түүний электрон бүтэц, хориотой бүсийн өргөн зэрэг хэрхэн нөлөөлөхийг судлав. Тооцооны үр дүнгээс үзэхэд бидний авч үзсэн цэгэн эффектүүдийн нөлөөгөөр хориотой бүсийн завсарт донор болон акцептор төвшин үүссэнээр усанболорын электрон бүтэц өөрчлөгдөж, хориотой энергийн бүсийн өргөн нарийсан хагасдамжуулагч шинж чанартай болж өөрчлөгдөж байгааг үзүүлэв. Мөн цэгэн дефектийн үүсгэж байгаа донор болон акцептор төлөвийн энергийн төвшиний нөлөөгөөр гэрлийг шингээж тунгалаг биш өнгөтэй болж байна. Цаашид гамма цацрагийн үйлчлэлээр үүсэж болох хувийн болон гаднын цэгэн эффектүүд усанболорын оптик шинж чанарт хэрхэн нөлөөлөхийг нарийвчлан судлах болно.

Талархал

Энэхүү ажлыг гүйцэтгэхэд дэмжлэг үзүүлж суурь судалгааны SST_018/2015 төслийг санхүүжүүлсэн ШУТС болон БСШУС яаманд талархал илэрхийлье.

- [1] Baatarkhuu.D, Tuvjargal.N, Ochirkhuyag.T, Davaasambuu.J, Shilagardi.G., "The optical absorption and EPR study of Gamma irradiated and heat-treated natural quartz" Mong.J. Phys., Issue 2,(2016), 436.
- [2] Mozzi R. L. and Warren B. E., "The Structure of Vitreous Silica" J. Appl. Crystallogr. 2 (1969) 164.
- [3] Henderson G. S. and Baker D. R. (eds.), "Synchrotron Radiation: Earth, Environmental and Material Sciences Applications," Short Course Series

30, Mineralogical Association of Canada. (2002)159-178.

- [4] Edwards A. H., Fowler W. B. and Robertson J., "Structure and imperfections in amorphous and crystalline silicon dioxide" R. Devine A. B., Duraud J.-P. and Dooryhée E. (eds.), John Wiley and Sons Ltd., (2000), p.253
- [5] Ed. Catlow R., "Defects and disorder in crystalline and amorphous solids" Kluwer Academic Publishers (1994)

- [6] Kittel C., "Introduction to Solid State Physics" John Wiley and Sons (1971).
- [7] Stevens-Kalceff M. A. and Philips M. R., "Cathodoluminescence microcharacterization of the defect structure of quartz" Phys. Rev. B 52 (1995) 3122.
- [8] Lamkin M. , Riley F. and Fordham R., "Oxygen Mobility in Silicon Dioxide and Silicate Glasses" A Review, J. Eur. Ceram. Soc. 10 (1992) 347.
- [9] Lide D. R., CRC Handbook of Chemistry and Physics, 85th edition, CRC Press, (2004).
- [10] Fan X. D. , Peng J. L. and Bursill L. A., "Joint Density of States of Wide-Band-Gap Materials by Electron Energy Loss Spectroscopy" J. Non-Cryst. Solids 24 (1977) 155.
- [11] Elliott S.R., "Physics of amorphous materials" Longman, London, 2 Ed. (1990).
- [12] Weeks R. A., "Paramagnetic Resonance of Lattice Defects in Irradiated Quartz" J. Appl. Phys. 27 (1956) 1376.
- [13] Н.Төвжаргал, Д.Баатархүү, Т.Очирхуяг, Ж.Даваасамбуу, Г.Шилагарди., "Гамма цацрагийн үйлчлэлээр Усанболорт үүсэх парасоронзон дефектийн судалгаа" МУИС-ийн эрдэм шинжилгээний бичиг 449, ФИЗИК СЭТГҮҮЛ (22) x11, 2016
- [14] Griscom D. L., "Glass Science and Technology" Academic, London, Vol. 4B (1990a) 151.
- [15] Skuja L., "Optically active oxygen-deficiency-related centers in amorphous silicon dioxide" J. NonCryst. Solids 239 (1998) 16.
- [16] Uchino T. , Takahashi M. and Yoko T., "Structure and Generation Mechanism of the PeroxyRadical Defect in Amorphous Silica," Phys. Rev. Lett. 86 (2001) 4560.
- [17] Griscom D. L., "E' center in glassy SiO₂: Microwave saturation properties and confirmation of the primary ²⁹Si hyperfine structure" Phys. Rev. B 20 (1979a) 1823
- [18] Griscom D. L., "The electronic structure of SiO₂: A review of recent spectroscopic and theoretical advances" Modern Phys. Lett. B 12 (1998) 541.
- [19] R. Dovesi, V.R. Saunders, C. Roetti, R. Orlando, C. M. Zicovich-Wilson, F. Pascale, B. Civalleri, K. Doll, N.M. Harrison, I.J. Bush, Ph. D'Arco, M. Llunell, M. Causa and Y. Noel, CRYSTAL14 User's Manual, University of Torino, Torino, (2014)
- [20] A. D. Becke ., J. Chem. Phys. 98, 5648 (1993).
- [21] C. Lee, W. Yang, and R. G. Parr ., Phys. Rev. B 37, 785 (1988).
- [22] William D. Callister, David G. Rethwisch., "Materials Science and Engineering: An Introduction" John Wiley and Sons, Inc., (2014).

Утааны механик шинж чанарыг судлах хялбар арга

Ж.Ванчинхүү*, Ж.Даваасамбуу, Б.Бат-Эрдэнэ

МУИС, ШУС, Физикийн тэнхим

Утааны бөөмцөрийн шугаман хэмжээ, тоон нягт буюу концентраци, хурд, бөөмцөр хоорондын зай, утаан дахь бөөмцөрийн концентраци зэрэг зарим механик шинж чанарыг хялбар тодорхойлох боломжит арга, аргачлалыг энд судлав. Энд дэвшүүлж байгаа аргыг ашиглан тамхины утааны зарим механик шинж чанарыг тогтоож агаар мандал руу орж байгаа эмиссийг үнэлэв. Агаарын бохирдлын судалгааны ажилд тохиромжтой байх зарим шинэ параметруудийг дэвшүүлэн гаргасан.

PACS# 64.70.ps, 68.60.Bs

Удиртгал

Төрөл бүрийн түлшний шаталтаас ялгаран гарах утаа нь шаталтын зайлшгүй үр дагавруудын нэг юм. Шаталт нь физик химийн олон шаттай процессуудын явцад түлшний материалууд хүчилтөрөгчтэй урвалд орох процесс юм [1-3]. Энэ процессын явцад ялгарах энерги нь дулаан ба цацаргалт хэлбэрээр харин урвалын бүтээгдэхүүнүүд нь утаа хэлбэрээр гадагшиж байдаг. Харин түлшинд агуулагдах үл шатах хэсгүүд нь үнс болж үлддэг. Шаталтаас ялгарч байгаа утаа нь түлшний халалт болон шаталтаас гарах хийн бүтээгдэхүүнүүд, шаталтын явцад бий болсон хатуу болон шингэн төлөвт орших жижиг хэсгүүдийг агуулж байдаг [2]. Эдгээр жижиг хэсгүүдийг нийтэд нь утааны бөөмцөр (smoke particulate) гэж нэрлэдэг. Эдгээр нь галаас гарахдаа харьцангуй өндөр температуртай байдаг бөгөөд утаатай хамт гадагшлах явцад саадын гадаргуу дээр конденсацлаж тэндээ сууж үлддэг. Үүнийг бид хөө, ис нэршлээр нь мэднэ.

Утааны бөөмцөрүүд гэрэл сарниулдаг учраас утаа бидний нүдэнд тод харагдах төдийгүй гэрэл шингээдэг учраас агаар мандал дотор их хэмжээгээр хуримтлагдсан үедээ үзэгдэх орчны хэмжээг хязгаарлаж байдаг. Үүнээс гадна эдгээр нь агаар мандлыг бохирдуулагч гол агент юм. Эдгээрийн концентраци, тус бүрийн хэмжээ, хоорондын зай, суултын хурд нь утааны механик шинж чанарыг үзүүлдэг гол хэмжигдэхүүнүүд юм.

Утааны бөөмцөрийн физик шинж чанар, бүтцийг рентген дифракц, Раман спектроскоп, Scanning Electron Microscopy with Energy Dispersive X-Ray (SEM-EDX) зэрэг аргуудаар олон талаас нь судалсан байдаг [4-7]. Харин янз бүрийн түлшнээс гарч байгаа утааны механик шинж чанар тухайлбал бөөмцөрийн концентраци, бөөмцөрийн шугаман хэмжээ,

тоон нягт, бөөмцөрийн материалын нягт зэргийг центрфугтэй масс анализатор, Differential Mobility Spectrometer (DMS) багажаар судалсан байдаг [8-10] бөгөөд утааны бөөмцөрийн оптик шинж чанарыг ч мөн авч үзсэн байдаг [11-12]. Агаарын бохирдолд утааны механик шинж чанар нөлөөллийн хувьд чухал ач холбогдолтой байдаг. Утааны механик шинж чанарыг мэдсэнээр утаанаас үүдэлтэйгээр агаарт бий болсон бохирдуулагч агентуудын хэмжээ, нөлөөг тогтоох боломж бүрддэг.

Манай улсын төв суурин газруудын агаарын бохирдол ихэссэнтэй холбоотойгоор энэ чиглэлийн судалгааны ажил 2000-иад оны сүүлчээс хийгдэж эхэлсэн. Агаарын бохирдлын мониторинг хийх, шаталтаас гарч байгаа агаар бохирдуулагч агентуудыг судлахдаа хий хэлбэртэй бохирдуулагчдыг хийн анализатор ашиглан хэмждэг. Харин бөөмцөрийг судлахдаа шүүх аргыг өргөн ашиглаж байна. Шүүх аргаар агаар бохирдуулагч агентуудын хэмжээг тогтохдоо утаа, эсвэл бохирдолтой агаарыг соруулан авч механик шүүлтүүр ашиглан түүний доторхи бөөмцөрүүдийг шүүж аваад түүнийхээ массыг хэмжиж энэ массыг соруулсан утааны эзлэхүүнд харьцуулан бохирдлын хэмжээг мкг/м^3 нэгжээр илэрхийлэн гаргадаг. Энэ зарчим дээр тулгуурлан ажилладаг тусгайлсан багажууд ч бас бий. Гэхдээ ийм багажуудын хэмжих хязгаар хязгаарлагдмал байдаг. Тухайлбал, бохирдуулагч агентын концентрацийг тодорхойлдог DustTrak төрлийн багажуудын хэмжих хязгаар 600 мкг/м^3 -аас хэтэрдэггүй. Гэтэл галаас гарч байгаа утааны концентраци хэдэн г/м^3 хүрэх тохиолдол ч бий. Энэ тохиолдолд утааны бөөмцөрийн концентраци багажийн хэмжих хязгаарыг давж гарах учраас шууд хэмжих боломжгүй болж механик шүүлтүүр ашиглан ялгаж аваад дараа нь хэмжих арга руугаа шилжих шаардлагатай болдог. Ингэж хэмжихэд олон тооны багаж

* Electronic address: j.vanchinkhuu@num.edu.mn

нэмэлт материал шаардлагатай болох төдийгүй хэмжилт боловсруулалтанд ихээхэн хугацаа шаардагддаг.

Бөөмцөрийн хэмжээг тодорхойлох орчин үеийн нарийн аргууд байдаг боловч үнэ ихтэй багаж шаарддаг, нөгөө талаас манай нөхцөлд олдоц муу байна.

Нэгж үүсгэгчээс гарч агаар мандал руу орж байгаа бохирдуулагч агент бүрийг тогтоож түүний гарцыг хянаж агаар мандал руу орох хувь хэмжээг тогтоогдсон хэмжээнд байлгах нь агаарын бохирдлыг бууруулах үйл ажиллагааны нэг чухал зорилт юм. Шаталтаас гарч байгаа бохирдуулагч агент бүрийн гарцыг тодорхойлох нь олон төрлийн багажуудыг нэгэн зэрэг ашиглан хийх томоохон цогц ажил байдаг. Манай улсын төв суурин газрын агаарын бохирдлын ихэнх хэсгийг утааны бөөмцөрүүд бий болгож байдаг бөгөөд агаар мандал дахь бөөмцөрийн хэмжээ ихэссэнээр утаан манан үүсэж харагдах орчныг бууруулж байдаг. Үүний зэрэгцээ агаарын доторхи тоосонцорын концентраци ихэссэнээр түүний амьсгалаар дамжин амьд биеийн дотор орох магадлал нь нэмэгдэж халдварт болон халдварт бус өвчлөлийн шалтгаан болдог. Ийм учраас агаарын бохирдлын судалгаанд утааны тоосонцорын хэмжээг тогтоох явдал эн тэргүүнд зайлшгүй авч үзэх асуудал болдог.

Бид энэ судалгааны ажилд төрөл бүрийн шаталтаас үүдэлтэйгээр агаар мандал руу орж байгаа бохирдуулагч агентуудын дотроос нөлөөллийн хувьд хамгийн өндөр хэмжээтэй байдаг утааны тоосонцорын механик шинж чанарыг хэрхэн хялбар судлах тухай асуудлыг дэвшүүлэн тавьж байгаа юм.

Аливаа түлшний шаталтын явцад тодорхой хэмжээтэй бөөмцөрүүд (эдгээрийг заримдаа шаталтын ширхэгт бүтээгдэхүүнүүд гэдэг) үүсч тодорхой хурдтайгаар галаас гадагшилж байдаг. Эдгээр нь микрометрийн эрэмбийн хэмжээтэй бөгөөд гэрэл сарниулагч объект байдаг. Бөөмцөрөөс сарниж байгаа энэ гэрэл нь тухайн бөөмцөрийн талаар болон системийн талаар их хэмжээний мэдээлэл агуулж байдаг. Манай шийдэл утааны бөөмцөрийн гэрэл сарниулдаг энэ чанарыг ашиглаж байгаа бөгөөд утаан дээр гэрэл тусган түүнээс сарнисан гэрлийг бүртгэж авах замаар гэрэл сарниулагч объект болон системийн механик шинж чанаруудыг богино хугацаанд тогтоох хялбар бөгөөд үр дүнтэй замыг санал болгодог.

Жижиг бөөмцөрүүд агуулсан утаа, уур, үүл зэрэг дисперсэт систем дээр тодорхой долгионы урттай дан өнгийн гэрэл тусгахад түүнээс

сарнисан гэрлийн эрчим I дараах томъёогоор тодорхойлогддог [2]:

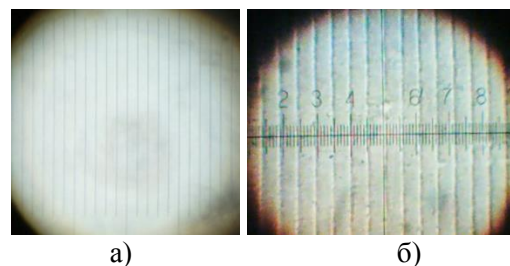
$$I \cong I_0 l \Omega \eta \sum_i c_i \sigma_{i,sc}$$

I_0 -тусгаж байгаа гэрлийн эрчим, l -лазерын цацрагийн ажиглагдаж буй урт буюу систем дотуур туулсан зай (ойролцоогоор 1 мм байна), Ω -ажиглаж буй биелэг өнцөг, η –гэрэл бүртгэх детекторын ашигт ажиллагааны коэффициент, c_i -сарниулагч төвүүдийн концентраци, $\sigma_{i,sc}$ - сариулагч төвийн сарниулах огтлол.

Энэ гэрлийг бүртгэн авч гэрлийн эрчмийг хэмжсэнээр системийн дотор байгаа бөөмцөрийн концентрацийг тодорхойлж болно [2,3]. Үүнээс гадна гэрлийн эрчим хангалттай их байхад энэ сарнисан гэрлийг микроскопын объектив рүү чиглүүлэн түүний харааны хавтгайд фокуславал түүн дотор байгаа бөөмцөрүүд нүдэнд үзэгдэхүйц тодорхой харагддаг. Нэгэнт ингэж нүдээр харж байгаа бол түүний дээр дурдсан механик шинж чанаруудыг окулярын хуваарийг ашиглан хэмжиж авч болно.

Туршилтын багаж төхөөрөмж

Микроскоп Бөөмцөрийн дээр дурдсан механик шинж чанаруудыг энгийн нүдээр харж тогтооход микроскоп, объектив микрометр юмуу дифракцийн тор шаардлагатай болдог. Харин бөөмцөрийг бүртгэж авах тохиолдолд фотоэлемент юмуу CCD камер хэрэглэгдэнэ.



Зураг 1. а) Микроскопын харааны талбайд үүссэн объектив микрометрийн дүрс (хоёр зураасын хоорондох зай 10 мкм), б) 600х өсгөлттэй микроскопын хуваарь бүхий окулярын хавтгайд харагдаж байгаа 1/100 дифракцийн торын өссөн дүрс.

Объект микрометрийг дүрсийн хэмжээг тогтооход ашиглах бөгөөд ихэнх объект микрометрийн хуваарийн үнэ 10 мкм байдаг (Зураг 1а) учраас бага хэмжээтэй объектийн дүрсийг тогтооход тохиромжтой биш байдаг. Ийм учраас илүү нарийвчлал бүхий объектийг ашиглах шаардлагатай болдог. Орчин үеийн дифракцийн торын тогтмол 50-2500 зураас/мм

(Зураг 16). Энэ тохиолдолд нэг зураасын хоорондох зай 20-0.4 мкм байна.

Микроскопын өсгөлт K нь объективын өсгөлт $k_{об}$ ба окулярын өсгөлт $k_{ок}$ -ийн үржвэрээр тодорхойлогддог:

$$K = k_{об} \times k_{ок}.$$

Микроскопын объективын өсгөлт 10-100, окулярын өсгөлт голчлон 10, 15, 20, 25 байдаг. Ийм учраас оптик микроскопын максимум өсгөлт 2500 байна.

Оптик микроскопын хувьд өсгөлтөөс гадна уг микроскопоор ажиглаж болох хамгийн бага хэмжээ нь түүний бас нэг чухал үзүүлэлт болдог. Энэ нь микроскопын ялгах чадвараар тодорхойлогддог. Ялгах чадвар нь өсгөгдсөн дүрс дотор байгаа элементүүдийн ялгарлыг үзүүлдэг бөгөөд объект дээр байгаа 2 цэгийн микроскопоор харахад ялгарч харагдах хамгийн бага зайгаар тодорхойлогддог. Үүнийг Релейн шалгуурыг ашиглан тухайн микроскопын хувьд дараах томъёогоор тодорхойлж болно:

$$L = \frac{1.22\lambda}{NA_{obj} + NA_{cond}}$$

Энд: λ - ажлын гэрлийн долгионы урт бөгөөд манай судалгаанд хэрэглэсэн ногоон гэрлийн лазерын хувьд $\lambda = 0.530$ мкм, $NA_{obj} = n \sin(\theta/2)$ -микроскопын объективын тоон аператур, $NA_{cond} = n \sin(\theta'/2)$ -конденсерын тоон аператур, n - объектив ба тавиур эсвэл конденсер ба тавиурын хоорондох орчны хугарлын илтгэгч бөгөөд агаар байгаа бол $n = 1$ байна, θ, θ' - апературын өнцөг (олонхи конденсерийн апературын өнцөг нь 144° байх бөгөөд үүнд харгалзан тоон аператур нь 0.95 байдаг). Микроскопын хязгаарын ялгах чадвар нүдний хамгийн сайн харах 514 нм долгионы урттай гэрэлд харгалзах ба 0.26 мкм байдаг. Харин харж болох хамгийн бага долгионы уртын (400 нм) хувьд 0.2 мкм байхыг тогтоож болно. Бидний ашиглаж байгаа системийн хувьд конденсерын аператур тооцогдохгүй учраас ногоон лазерын хувьд 40х ба 100х өсгөлттэй объектив бүхий микроскопын ялгах чадвар харгалзан $L = \frac{1.22\lambda}{NA_{obj}} = 0.99$ мкм, 0.51 мкм байна.

Окулярын хуваарийн үнэ Объектийн хэмжээг микроскопын харааны талбайд байгаа хуваарьтай харьцуулах замаар тодорхойлдог. Микроскопын окулярын хавтгайд хуваарьтай зураас байрладаг. Эдгээр зураасын хоорондох зай буюу хуваарийн үнийг өсгөлт бүр дээр тодорхойлох шаардлагатай. Үүний тул объектомикромметр ашиглана. Тухайлбал, Зураг 1 б-д 1/100 зураас бүхий дифракцийн зургийн

өсгөсөн дүрсийг үзүүлэв. Энэ дүрсийн m ширхэг зураас окулярын хуваарийн n зураастай давхцаж байгаа учраас окулярын хуваарийн үнэ дараах томъёогоор олдоно:

$$d = m \cdot \frac{l}{n},$$

энд: l -дифракцийн торын зэргэлдээ хоёр зураасын хоорондох зай. Энэ зургийн окулярын хуваарийн үнэ 1.875 мкм байна. Энэ утгыг тодорхойлсноор бид микроскопын харааны хавтгайд фокуслагдсан дүрсийн хэмжээг окулярын хуваарийг ашиглан тогтоох боломжтой болж байгаа юм. Энэ хэмжилтийг ялгаатай тооны зураасуудын хооронд хэд хэдэн удаа хийж дундажлан хуваарийн үнийг нарийвчлан тогтооно. Дифракцийн тор эсвэл объект микрометрийн хуваарийн үнэ тодорхойгүй байгаа бол тэдгээрийг дифракцийн үзэгдэл ашиглан тодорхойлж болно гэдгийг энд дурдая.

Утааны камер Утаа нь хөдөлгөөнт объект учраас түүнийг ажиглахын тулд нэг чиглэлд тогтвортой урсгах юм уу эсвэл тодорхой орон зайн дотор «түгжих» шаардлагатай болдог. Үүнийг хэрэгжүүлэхэд утааны камерыг ашигладаг. Энэ нь тодорхой эзлэхүүнтэй, жигд хөндлөн огтлолтой нэг талаас нь ажиглаж, өөр нэг талаас нь гэрэлтүүлж болох тунгалаг цонхууд бүхий битүү сав юм (Зураг 2). Утааг камерт оруулж үзэгдэх гэрлээр гэрэлтүүлэхэд утааны бөөмцөрөөс гэрлийн сарнил үүсдэг. Утааны бөөмцөрүүдийн сарниулсан гэрлийг микроскопын харааны талбайд чиглүүлэн фокуслаж бөөмцөрийн тод дүрсийг гарган авна. Дүрсийг CCD камераар компьютерт дамжуулж болно.

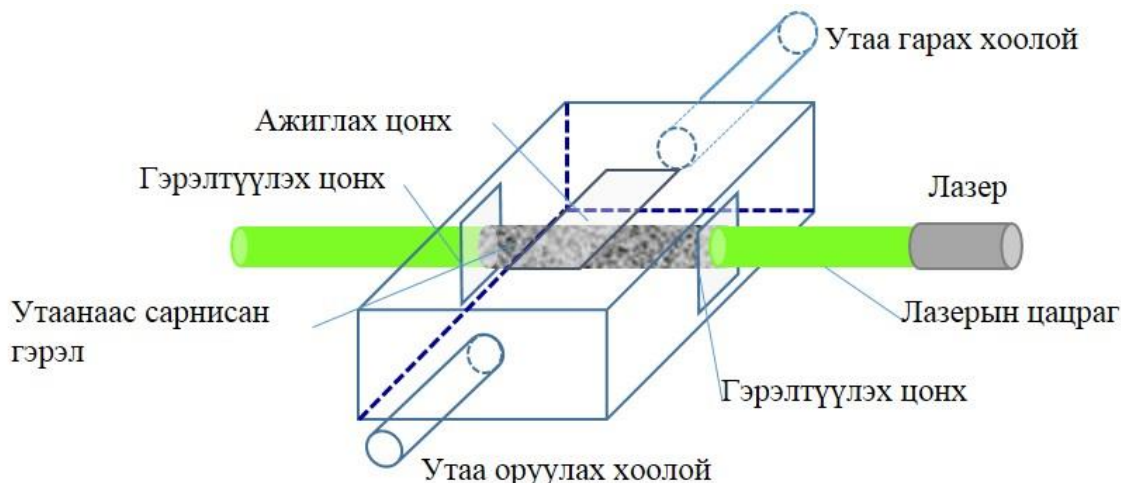
Шаталтаас ялгарч байгаа утааг хоолойгоор дамжуулан ажиглалтын камер луу оруулдаг. Бага диаметртай хоолойгоор дамжуулан утааг камерт оруулах нь хялбар биш байдаг. Утааг оруулахын тулд шаталт ба камерын хооронд даралтын градиент үүсгэх шаардлагатай бөгөөд үүнийг температураар удирдаж гүйцэтгэх нь илүү зохимжтой байдаг.

Утааны бөөмцөрийн хурдыг хэмжих

Утааны камерыг микроскопын тавиурт бэхэлж лазерын гэрлийг асаасны дараа утааг камерт оруулахад утааны бөөмцөрүүд лазерын гэрлийг сарниулсаны улмаас камер дотор тархаж буй гэрлийн дагууд тод ногоон өнгөтэй цилиндр үүснэ. Микроскопын тубусыг хөдөлгөн (зарим микроскопт суурийг шилжүүлдэг) энэ цилиндрийн хөндлөн огтлолын аль нэг хөвч болон өндрийг дайрсан хавтгайг харааны талбайд фокуслаж утааны доторхи бөөмцөрийн

тод дүрсийг гарган авна. Камерт ямар нэг алдагдал (leak) байхгүй бол утааны урсгал жигдрэх үед камерын орох гарах хоолойгоор ижил хэмжээний утаа урсана. Энэ үед утааны

хурд тогтмол байх бөгөөд бөөмцөрүүд урсгалын дагуу нэг зүг чиглэн тогтмол хурдтай хөдөлнө. Утааны бөөмцөрийн чиглэсэн хөдөлгөөний хурд нь үнэндээ утааны урсгалын хурд юм.



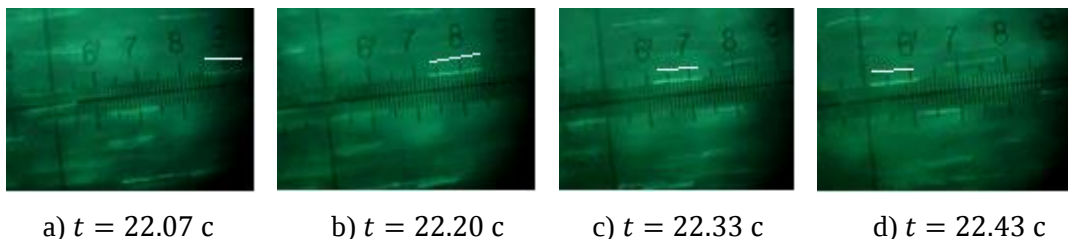
Зураг 2. Утааны бөөмцөрийн механик шинж чанарыг тодорхойлоход ашиглах камер бүтэц, түүний гэрэлтүүлэг.

Ийм учраас утааны бөөмцөрийн хурдыг хэмжиж утааны хурдыг тодорхойлно. Бөөмцөрийн хөдөлгөөний хурдыг нүдээр ажиглаж хэмжихийн оронд түүний хөдөлгөөнийг CCD камер ашиглан бичиж аваад боловсруулалт хийх нь илүү тохиромжтой байдаг. Камерын бичлэгийн хурдаас хамаарч бүртгэгдэж байгаа бөөмцөр цэгээр эсвэл тодорхой урттай гэрэлтэй шугам хэлбэртэй бүртгэгддэг. Хэрэв CCD камерын бичих хурд бага бол хөдөлж байгаа бөөмцөр шугам байдлаар дүрслэгдэнэ (Зураг 3).

Энэ тохиолдолд бөөмцөрт харгалзан бичигдсэн шугамын урт l -ийг камерын бичлэгийн интервал τ -д хувааж олно:

$$v = \frac{l}{\tau}.$$

Шугамын уртыг окулярын хуваариас тоолж аваад хуваарийн үнээр үржүүлж олно. Энэ ажилд бид $1/8$ с бичлэгийн интервалтай CCD камер ашиглав.



Зураг 3. Бүрэн шаталтын үед ялгарах утааны хурдтай утааны бөөмцөрийн хөдөлгөөн (өсгөлт 100х, хуваарийн үнэ 8.68 мкм)

Иймд Зураг-3-г үзүүлсэн бөөмцөрийн хурд $v = \frac{100.73 \text{ мкм}}{0.125 \text{ с}} = 804 \text{ мкм/с}$ байна.

Нөгөө талаас энэ хурд үнэн эсэхийг зураасын хөдөлгөөний хурдаар магадлаж болно. Зураасын эхний дөрвөн байрлалд харгалзах хугацааны эгшин өгөгдсөн учраас энэ хурд дараах утгатай байна:

$$\bar{v} = \frac{l}{\tau} = 815 \text{ мкм/с}.$$

(энд бөөмцөр t хугацааны дотор туулах замыг s -ээр тэмдэглэв). Энэ утга өмнөх утгатай алдааны хүрээнд бараг тохирч байна.

Хэрэв бичих хурд хангалтай өндөр юмуу эсвэл бөөмцөрийн хурд бага бол бөөмцөр хөдөлгөөний эгшин бүрт толбо байдлаар бүртгэгддэг (Зураг 4). Энэ тохиолдолд бөөмцөрийн хөдөлгөөний хугацааг хэмжиж энэ хугацаанд туулсан замын хэмжээг окулярын хуваарийн үнийг ашиглан шууд тодорхойлоод мөн л дээрх томъёог ашиглан эдгээрийн харьцаагаар хурдыг тодорхойлж болно. Зураг 4-т өгөгдсөн бөөмцөрийн координат ба хугацаанаас түүний хөдөлгөөний дундаж хурдыг хэмжвэл $v = 49.5 \text{ мкм/с}$ байхыг тогтоож болно.

Энэ үр дүнгээс харахад ямарч түлшний шаталтын эхний шатанд утааны хурд бага байх

бөгөөд бүрэн шаталтын горимд шилжих үед утааны хурд эрс ихэсдэг нь харагдаж байна. Урсгал тасралтгүйн тэгшитгэлийг ашиглан энд хэмжсэн хурдаар галаас гарч байгаа утааны хурдыг хэмжиж болно. Энэ хэмжигдэхүүний

утга утааны цахилгаан шүүлтүүрийн тооцоонд чухал ач холбогдолтой байдаг. Ердийн задгай галаас гадагшилж байгаа утаа хурд ойролцоогоор 0.05-0.07 м/с байдаг.

a) $t = 31.57$ cb) $t = 32.50$ cc) $t = 33.10$ cd) $t = 33.60$ c

Зураг 4. Шаталтын эхний үед ялгарах бага хурдтай бөөмцөрийн хөдөлгөөн (Байрлал бүрд харгалзах хугацааны эгшинийг доор нь тэмдэглэв. Өсгөлт 70х, окулярын хуваарийн үнэ 10 мкм).

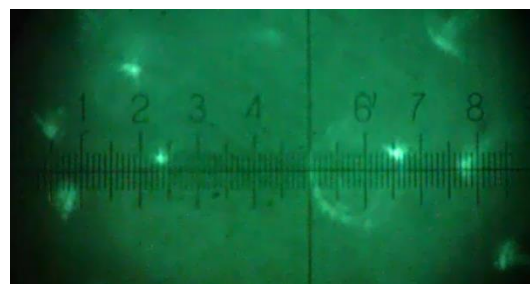
Харин агаарын чанарын албаны лабораторит шалгасан хэмжилтийн үр дүнгээр зуухнаас гарах утга үнэхээр 1-3 м/с байдаг. Харьцангуй бага хурдтай хөдөлж байгаа бөөмцөрийн хөдөлгөөнийг ажиглахад тэдгээр нь чиглэсэн хөдөлгөөнөөс гадна эмх замбараагүй хөдөлж байдаг. Эмх замбараагүй хөдөлгөөний дундаж хурд тэгтэй тэнцүү байх нь ойлгомжтой. Утааг битүү саванд оруулж ажиглалт хийх үед энэ хөдөлгөөн тод ажиглагдана.

Бид утааны хөдөлгөөний хурдыг өөрсдийн боловсруулсан утаанд мониторинг хийх аргадаа тулгуурлан тогтоож агаарын чанарын албаны лабораторит батлах хэмжилт хийснээс гадна Питот хоолойгоор тодорхойлсонутгатай жишив. Эдгээр хэмжилтийн утгатай харьцуулбал манай боловсруулсан утааны хурдыг хэмжих энэ процедур нэлээд үнэмшилтэй байгаа нь тогтоогдлоо.

Эцэст нь утааны хурдыг хэмжих тохиолдолд микроскопын өсгөлт өндөр байх төдийлэн шаардлагагүй, харин бөөмцөрүүдийн дүрс маш бага хэмжээтэй байх өсгөлтийг сонгон авах хэрэгтэй гэдгийг тэмдэглэе. Энэ хэмжилтэд 10х өсгөлттэй объектив, 7х-10х өсгөлттэй хуваарьтай окуляр ашиглах хамгийн тохиромжтой.

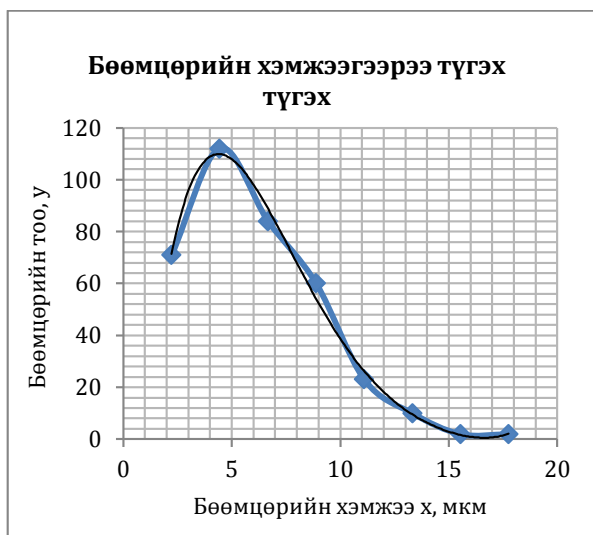
Бөөмцөрийн хэмжээ, хэмжээгээр түгэх түгэлт
Утааны бөөмцөрийн хэмжээг мөн л дээрх процедурыг ашиглан хэмжинэ. Утааг камерт оруулж тогтвортой жигд урсгал бий болгосны дараа орох ба гарах хоолойг зэрэг хаана. Энэ үед камер утаагаар дүүрч утаа камер дотор бараг жигд тархсан байна. Микроскопын харааны талбайд үүсэж байгаа бөөмцөрийн дүрсийн хөдөлгөөн эмх замбараагүй байдаг тул тэдгээрийн хэмжээг нүдээр ажиглан тогтооход бэрхшээлтэй байдаг. Ийм учраас микроскопыг фокуслан утааны бөөмцөрийн тод дүрсийг гарган авч түүний хөдөлгөөний бичлэгийг

хийнэ. Битүү камер дотор байгаа утааны бөөмцрүүд эмх замбараагүй хөдөлгөөн хийх бөгөөд тод дүрс өгч байгаа бөөмцөрийн хэмжээг окулярын хуваариар тогтооно.



Зураг 5. Микроскопын окулярын хавтгайд үүсэж буй бөөмцөрийн дүрс (Өсгөлт 400х, окулярын хуваарийн үнэ $d=2.25$ мкм).

Тухайлбал, Зураг 5-д хэд хэдэн бөөмцөрийн тод дүрсийг үзүүлэв. Энэ зургийн хуваарь дээр байрлаж байгаа хоёр бөөмцөрийн хэмжээ харгалзан 4.5 мкм, 6.7 мкм байна. Ийм байдлаар тамхины утааны доторхи 300 гаруй бөөмцөрийн шугаман хэмжээг олж бөөмцөрийн хэмжээгээрээ түгэх түгэлтийг гаргав (Зураг 6). Энэ хэмжилтийн үр дүнгээс үзэхэд тамхины утааны бөөмцөрийн минимум хэмжээ 0.6 мкм, максимум хэмжээ 26 мкм бөгөөд ийм хэмжээтэй бөөмцөрүүд 1000-аас цөөнгүй бөөмцөр дотор нэг удаа тааралдах боломжтой байдаг. Энэ түгэлтийн хувьд бөөмцөрийн дундаж хэмжээ 6.05 мкм, хамгийн магадлангүй хэмжээ нь 4.4 мкм байх нь харагдаж байна. Тамхины утааны бөөмцөрийн хэмжээ ийм бага байдаг учраас Ми сарнилын улмаас утаа хөх цэнхэр харагддаг гэсэн дүгнэлтийг хийж болно. Гэрлийн сарнилын онолын үүднээс авч үзвэл утаа бараг хөх ягаан өнгөтэй харагдах ёстой боловч хүний нүдний мэдрэх чадвар энэ мужид цэнхэр өнгө дээр хамгийн их байдаг тул утааны өнгө ингэж тодорхойлогддог болж таарч байна.



Зураг 6. Утааны бөөмцөрийн хэмжээгээр түгэх түгэлт.

Энэ аргаар бөөмцөр хатуу эсвэл шингэн төлөвт байгаа эсэхээс нь үл хамааран түүний хэмжээг тодорхойлж болно. Туршилтын явцад хийсэн ажиглалтаас харахад бөмбөрцөгт ойр хэлбэртэй бөөмцөр ихэвчлэн шингэн хэлбэрт байгаа нь харагддаг. Үүнийг цаашид бөөмцөрийн хэлбэрт хийх морфологийн судалгаагаар нарийвчлан тогтоож болох юм.

Бөөмцөр хоорондын зай

Утааны доторхи бөөмцөрүүд өөр өөр хэмжээтэйгээс гадна тэдгээрийн хоорондох зай харилцан адилгүй байдаг. Бөөмцөр хоорондын зай нь утааны механик шинж чанарыг тухайлбал утааны өтгөн, сийрэг чанарыг үзүүлэх нэг чухал хэмжигдэхүүн юм. Утааны өтгөн, сийрэг чанарыг түүн дотор байгаа бөөмцөрийн концентраци буюу тоон нягт гэсэн хэмжигдэхүүнээр тодорхойлдог боловч бөөмцөр хоорондын зайгаар ч бас илэрхийлэх боломжтой. Утааны доторхи бөөмцөрүүдийн хоорондын зай их байх тусам утаа сийрэг, харин бага байхад утаа өтгөн байдаг. Ийм учраас энэ хэмжигдэхүүн утааны оптик шинж чанартай ч бас холбоотой болдог.

Бөөмцөр хоорондын зайг хэмжихийн тулд утааг камерт оруулж өмнөхийн адил жигд урсгал үүсгэнэ. Ийм жигд урсгалтай үед бөөмцөр хоорондын зайг окуляр хуваарийг ашиглан хэмжиж авна. Зураг 5-д байгаа хуваар дээр байрлах гурван бөөмцөрийн хувьд хоорондох зай нь харгалзан 96,75 мкм, 27 мкм байна. Утааны бөөмцөр хоорондын зайг нарийвчлан ажиглахад утааны урсгалын дагуу ба хөндлөн чиглэлд бөөмцөр хоорондын зай бага зэрэг ялгаатай байгаа нь ажиглагддаг. Үүнээс гадна хөндлөн чиглэлд хэмжсэн бөөмцөр хоорондын зай хугацаанаас хамаарч хүндийн хүчний дагуу

ба хөндлөн чиглэлд мөн ялгаатай болох хандлага ажиглагддаг.

Бөөмцөрийн концентраци

Эхлээд утааг камерт оруулж утааны стационар урсгал бий болгосны дараа утааны бөөмцөр хоорондын зай болон бөөмцөрийн хэмжээг тогтооно. Бөөмцөр хоорондын дундаж зайг тодорхойлохдоо нэг шугам дээр оршиж байгаа хоёр бөөмцөрийн хоорондын зайг окулярын хуваарийг ашиглан хэмжинэ. Энэ хэмжилтийг олон тооны хос бөөмцөрийн хувьд гүйцэтгэж бөөмцөр хоорондын дундаж зайг тогтооно. Бөөмцөр хоорондын зайг l_{avr} гэж үзвэл утааны доторхи бөөмцөрийн концентраци буюу тоон нягтыг дараах илэрхийллээр тодорхойлж болно:

$$n \approx \frac{1}{l_{avr}^3}.$$

Энэ утга нь утааны урсгал дахь бөөмцөрийн концентраци юм. Энэ илэрхийллийг ашиглан тооцоо хийж төрөл бүрийн түлшний шаталтаас гарах утааны бөөмцөрийн концентрацийг тодорхойлж болно.

Агаарын бохирдлыг судалгаанд тоосонцорын концентрацийг $г/м^3$ нэгжээр илэрхийлдэг. Энэ нь утааны нэгж эзлэхүүнд байгаа бөөмцөрийн масс юм. Манай судалгааны аргаар энэ хэмжигдэхүүнийг ч мөн тодорхойлох боломжтой. Бөөмцөрийн материалын нягт α бол түүний масс $\mu \approx \alpha d_{avr}^3$ байх учраас утааны тоосонцорын нягт дараах томъёогоор илэрхийлэгдэнэ:

$$\rho = \mu n \approx \alpha \frac{d_{avr}^3}{l_{avr}^3}.$$

Тамхины утааны хувьд бөөмцөрийн дундаж хэмжээ нь 6 мкм, бөөмцөр хоорондын зай 56 мкм байдаг. Тамхины утааны бөөмцөрийн материалын нягт $\sim 1200 \text{ кг}/м^3$ байдаг [8]. Иймээс тамхины утааны доторхи бөөмцөрийн массаар илэрхийлэгдсэн концентраци буюу утааны доторхи бөөмцөрийн нягт дараах утгатай байна:

$$\rho = (1.5 \div 1.6) \cdot 10^{-3} \frac{г}{см^3}.$$

Агаарын бохирдлын судалгаанд нэгж үүсгэгчийн ялгаруулах тоосонцорын эмиссийн хэмжээг илэрхийлэх зайлшгүй шаардлагатай байдаг. Өнөөдөр Монгол улсын хэмжээнд тухайн үүсгэгчийн ялгаруулах нийт тоосонцорын массаар нь уг үүсгэгчийн бохирдуулах чанар буюу эмиссийг үнэлж тогтоодог. Энэ нь агаарын бохирдлын үнэлгээнд чухал боловч судалгааны ажилд параметр болгон хэрэглэхэд тохиромж муутай байдаг. Харин нэгж үүсгэгчийн бохирдуулагч

ялгаруулах чадварыг хувьд нэгж хугацаанд агаар мандал руу оруулж байгаа тоосонцорын хэмжээгээр нь үнэлбэл илүү тохиромжтой. Үүнийг судалгааны параметр болгон авахад ч тохиромжтой юм. Дээр тодорхойлсон утааны доторхи бөөмцөрийн нягтыг ашиглан энэ параметрийг зохиоё. Утааны нэгж эзлэхүүнд ρ масстай бөөмцөр агуулагдах бөгөөд энэ нь v хурдтайгаар гадагшилна. Нэгж хугацаанд урсан гарах утааны эзлэхүүн Sv (S -утаа гадагшлах хоолойн хөндлөн огтлолын талбай) учраас энэ утааг гаргаж байгаа үүсгэгчээс нэгж хугацаанд агаар мандал руу орох бөөмцөрийн хэмжээ дараах томъёогоор илэрхийлэгдэнэ:

$$m = \rho Sv.$$

Энэ хэмжигдэхүүн нь үүсгэгчийн бохирдол ялгаруулалтыг үзүүлэх бөгөөд г/с нэгжтэй байна. Үүнийг үндэслэн ширхэг тамхинаас агаар луу орох бохирдлын хурд $m \sim 1.5 \frac{\text{мг}}{\text{с}}$ байна гэдгийг тооцоолон гаргаж болно.

Дүгнэлт

Бидний дэвшүүлж буй энэ аргаар утааны доторхи бөөмцөрийн төдийгүй дисперслэгдсэн бусад орчны (цементийн үйлдвэрлэл, шүршдэг будагтай орчин, уур манантай орчин зэрэг) дотор байгаа бөөмцөрийн механик шинж чанарыг лабораторийн нөхцөлд бүрэн тодорхойлж болно. Энэ аргыг цахилгаан оронд хэрэглэх замаар бөөмцөрийн цахилгаан шинж чанарыг ч бас тодорхойлох боломжтой юм. Энэ арга нь түргэн, найдвартай төдийгүй илүү хямд төсөр юм. Энэ аргыг ашиглан тогтоосон утааны механик шинж чанарыг тодорхойлох хэмжигдэхүүнүүдийн утга бусад арга, багаж ашиглан хэмжсэн үр дүнтэй алдааны хязгаар дотор давхацдаг.

Сарнисан гэрлийн эрчим сарниулагч төвүүдийн тоонд пропорциональ байдаг. Ийм учраас судалж байгаа системийн сарниулагч төвийн

концентраци бага байвал бүртгэгдэж байгаа гэрлийн эрчим бага байх бөгөөд энэ нь энэ аргыг хэрэглэх хязгаарыг тогтоож байдаг.

Энэ аргачлалаар утааны бөөмцөрийн хэмжээг тогтоох нь хэд хэдэн давуу талтай. Үүний нэг нь бөөмцөрийн механик шинж чанарыг бодит хугацаанд нь хэмжиж чаддаг. Нөгөө талаас хөвөгч бөөмцөрийн хэмжээг тогтоож чаддагаараа онцлогтой.

Ашигласан материал

- [1] M.A.Liberman, "Introduction to Physics and Chemistry of Combustion", Springer-Verlag, (2008).
- [2] J.Warnatz, et. al., "Combustion: Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation", Springer, 4th ed., (2006).
- [3] K.S.Sajwan, et. al., "Coal Combustion Byproducts and Environmental Issues", Springer Science+Business Media, Inc., (2006).
- [4] P.Lu et al, Journal of Hazardous Materials, 199–200, 272–281, (2012)
- [5] P. G. Satsangi, Int. J. Environ. Sci. Technol. 11, 217–232 (2014)
- [6] Sadezky et al., Carbon, 43, 1731–1742, (2005)
- [7] J.Vanchinkhuu et al, Вестник Бурятского Государственного Университета: Химия. Физика, Вып. 2-3, 18-25, (2016).
- [8] T.J.Johnson, et al, Journal of Aerosol Science 75, 9–16 (2014).
- [9] M.W.McElroy et. al, Science vol 215, iss. 4528, 13-18, (1982)
- [10] C. Ehrlich et al., Atmospheric Environment, 41, 6236–62548 (2007)
- [11] P.Chylek, et al, Applied optics, 20, No. 17, 1, (1981)
- [12] M. Schnaiter et al., Journal of Aerosol Science, 34, pp. 1421–1444, (2003)

Нарны цацраг дэлхийн агаар мандлыг нэвтрэн газрын гадаргууд ирэхдээ шингэх ба сарних замаар эрчим нь сулардаг. $I_{\lambda 0}$ эрчимтэй нарны цацраг агаар мандлын дээд хил дээр буюу A_1 цэг дээр тусч байна гэе. Тодорхой долгионы урттай нарны цацраг B^1 цэгээс B цэгт ирэхэд эрчим нь:

$$dI_{\lambda} = -\alpha_{\lambda} \cdot \rho \cdot I_{\lambda} \cdot dS \quad (1)$$

хэмжээгээр буурна. Энд: $dS=BB^1$, ρ -агаарын нягт, α_{λ} - λ долгионы урттай цацраг нэгж масстай хэсгийг нэвтрэхэд харгалзах сулралын коэффициент. Газрын гадаргуу дээрх A цэг дээр ирж байгаа нарны цацрагийн урсгал нь:

$$\int_{I_0}^{I_{\lambda}} \frac{dI_{\lambda}}{I_{\lambda}} = - \int_0^S \alpha_{\lambda} \cdot \rho \cdot dS \quad (2)$$

тэгшитгэлээр тодорхойлогдоно.

Гурвалжин A_2AA_1 -ээс $\frac{AA_1}{AA_2} = \frac{1}{\sinh \theta}$, нөгөө

$$\text{талаас } \frac{AA_1}{AA_2} = \frac{M}{M_0} = m \quad (3)$$

болохыг харж болно. Иймд $m = \frac{1}{\sinh \theta}$ (4)

болно.

Үүнд: m -агаар мандлын оптик масс, h_0 -нарны хөөрөх өндөр. (4) томъёо нарны өндөр 20^0 -аас дээш байхад агаар мандлын массыг нилээд нарийвчлалтай илэрхийлдэг боловч нарны өндөр бага болоход алдаа нь тооцохоор хэмжээнд хүрдэг тул илүү нарийвчлалтай өөр томъёог хэрэглэдэг. (2) ба (3) томъёоноос:

$$\ln \frac{I_{\lambda}}{I_{\lambda 0}} = -\alpha_{\lambda} \cdot M_0 \cdot m \quad (5)$$

ба $M_0 \cdot \alpha_{\lambda} = \tau_{\lambda}$ гэж тэмдэглэвэл томъёо (5)-с λ долгионы урттай нарны монохромат цацрагийн эрчмийг

$$I_{\lambda} = I_{\lambda 0} \cdot e^{-\tau_{\lambda} \cdot m(\theta)} \quad (6)$$

олж болно. Үүнийг Буге-Ламбертийн хууль буюу агаар мандалд нарны шулуун цацрагийн эрчим сулрах хууль гэнэ. τ_{λ} -ийг спектрийн тухайн муж дахь агаар мандлын ерөнхий оптик зузаан гэж нэрлэдэг.

Агаар мандал дахь нарны цацрагийн эрчмийн сулралын хууль буюу Буге-Ламбертийн хуулиас агаар мандлын оптик зузааныг илэрхийлж бичвэл:

$$\tau_{\lambda} = -\frac{1}{m(\theta)} \ln \left(\frac{I_{\lambda}}{I_{\lambda 0}} \right) = \frac{1}{m(\theta)} \ln \left(\frac{I_{\lambda 0}}{I_{\lambda}} \right) \quad (7)$$

болно. Энд: $I_{\lambda 0}$ - спектрийн тухайн мужид агаар мандлын гаднах хилд ирж буй нарны шулуун цацрагийн утга, I_{λ} - спектрийн тухайн муж дахь нарны шулуун цацрагийн хэмжсэн утга.

Агаар мандлын ерөнхий оптик зузааныг дараах хэлбэрээр буюу оптик зузаануудын нийлбэр байдлаар илэрхийлж болно [1].

$$\tau_{\lambda} = \tau_a(\lambda) + \tau_R(\lambda) + \tau_{O_3}(\lambda) + \tau_{mg}(\lambda) + \tau_{PW}(\lambda) \quad (8)$$

Үүнд: $\tau_a(\lambda)$ -аэрозолын, $\tau_R(\lambda)$ -Релейн сарнилын, $\tau_{O_3}(\lambda)$ -озоны, $\tau_{mg}(\lambda)$ -холимог хийн, $\tau_{PW}(\lambda)$ -усны уурын оптик зузаан тус тус болно. (7) болон (8) томъёоноос аэрозолын оптик зузааныг тодорхойлбол дараах хэлбэртэй олдоно [1,2].

$$\tau_a(\lambda) = \frac{1}{m(\theta)} \left(\ln I_{\lambda 0} - \ln I_{\lambda} \right) - (\tau_R(\lambda) + \tau_{O_3}(\lambda) + \tau_{mg}(\lambda) + \tau_{PW}(\lambda)) \quad (9)$$

Аэрозолын оптик зузаан нь орон зай болон цаг хугацааны хувьд өөрчлөгдөж байдаг хэмжигдэхүүн бөгөөд түүнийг тодорхойлох зорилгоор скайрадиометр, нарны фотометр, эсвэл шилэн шүүлтүүрүүд бүхий актинометрийн тусламжтайгаар газрын гадаргад ирж буй нарны шулуун цацрагийг хэмждэг.

В. Ангстромын экспонент

Ангстромын экспонент нь аэрозолын оптик зузааны гэрлийн долгионы уртаас хамаарах хамаарлыг илтгэдэг параметр юм. Энэхүү параметр нь тухайн ажиглалт, судалгаа хийж буй бүс нутгийн агаар мандалд агуулагдаж буй аэрозолын шугаман хэмжээстэй хамааралтай бөгөөд ангстромын экспонентийн их утга нь тухайн агаар мандал дахь аэрозолын хэмжээс харьцангуй жижиг байгааг, харин бага утга нь тухайн агаар мандалд харьцангуй том хэмжээст аэрозол голчлон түгж буйг тус тус илтгэдэг. Жишээлбэл: $\alpha \ll 1$ үед агаар мандалд том ширхэгтэй буюу эффектив радиус нь $0.5 \mu\text{m}$ -аас их байх аэрозол давамгайлна хэмээн үнэлж болно. Харин, $\alpha \geq 1$ үед агаар мандалд жижиг ширхэгтэй буюу $0.5 \mu\text{m}$ -аас бага эффектив радиустай буюу биомасс шатааснаас үүссэн юмуу хотын агаарын бохирдолтой холбоотой аэрозол давамгайлж байна хэмээн үзэж болно. Ангстромын экспонентийг спектрийн тухайн муж дахь аэрозолын оптик зузаан болон долгионы уртын харьцаагаар тодорхойлдог [1].

$$\frac{\tau_\lambda}{\tau_{\lambda_0}} = \left(\frac{\lambda}{\lambda_0}\right)^{-\alpha} \quad (10)$$

α -ангстромын экспонентийг тодорхойлбол:

$$\alpha = -\frac{\ln \frac{\tau_\lambda}{\tau_{\lambda_0}}}{\ln \frac{\lambda}{\lambda_0}} \quad (11)$$

болно.

С. Нэг сарнилын альбе́до

Нэг сарнилын альбе́до (НСА) буюу single scattering albedo гэх энэхүү параметр нь агаар мандалд агуулагдаж буй аэрозолын бөөмс дээр гэрэл сулрах үзэгдлийг илэрхийлэх сулралын оптик параметруудийн шинж чанарын тодорхойлолтонд чухал ач холбогдолтой юм. Нэг сарнилын альбе́до нь гэрлийн нийт сулрал дахь сарнил болон шингээлтийн коэффициентуудын хоорондын харьцаагаар тодорхойлогддог [1]:

$$\omega = \frac{\sigma_s}{\sigma_a + \sigma_s} \quad (12)$$

Үүнд: ω -нэг сарнилын албе́до, σ_s -сарнилын коэффициент, σ_a -шингээлтийн коэффициент. Орчны харьцангуй чийгшил дэхь сарнилын коэффициентийг Кастин-Ханил нарын тэгшитгэлээр тооцоолбол:

$$\sigma_s(R) = \sigma_0(1 - R)^{-\gamma} \quad (13)$$

Дээрх тэгшитгэлд R -харьцангуй чийгшил, γ -аэрозолын бөөмсийн конденсацын идэвхийн параметр, σ_0 -аэрозолын хуурай бөөмсийн сарнилын коэффициент. Аэрозолын шингээлтийн коэффициентийг дараах байдлаар тодорхойлно:

$$\sigma_a = \sigma_m \times 10^{-3} \times M \quad (14)$$

Үүнд: σ_a -шингээлтийн коэффициент, σ_m -тодорхойлсон шингээлтийн хөндлөн огтлол, M -массын концентрац. (13) болон (14) тэгшитгэлүүдийг (12) томъёонд орлуулан бичвэл нэг сарнилын альбе́до ω нь дараах байдалтай олдоно [3,4].

$$\omega = (1 + \frac{M}{10^3 \sigma_0} \sigma_m (1 - R)^\gamma)^{-1} \quad (15)$$

Нэг сарнилын альбе́догийн утга $\omega \leq 1$ байх бөгөөд хэрвээ цацрагийн эрчим зөвхөн сарнилын нөлөөгөөр суларч байвал нэг сарнилын альбе́догийн тоон утга 1 байна. Харин тоон утга нь 1-ээс бага байвал агаар мандал дундуур нэвтрэн газрын гадаргад хүрч буй нарны цацрагийн эрчим зөвхөн сарнилаар биш мөн шингээлтийн нөлөөгөөр суларч буйг илэрхийлнэ.

Аэрозо́лын эзэлхүүний тархалт:

$(dV/d(\ln r))$ нь нэгж агаар мандал дахь тухайн $r + dr$ радиустай аэрозо́лын бөөмсийн нийт эзэлхүүнийг илэрхийлнэ.

III. СУДАЛГААНЫ ҮР ДҮН БА ХЭЛЭЛЦҮҮЛЭГ

Японы Чибегийн Их Сургуулийн эрдэмтэдтэй хамтарсан суурь судалгааны багаж Скайрадиометр /РОМ-1/-ийн хэмжилтийн өгөгдлөөр Улаанбаатар хот /47.55N, 106.53E, д.т.д 1310м/ орчимд өвөл, зун болон ойн түймрийн утаатай байх үед агаарын бохирдлын үзүүлэлтүүд болох 500нм-ийн долгионы уртад харгалзах аэрозо́лын оптик зузаан, нэг сарнилын альбе́до болон ангстромын экспонентийн статистик үзүүлэлтүүдийг харгалзан Хүснэгт 1, 2, 3-т үзүүлээ.

Хүснэгт 1. Өвөл, зун болон ойн түймрийн утаатай байх үед 500нм-ийн долгионы уртад харгалзах аэрозо́лын оптик зузааны статистик үзүүлэлтүүд

Улирал	Хэмжилтийн тоо	Дундаж	Хамгийн бага утга	Хамгийн их утга	Стандарт хазайлт
Өвөл	221	0.27	0.07	0.97	0.18
Зун	235	0.39	0.03	1.95	0.32
Түймрийн утаатай	34	1.07	0.69	1.65	0.15

Хүснэгт 1-ээс харвал аэрозо́лын оптик зузааны зун, өвлийн дундаж утгын ялгаа нь 0.12 буюу дундаж утгын хувьд өөрчлөлт багатай байна. Харин 2016 оны 7-р сарын 20-24 буюу ойн түймрийн утаатай байх үеийн дундаж утга нь харьцангуй огцом өссөн байна. Хамгийн их утга нь зун 1.95, хамгийн бага утга нь өвөл 0.03 байгаа нь ажиглагдаж байна.

Хүснэгт 2. Өвөл, зун болон ойн түймрийн утаатай байх үеийн ангстромын экспонентийн статистик үзүүлэлтүүд

Улирал	Хэмжилтийн тоо	Дундаж	Хамгийн бага утга	Хамгийн их утга	Стандарт хазайлт
Өвөл	221	1.53	0.13	2.30	0.29
Зун	235	1.07	0.01	1.76	0.37
Түймрийн утаатай	34	1.31	0.92	1.65	0.15

Ангстромын экспонентын дундаж утга нь өвөл, зун болоод түймрийн утаатай байх аль ч нөхцөлд $\alpha \geq 1$ байгаа нь 0.5 μm -ээс бага буюу биомасс шатаалтын процесстэй холбоотой аэрозоль давамгайлж байгааг харуулж байна. Хамгийн

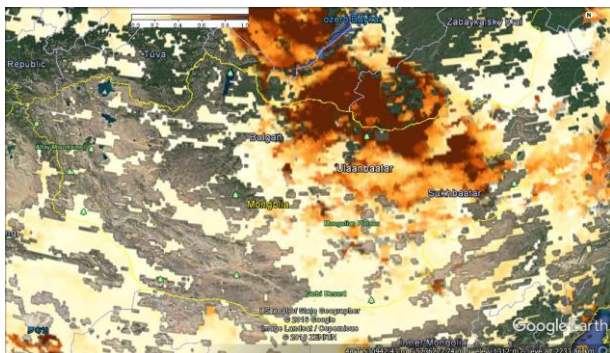
бага утга нь зун 0.01, хамгийн их утга нь 2.30 буюу өвлийн улиралд ажиглагдаж байна.

Нэг сарнилын альбедон дундаж утга өвөл 0.94, зун 0.89 буюу өвлийн дундаж их байгаа нь өвлийн улиралд сарнилын нөлөөтэй гэрлийн эрчмийн сулрал давамгайлж байгааг илтгэж байна.

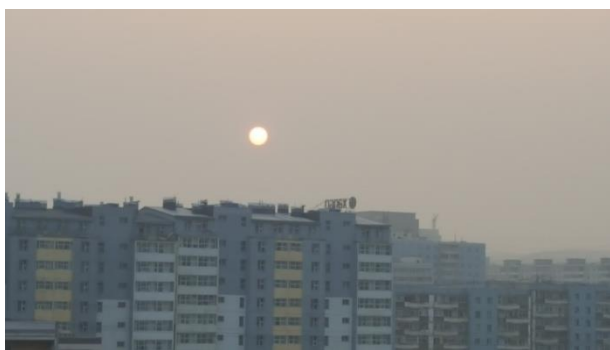
Хүснэгт 3. Өвөл, зун болон ойн түймрийн утаатай байх үед 500нм-ийн долгионы уртад харгалзах нэг сарнилын альбедон статистик үзүүлэлтүүд

Улирал	Хэмжилтийн тоо	Дундаж	Хамгийн бага утга	Хамгийн их утга	Стандарт хазайлт
Өвөл	221	0.94	0.81	1.00	0.05
Зун	235	0.89	0.73	1.00	0.08
Түймрийн утаатай	34	0.96	0.91	1.00	0.02

Сибирийн ойн түймэртэй байх үеийн аэрозолын оптик зузааны тархалтыг MODIS (17, July- 25, July) хиймэл дагуулын өгөгдлөөр Зураг 1а-д, Улаанбаатар хот орчмоор энэхүү түймрийн утаатай агаар орчил урсгалын нөлөөгөөр дайрч өнгөрөх үеийн агаар мандлын харагдах байдлыг Зураг 1б-д тус тус харууллаа.

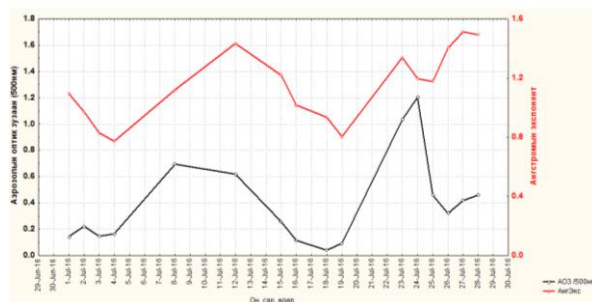


Зураг 1а. MODIS (17, July- 25, July) хиймэл дагуулын өгөгдлөөр гаргасан аэрозолын оптик зузааны тархалтын зураг.



Зураг 1б. Улаанбаатар хот орчмоор ойн түймрийн утаатай /7-р сарын 24-нд/ агаар дайран өнгөрөх үеийн фото зураг.

500 нм-ийн долгионы уртад харгалзах аэрозолын оптик зузаан болон ангстромын экспонентийн сарын явыг Зураг 2-т харууллаа.



Зураг 2. 500нм-ийн долгионы уртад харгалзах аэрозолын оптик зузаан ба ангстромын экспонентийн сарын явц /2016.07.01-28/.

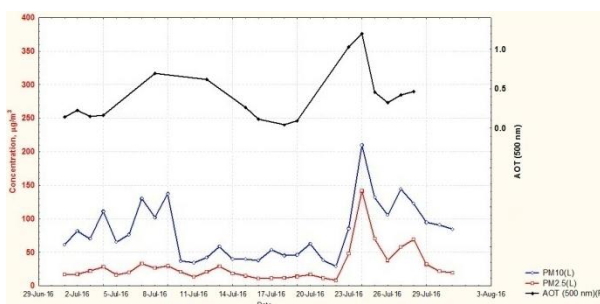
Зургаас харахад хоёр хэмжигдэхүүний ерөнхий явц төстэй, 500нм-т харгалзах аэрозолын оптик зузааны хамгийн их утга 7-р сарын 24-нд ажиглагдаж байгаа нь энэ өдрүүдэд түймрийн утаатай байсныг илтгэж байна. Улаанбаатар хотод байрлах агаарын чанарын хэмжилтийн станцуудын байрлалыг зураг 3-т харууллаа.



Зураг 3. Улаанбаатар хотод байрлах агаарын чанарын хэмжилтийн станцуудын байрлал.

Эдгээр станцууд нь харгалзан 2.5 μm болон 10 μm -ээс бага шугаман хэмжээтэй тоосонцор PM_{2.5}, PM₁₀ ба CO, SO₂, NO₂, O₃, салхины хурд, агаарын температур, агаарын даралт гэсэн 8 параметрийг хэмждэг.

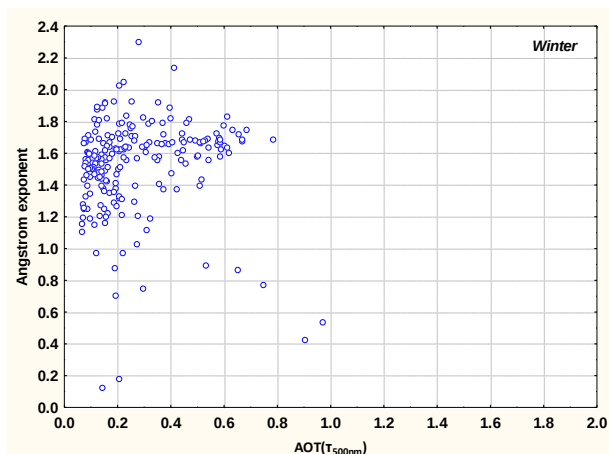
Зураг 4-т 500 нм-ийн долгионы уртад харгалзах аэрозолын оптик зузаан (AOT)-ы утга болон тоосонцор PM_{2.5}, PM₁₀-ийн хэмжээний өвлийн улирлын явцыг харууллаа.



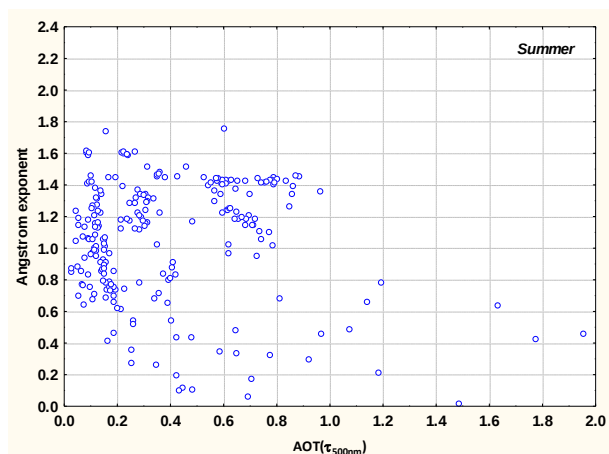
Зураг 4. 500нм-ийн долгионы уртад харгалзах аэрозолын оптик зузааны утга болон тоосонцор PM_{2.5}, PM₁₀-ийн хэмжээний явц /2016.07.01-28/.

Эдгээр утгууд 7-р сарын 24-нд огцом өсөлттэй байгаа нь ажиглагдаж байна. Өвөл, зун болон ойн түймрийн утаатай байх үеийн ангстромын экспонент (Angstrom exponent)-ийн утгын 500нм-ийн долгионы уртад харгалзах аэрозолын оптик зузаан (AOT)-аас хамаарсан тархалтыг харгалзан зураг 5а, 5б, 5в-д харууллаа.

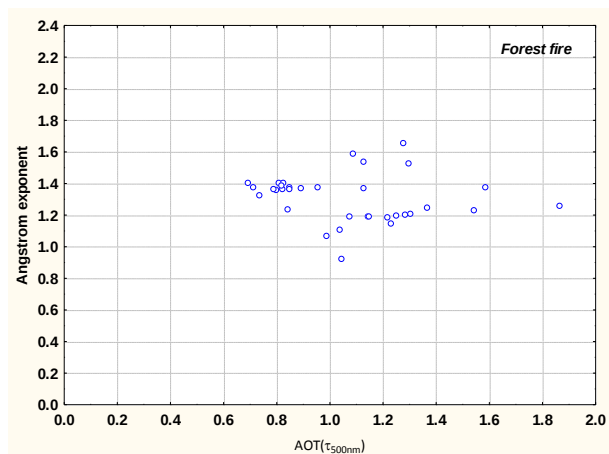
(a)



(б)



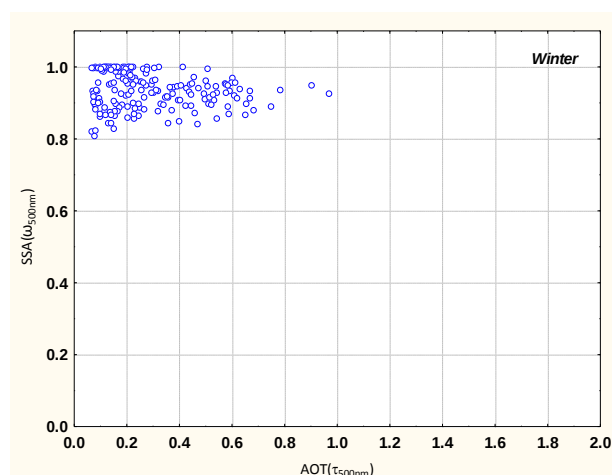
(в)



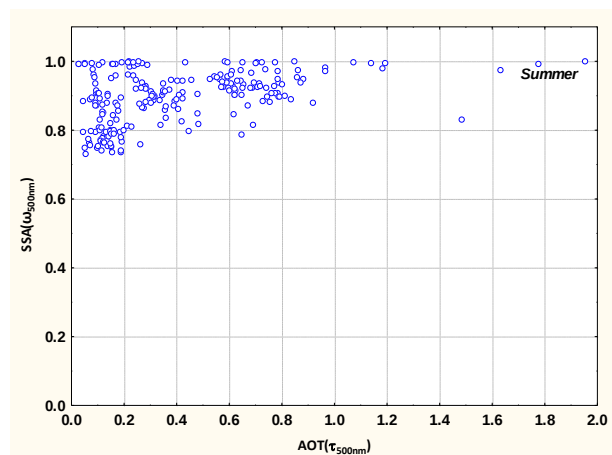
Зургаас харахад өвөл болон түймрийн утаатай байх үеийн ангстромын экспонентийн тархалтын утгын олонлогийн ихэнх нь $\alpha \geq 1$, харин зуны улиралд утгын олонлогийн бараг хагас орчим хувь нь $\alpha < 1$ байгаа нь өвөл, болоод утаатай байх үед 0.5μм-ээс бага буюу биомассын шаталттай холбоотой аэрозол, зуны энгийн өдрүүдэд 0.5 μм-ээс их буюу агаарын босоо хөдөлгөөн их байдагтай холбоотойгоор механик хөдөлгөөнөөс үүссэн аэрозол ихэсдэгийг харуулж байна.

Өвөл, зун болон ойн түймрийн утаатай байх үеийн 500 нм-ийн долгионы уртад харгалзах нэг сарнилын альбе́до (SSA /500nm)-н утгын 500 нм-ийн долгионы уртад харгалзах аэрозолын оптик зузаан (AOT)-аас хамаарсан тархалтыг харгалзан зураг 6а, 6б, 6в-д харууллаа.

(a)

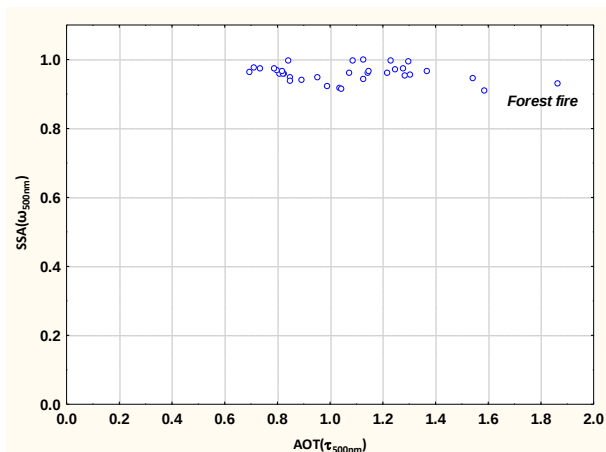


(б)



Зураг 5. (а), (б), (в) харгалзан өвөл, зун болон ойн түймрийн утаатай байх үеийн ангстромын экспонентийн утгын тархалт.

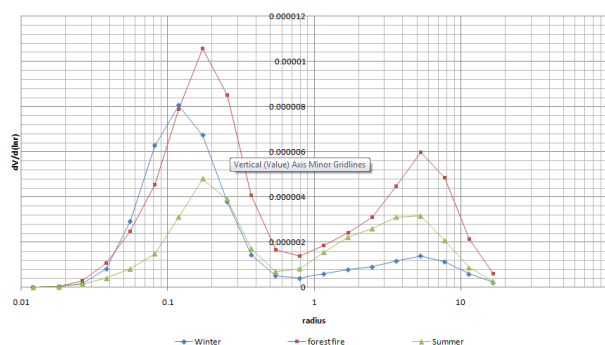
(B)



Зураг 6: ба, бб, бв харгалзан өвөл, зун болон ойн түймрийн утаатай байх үеийн 500нм-ийн долгионы уртад харгалзах нэг сарнилын альбедон утгын тархалт.

Эдгээр зургуудаас харвал өвлийн улиралд сарнилаас шалтгаалсан нарны цацрагийн эрчмийн сулрал давамгайлдаг бол зуны улиралд сарнилаас гадна, шингээлтээс шалтгаалсан цацрагийн эрчмийн сулрал ихэсдэг нь харагдаж байна. Харин түймрийн утаатай байх үед цаг агаар харьцангуй тогтвортой байсан. Тиймээс цацрагийн эрчмийн сулралын шалтгааны ихэнх хувийг сарнил эзэлж байна.

Агаар мандлын өөр өөр төлөвт буюу өвөл, зун болон ойн түймрийн утаатай байх үеийн аэрозолийн шугаман хэмжээнээс хамаарсан эзэлхүүний түгэлт $dV/d(\ln r)$ -ийг зураг 7-д харууллаа.



Зураг 7. Өвөл, зун болон ойн түймрийн утаатай байх үеийн аэрозолийн шугаман хэмжээнээс хамаарсан эзэлхүүний түгэлт.

Эндээс харвал агаар мандлын аль ч төлөв байдалд бага радиустай буюу 0.1-0.2μм-ийн радиустай аэрозолийн тархалт давамгайлж байна. Харин зуны улиралд харьцангуй том хэмжээстэй аэрозолийн эзэлхүүний тархалт ихэсдэг зүй тогтол ажиглагдлаа.

IV. ДҮГНЭЛТ

Энэхүү ажлаар агаар мандлын аэрозолийн үзүүлэлтүүд болох аэрозолийн оптик зузааны 500нм-т харгалзах утга, ангстромын экспонент, нэг сарнилын альбедон 500нм-т харгалзах утга болон аэрозолийн эзэлхүүний түгэлтийг агаар мандлын янз бүрийн нөхцөлд буюу өвөл, зун болон түймрийн утаатай байхад тодорхойллоо. Эдгээр тодорхойлсон дүнгүүдээс авч үзвэл:

- Аэрозолийн оптик зузааны хамгийн бага утга зуны улиралд илэрч байгаа нь энэ улиралд ахуйн зориулалттай түлш шатаах процесс зогсдог учраас тэнгэр хамгийн цэлмэг байдагтай, харин хамгийн их утга мөн зуны улиралд илэрч байгаа нь усны уурын агууламж буюу харьцангуй чийг мөн л зундаа их байдагтай холбоотой гэж үзэж байна. Агаарын чанарын болоод аэрозолийн оптик зузааны явцаас авч үзвэл 2016 оны 7-р сарын 24-нд аэрозолийн оптик зузаан (AOT) болон PM2.5, PM10 тоосонцруудын утга огцом өсөлттэй байгаа нь түймрийн утаанаас шалтгаалсан гэж үзэж байна.
- Агаар мандлын аль ч нөхцөлд ангстромын экспонентийн дундаж утга $\alpha \geq 1$ байгаа нь утаанаас шалтгаалсан аэрозол өвөл, зуны аль ч улиралд байдгийг харуулж байна. Мөн зуны улирлын тархалтаас авч үзвэл энэ улиралд том хэмжээстэй буюу 0.5нм-ээс их шугаман хэмжээстэй аэрозол ихсэж байгаа нь энэ улиралд агаарын босоо хөдөлгөөн харьцангуй их байдагтай холбоотойгоор механик хөдөлгөөнөөр үүсгэгдсэн аэрозол ихэсдэгтэй холбоотой.
- Нэг сарнилын альбедог авч үзвэл өвлийн улиралд сарнилтай холбоотой нарны цацрагийн эрчмийн сулрал давамгайлж байдаг бол зуны улиралд сарнил болон шингээлтээс шалтгаалсан цацрагийн эрчмийн сулрал аль аль нь байдаг байна. Энэ нь Монгол орны хувьд өвөлдөө цаг агаарын нөхцөл харьцангуй тогтвортой буюу тэнгэр цэлмэг байдаг харин зуны улиралд харьцангуй чийг ихэсдэгийг харуулж байна.
- 1. Аэрозолийн эзэлхүүний түгэлтийг авч үзвэл өвөл, зун болоод түймрийн утаатай байх үеийн аль ч нөхцөлд шаталттай холбоотой аэрозолийн түгэлт давамгайлж байна. Гэвч зуны улиралд бага радиустай аэрозолийн түгэлт багасаж, том хэмжээст

аэрозолын түгэлт ихэссэн зүй тогтол илэрч байгаа нь хэдийгээр зун ахуйн галлалт бараг үгүй ч усны уурийн агууламж ихэсдэгтэй харин том хэмжээст аэрозолын түгэлтийг агаарын босоо хөдөлгөөнтэй ихэсдэгтэй холбоотой гэж үзэж байна.

V. НОМ ЗҮЙ

- [1] “Агаар мандалд явагдах оптик үзэгдлийн судалгаа” суурь судалгааны төслийн тайлан.
- [2] Л.Бадрах, Б.Даариймаа, Ц.Баатарчулуун “Улаанбаатар хот орчмын агаар мандлын зарим оптик параметруудийг тодорхойлсон дүн” Физик сэтгүүл 2015 425 (19).
- [3] T.Takamura, P.Khatri, B.J.Sohn, N.Tugjsuren, B.Thana, M.Campanelli and G.Padithurai, “Aerosol optical properties and aerosol direct effect over typical sites of SKYNET network”, ICCASR 2013.
- [4] N.Tugjsuren and Ts.Baatarchuluun, “Aerosol optical properties over Ulaanbaatar and Mandalgovi, Mongolia”, The 2014 International Workshop on SKYNET and Asian Lidar Network, 2014.
- [5] Gregory L.Schuster, Oleg Dubovik and Brent N.Holben “Angstrom exponent and bimodal aerosol size”, J. Geophys. Res., vol.111,D07207, doi:10.1029/2005JD006328, 2006.

Influence of raindrop size distribution variations on the rain specific attenuation coefficients

Nyamjav J.¹, Batpurev M.^{2*}, and Jamiyan S.¹

¹ Department of Electronics and Communication Engineering, School of Engineering and Applied Sciences, National University of Mongolia, Ulaanbaatar, Mongolia.

² Department of Physics, School of Art and Science, National University of Mongolia, Ulaanbaatar, Mongolia.

The raindrop size distribution is one of main term to evaluate microwave attenuation due to rainfall. In this paper, the lognormal distribution is introduced to represent the raindrop-size distribution based on the measurement performed at the Chungnam National University. Since the distribution parameters are strongly scattered around the fitted value, we developed a new statistical model for the lognormal distribution parameters. Based on the new statistical model for raindrop size distribution parameters we have estimated influence of raindrop size distribution variations on the rain specific attenuation coefficients.

I. INTRODUCTION

The attenuation due to rain is caused by two mechanisms: the absorption and the scattering by raindrops. The behaviours of these mechanisms depend on three factors of rainfall medium: the complex refractive index of water, the shape of raindrops and raindrop size distributions. In the present studies we have used the model for complex refractive index of water proposed by Liebe et al [1], and assumed the shape of raindrops are sphere. Natural raindrop size distributions are highly variable [3,4]. Therefore, to account the variability of raindrop size distributions we have developed statistical model for the parameters of lognormal distributions [2]. Then influence of the variations of raindrop size distributions on the rain specific attenuation coefficients are estimated using Monte Carlo simulations.

II. BACKGROUND

The rain specific attenuation of the microwave due to rain can be expressed [6]:

$$\gamma = 4.343 \cdot 10^3 \cdot \int_{D_{\min}}^{D_{\max}} Q_{\text{ext}} \frac{\pi D^2}{4} \cdot N(D) \cdot dD \quad (1)$$

where $N(D)$ denotes raindrop size distribution. On the other hand, the rainfall rate is estimated as:

$$R = 6 \cdot \pi \cdot 10^{-4} \cdot \int_{D_{\min}}^{D_{\max}} D^3 \cdot v(D) \cdot N(D) \cdot dD \quad (2)$$

where $v(D)$ represents raindrop terminal velocity [6].

The experimental measurements and theoretical calculations indicate very good correlations between the rainfall rate and the specific attenuation

due to rain. Hence, for specific attenuation calculations used power regression equation

$$\gamma = \alpha \cdot R^\beta \quad (3)$$

Therefore theoretical calculation of the specific attenuation due to rain leads to estimate the specific attenuation coefficients α and β . Usually these coefficients are calculated based on the equilibrium shape and average raindrop size distributions [6]. The lognormal distribution for raindrop-size distribution is formulated as [2];

$$N(D; N_0, \mu, \sigma) = \frac{N_0}{\sqrt{2 \cdot \pi \cdot \mu \cdot \sigma}} \cdot \left(\frac{D}{\mu} \right)^{-1} \cdot \exp \left\{ -\frac{1}{2} \cdot \left[\frac{1}{\sigma} \ln \left(\frac{D}{\mu} \right) \right]^2 \right\} \quad (4)$$

The parameters of the lognormal distributions at given rainfall are considered as random variables with definite distribution functions. Experimentally estimated histograms of the lognormal distribution parameters hints the parameters μ and σ could be described by normal, and N_0 - by lognormal distributions. Hence the distribution of the parameters $\ln(N_0)$, μ and σ assessed as the 3-variates normal distribution with corresponding covariance matrix Σ , that is described as

$$p(x) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi})^3 \cdot |\Sigma|^2} \exp \left[\frac{1}{2} \cdot (x - M)^T \cdot \Sigma^{-1} \cdot (x - M) \right] \quad (5)$$

$$M = [\mu_{\ln(N_0)}, \mu_\mu, \mu_\sigma]$$

* Electronic address: batpurev@num.edu.mn

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{\ln(N_0)} & \text{Cov}(\ln(N_0), \mu) & \text{Cov}(\ln(N_0), \sigma) \\ \text{Cov}(\ln(N_0), \mu) & \sigma_{\mu} & \text{Cov}(\mu, \sigma) \\ \text{Cov}(\ln(N_0), \sigma) & \text{Cov}(\mu, \sigma) & \sigma_{\sigma} \end{pmatrix}$$

III. THE STATISTICAL MODEL FOR RAINDROP SIZE DISTRIBUTIONS

All the analyses given in this paper are based on the data collected from July 2003 to November 2003 at the Chungnam National University. The Joss-Walvogel distrometer (RD-80, Distromet Co. Ltd) has been used for measurement. To reduce the sampling error we have chosen distrometer integration time to be 60 sec. The parameters N_0 , μ and σ were estimated by the maximum likelihood estimation method. Then the parameters of the 3-variate normal distributions for $[N_0, \mu, \sigma]$ are estimated as function of rainfall rate by using robust estimation method. They are expressed

$$\begin{aligned} \mu_{\ln(N_0)} &= 0.1326 \cdot \ln(R) + 6.541 \\ \mu_{\mu} &= \begin{cases} 0.09782 \cdot \ln(R) + 0.537; & \text{if } R \leq 10 \\ 0.2511 \cdot \ln(R) + 0.1536; & \text{if } R > 10 \end{cases} \\ \mu_{\sigma} &= \begin{cases} 0.0829 \cdot \ln(R) + 0.27; & \text{if } R \leq 10 \\ -0.003323 \cdot \ln(R) + 0.4641; & \text{if } R > 10 \end{cases} \\ \sigma_{\ln(N_0)} &= -0.1183 \cdot \ln(R) + 0.801 \\ \sigma_{\mu} &= 0.02159 \cdot \ln(R) + 0.08213 \\ \sigma_{\sigma} &= -0.002328 \cdot \ln(R) + 0.0623 \\ \text{Cov}(\ln(N_0), \mu) &= 0.00692 \cdot \ln(R) - 0.07 \\ \text{Cov}(\ln(N_0), \sigma) &= 0.007371 \cdot \ln(R) - 0.02344 \\ \text{Cov}(\mu, \sigma) &= -0.002141 \cdot \ln(R) + 0.001834 \end{aligned} \quad (6)$$

The algorithm for generating the desired 3-varaites $[N_0, \mu, \sigma]$ random vector is as follows:

1. Generate $[z_1, z_2, z_3]$ vector as Normal (0,1) random variates.
2. Calculate $[\ln(N_0), \mu, \sigma]^T = [\mu_{\ln(N_0)}, \mu_{\mu}, \mu_{\sigma}]^T + \Sigma^{*}[z_1, z_2, z_3]$;
3. Return $[\exp(\ln(N_0)), \mu, \sigma]^T$.
4. Generate raindrop sizes using parameters $[N_0, \mu, \sigma]$

To test the proposed statistical model for raindrop size distribution, the Monte Carlo simulations were carried out. For example one realization of Monte Carlo simulation results are illustrated on Figure 1. Comparing of this

scatter-gram to those found in experiment gives excellent agreement.

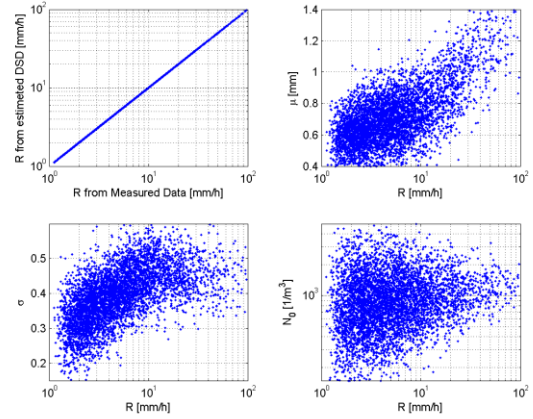


Figure 1. Scattergram of the lognormal distribution parameters.

IV. THE INFLUENCE OF THE RAINDROP SIZE DISTRIBUTIONS VARIATIONS ON THE RAIN SPECIFIC ATTENUATION COEFFICIENTS

Using our statistic model for raindrop size distribution, we have carried out Monte Carlo simulation to reveal the influence of the raindrop size distribution variations on the rain specific attenuation coefficients. For each simulated raindrop size distributions we have calculated the rain specific attenuation coefficients. These coefficients variations against frequency are shown Figure 3. Here, for each frequencies scattering of each coefficients are plotted using boxplot function of MATLAB. It has been found the specific attenuation coefficients more strictly influenced by raindrop size distributions than raindrop shape.

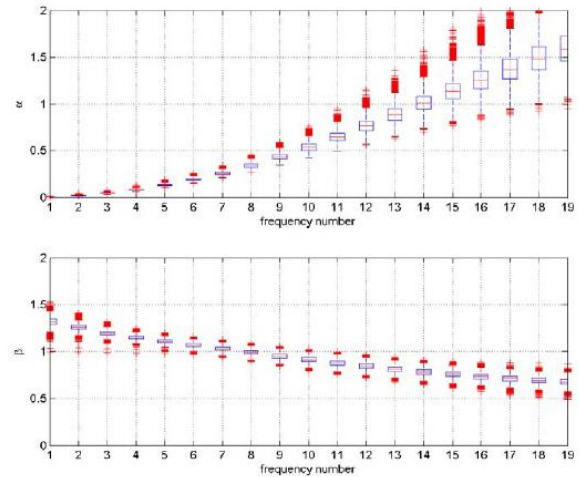


Figure 2. The influence of the raindrop size distribution variations on the rain specific attenuation coefficients.

The effect of raindrop size distribution variations on the β coefficient almost not depend on the

frequency, whereas, the effect of raindrop size distribution variations on the α coefficient increases with frequency. Hence, as frequency increases one should care about the raindrop size distribution variations.

V. CONCLUSIONS

In this paper, we introduced new models for raindrop-size distributions, based on the measurement performed at the Chungnam National University. It is concluded that the lognormal distribution is the most adequate candidate for describing raindrop-size distributions than other distribution models. Also, a new statistical model for the lognormal distribution parameters was developed to take advantage of the Monte Carlo method. In the framework of Mie scattering theory the influence on raindrop size distribution variations on the rain specific attenuation coefficients are estimated by Monte Carlo simulations. Simulation result shows the specific attenuation coefficients more strictly influenced by raindrop size distributions than raindrop shape.

VI. REFERENCES

- [1] Liebe, H.J., G. A. Hufford and T. Manabe., "A Model for Complex Permittivity of Water at frequencies below 1THz", J. Infrared Millimeter Waves. 12, pp. 659-674, 1991.
- [2] Nyamjav Jambaljav, °Yong-Ho Park, Jeong-Ki Pack, Chea-Ok Ko., "Empirical Study of Raindrop-Size Distribution", Korea-Japan Joint Conference on AP/EMC/EMT November 22- 23, 2004, pp.331-334, Seoul, Korea.
- [3] Jameson A. R., and Kostinski A. B., "What is a raindrop-size distribution?", Bull. Amer. Meteor. Soc. 82, pp. 1169-1177, 2001.
- [4] Ulbrich C. W., "Natural variations in the analytical form of the raindrop-size distribution", J. Climate Appl. Meteor. 22, pp. 1764-1775, 1983.
- [5] Van De Hust, H.C. "Light Scattering by Small Particles" New York, Wiley. 1957.
- [6] Medeiros Filho, F., S., Cole, R., S., Sarma, A., D., "Millimetre Wave Rain Induced Attenuation: Theory and Experiments", IEEE Proc., 1986, 133, (4) pp 308-314.

Улаанбаатар хотын агаар дахь радоны хэмжилт

Б. Булгансайхан^{1,*}, Н. Норов²

¹ ШУТИС-ийн Хэрэглээний Шинжлэх Ухааны Сургууль

² МУИС-ийн Цөмийн Физикийн Судалгааны Төв

Улаанбаатар хотын нийт 260 гаруй цэгээс тодорхой аргачлалын дагуу агаарын дээж авч агаар дахь цацраг идэвхит радоны агуулгыг тодорхойллоо. Агаар дахь Радоны агуулга нь Улаанбаатар хотын баруун болон хойд хэсгүүдээр илүү өндөр үзүүлэлттэй байна. Нийт хэмжилтийн дүнгээс харахад Нийслэлийн гаднах агаар дахь радоны дундаж хэмжээ 8.3 Бк/м³ байна. Үүнийг Дэлхийн дундаж үзүүлэлт болох 5 Бк/м³-тай харьцуулахад 1.9 дахин их байна.

Түлхүүр үгс: цацраг идэвхит инертийн хий, радоны удам, альфа бөөм, бета бөөм, гамма туяа

ОРШИЛ

Дэлхийн Эрүүл Мэндийн Байгууллагын 2012 оны судалгаагаар Улаанбаатар хот нь дэлхийн хамгийн их агаарын бохирдолтой хотуудын жагсаалтын 2-т бичигдсэн байна.



Зураг 1. Улаанбаатар хотын өвөл зуны харьцуулалт (Нэг цэгээс авсан зураг).

Дэлхийн Банкны судалгаагаар Улаанбаатар хотын агаарын бохирдлын 60-90% нь гэр хорооллын айл өрхүүдийн түүхий нүүрсний хэрэглээнээс үүдэлтэй юм. Улаанбаатар хотын айл өрхийн тоо сүүлийн жилүүдэд огцом нэмэгдэж байгаа бөгөөд нийт өрхийн 60 гаруй хувь нь (191 мянган өрх) гэр хороололд амьдарч байна. Дэлхийн Банкны судалгаагаар гэр хорооллын айл өрх халаалтын улиралд дунджаар 3.9-4.8 тонн нүүрс, 4.7-5.5 м³ мод хэрэглэдэг. Энэ нь Улаанбаатар хотын гэр

хорооллын айл өрхүүд жилд 800 орчим мянган тонн нүүрс хэрэглэдэг гэсэн үг юм.

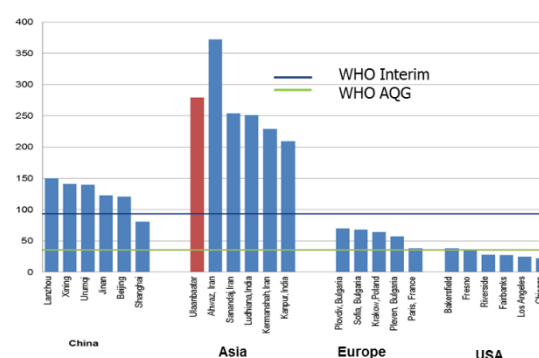


График 1. Дэлхийн хотуудын агаарын бохирдлын харьцуулалт (PM2.5 µg/m³).

Агаарын бохирдлыг PM, NO_x, SO_x-р илэрхийлэхээс гадна агаар дахь цацраг идэвхит элементийн агуулгыг тодорхойлох зайлшгүй шаардлагатай юм.

Иймд энэхүү судалгаагаар Улаанбаатар хотын тодорхой цэгүүдэд агаар дахь Радоны агууламжийг тодорхойлж, олон улсын дундаж түвшинтэй харьцууллаа.

СУДАЛГААНЫ АРГА ЗҮЙ

Радон бол өнгө, үнэр, амтгүй цацраг идэвхт инертийн хий юм бөгөөд байгаль дээр ²¹⁹Rn, ²²⁰Rn, ²²²Rn гэсэн түүний 3 изотоп тохиолдох “Радон” гэсэн нэр томъёог ихэвчлэн ²²²Rn изотопт хамааруулж ойлгодог. [1]
²²²Rn хамгийн их тархацтай байдаг нь түүний эх ²³⁸U изотопын тархац их, нөгөө 2 изотопоос хагас задралын үе ихтэй байдагтай холбоотой. ²²²Rn 3.8 хоногийн хагас задралын үетэй бөгөөд Улаанбаатар хотын агаар дахь эзлэхүүний идэвх болон түүний өөрчлөлтийг судлах нь түүний дараах шинжүүдээр тодорхойлогдоно.[2], [3]

* Electronic address: baldorjb@yahoo.com

- ^{222}Rn нь инертийн хий бөгөөд усанд уусдаг. Энэ шинж чанар нь түүнийг Улаанбаатар хотын хэрэглээний ус болон хөрсний усанд чөлөөтэй тархах боломжийг бүрдүүлнэ. [7]
- ^{222}Rn өөрөө альфа-бөөм цацруулж задарна. Түүний задралын бүтээгдэхүүнүүд ^{218}Po , ^{214}Pb , ^{214}Bi зэрэг охин цөмүүдийг “радоны удам” гэнэ. Эдгээр цацраг идэвхт охин цөмүүд хатуу төлөвтэй альфа, бета бөөм ба гамма туяа цацруулах тул цацрагийн нөлөөлөл ихтэй. [4]

Агаар дахь радоны эзлэхүүний идэвхийг тодорхойлох аргын зарчим нь агаар соруулж, шүүлтүүр дээр радоны задралаас үүсэх богино наст цацраг идэвхт цөмүүдийн задралын альфа бөөмийг радиометрээр тоолоход үндэслэнэ. АНУ-ын “SKC INC” компанийн Model 224-PCXR4 төрлийн агаар соруулагч нь агаар дахь радоны задралын бүтээгдэхүүн цацраг идэвхт изотопуудыг барьж чадах шүүлтүүр ашиглах тохиолдолд 2.5 литр агаар 1 минутад сорно.



Зураг 2. АНУ-ын “SKC INC” компанийн Model 224-PCXR4 төрлийн агаар соруулагч.

5 минут агаар соруулж цацраг идэвхт тоосонцор суусан шүүлтүүрийг сцинтиляцийн тоолуур бүхий “Environmental Instrumnets Canada Inc” компанийн Model TM372 төрлийн альфа тоолуурт тавьж хэмжинэ.

Агаарын дээжийг 5 минут соруулж дууссанаас хойш 5, 15, 30 минутын дараа фильтрийн идэвхийг α - тоолуураар 3 удаа хэмжсэн тоолуурын тоолох хурдыг дараах томъёонд орлуулж радоны задралын богино наст бүтээгдэхүүнүүдийн агаар дахь агуулалтыг тодорхойлно.

$$C_{RaA} = \frac{1}{k\eta U} (21.5N_1 - 48.5N_2 + 31.1N_3)$$

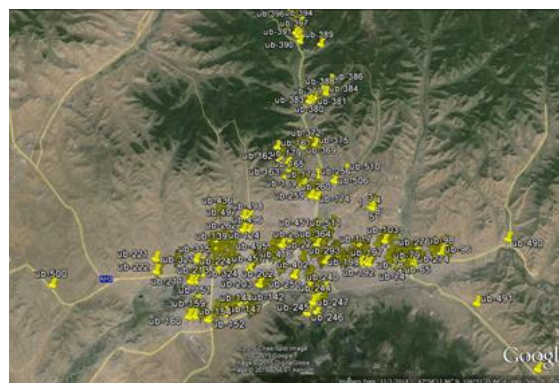
$$C_{RaB} = \frac{1}{k\eta U} (11.7N_3 - 1.4N_1 - 4.8N_2)$$

$$C_{RaC} = \frac{1}{k\eta U} (9.9N_2 - 0.8N_1 - 8.2N_3) \quad [6]$$

Үүнд: C_{RaA} ; C_{RaB} ; C_{RaC} радоны задралын богино наст ^{218}Po , ^{214}Pb , ^{214}Bi -ийн агаар дахь агуулалт ($\text{Бк}/\text{м}^3$); U – агаар соруулах хурд ($\text{л}/\text{мин}$); k – фильтрийн барих чадвар; η - α - тоолуурын бүртгэх чадвар; N_1 , N_2 , N_3 – агаар соруулж дууссанаас 5, 15, 30 минутын дараах тоолуурын тоолох хурд ($\text{имп}/\text{мин}$).

СУДАЛГААНЫ ҮР ДҮН

Судалгаанд Улаанбаатар хотын бүхий хэсгийг хамруулан нийт 260 гаруй цэгээс дээж авч шинжиллээ. Дээжийг Улаанбаатар хотын агаарын бохирдлын хамгийн их үед буюу 12 сарын 06-наас 12 сарын 18-ны хооронд авч шинжлэн судлав.



Зураг 3. Дээж авсан цэгүүдийн байршил.

Дээж авсан цэгүүдийг байршлаас нь шалтгаалан 21 бүлэг болгон ангилж хэмжилт хийсэн болно. Тухайн 21 бүлэгт хамаарагдах хэмжилтүүдийн үр дүнгийн дунжийг доорх хүснэгт болон графикт үзүүлж дэлхийн дундаж утгатай харьцуулав.

Хүснэгт 1. Хэмжилтийн үр дүн.

Д.д	Хэмжилт хийсэн газар	Дээж авсан огноо	Дээжийн тоо	Дундаж $\text{Бк}/\text{м}^3$
1	СХД Баянхошуу орчимд	2014.12.06	20	10,77
2	БГД 3-р хороолол	2014.12.07	10	11,35
3	БГД 4-р хороолол	2014.12.07	10	9,33
4	ЧД 4-н зам орчим	2014.12.07	10	10,46
5	СБД Дөлгөөн нуур орчимд	2014.12.07	10	7,71
6	БЗД MCS TIGER & MCS COCA COLA орчимд	2014.12.08	20	5,87
7	БЗД Баянзүрх зах орчимд	2014.12.09	10	10,41
8	БЗД Хужирбулан орчимд	2014.12.09	10	5,2

9	БЗД Да хүрээ зах орчим	2014.12.09	15	4,38
10	БЗД Нэгдсэн эмнэлгийн орчим	2014.12.10	5	3,12
11	СХД Их наран, Бага наран	2014.12.11	20	14,23
12	ХУД Яармаг орчим	2014.12.12	10	7,54
13	ХУД Нисэх орчим	2014.12.12	10	6,43
14	Чингэлтэй гэр хороолол 17,18-р хороо	2014.12.13	20	6,53
15	БЗД гэр хороолол	2014.12.14	20	4,69
16	3,4-р дулааны цахилгаан станц үнсэн сан	2014.12.15	20	12,46
17	22-н товчоо, Номин агуулах, Мах маркет	2014.12.18	9	11,19
18	2-р дулааны цахилгаан станц үнсэн сан	2014.12.18	10	8,54
19	Зайсан орчим	2014.12.18	12	3,35
20	АПУ ХХК орчим	2014.12.18	4	4,99
21	7-н буудал орчим	2014.12.18	5	10,22

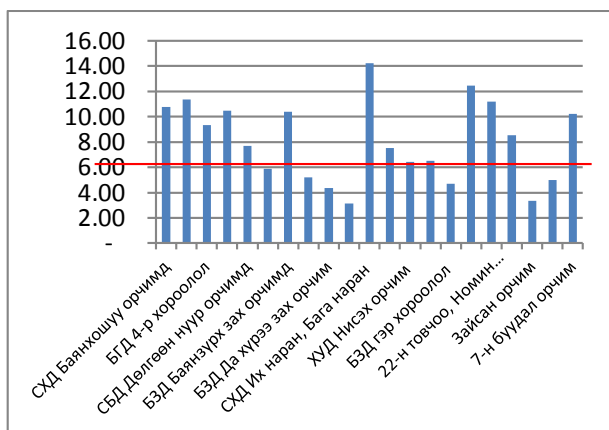


График 2. Хэмжилтийн дүнг дэлхийн дундаж үзүүлэлттэй харьцуулах нь. Гадаад орчны агаар дахь радоны дэлхийн дундаж утга - 5Бк/м³.

ДҮГНЭЛТ

- Дээрх судалгаанаас харахад Улаанбаатар хотын агаарын чанарын Радоны агууламж нь Баруун, зүүн наран, 4-р цахилгаан станцын үнсэн сан, 3-р хороолол, 22-ын товчоо, Баянхошуу, 4 зам, Баянзүрх зах, 7 буудал зэрэг газруудад хамгийн их буюу дэлхийн дундаж утгаас 2-с дээш дахин их байна.
- Да хүрээ зах, БЗД-ийн эмнэлэг, Зайсан болон АПУ ХХК-ын орчимд хамгийн бага буюу дэлхийн дундаж утгаас бага байна.

- Нийт хэмжилтийн дүнгээс харахад Нийслэлийн гаднах агаар дахь радоны дундаж хэмжээ 8,3 Бк/м³ байна. Үүнийг Дэлхийн дундаж үзүүлэлт болох 5 Бк/м³-тай [5] харьцуулахад 1.9 дахин их байна. Энэ нь агаарын бохирдол, гаднах агаарын хэмжилтийг өвлийн улиралд хийж байгаатай холбоотой байж болно.
- Гадна агаар дахь радоны зөвшөөрөгдөх хэмжээг заасан дэлхийн болон Монгол улсын стандарт гэж байдаггүй. Иймд агаар дахь цацрагийн хэмжээний тухай Монгол Улсын стандарт, нормативыг шинээр тогтоож, нийслэлийн нутаг дэвсгэрт агаар дахь дарь цацраг идэвхт бодисын хэмжээг тогтмол хэмжих, агаарын бохирдлын цацрагийн эх үүсвэрийг тодорхойлох шаардлагатай байна.

НОМ ЗҮЙ

- [1] United Nations Scientific Committee on the Effects of Atomic Radiation (UNSCEAR). Sources and Effects of Ionizing Radiation. Report to the General Assembly, UN New York. (1988).
- [2] United Nations Scientific Committee on the Effects of Atomic Radiation (UNSCEAR). Sources and Effects of Ionizing Radiation. Report to the General Assembly, UN New York. (1993).
- [3] United Nations Scientific Committee on the Effects of Atomic Radiation (UNSCEAR). Sources and Effects of Ionizing Radiation. Report to the General Assembly, UN New York. (2000).
- [4] 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).
- [5] ICRP International Commission on Radiological Protection. Protection against Radon-222 at Home and Work. ICRP Publication 65. Ann. ICRP 23/2 (1993).
- [6] International Commission on Radiological Protection, Recommendations of the ICRP, Publication 60, Ann. ICRP Vol.21, Elsevier Science, Oxford (1991).
- [7] 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).

Electric Dipole Transition of the First Excited State of ${}^9\text{Be}$

M.Odsuren^{1,2,*}, K.Katō³, G.Khuukhenkhuu^{1,2}, S.Davaa^{1,2}

¹*School of Engineering and Applied Sciences, National University of Mongolia, Ulaanbaatar, Mongolia*

²*Nuclear Research Center, National University of Mongolia, Ulaanbaatar, Mongolia*

³*Nuclear Reaction Data Centre, Faculty of Science, Hokkaido University, Sapporo, Japan*

The E1 transition strength of the $1/2^+$ first excited state of ${}^9\text{Be}$ is calculated using three body cluster model and complex scaling method where the excited state is correctly treated as unbound. The $1/2^+$ resonance is obtained using the attractive three-body potential.

PACS numbers: 27.20.+n 6≤A≤19, 21.60.Gx, 24.30.Gd, 25.20.Lj

Keywords: light nuclei, electric dipole transition, potential strength

INTRODUCTION

It is a longstanding problem to determine resonance energy and decay width of the first excited $1/2^+$ state of ${}^9\text{Be}$, which is closely connected with the problem to clarify whether it is a resonant state or not. The resonant structure [1-5] and a virtual characteristic state [6] of ${}^9\text{Be}(1/2^+)$ have been studied by the various theoretical approaches and photo-dissociation experiments. However, a complete understanding on the nature of ${}^9\text{Be}(1/2^+)$ state has not yet been obtained. It is desired to perform a more comprehensive study based on an $\alpha+\alpha+n$ three-body calculations which can treat the bound ground state and also the unbound resonant states of ${}^9\text{Be}$ in an unified framework.

The low-energy photodisintegration of ${}^9\text{Be}$ has also received much attention from the viewpoint of the astrophysical interest. The photodisintegration cross section has been discussed to be negligibly small in the energy region between thresholds of $\alpha+\alpha+n$ (1.5736 MeV) and ${}^8\text{Be}+n$ (1.6654 MeV). The observed cross section above the ${}^8\text{Be}+n$ shows a prominent peak, although there are some discrepancies among the experimental absolute values. The cross section profile has an asymmetric shape and cannot be explained by a simple resonance formula like the Breit-Wigner form.

In this work, the complex scaling method (CSM) [7-8] is applied to an $\alpha+\alpha+n$ three-cluster model for understanding the nuclear structure and (γ,n) reactions for low-lying states in ${}^9\text{Be}$.

We treat the unbound nature of the $1/2^+$ state of ${}^9\text{Be}$ and investigate the E1 transition between $1/2^+$ and $3/2^-$ states, which contributes to the (γ,n) reaction dominantly. Furthermore, we examine the resonance formation in the (γ,n) reaction to see whether a direct three-body breakup or a two-step process through the ${}^8\text{Be}+n$ intermediate resonant state is dominant.

FRAMEWORK

A. $\alpha+\alpha+n$ three body model

The Schrödinger equation for the $\alpha+\alpha+n$ system using the orthogonality condition model (OCM) is solved. The Schrödinger equation is given as

$$\hat{H} \Psi_{J^\pi}^\nu = E_\nu \Psi_{J^\pi}^\nu \quad (1)$$

where J^π is the total spin and parity of the $\alpha+\alpha+n$ system and ν is the index of eigenstates. The energy eigenvalue E_ν is measured from the $\alpha+\alpha+n$ threshold of ${}^9\text{Be}$. The Hamiltonian for the relative motion of the $\alpha+\alpha+n$ three-body system is given as

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^3 t_i - T_{c.m.} + \sum_{i=1}^2 V_{an}(\xi_i) + V_{\alpha\alpha} + V_{PF} + V_3 \quad (2)$$

where t_i and $T_{c.m.}$ are kinetic energy operators for each particle and the center-of mass of the system, respectively. The interaction between the neutron and the i -th α particle is given as $V_{an}(\xi_i)$, where ξ_i is the relative coordinate between them. The Kanada, Kaneko, Nagata, Nomoto (KKNN) potential [9] is employed for V_{an} . For the $\alpha+\alpha$ interaction $V_{\alpha\alpha}$, we employ the same potential as used in Ref. [10], which is a folding potential of the effective nucleon-nucleon (NN) interaction and the Coulomb interaction.

The pseudopotential $V_{PF} = \lambda |\Phi_{PF}\rangle\langle\Phi_{PF}|$ is the projection operator to remove the Pauli forbidden states from the relative motions of $\alpha+\alpha$ and $\alpha+n$. The Pauli forbidden state Φ_{PF} is defined as the harmonic oscillator wave functions by assuming the $(0s)^4$ configuration, whose oscillator length ($\lambda=10^6$ MeV) is fixed to

* Electronic address: odsurenn@gmail.com

reproduce the observed charge radius of the α particle. In the present calculation, the $\alpha+\alpha+n$ three-body potential V_3 is used. The explicit form of V_3 is given as

$$V_3 = v_{3b} \exp(-\mu\rho^2) \quad (3)$$

where ρ is the hyper-radius of the $\alpha+\alpha+n$ system. The hyper-radius is defined as

$$\rho^2 = 2r^2 + \frac{8}{9}R^2,$$

where r is the distance between two α 's and R is that between the neutron and the center-of-mass of the α - α subsystem. To reproduce the ground-state properties, we take the potential strength v_{3b} and the potential width μ as 1.10 MeV and 0.02 fm^{-2} , respectively. For other spin-parity states, the same value of μ as used in $3/2^-$ states is employed, and different strengths are used to reproduce the energy positions of the observed peaks in the photodisintegration cross section.

The Schrödinger equation with the coupled rearrangement-channel Gaussian expansion method [11] is solved. In the present calculation, the ^9Be wave function $\Phi_{j\pi}^\nu$ is described in the Jacobi coordinate system as

$$\Phi_{j\pi}^\nu = \sum_{cij} C_{cij}^\nu(J^\pi) \left[[\phi_i^j(r_c) \phi_L^j(\mathbf{R}_c)]_I, \chi_{\frac{1}{2}}^\nu \right]_{J^\pi} \quad (4)$$

where $C_{cij}^\nu(J^\pi)$ is a expansion coefficient and $\chi_{\frac{1}{2}}^\nu$ is the spin wave function. The relative coordinates r_c and $\mathbf{R}_c$ are those in three kinds of the Jacobi coordinate systems indexed by c ($= 1, 2, 3$), and the indices for the basis functions are represented as i and j . The spatial part of the wave function is expanded with the Gaussian basis functions.

B. Complex scaling method

To calculate the photodisintegration cross section, we use the CSM [7-8,10]. In the CSM, the relative coordinates ξ (r_c and $\mathbf{R}_c$) are transformed as

$$U(\theta)\xi U^{-1}(\theta) = \xi e^{i\theta}, \quad (5)$$

where $U(\theta)$ is a complex scaling operator and θ is a scaling angle being a real number. Applying this transformation to Eq. (1), the complex scaled Schrödinger equation is obtained as

$$\hat{H}^\theta \Psi_{j\pi}^\nu(\theta) = E_\nu^\theta \Psi_{j\pi}^\nu(\theta). \quad (6)$$

By solving the complex-scaled Schrödinger equation with appropriate $\mathcal{L}^2$ basis functions, we

obtain the energy eigenvalues E_ν^θ and eigenstates $\Psi_{j\pi}^\nu(\theta)$ (their biorthogonal states $\tilde{\Psi}_{j\pi}^\nu(\theta)$) [10].

The energy eigenvalues E_ν^θ obtained on the complex energy plane are governed by the Aguilar, Balslev, Combes (ABC) theorem [7-8]. A schematic picture of the energy eigenvalue distribution is shown in Fig. 1.

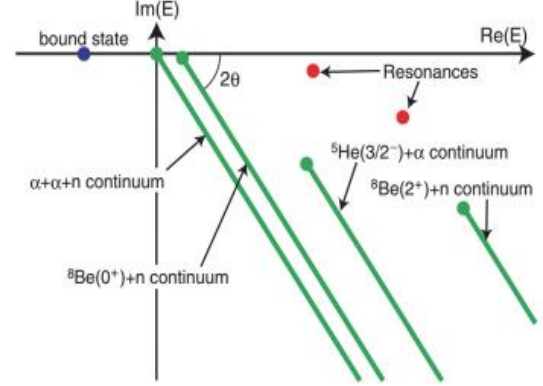


Figure 1: Schematic picture of energy eigenvalue distribution on the complex energy plane for the $\alpha+\alpha+n$ system.

In the CSM, the energies of bound states are given by real numbers and are invariant under the complex scaling. On the other hand, resonances and continuum states are obtained as eigenstates with complex energy eigenvalues. The resonances are obtained as isolated eigenstates on the complex energy plane, whose energies are given as $E_\nu^\theta = E_\nu^r - i\Gamma_\nu/2$. The resonance energies E_ν^r and the decay widths Γ_ν are independent of the scaling angle θ . The complex-scaled continuum states are obtained on branch cuts rotated down by 2θ as shown in Fig. 1.

The branch cuts start from the different thresholds for two- and three-body continuum states in the case of the $\alpha+\alpha+n$ system as shown in Fig. 1. This classification of the continuum states is useful in investigation of properties of the ^9Be photodisintegration.

Using the energy eigenvalues and eigenstates of the complex-scaled Hamiltonian $\hat{H}^\theta$, the complex-scaled Green's function is defined as

$$\mathcal{G}^\theta(E; \xi, \xi') = \langle \xi | \frac{1}{E - \hat{H}^\theta} | \xi' \rangle = \sum_\nu \frac{\Psi_{j\pi}^\nu(\theta) \tilde{\Psi}_{j\pi}^\nu(\theta)}{E - E_\nu^\theta} \quad (7)$$

In the derivation of the right-hand side of Eq. (7), we use the extended completeness relation. The cross section is calculated

$$^9\text{Be}(3/2^-) + \gamma \rightarrow \alpha + \alpha + n,$$

in terms of the electric-dipole transition. In the present calculation, we focus on the low-lying region of the photodisintegration cross section and take into account only the dipole responses.

The photodisintegration cross section σ is given by the $E1$ transition as

$$\sigma^\gamma(E_\gamma) = \sigma_{E1}(E_\gamma), \quad (8)$$

where E_γ is the incident photon energy. The energy E in Eq. (7) is related to E_γ as $E = E_\gamma - E_{g.s.}$ where $E_{g.s.}$ is the binding energy of the ${}^9\text{Be}$ ground state measured from the $\alpha+\alpha+n$ threshold. The cross sections for the electric-dipole transition σ_{E1} are expressed as the following form:

$$\sigma_{E1}(E_\gamma) = \frac{16\pi^3}{9} \left(\frac{E_\gamma}{\hbar c} \right) \frac{dB(E1, E_\gamma)}{dE_\gamma}. \quad (9)$$

Using the CSM and the complex-scaled Green's function in Eq. (7), the electric-dipole transition strength is given as

$$\begin{aligned} & \frac{dB(E1, E_\gamma)}{dE_\gamma} \\ &= -\frac{1}{\pi} \frac{1}{2J_{g.s.} + 1} \text{Im} \left[\sum_v \langle \tilde{\Psi}_{g.s.}^v(\theta) || \hat{O}_{E1}^\theta || \Psi^v(\theta) \rangle \right] \\ & \quad \times \frac{1}{E - E_g^v} \langle \tilde{\Psi}^v(\theta) || \hat{O}_{E1}^\theta || \Psi_{g.s.}(\theta) \rangle. \end{aligned} \quad (10)$$

Where $J_{g.s.}$ and $\Psi_{g.s.}(\theta)$ are the total spin and the wave function of the ground state, respectively, and $\hat{O}_{E1}^\theta$ is an electric-dipole transition operator.

RESULTS AND DISCUSSION

The $3/2^-$ ground state of ${}^9\text{Be}$ is calculated at 2.16 MeV from the $\alpha+\alpha+n$ threshold with no three-body potential ($v_3 = 0$) by M.Kato [12]. The two-cluster potentials $V_{\alpha n}$ and $V_{\alpha\alpha}$ are fixed to reproduce the experimental data of the corresponding sub-systems. Here, we introduce a repulsive three-body potential $v_{3b} = 1.10 \text{ MeV}$, $\mu = 0.02 \text{ fm}^{-2}$) to fit the observed binding energy (-1.574 MeV) of ${}^9\text{Be}$.

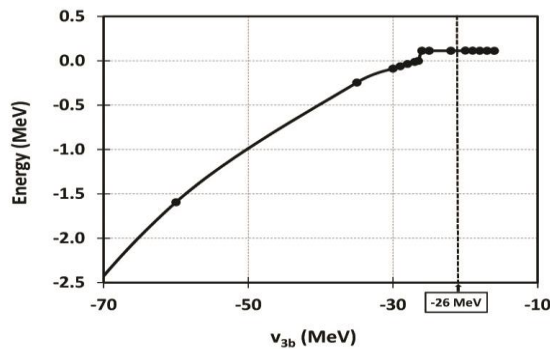


Figure 2. Energies of the $1/2^+$ state measured from the $\alpha+\alpha+n$ threshold, as a function of the three-body potential strength v_{3b} .

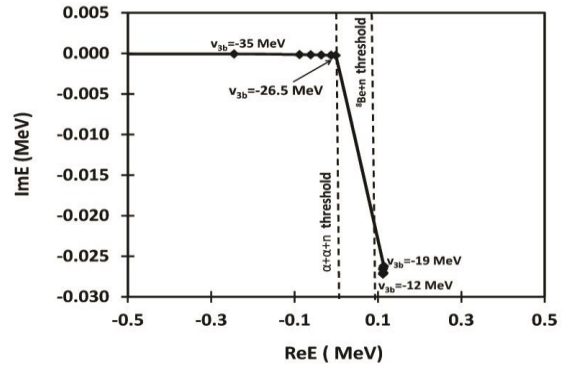


Figure 3. The eigenvalue trajectory of the $1/2^+$ state in the complex-energy plane.

The Hamiltonian Eq.(2) reproduces all the threshold energies of $\alpha+\alpha+n$, ${}^8\text{Be}+n$ and ${}^5\text{He}+\alpha$ in the ${}^9\text{Be}$ nucleus. Using this Hamiltonian, we do not obtain the $1/2^+$ resonance of ${}^9\text{Be}$. This result is the same as that obtained in Refs. [6, 12].

To clarify the resonance nature of the $1/2^+$ state, we carry out three-body calculation of the $1/2^+$ state by adding the three-body potential. With a strong attractive three-body potential with a negative value of v_{3b} , the $1/2^+$ state is obtained as a bound state as shown in Fig. 2.

From calculations for various values of v_{3b} , we find that the $1/2^+$ state becomes bound with the value of v_{3b} below -26 MeV. Increasing the value of v_{3b} from -26 MeV gradually, we search for the $1/2^+$ resonance solutions in the CSM, whose eigenvalue trajectory is shown in Fig. 3. It can be seen that there is a jump from the $\alpha+\alpha+n$ threshold energy to a complex value, the real part of which corresponds to a energy just above the ${}^8\text{Be}+n$ threshold. This discontinuity of the trajectory may be understood by considering the properties of solutions in the CSM. In the CSM, resonance poles existing below the 2θ line of continuum states starting from the lowest threshold of $\alpha+\alpha+n$ cannot be obtained as isolated eigenvalues. Because of the analyticity condition for the present complex scaled Hamiltonian, the θ value must be smaller than 45° [7].

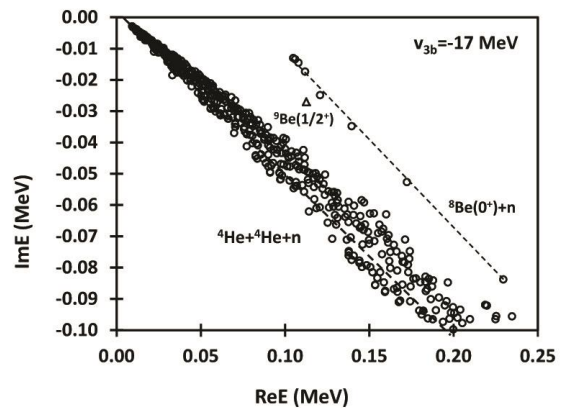


Figure 4. The $1/2^+$ energy eigenvalue distribution in the complex energy plane for the $\alpha+\alpha+n$ model.

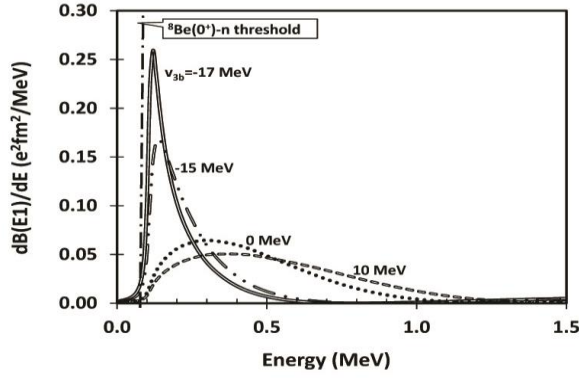


Figure 5. The $E1$ transition strength for ${}^9\text{Be}$ ($3/2^-$ to $1/2^+$) as a function of energy E , changing the strength v_{3b} of the three-body potential.

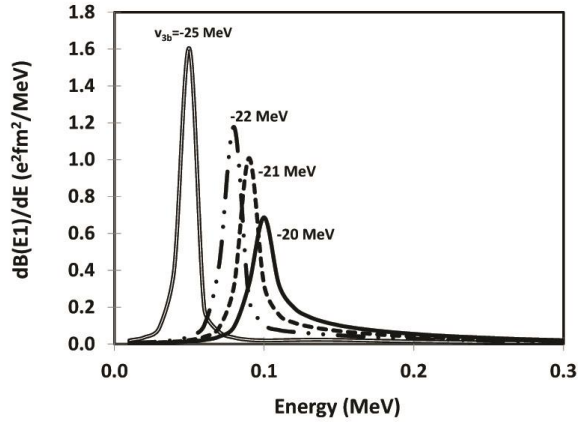


Figure 6. The $E1$ transition strength ${}^9\text{Be}$ ($3/2^-$ to $1/2^+$) calculated for $v_{3b} = -20, -21, -22, -25$ MeV.

For virtual states (whose energy eigenvalue is located at the negative real axis of the second Riemann surface), the angle θ has to be larger than 90° . When a virtual state exists in the ${}^8\text{Be}+n$ channel, a jump is expected in the resonance trajectory as discussed in Ref. [13]. The present case is not a two-body system but the $\alpha+\alpha+n$ three-body one. It is difficult to trace the jump behavior of the pole solutions in the CSM.

Fig. 4 displays an example of the eigenvalue distribution of ${}^9\text{Be}(1/2^+)$ for $v_{3b} = 17$ MeV with $\theta = 15^\circ$. Besides the triangle corresponding to the resonance, all solutions for continuum states described by open circles lie on two straight lines starting from positions of the $\alpha+\alpha+n$ three- and ${}^8\text{Be}(0^+)+n$ two-body thresholds. To investigate the effect of the $1/2^+$ resonance of ${}^9\text{Be}$, the $E1$ transition strength is calculated by using the solutions of the $1/2^+$ state and the ground state.

In Fig. 5, the results are shown as a function of the energy measured from the $\alpha+\alpha+n$ threshold for several values of the three-body potential strength v_{3b} . The $v_{3b} = -15$ and -17.1 MeV (attractive) or the $v_{3b} = 0$ and 10 MeV (repulsive) three-body potential strengths are applied. The $E1$ transition strength for $v_{3b} = -17.1$ MeV rises sharply from

the ${}^8\text{Be}(0^+)+n$ two-body threshold. The transition strength reaches with a maximum of $0.26 \text{ e}^2\text{fm}^2/\text{MeV}$ at $E=0.11$ MeV, and decreases to $0.01 \text{ e}^2\text{fm}^2/\text{MeV}$ at $E=0.5$ MeV. As v_{3b} increases, the peaks of the $E1$ transition strength decrease gradually and move into higher energies. In the cases of $v_{3b} = 0$ and 10 MeV, the peaks of the $E1$ strength are broad and their energy positions are distant from the ${}^8\text{Be}(0^+)+n$ threshold. It is noted that the $E1$ transition strength is very small in the energy region below the ${}^8\text{Be}(0^+)+n$ two-body threshold.

The $E1$ transition strengths calculated for $v_{3b} = -20 \sim -25$ MeV are shown in Fig. 6. They have transition strengths in the energy region between $\alpha+\alpha+n$ and the ${}^8\text{Be}(0^+)+n$ thresholds. Each $E1$ transition strength seems to be expressed by the Breit-Wigner form. In the case of $v_{3b} < -25$ MeV, where the $1/2^+$ state becomes a bound state, the $E1$ transition strengths have not a characteristic structure around $\alpha+\alpha+n$ and ${}^8\text{Be}(0^+)+n$ threshold energies.

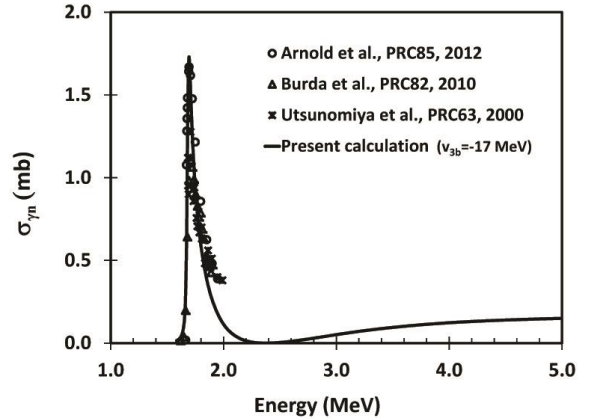


Figure 7. The ${}^9\text{Be}(\gamma, n){}^8\text{Be}$ cross section $\sigma_{\gamma n}$ as a function of excitation energy E . The experimental data are taken from Refs. [1-3]

Comparing the calculated photo-disintegration cross section of the $1/2^+$ state with the recent new experiment [1], we find that $v_{3b} = -17.1$ MeV gives a good agreement as shown in Fig. 7. Using this v_{3b} we obtain $1/2^+$ as a three-body resonance. This result indicates that the experimental cross section can be explained in terms of the $1/2^+$ resonance of ${}^9\text{Be}$.

SUMMARY

In this work, the properties of the $1/2^+$ state of ${}^9\text{Be}$ by varying values of three-body potential are studied. Without the three-body potential, we cannot obtain the $1/2^+$ resonance of ${}^9\text{Be}$, which is consistent to the results in Refs. [6, 12]. The $1/2^+$ resonance is obtained using the attractive three-body potential, which is responsible to explain the $E1$ transition strength of ${}^9\text{Be}$ with an enhancement near the $\alpha+\alpha+n$

threshold energy. The calculated photo-disintegration cross section is in good agreement with new experimental data [1] using the resonance solution of ${}^9\text{Be}(1/2^+)$ with an appropriate strength of the three-body potential.

ACKNOWLEDGEMENTS

The numerical calculations were done with use of computing system of the Nuclear Research Center, National University of Mongolia.

REFERENCES

- [1] C.W.Arnold, T.B.Clegg, C.Iliadis, H.J.Karwowski, G.C.Rich, J.R.Tompkins, C.R.Howell, Cross-section measurement of ${}^9\text{Be}(\gamma, n)$ ${}^8\text{Be}$ and implications for $\alpha+\alpha+n\rightarrow{}^9\text{Be}$ in the r process, *Phys. Rev. C* **85**, 044605, (2012)
- [2] O.Burda, P. von Neumann-Cosel, A.Richter, C.Forssen, B.A.Brown, Resonance parameters of the first $1/2^+$ state in ${}^9\text{Be}$ and astrophysical implications, *Phys. Rev. C* **82**, 015808, (2010)
- [3] H.Utsunomiya, Y.Yonezawa, H.Akimune, T.Yamagata, M.Ohta, M.Fujishiro, H.Toyokawa, H.Ohgaki, Photodisintegration of ${}^9\text{Be}$ with laser-induced Compton backscattered γ rays, *Phys. Rev. C* **63**, 018801, (2000)
- [4] V.D.Efros, P. von Neumann-Cosel, A.Richter, Resonance parameters of the first $1/2^+$ state in ${}^9\text{Be}$ and astrophysical implications, *Phys. Rev. C* **89**, 027301, (2010)
- [5] E.Gariddo, D.V.Fedorov, A.S.Jensen, Above threshold s-wave resonances illustrated by the $1/2^+$ states in ${}^9\text{Be}$ and ${}^9\text{Be}$, *Phys. Lett. B* **684**, 132, (2010)
- [6] K.Arai, P.Descouvemont, D.Baye, W.N.Catford, Resonance structure of ${}^9\text{Be}$ and ${}^9\text{B}$ in a microscopic cluster model, *Phys. Rev. C* **68**, 014310, (2003)
- [7] S.Aoyama, T. Myo, K.Kato, K.Ikeda, The complex scaling method for many-body resonances and its applications to three-body resonances, *Prog. Theor. Phys.* **116**, 1, (2006)
- [8] T.Myo, K.Kato, S.Aoyama, K.Ikeda, Analysis of ${}^6\text{He}$ coulomb breakup in the complex scaling method, *Phys. Rev. C* **63**, 054313, (2001)
- [9] H.Kanada, T.Kaneko, S.Nagata, M.Nomoto, Microscopic study of nucleon- ${}^4\text{He}$ scattering and effective nuclear potentials, *Prog. Theor. Phys.* **61**, 1327, (1979)
- [10] M.Odsuren, K.Kato, M.Aikawa, T. Myo, Decomposition of scattering phase shifts and reaction cross sections using the complex scaling method, *Phys. Rev. C* **89**, 034322, (2014)
- [11] E.Hiyama, Y.Kino, M.Kamimura, Gaussian expansion method for few-body systems, *Prog. Part. Nucl. Phys.* **51**, 223, (2003)
- [12] M.Kato, Investigation of ${}^9\text{Be}$ in the complex scaling method, Master Thesis in Hokkaido University (March, 2012) and private communication.
- [13] H.Masui, S.Aoyama, T.Myo, K.Kato, K.Ikeda, Study of virtual states in ${}^5\text{He}$ and ${}^{10}\text{Li}$ with the jost function method, *Nucl. Phys. A* **673**, 207 (2000).

(n,α) Reaction Cross Sections and Angular Distributions for Several MeV Neutrons

Ts.Zolbadral^{1,*}, Ts.Bilguun² and G.Khuukhenkhuu¹

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

²Executive Office of Nuclear Energy Commission, Ulaanbaatar, Mongolia

In this work from the unified viewpoint using the TALYS code we analyzed the experimental (n,α) cross sections, angular distributions of ³⁹K and ⁶⁴Zn, and the ratio of forward/backward cross-sections of ⁹⁵Mo, ¹⁴³Nd, ¹⁴⁷Sm and ¹⁴⁹Sm isotopes at the 4.0-6.5 MeV energies of neutrons.

PACS:25

I. INTRODUCTION

In our previous work [1] the experimental total (n,α) cross sections for 11 nuclei from ³⁹K to ⁹⁵Mo as well as the angular distribution of emitted alpha particle for some isotopes in the several MeV energy range of neutrons were compared to existing other experimental data, evaluated nuclear data libraries and TALYS-1.6 [2] calculations with “default” optical potential parameters. From these results some disagreements between the experimental data and the TALYS-1.6 calculation with the default parameters were observed. In our last paper [3] it is mentioned that there is a possible way to reduce the disagreement by changing the optical model parameters that implemented in last version of the TALYS code.

In this paper, firstly we studied the influence of the TALYS-1.8 code optical parameters on the final results. The most sensitive parameter “r_v” was found by fitting of TALYS-1.8 calculation to the experimental (n,α) cross sections and angular distributions simultaneously for ³⁹K and ⁶⁴Zn isotopes, as examples. In addition, we analyzed the total (n,α) cross sections and the ratio of a forward/backward ratio at the 4.0-6.5 MeV energies of neutrons for ⁹⁵Mo, ¹⁴³Nd, ¹⁴⁷Sm and ¹⁴⁹Sm isotopes.

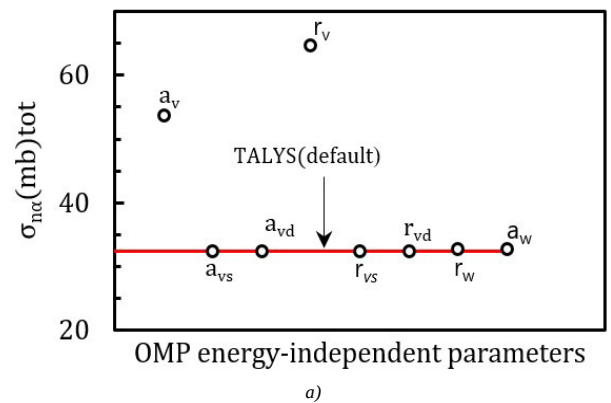
II. THE SENSITIVITY OF OPTICAL MODEL PARAMETERS IN TALYS CODE

For a process of nuclear reaction, the interaction of a nucleon with a nucleus can be imagined that some parts of the incident particles on a nucleus are scattered and others are absorbed by the nucleus. It is analogous to the reflecting and absorption of light by a semi-transparent body. This is a main physical principle of the optical model in the nuclear reaction. The optical model can be represented by a nuclear complex potential with parameters that are adjusted to fit the experimental data. The local and global parameterizations of Koning and Delaroche are used as the default optical model potentials

(OMP) in the TALYS code. The phenomenological OMP for nucleon-nucleus scattering, U[2], is defined as:

$$U(r, E) = -V_V(r, E) - iW_V(r, E) - iW_D(r, E) + V_{SO}(r, E). 1. + iW_{SO}(r, E). 1. + V_C(r, E) \quad (1)$$

where $V_{V,SO,C}$ and $W_{V,D,SO}$ are the real and imaginary components of the volume-central (V), surface-central (D), spin-orbit (SO) and Coulomb (C) potentials, respectively. E is the LAB energy of the incident particle in MeV. All components are separated in energy-dependent well depths, V_V , W_V , W_D , V_{SO} , and W_{SO} , and energy-independent radial parts $f(r, R_i, a_i)$ that used the Saxon-Woods form. Energy-independent (radial) 8 parameters: a_v , r_v , a_d , r_d , a_w , r_w , a_{SO} and r_{SO} and energy-dependent 13 parameters: d_1 , d_2 , d_3 , v_1 , v_2 , v_3 , v_4 , v_{SO1} , v_{SO2} , w_1 , w_2 , w_{SO1} and w_{SO2} there are. In the TALYS code, all these parameters are used as default values for each isotope or can be adjusted in the region of 0.1-10. To investigate the influence of above parameters on the final results, we calculated the (n,α) reaction cross-sections firstly using the default values of these parameters, then they one by one changed in certain range for each parameters. Our results of calculation for total cross sections of the ⁶⁴Zn(n,α)⁶¹Ni reaction at 4 MeV of neutron energy are shown in Fig.1, as example



* Electronic address: Ts_Zolbadral@num.edu.mn

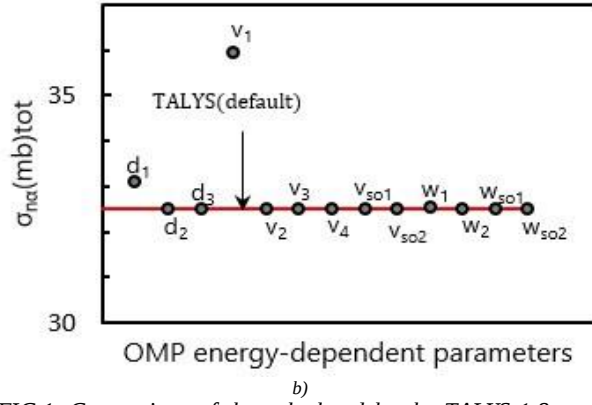
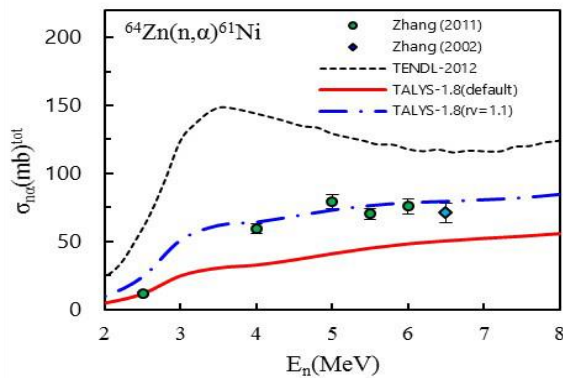


FIG.1. Comparison of the calculated by the TALYS-1.8 total cross sections of the $^{64}\text{Zn}(n,\alpha)^{61}\text{Ni}$ reaction at $E_{\text{inc}}=4$ MeV with the default and the adjusted values of OMP parameters

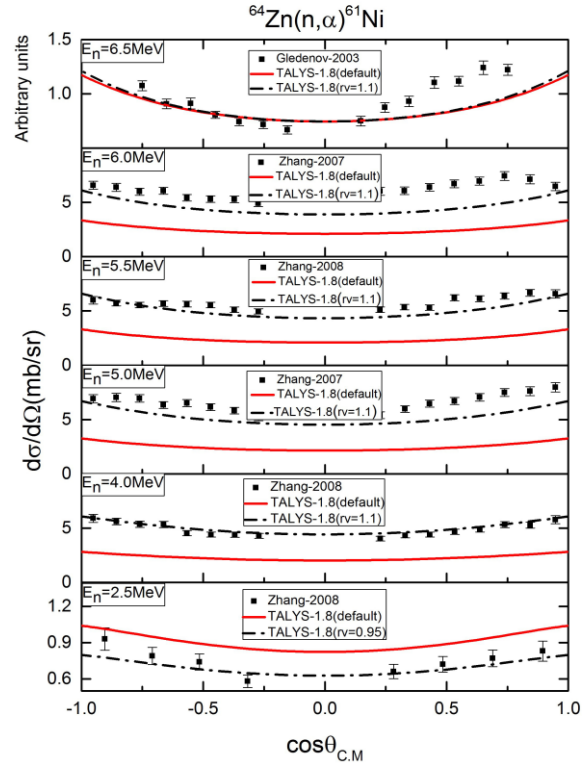
In this case the total cross-section of $^{64}\text{Zn}(n,\alpha)^{61}\text{Ni}$ reaction at 4 MeV of neutron energy is 32.5mb by TALYS-1.8 with default parameters. After that, an adjusted calculation is sequentially executed by changing 'default' values into 1.1 for each OMP parameters. From Fig.1 it can be seen that more sensitive parameters are r_v , a_v , v_1 and d_1 . The biggest changing of the $^{64}\text{Zn}(n,\alpha)^{61}\text{Ni}$ reaction cross section at 4 MeV was observed for r_v parameter.

III. RESULTS AND DISCUSSION

We used the adjusted parameter, r_v , which is the most sensitive one among the OMP parameters, to fit TALYS calculation to the experimental data. The total cross-sections and the angular distributions of (n,α) reactions for ^{39}K and ^{64}Zn isotopes, calculated by the TALYS-1.8 with the defaults and adjusted parameter r_v as well as values by TENDL are compared with the experimental data in the Figs.2 and 3. All the experimental data were taken from Ref.[4].



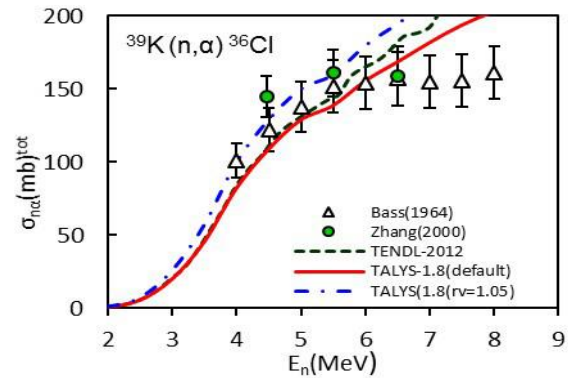
a) Total cross sections



b) Angular distributions

FIG.2. Comparison of TALYS-1.8 calculation with default and adjusted OMP parameters for the $^{64}\text{Zn}(n,\alpha)^{61}\text{Ni}$ reaction at several MeV energy range.

$^{64}\text{Zn}(n,\alpha)^{61}\text{Ni}$. From the FIG.2a it can be concluded that the calculated total cross-sections of this reaction by TALYS-1.8 with the default parameters were in disagreement with the experimental data, especially in the region of 4 to 7 MeV. Also, a big difference between calculated by the TENDL values and the experimental data in this case was observed. For the adjusted parameter $r_v=1.1$ the calculated and experimental (n,α) cross-sections were satisfactorily in agreement except for 2.5 MeV.



a) Total cross sections

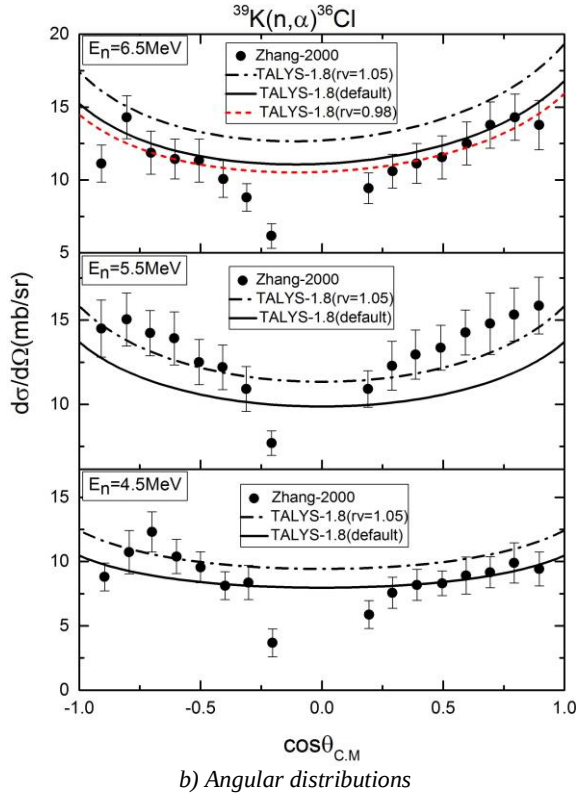


FIG.3. The same as in FIG.2 for the $^{39}\text{K}(n,\alpha)^{36}\text{Cl}$ reaction.

From the FIG.2b it is seen that for angular distributions of the $^{64}\text{Zn}(n,\alpha)^{61}\text{Ni}$ reaction satisfactory agreement between the calculated by TALYS-1.8 values and experimental data was obtained with the parameter $r_v=1.1$ for neutron energy of $E_n=4.0, 5.0, 5.5, 6.0$ and 6.5 MeV. For neutron energy $E_n=2.5$ MeV best agreement between the calculated results with parameter $r_v=0.95$ and experimental data was reached. As to neutron energy point $E_n=6.5$ MeV where angular distribution is given in arbitrary units the calculated values were normalized to experimental data at $\theta_{c.m.}=90^\circ$.

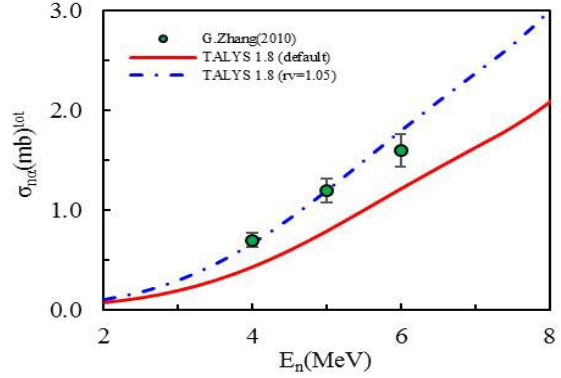
$^{39}\text{K}(n,\alpha)^{36}\text{Cl}$. For the total cross-section, FIG.3a shows that, a small difference between two existing experimental data in region 4-6 MeV was observed. The results of the TENDL and TALYS-1.8 with default parameters calculations are in agreement within the error limits of the experimental data for neutron energy range of $E_n=4\div 6.5$ MeV. In addition, the results of TALYS-1.8 calculation can be improved by changing the parameter $r_v=1.05$. Nevertheless, it should be noted that an essential disagreement between the TALYS-1.8 calculation and experimental values in the region above 7 MeV was obtained.

For the angular distribution of this reaction FIG.3b shows that, the results of TALYS-1.8 calculation with default parameters are in satisfactory agreement with the experimental data at 4.5 MeV. But, at 5.5 and 6.5 MeV, calculated values and

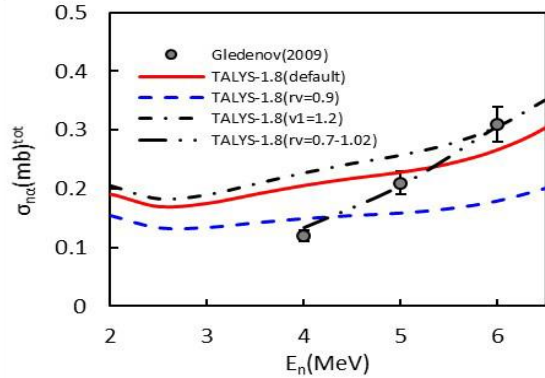
experimental data are in disagreement. So, good agreement between the calculated and experimental values at 5.5 MeV was reached using parameter $r_v=1.05$ as in the case of the total cross-section. At the same time the parameter $r_v=1.05$ gives worse results than default parameter at 6.5 MeV. But, in this case $r_v=0.98$ gives better results than other ones.

IV. THE TOTAL CROSS-SECTION FOR HEAVY ISOTOPES

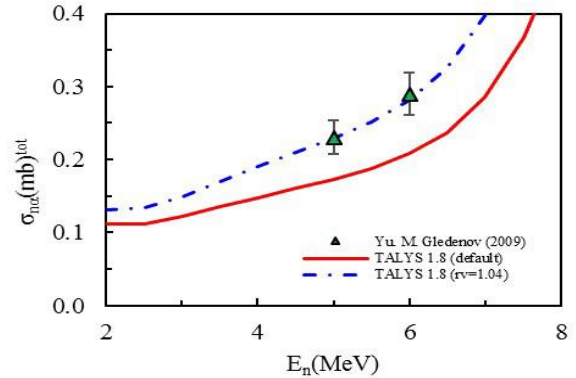
Comparison of calculated results by TALYS-1.8 with the default and adjusted parameters for the total cross-sections of (n,α) reactions of the ^{95}Mo , ^{143}Nd , ^{147}Sm and ^{149}Sm heavy isotopes are shown in Fig.4.



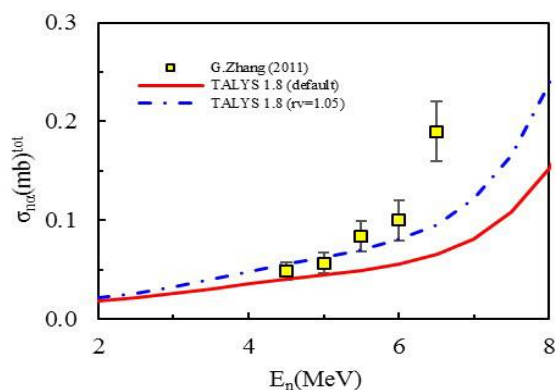
1. Total cross section of the $^{95}\text{Mo}(n,\alpha)^{92}\text{Zr}$ reaction.



b) Total cross section of the $^{143}\text{Nd}(n,\alpha)^{140}\text{Ce}$ reaction.



c) Total cross section of the $^{147}\text{Sm}(n,\alpha)^{144}\text{Nd}$ reaction.



d) Total cross section of the $^{149}\text{Sm}(n,\alpha)^{146}\text{Nd}$ reaction.

FIG.4. The comparison of the results of TALYS-1.8 calculation with default and adjusted parameters for the total cross-sections of (n,α) reactions of ^{95}Mo , ^{143}Nd , ^{147}Sm and ^{149}Sm .

$^{95}\text{Mo}(n,\alpha)^{92}\text{Zr}$. FIG.4.a shows that the result of TALYS-1.8 calculation with default parameters is in disagreement with experimental data. So, by taking the parameter $r_v = 1.05$, the agreeable results in within the error limits of the experimental data were obtained.

$^{143}\text{Nd}(n,\alpha)^{140}\text{Ce}$. From FIG.4.b it is seen that result of TALYS-1.8 calculation with default parameters is in disagreement with experimental data in region $E_n=4-6$ MeV. Then by trying to change the OMP any parameters, we could not reach fitted results in this region. Therefore, we considered different

values of the parameter r_v for each incident neutron energy. These values were obtained in the range of $r_v=0.70-1.02$ for $E_n=4-6$ MeV.

$^{147}\text{Sm}(n,\alpha)^{144}\text{Nd}$. In this case the agreement between the calculated and experimental cross sections was obtained at the parameter $r_v = 1.04$.

$^{149}\text{Sm}(n,\alpha)^{146}\text{Nd}$. From FIG.4.d the disagreement between the experimental and calculated TALYS-1.8 with default parameters was seen. So, it can also be improved by changing the parameter $r_v = 1.05$. However, in the region above 6.0 MeV, by changing any parameters of OMP to reduce the disagreement between the TALYS calculation and the experimental data was not gotten.

V. FORWARD/BACKWARD RATIO FOR HEAVY ISOTOPES

In the laboratory system, the angular distribution of emitted particles from heavy nuclei for the compound mechanism of the nuclear reaction has the isotropic tendency. At the same time for the pre-equilibrium and direct reaction mechanisms forward peaked form is dominant. The forward/backward ratios of alpha particle from (n,α) reaction were calculated by TALYS code for ^{95}Mo , ^{143}Nd , ^{147}Sm and ^{149}Sm isotopes. These results and experimental data are given in Table.1.

Table.1. Calculated and measured forward/ backward ratios of heavy isotopes.

$^{95}\text{Mo}(n,\alpha)^{92}\text{Zr}$					
Energy (MeV)	Measured Ref [5]	TALYS-1.0 (default)	TALYS-1.0 ($r_d=0.5$)	TALYS-1.8 (default)	TALYS-1.8 (direct)
4.0	1.10 ± 0.14	1.21	1.21	1.00	1.93
5.0	1.24 ± 0.14	1.40	1.40	1.01	2.06
6.0	1.37 ± 0.14	1.65	1.64	1.01	2.20
Ref [6] $^{143}\text{Nd}(n,\alpha)^{140}\text{Ce}$					
4.0	1.25 ± 0.12	1.22	1.20	1.00	1.92
5.0	1.78 ± 0.18	1.54	1.51	1.01	2.08
6.0	2.50 ± 0.25	1.90	1.89	1.05	2.23
Ref [6] $^{147}\text{Sm}(n,\alpha)^{144}\text{Nd}$					
5.0	1.65 ± 0.23	1.73	1.71	1.01	2.05
6.0	2.49 ± 0.32	2.02	2.02	1.05	2.20
Ref [7] $^{149}\text{Sm}(n,\alpha)^{146}\text{Nd}$					
4.5	1.40 ± 0.40	1.64	1.61	1.01	2.03
5.0	1.60 ± 0.40	1.81	1.79	1.01	2.09
5.5	1.90 ± 0.50	1.96	1.95	1.02	2.17
6.0	2.20 ± 0.60	2.09	1.99	1.03	2.24
6.5	2.70 ± 0.70	2.20	2.20	1.05	2.32

The measured forward/backward ratio, is increased with the growing the incident particle energy. This fact is perhaps explained by the increasing the contribution from direct and pre-equilibrium mechanisms when the projectile energy increases.

In our calculations were used two versions of TALYS-1.0 and 1.8 codes. In the TALYS-1.0 version, above-mentioned growing tendency of forward/backward ratio is being kept. In addition, the results of TALYS-1.0 with adjusted the OMP

parameter, r_d , are shown in Table.1 that gives the same values as calculation with the default parameters. It means that TALYS-1.0 calculation with adjusted OMP parameters leads to the same changed values for forward and backward directions.

The TALYS-1.8 version gives different results from the experimental data. From the analysis by the TALYS-1.8 version it was observed that the contribution of the compound mechanism is one-order more than direct mechanism. Therefore, calculated by TALYS-1.8 version forward/backward ratio is close to 1.0 value. Also, we calculated the forward/backward ratio by only direct reaction mechanism for TALYS-1.8 version (see the sixth column in table.1, titled as TALYS - 1.8(direct)). These calculations gave the growing tendency of the forward/backward ratio with increasing the neutron energy.

VI. CONCLUSIONS

1. The total (n,α) cross section for ^{64}Zn at neutron energy of 4 MeV was calculated using TALYS code with different OMP parameters to investigate the influence of these parameters on the final results. It was obtained that the radial parameter r_v is the most important one.
2. It was shown that changing the radial parameter r_v in the acceptable range satisfactorily agreement between the calculated results and experimental data of the total cross sections, angular distributions of the emitted α -particles and forward/backward ratios for the fast neutron induced (n,α) reactions on the some medium mass and heavy isotopes were reached.

VII. REFERENCE

- [1] G.Khuukhenkhuu, Yu.M.Gledenov, Guohui Zhang, M.V.Sedysheva, M.Odsuren, Ts.Zolbadral, J.Munkhsaikhan and

E.Sansarbayar “*Analysis Of Fast Neutron Induced (n,α) Reaction Cross Sections And Angular Distributions For Medium Mass Nuclei*” (Proceedings of the XXIII International Seminar on Interaction of Neutrons with Nuclei, ISINN-23, May 25-29, 2015), 2016, JINR,Dubna, p353-360.

- [2] A.Koning, S.Hilaire, and S.Goriely, “*User Manual of TALYS-1.8*” (Nuclear Research and Consultancy Group, Petten, the Netherlands, 2015).
- [3] M.Odsuren, G.Khuukhenkhuu, S.Davaa, Yu.M.Gledenov, Guohui Zhang, M.V.Sedysheva, Ts.Zolbadral, J.Munkhsaikhan and E.Sansarbayar “ *(n,α) Reaction Cross Sections and Angular Distributions for Several MeV Neutrons*” (Proceedings of the 6th Workshop on Asian Nuclear Reaction Database Development, AASPP-6, 15-17 Sep, 2015, Sapporo, Japan) IAEA, INDC (JPN)-0200, 2016, p59-64.
- [4] <https://www-nds.iaea.org/exfor/exfor.htm>
- [5] Guohui Zhang, Hao Wu, Jiaguo Zhang et al., “*Cross Section Measurement for the $^{95}\text{Mo}(n,\alpha)^{92}\text{Zr}$ Reaction at 4.0 5.0 and 6.0 MeV*”, Appl. Rad. and Isot., v.68, N1, (2010), p.180.
- [6] Yu.M.Gledenov, M.V.Sedysheva, V.A.Stolupin, Guohui Zhang, Jiaguo Zhang, Hao Wu, Jiaming Liu, Jinxiang Chen, G.Khuukhenkhuu, P.E.Koehler, and P.J.Szalanski “*Cross Sections of the $^{143}\text{Nd}(n,\alpha)^{140}\text{Ce}$ and $^{147}\text{Sm}(n,\alpha)^{144}\text{Nd}$ Reactions in the MeV Neutron Energy Region*”, Phys. Rev. C **80**, 044602 (2009).
- [7] Guohui Zhang, Yu. M. Gledenov, G. Khuukhenkhuu, M. V. Sedysheva, P. J. Szalanski, P. E. Koehler, Yu. N. Voronov, Jiaming Liu, Xiang Liu, Jinhua Han, and Jinxiang Chen “ *$^{149}\text{Sm}(n,\alpha)^{146}\text{Nd}$ Cross Sections in the MeV Region*”, Phys. Rev. Lett. **107**, 252502 (2011).

Seasonal Variations of Surface Radio Refractive Index in Mongolia

Jamiyan Sukhbaatar,* Battogtokh Jigjidsuren, Tsendayush Oldokh, Nyamjav Jambaljav

*Department of Electronics and Communication Engineering, School of Engineering and Applied Science,
National University of Mongolia*

In this paper, the statistical analysis of surface radio refractivity in Mongolia is studied. The method proposed in the recommendation of the International Telecommunication Union ITU has been used. Meteorological data derived from fifty nine weather stations which cover the most populated areas in Mongolia. A total of more than five million refractivity measurements was considered in this analysis. The result showed that the highest average values of the radio refractivity were observed in January while the lowest values were observed in April and May. The annual refractivity values were higher in the northern region and lower in the southern part of the geographical map. The monthly maximum radio refractivity value, 342 N-Units was in Zavkhan aimag in January. The lowest value was 290 N-Units in Umnugovi aimag in May. The result also shows that the seasonal refractivity variation is caused follows the climatic condition and geographical region.

Keywords: Radio refractive index, radio-wave propagation, meteorological parameters.

INTRODUCTION

During the design of radio communication networks, it is important to know the atmospheric radio refractive index, which is the ratio of the velocity of propagation of a radio wave in free space to the velocity in a specified medium. Radio wave propagation changes in the refractive index of air in the troposphere [1]. Changes in the value of the troposphere radio refractive index can curve the path of the propagating radio wave. At standard atmospheric conditions near the Earth's surface, the radio refractive index is approximately 1.0003 [2]. Since the value of refractive index is almost unity, then the refractive index of air in the troposphere is often measured by a quantity called the radio-refractivity N , which is related to the refractive index, n as:

$$N = (n - 1) \times 10^6$$

As the conditions of propagation in the atmosphere vary, the interference of radio-wave propagation is observed. Such interferences are incident with some meteorological parameters (inversion of temperature, high evaporation and humidity, passing of the cold air over the warm surface and conversely). Radio waves travel through vacuum with a speed equal to the speed of light. In material medium, the speed of the radio waves is approximately c/n where c is the speed of light in vacuum and n is the radio refractive index of the medium. The value of the radio refractive index (n) for dry air is almost the same for radio waves and the light waves. But the value of the radio refractive index (n) for water vapor, which is always present in some quantity in the lower troposphere, is different for the light waves and radio waves. This

arises from the fact that water vapor molecule has a permanent dipole moment which has different responses to the electric forces of different radio wave frequencies propagated within the atmosphere. The atmospheric radio refractive index depends on air temperature, humidity, atmospheric pressure and water vapor pressure. Subsequently, meteorological parameters depend on the height at a point above the ground surface. Variation in any of these meteorological parameters can make a significant variation on radio wave propagation, because radio signals can be refracted over the whole signal path [3]. Falodun and Ajewole [4] reported that in the atmosphere, pressure, temperature and humidity decrease exponentially as height h increases.

Radio frequency or radio wave signal propagation in the troposphere is affected by many factors which include the variations of meteorological parameters such as humidity, temperature and atmospheric pressure. Meteorological parameters are associated with the change in weather in different seasons of the year and these changes have resulted in refractivity changes. Grabner and Kvicera [5] reported that multipath effects also occur as a result of large scale variations in atmospheric radio refractive index, such as different horizontal layers having different refractivity. This effect occurs most often, when the same radio wave signals follow different paths thereby having different time of arrivals to its targeted point. This may result to interference of the radio wave signals with each other during propagation through the troposphere. The consequence of this large scale variation in the atmospheric refractive index is that radio waves propagating through the atmosphere become progressively curved towards the earth. Thus, the

* Electronic address: jamiyan@num.edu.mn

range of the radio waves is determined by the height dependence of the refractivity. Thus, the refractivity of the atmosphere will not only vary as the height changes but also affect radio signal.

In this paper, we estimate the seasonal variations of the radio refractivity using meteorological parameters (temperature, humidity and atmospheric pressure) for the station in Buyant-Ukhaa, Ulaanbaatar.

CALCULATION OF RADIO REFRACTIVITY

Radio refractive index, n , is equal to approximately 1.0003. Since n never exceeds unity by more than a few parts in 10^{-4} , it is convenient to consider scaled-up by 10^6 and measured by radio-refractivity N , which is related to the refractive index, n as:

$$N = (n - 1) \times 10^6 \quad (1)$$

Radio refractivity [6] N is expressed by:

$$N = N_{dry} + N_{wet} \\ = \frac{77.6}{T} \left(P + 4810 \frac{e}{T} \right) \quad (2)$$

with the dry term, N_{dry} , of radio refractivity given by:

$$N_{dry} = 77.6 \frac{P}{T} \quad (3)$$

and the wet term, N_{wet} , by:

$$N_{wet} = 3.732 \times 10^5 \frac{e}{T^2} \quad (4)$$

where P is the atmospheric pressure (hPa), e is the water vapor pressure (hPa) and T is the absolute temperature (K).

The relationship between water vapor pressure e and relative humidity is given by [6]:

$$e = \frac{H e_s}{100} \quad (5)$$

e_s is the saturation vapor pressure (hPa) at the temperature t (°C), and obtained from:

$$e_s = a \exp \left(\frac{bt}{t+c} \right) \quad (6)$$

where H is the relative humidity (%) and t is the Celsius temperature (°C). For water $a=6.1121$, $b=17.502$, $c=240.97$ (valid between -20° to $+50^\circ$, with an accuracy of $\pm 20\%$) [3].

RESULTS AND DISCUSSION

In this study, we investigated seasonal variation of refractivity over fifty nine localities. Meteorological data obtained from weather stations which located

fifty nine different locations. These stations give us reasonable geographic coverage. Since temperature, humidity, atmospheric pressure and water vapor pressure, which are important parameters for determination of radio refractivity are highly variable and change rapidly in time and from place to place, measurements of these parameters were considered fifty nine different locations. Meteorological data were taken in different period for different stations. Twenty seven stations cover 40 years from 1960 to 2016 and rest of stations covers up to 32 years from 1974 to 2016. Each day, eight measurements of temperature, relative humidity and pressure were taken at 02.00, 05.00, 8.00, 11.00, 14.00, 17.00, 20.00 and 23.00 hours local time at all fifty nine stations. For this reason, the seasonal refractivity was calculated different periods for different stations. A total of more than five million refractivity measurements was calculated. The locations of the meteorological stations are shown in Figure 1.

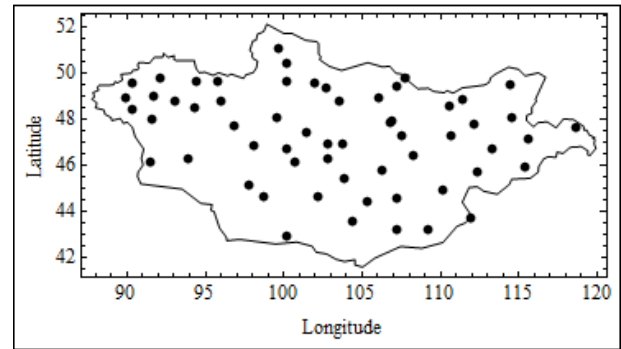


Figure 1. Location map for meteorological stations.

The refractivity values are estimated by using (2). The partial water vapor pressure e was determined by using (5) and (6). Dry term, N_{dry} , and wet term, N_{wet} , of refractivity were determined by using (3) and (4) respectively.

Figure 2 presents a typical variation of mean annual refractivity across Mongolia. The contours were calculated using mean annual refractivity values of 59 meteorological stations and altitudes of meteorological stations were not considered in the calculation. The result showed that northern region of geography has more higher refractivity value than the other regions. The maximum refractivity value was 320 N-units, observed in Rinchinlhumbe and Baruunturuun. These two stations fall within the same geographical and climatic region (the Khangai and Khuvsgul mountain areas). From the result, we can see that Gobian zone has lower refractivity values. This can be explained by the average annual precipitation. The average annual precipitation is low (around 38mm) in the Gobian zone and higher (around 389mm) in the Northern region [6]. The

minimum refractivity value was observed in Gurvan-tes, 301 N-units.

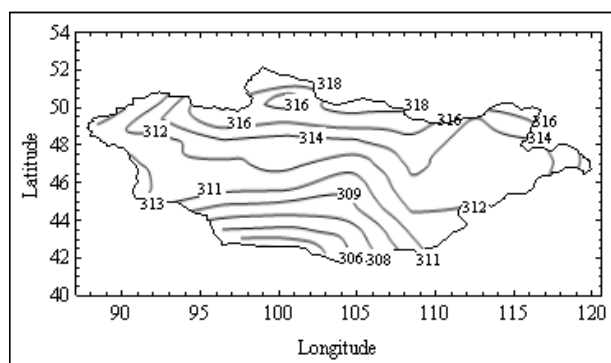


Figure 2. Annual mean N contours for Mongolia.

Contours of winter months (December, January and February) values of refractivity are shown in Figures 3, 4 and 14 respectively. It is seen that the refractivity values of winter months are higher than the annual mean values (Figure 2). The average values in Gobian zone were between 312 N-units and 320 N-units, while the average values in the colder region (Northern and Western region) were between 325 N-units and 336 N-units. The refractivity values in January were higher than all other months. From the geographical point of view, the refractivity values in winter months are higher in Northern region which is similar to annual values.

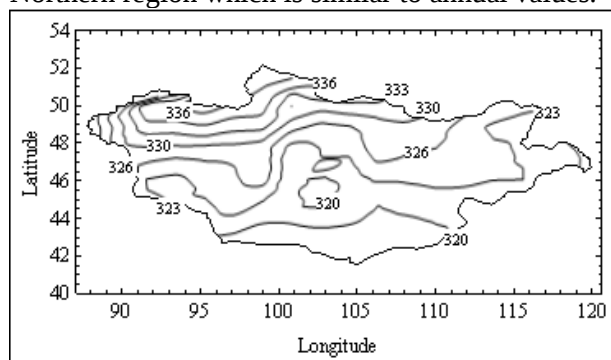


Figure 3. January mean N contours for Mongolia.

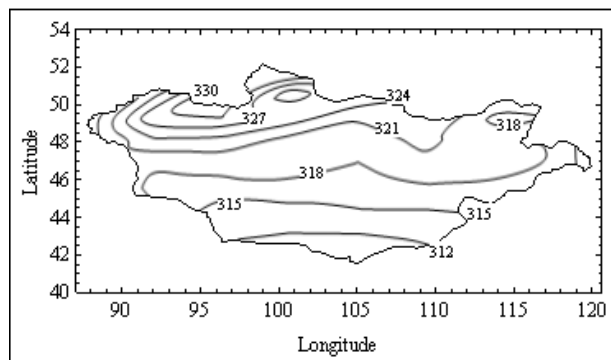


Figure 4. February mean N contours for Mongolia.

Plots of March, April and May values of refractivity are shown in Figure 5, 6, and 7 respectively. Figures 6 and 7 shown that the general behavior of the

contours and refractivity values for April and May are similar to each other. Also, the refractivity values of these two months are lower than the annual mean values. Refractive values in March are higher than these two months.

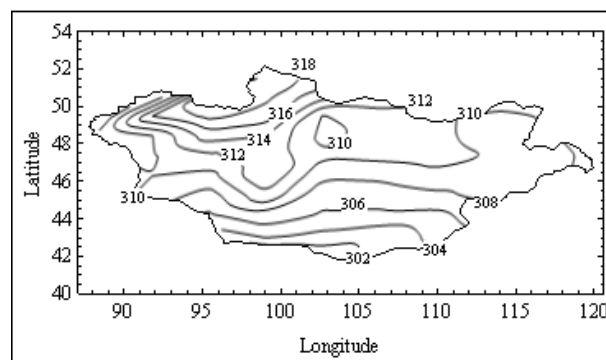


Figure 5. March mean N contours for Mongolia.

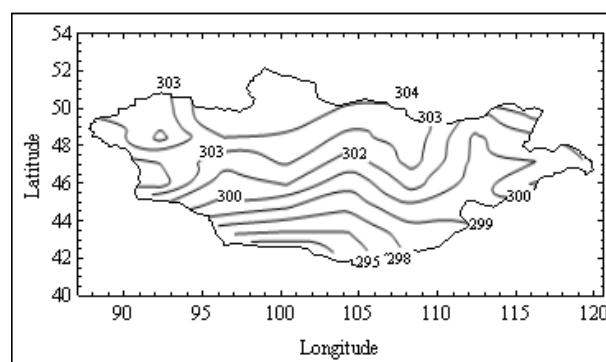


Figure 6. April mean N contours for Mongolia.

Charts of the mean values of radio refractivity in June, July, August and September (which are warm months and also the average precipitation is higher in these months) are presented in Figs. 8 to 11. From these pictures, we can see that the behavior of the contours is identical to each other. However, the refractivity values are higher in July while lower in September.

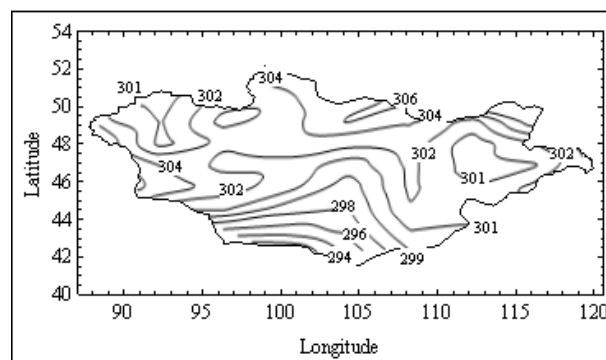


Figure 7. May mean N contours for Mongolia.

The interesting result observed in these warm months is that the refractivity values in the northern region and the southern region were same. Also, the highest refractivity values (325-329 N-Units) were in the eastern region in July and August.

The refractivity values increased from 304 N-Units (in the southern region) to 328 N-Units (in the eastern region) in August. The difference is 24 N-Units which is the highest of all months.

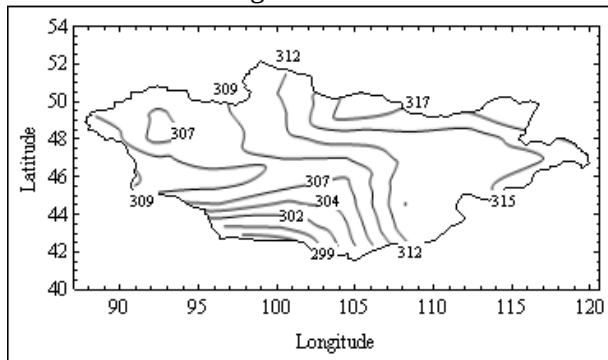


Figure 8. June mean N contours for Mongolia.

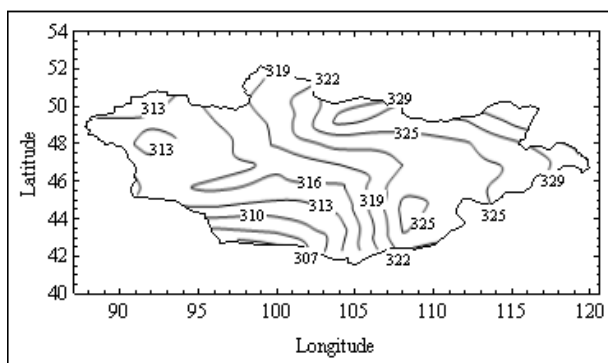


Figure 9. July mean N contours for Mongolia.

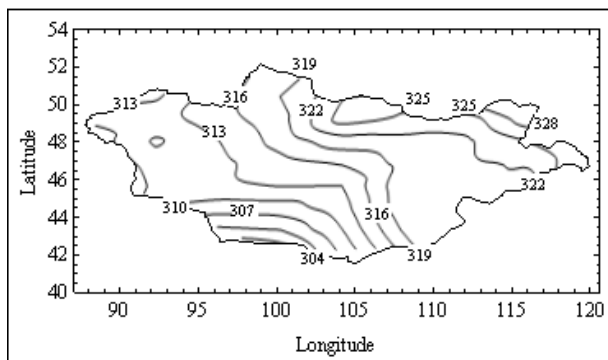


Figure 10. August mean N contours for Mongolia.

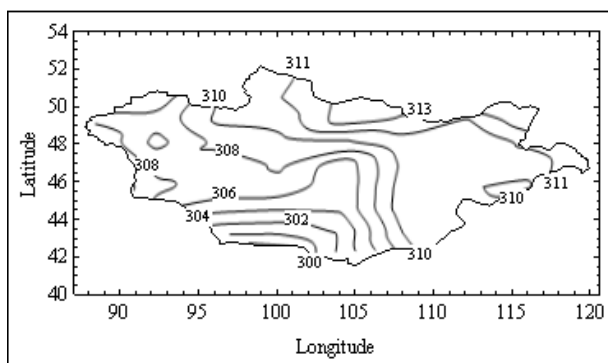


Figure 11. September mean N contours for Mongolia.

The radio refractivity values in October and November are depicted in Figure 12 and 13. Comparing the values of these two months, higher

values were occurred in November. Also, the refractivity values increased from the southern region to northern region. From the Figure 12, we can see that lowest refractivity value is 320 N-Units in the southern region while the highest value is 310 N-Units in the northern region and variation of refractive values is only 10 N-Units which is the lowest of all other months.

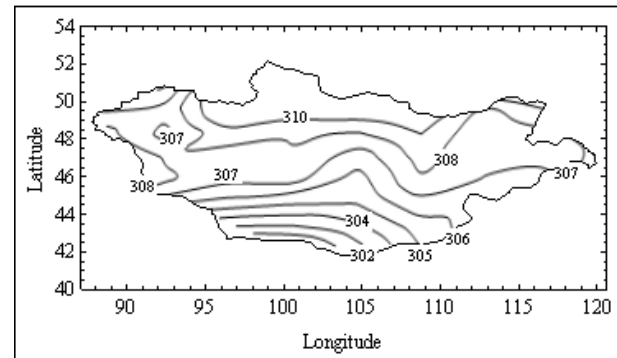


Figure 12. October mean N contours for Mongolia.

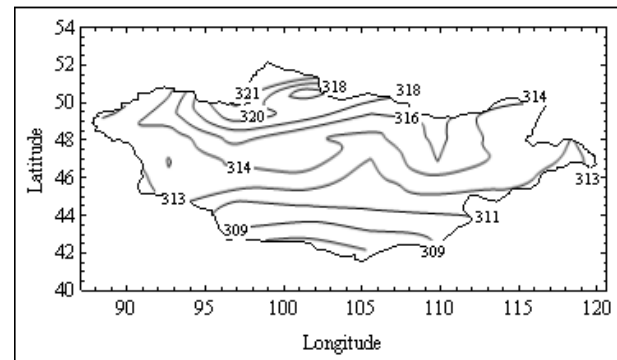


Figure 13. November mean N contours for Mongolia.

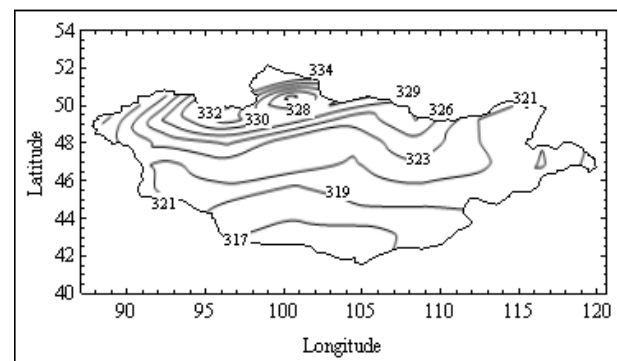


Figure 14. December mean N contours for Mongolia.

Figure 15 shows that the annual mean refractivity values for all localities. The vertical bars indicate the standard deviations of the refractivity values. It is seen that the N – values vary in the wide range in the localities which placed in the northern region than the southern region.

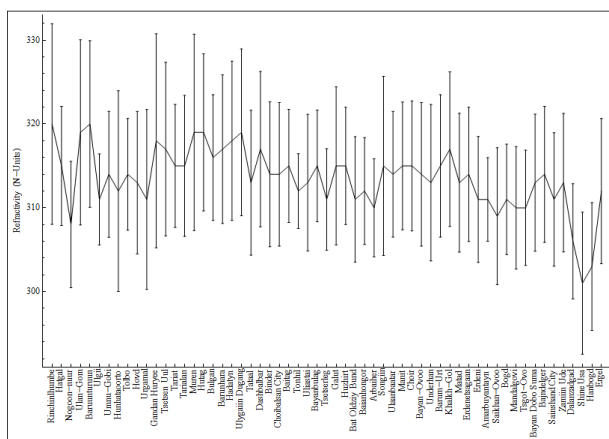


Figure 15. Annual N values for all stations. Vertical bars indicate the standard deviations of N for the stations.

CONCLUSION

In this paper, the surface radio refractivity values estimated from the data recorded at the fifty nine weather stations in Mongolia was analyzed. The lowest refractivity values were observed in April and May while the highest values were observed in January (the coldest and the driest month of the year). The refractivity values were lower in the southern region and gradually increased to the northern region except June, July, August and September. The refractivity values increased from the western region to eastern region while the values were same in southern and northern region for these four months. In addition to these comments and discussion, the following points can be emphasized:

- Higher variations were in northeast localities, although lower variations observed in southern localities.
- Higher mean refractivity values were in the Northern region in winter, spring and fall whereas eastern region in summer.

- Lower monthly and annual mean refractivity values were in Gobian zone.
- The lowest change in refractivity values was October. The refractivity values changed from 302 N-Units to 310 N-Units. While the highest change in refractivity values was in August. It changed from 304 N-Units to 328 N-Units.
- The monthly maximum radio refractivity value, 342 N-Units was in Zavkhan aimag in January. The lowest value was 290 N-Units in Umnugovi aimag in May.

REFERENCES

- [1] Bean B.R “The Radio Refractive Index of Air”, Proc. I.R.E., 50, pp.260-73, March 1962.
- [2] Freeman R.L “Radio System Design for Telecommunications”, John Wiley&Sons Inc, Hoboken, New Jersey, 2007, pp. 880.
- [3] Priestley J.T and Hill R.J “Measuring High-Frequency Refractive Index in the Surface layer”, Journal of Atmospheric and Oceanic Technology, Vol.2, 1984, pp. 233.
- [4] Falodun S.E and Ajewole M.O “Radio refractive index in the lowest 100-m layer of the troposphere in Akure, South Western Nigeria”, Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics, Vol.68, 2006, pp. 236.
- [5] Grabner M. and Kvicera V., “Radio Engineering 12”, No., 2008, pp50.
- [6] ITU-R “The radio refractive index: Its formula and refractivity data”, pp.453-9, 2003.
- [7] “Mongolia’s Country Studies Report on Climate Change”, Vol.1: Executive Summary. Ulaanbaatar: HMRI.

Нарны титмийн плазм дахь электроны нягтыг радио гялбааны ажиглалтаар тодорхойлох

Д.Мөнхманлай*, Б.Түвшинжаргал, Б.Батбаяр, Ч.Мөнхжаргал

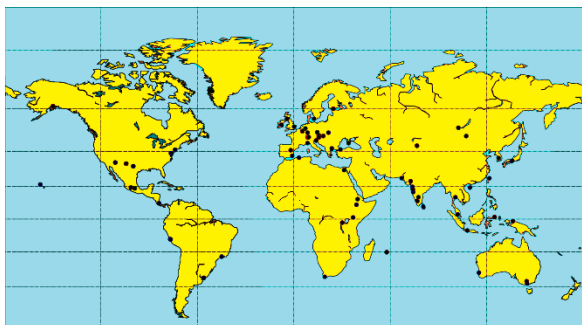
ШУА, Одон Орон, Геофизикийн Хүрээлэн

Швейцарийн Цюрих Технологийн Институтад зохион бүтээсэн CALLISTO (Compound Astronomical Low-cost, Low-frequency Instrument for Spectroscopy and Transportable Observatory) буюу хямд, нам радио давтамжийн мужид ажилладаг зөөврийн спектрометрийн багажаар цахилгаан соронзон цацаргалтын эрчим болон нарны радио гялбааг байнгын цэгт тасралтгүй бүртгэж байна.

PACS number: 95.30.Gv

I. ОРШИЛ

Нарны радио цацрагийн спектрийг 45МГц - 850МГц мужид бүртгэх “CALLISTO” олон улсын судалгааны сүлжээнд Одон Орон Геофизикийн Хүрээлэн (ООГХ) 2008 оноос оролцож Нарны тэсрэлтээс үүссэн радио гялбааг (radio burst) тогтмол бүртгэж байна (Зураг 1).

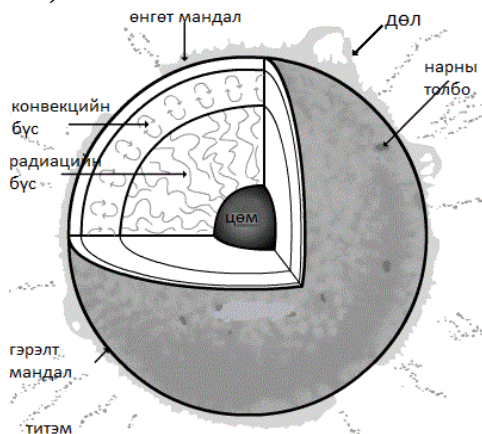


Зураг 1. CALLISTO багажыг суурилуулсан газрууд[4].

II. ҮНДСЭН ХЭСЭГ

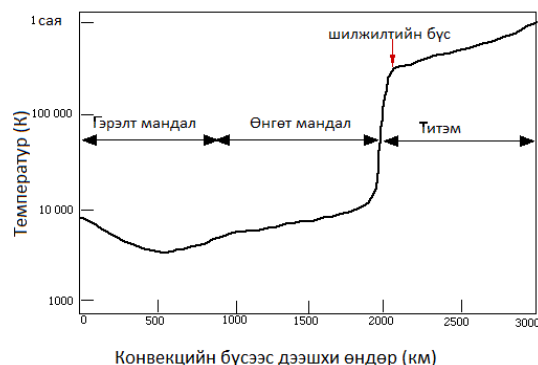
A. Нарны ерөнхий бүтэц

Нар нь цөм, цацрагийн бүс, конвекцийн бүс болон агаар мандал гэж нэрлэгдэх гэрэлт мандал, өнгөт мандал, титэм зэргээс тогтоно (Зураг 2).



Зураг 2. Нарны дотоод бүтэц ба агаар мандал.

Мөн өнгөт мандал болон титмийн хооронд шилжилтийн бүс гэж нэрлэдэг хэсэг бий. Энд өнгөт мандлын температур 8000K орчим байхад, харин шилжилтийн бүсэд температур 500000K байдаг. Температурын эрс өөрчлөлт бүхий энэ шилжилтийн бүс 100 км орчим зузаантай байна [3].



Зураг 3. Нарны агаар мандлын температурын явц.

B. Радио гялбаа

Нарны титэм, өнгөт мандалд тэсрэлт болох ба түүнээс үүссэн электроны багц урсгал нь титэмийн орчноор дайран өнгөрөхдөө тухайн орчин буюу плазмыг хэлбэлзэлд оруулна. Энэхүү хэлбэлзэл нь радио долгионыг үүсгэх бөгөөд спектрометр багажаар бүртгэж титмийн плазм дахь электроны нягтыг тодорхойлж болно.

Хүснэгт 1. Нарны радио цацаргалтын төрлүүд, тэдгээрийн үүсэх механизм [1].

Emission mechanism	Frequency	Source/Exciter
(1) Incoherent radio emission:		
(1a) Free-free emission (bremsstrahlung)	$\nu \geq 1$ GHz	Thermal plasma
- Microwave postbursts		Thermal plasma
(1b) Gyroemission	$\omega = s\Omega_e$	
Gyroresonance emission	($s = 1, 2, 3, 4$)	Thermal electrons
Gyrosynchrotron emission	($s \approx 10 - 100$)	Mildly relativistic electrons
- Type IV moving		Trapped electrons
- Microwave type IV		Trapped electrons
(2) Coherent radio emission:		
(2a) Plasma emission	$\nu_{pe} = 9000\sqrt{n_e}$	Electron beams
- Type I storms		Langmuir turbulence
- Type II bursts		Beams from shocks
- Type III bursts		Upward propagating beams
- Reverse slope (RS) bursts		Downward propagating beams
- Type J bursts		Beams along closed loops
- Type U bursts		Beams along closed loops
- Type IV continuum		Trapped electrons
- Type V		Slow electron beams
(2b) Electron-cyclotron maser:	$\omega = s\Omega_e/\gamma + k_{\parallel}v_{\parallel}$	Losscones
- Decimetric ms spike bursts		Losscones

* Electronic address: d.munkhmanlai@yahoo.com

Зураг 8. Бусад судлаачдын гаргаж авсан электроны концентрацийн тооцоололтой харьцуулсан байдал.

Бусад судлаачдын үр дүнтэй харьцуулж үзэхэд бидний тодорхойлсон электрон нягт тэсрэлтийн, идэвхт мужийн n_e -ээс бага, тайван үеийнхтэй ойролцоо байна. Зураг 8 дээр тодорхойлсон утгыг тавибал нягт нь гэрэлт мандлаас 0.5-аас 1 хүртэлх нарны радиус бүхий зайнд байна гэж үзэж байна.

Иймд бидний тодорхойлсон электроны нягт нь тайван муж буюу нарны идэвхжлийн минимум үеийн титмийн нягттай тохирч байна.

Энэхүү ажлыг ООГХ-ийн “Нарны идэвхжлийн үеийн идэвхт муж, үзэгдлүүдийн бүтэц, динамикийн судалгаа” сэдэвт ажлын хүрээнд хийж гүйцэтгэв.

VI. ТАЛАРХАЛ

Судалгааны арга зүйн зөвлөгөө өгч тусалсан эрдэм шинжилгээний тэргүүлэх ажилтан Д.Батмөнхөд талархал илэрхийлье.

VII. НОМ ЗҮЙ

- [1] Markus J. Aschwanden, Physics of the Solar Corona (2005) p.638.
- [2] Письмо в астрономический журнал, 2009, т.35, №1, с.50-62.
- [3] https://www.nasa.gov/mission_pages/iris/multimedia/layerzoo.html
- [4] www.e-callisto.org

Creation of Ohmic contact on InGaAs/InAlAs quantum well detector for broad range photon detection

Tamiraa Ganbold^{1,*}, Matias Antonelli², Ralf .H. Menk², Giorgio Biasiol³

¹Department of Chemistry and Biological Engineering, School of Engineering and Applied Science, National University of Mongolia

²Elettra – Sincrotrone Trieste S.C.p.A., Trieste, Italy

³IOM CNR, Laboratorio TASC, Area Science Park, Trieste, Italy

Several applications utilizing either synchrotron or conventional light sources require fast and efficient pixelated detectors. In order to cover a wide range of experiments, this work investigates the possibility to use InGaAs/InAlAs quantum well devices as photon detectors for a broad range of energies. Owing to their direct, low-energy band gap and high electron mobility, such devices may be used also at room temperature as multi-wavelength sensors from visible light to hard X-rays. Three different metal configurations were tested to create Ohmic contacts on quantum – well detectors. The triple layers of Au/Ge/Ni is a suitable metal to create good Ohmic contacts for the readout electrode. When the beam is hitting from the readout side, Al could be involved as contacting metal with annealing without requiring the etching.

PACS number: 07.85.Qe

Keywords: Ohmic contact, quantum-well photon detector, X-ray .

INTRODUCTION

As X-ray beams from modern light sources become more intense, with smaller spots and shorter pulse durations, several experimental techniques using either Synchrotron Radiation (SR) or Free Electron Lasers (FEL) would take advantage of new solutions for the production of fast and efficient photon detector [1]. The opportunity to use quantum-well (QW) devices for photon detection has been proposed in infrared region [2]. Thanks to their direct, low-energy band gap and high electron mobility, QW devices based on arsenide semiconductors have been proposed as multi-wavelength sensors from visible light to hard X-rays.

It is very important to create Ohmic contact in both sides of the devices for detector performance such as electronic noise and absorbance of X-ray etc. In order to select the metal for the bias electrode, the photon absorption of the metal layer has to be minimized when the beam is hitting from the bias side. Therefore, the transmission spectra of the all metal configurations were calculated and plotted in terms of incident photon energy (Fig. 1) [3]

In other hand, creating low resistant good contact for readout electrodes is critically important in detector working conditions.

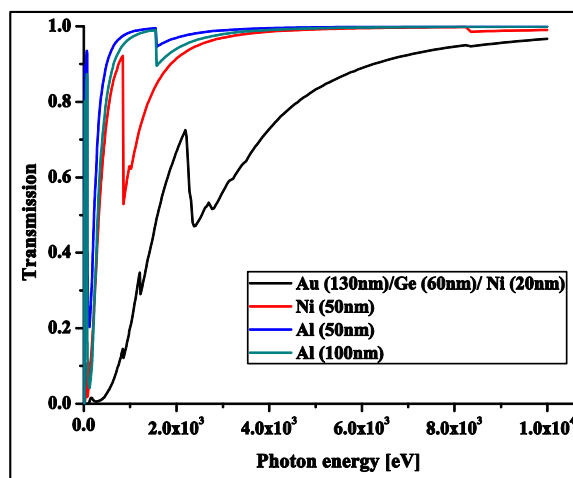


Figure.1. Transmission spectra of all metal layers was calculated.

DEVICE FABRICATION

InGaAs/InAlAs QWs were grown on a 500- μm -thick, epi-ready semi-insulating GaAs wafer by Molecular Beam Epitaxy (MBE) [3]. In order to virtually eliminate threading dislocations in the QW, a 1- μm step-graded buffer layer (BL) of $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$ ($x = 0.15 - 0.75$) was inserted below the 2DEG region to fit the GaAs lattice parameter to the $\text{In}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{As}$ one (Fig. 2). The BL structure was designed in such a way that its topmost part has a lattice parameter corresponding to the unstrained $\text{In}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{As}$, owing to the partial lattice relaxation of the buffer layers closer to the substrate. Then, a 25-nm-thick $\text{In}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{As}$ QW containing a 2DEG was placed between 50-nm-thick $\text{In}_{0.75}\text{Al}_{0.25}\text{As}$

* Electronic address: tamiraa@seas.num.edu.mn

barrier layers; a delta Si-doping was introduced in the upper barrier at 30 nm distance [4].

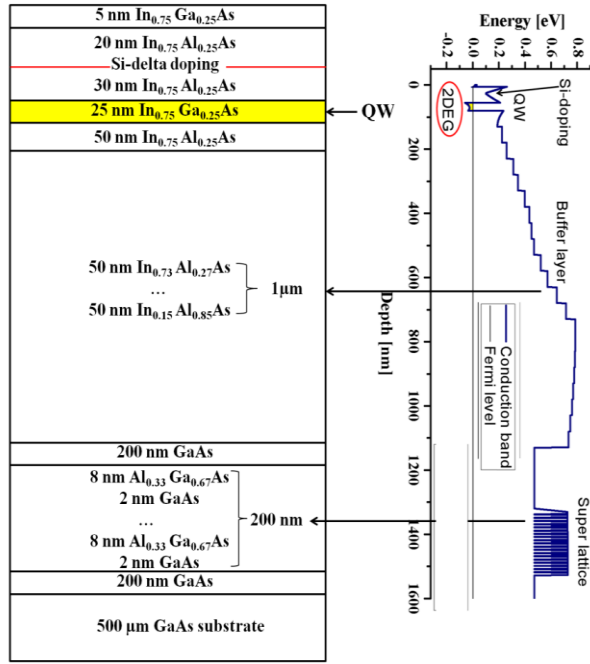


Figure.2. Layered structure of the QW wafer and its band structure showing 2D Electron gas formations.

Due to its low atomic number, Al layer absorbs less the incident photon with respect to the other two metallic layer configurations. Furthermore, it has a less pronounced K absorption edge (1.559 keV). Therefore, a metallic layer of Al can be used as bias electrode when the beam is hitting from the bias side since it has minimum absorption of the photons. Since different pixelation strategies were developed in our devices [5], we have to choose a metal layer creating good Ohmic contact, which can also be useful as a mask for the wet chemical etching for the readout electrode. We developed a test structure to compare the properties of the three metal layers, as is shown in Figure 3. Such structure, repeated for all the three metal configurations (Au/Ge/Ni – 130/60/30nm, Ni-50nm, Al-100nm), consisted of three pads on the surface of the QW side.

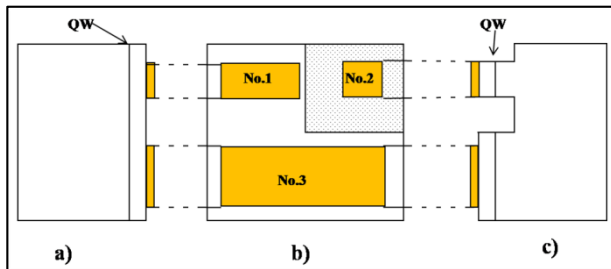


Figure.3. Developed structure to check Ohmic contacts. a) cross section of Pad No.1 and Pad No.3; b) top view of the configuration c) cross section of Pad No.2 and Pad No.3.

Pads No.1 and 3 were deposited on the grown surface and electrically connected through the QW.

Pad No.2 was still deposited on the grown surface, but the QW around the pad was etched away (1.5μm deep etch), in order to check electrical conduction through the GaAs substrate. Therefore, the resistance R_{12} measured between Pad No.1 and 2 is of the order of MΩ (Fig. 3c) while the resistance R_{13} between Pad No.1 and 3 of the order of a few kΩ (Fig.3a). The metal layers were deposited by a thin film deposition method.

The Au/Ge/Ni metal combination is proven to provide perfectly Ohmic contacts by annealing at 364°C even at cryogenic temperature in InGaAs QW devices [4]. Therefore, Au/Ge/Ni contacts annealed in such a way on our test structure can be considered as the reference of a perfect Ohmic contact.

In other hand, avoiding a double lithographic exposure and the related aligning difficulties, we have used the metal layers themselves as masks to etch the semiconductor. To test the behaviour of the different metals to etching, we performed a blanket etching both through as deposited metal pads and after annealing to 364°C.

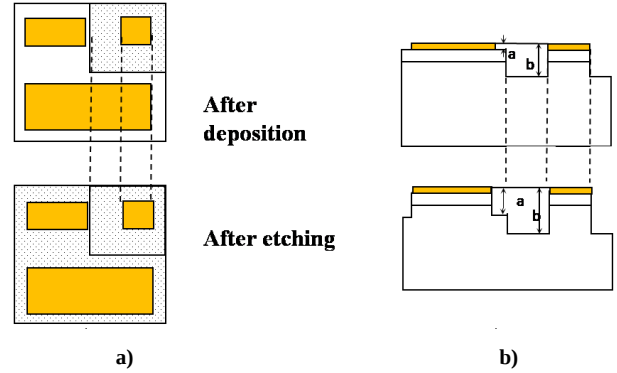


Figure.4. Schematic view of the surface; top view and its cross section; dotted area shows the etched surface.

The samples were etched in the phosphoric etching solution ($H_3PO_4:H_2O_2:H_2O$ with ratio 3:1:50.) for 15 min with ~100 nm/min etching rate after deposition of the metal pads. If the metal layer is capable to withstand the etching solution and protect the underlying semiconductor, the value of a should be ~1.5μm, while b should be ~3.0μm (Fig. 4).

RESULTS AND DISCUSSION

In order to assess the Ohmic behaviour of the various contacts after deposition then annealing, we have performed I-V scans for R_{12} in a ±0.05V range (Fig. 5a) and for R_{13} in a ±1.0V range (Fig. 5b). The curves are all linear, showing a perfect Ohmic character for all the tested contacts, except for Al right after the deposition. R_{13} resulted of order of kΩ for all the metals and becoming a bit lower after the annealing, expect for Ni, which increased by an order of magnitude and lost its Ohmic behavior, after the annealing.

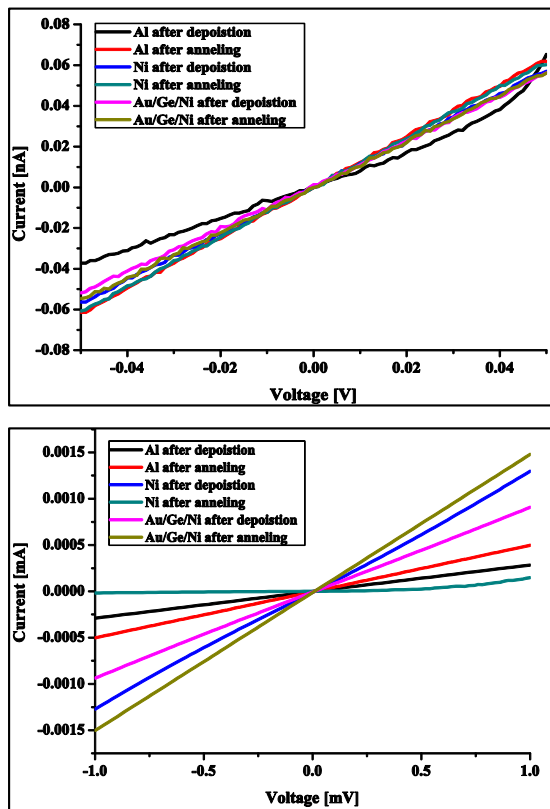


Figure 5. I-V curve for the metals after deposition then annealing.

Table 1. Surface topography of the surface with metal pads before and after etching.

	Au/Ge/Ni	Al	Ni
Etched after deposition	a=2.1 μ m b=3.6 μ m	a=0.4 μ m b=2.0 μ m	a=1.9 μ m b=3.3 μ m
Etched after annealing	a=1.6 μ m b=3.3 μ m	a=2.0 μ m b=3.3 μ m	a=0.6 μ m b=1.2 μ m

As shown in Table 1, the Au/Ge/Ni triple layer was not attached by the solution even after annealing and etching. However, Ni could resist the chemical etching only when it is not annealed and Al only after annealing. Annealed Ni and just deposited Al layers were etched and the QW surface as well. The ability of the different metals to sustain etching must be however confirmed by measuring the resistances between the pads (Fig. 6).

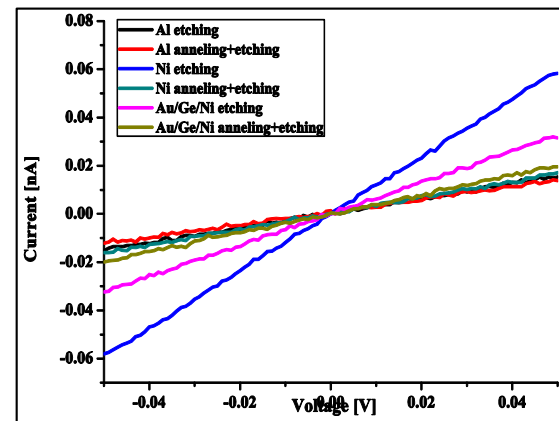
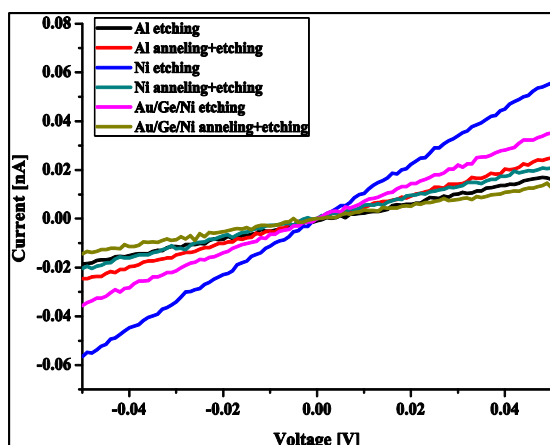


Figure 6. I-V curve for the metals etching after deposition, etching and annealing.

The resistance R_{12} between Pad No.1 and 2 of Au/Ge/Ni and Ni before and after etching the as deposited metals was similar, while it increased considerably for Al, implying that Al was etched away by the solution. The resistances R_{13} between Pad No.1 and 3 after etching in the phosphoric solution increased to the order of the substrate resistance. However, Au/Ge/Ni and Ni metal layers are still resulting same order of R_{12} even after annealing and etching.

Table 2. Summarizing R_{12} and R_{13} for all the cases with three tested metals.

Procedure	Au/Ge/Ni		Ni		Al	
	R_{12}	R_{13}	R_{12}	R_{13}	R_{12}	R_{13}
After deposition	93 M Ω	2.2 k Ω	87 M Ω	1.6 k Ω	113 M Ω	6.9 k Ω
After annealing	89 M Ω	1.3 k Ω	81 M Ω	35 k Ω	80 M Ω	4.0 k Ω
After etching	153 M Ω	142 M Ω	84 M Ω	88 M Ω	327 M Ω	277 M Ω
After annealing then etching	253 M Ω	364 M Ω	303 M Ω	239 M Ω	380 M Ω	201 M Ω

CONCLUSIONS

As a conclusion, a triple layers of Au/Ge/Ni is a suitable metal to create good Ohmic contacts for the readout electrode. Moreover, Au/Ge/Ni and Ni metal layers could be used as a protecting mask due to the capability to resist the etching solution. However, the metallic layer should not be annealed before the etching and it can be annealed later. When the beam is hitting from the readout side, Al could be involved as contacting metal with annealing without requiring the etching.

ACKNOWLEDGEMENTS

We acknowledges support from the Training and Research in Italian Laboratories (TRIL) Programme of the International Centre for Theoretical Physics, Trieste. The research leading to these results has received funding from the European Community's Seventh Framework Programme (FP7/2007-2013) under grant agreement no 312284.

REFERENCES

- [1] R. G. VanSilfhout, S. Manolopoulos, N. R. Kyele, and K. Decanniere, *Sens. Actuat. A* 133, 82 (2007).
- [2] J. K. L. S. V. Bandara, S. D. Gunapala, D. Z-Y. Ting, S. B. Rafol, *Proc.Far-IR, Sub-Mm MM Detect. Technol. Work.* (2002).
- [3] B. L. Henke, E. M. Gullikson, and J. C. Davis, *At. Data Nucl. Data Tables* 54, 181 (1993).
- [4] F. Capotondi, G. Biasiol, D. Ercolani, V. Grillo, E. Carlino, F. Romanato, and L. Sorba, *Thin Solid Films* 484, 400 (2005).
- [5] F. Capotondi, G. Biasiol, I. Vobornik, L. Sorba, F. Giazotto, A. Cavallini, and B. Fraboni, *J. Vac. Sci. Technol. B* 22, 702 (2004).
- [6] T. Ganbold, M. Antonelli, G. Biasiol, G. Cautero, H. Jark, D. M. Eichert, R. Cucini, and R. H. Menk, *J. Instrum* 9, (2014).