

МОНГОЛ УЛСЫН ИХ СУРГУУЛЬ
ШИНЖЛЭХ УХААНЫ СУРГУУЛЬ

МУИС-ийн Эрдэм шинжилгээний бичиг

ФИЗИК

№27 (495)



МУИС ПРЕСС ХЭВЛЭЛИЙН ГАЗАР
2018 он

Редакцийн зөвлөл:

Зөвлөлийн дарга:

Др, Проф. Ж.Даваасамбуу
Монгол Улсын Их Сургууль

Гишүүд:

- | | |
|----------------------------------|--------------------------|
| 1. Док. Проф. Б.Бурмаа | Монгол Улсын Их Сургууль |
| 2. Док. Проф. Н.Цогбадрах | Монгол Улсын Их Сургууль |
| 3. Док. Проф. П.Энхбаяр | Монгол Улсын Их Сургууль |
| 4. Док. Дэд проф. Ж.Ванчинхүү | Монгол Улсын Их Сургууль |
| 5. Док. Дэд проф. Д.Улам-Оргих | Монгол Улсын Их Сургууль |
| 6. Док. Дэд проф. Ц.Баатарчулуун | Монгол Улсын Их Сургууль |
| 7. Док. Ц.Энхбат | Шинжлэх Ухааны Академи |
| 8. Док. Ч.Содбилэг | Шинжлэх Ухааны Академи |
| 9. Док. Дэд проф. П.Мөнхбаатар | Монгол Улсын Их Сургууль |
| 10. Док. Дэд проф. С.Мөнхцэцэг | Монгол Улсын Их Сургууль |
| 11. Док. Дэд проф. Н.Төвжаргал | Монгол Улсын Их Сургууль |
| 12. Док. Дэд проф. Б.Мөнхбат | Монгол Улсын Их Сургууль |
| 13. Док. Дэд проф. С.Одмаа | Монгол Улсын Их Сургууль |
| 14. Док. Дэд проф. Х.Тэгшжаргал | Монгол Улсын Их Сургууль |
| 15. Док. Ч.Алдармаа | ШУТИС |

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, 2018

ISSN 2311-1097

“ФИЗИК, ФИЗИК БОЛОВСРОЛЫН АСУУДАЛ”

Монголын физикийн нийгэмлэгийн
эрдэм шинжилгээний хурал

2018 оны 11-р сарын 02-03

**ШУА-ийн жинхэнэ гишүүн, Монгол улсын гавъяат багш,
доктор, профессор Н.Содномын мэндэлсний
95 жилийн ойд зориулав.**

Санхүүжүүлэгч байгууллага:



Монголын Физикийн Нийгэмлэг



Монгол Улсын Их Сургуулийн
Шинжлэх ухааны сургууль



Шинжлэх Ухааны Академийн
Физик технологийн хүрээлэн



Физик, байгалийн ухааны
боловсролын төв



“Интер сайнс” ХХК

Программын комисс

1. Проф. Ж.Даваасамбуу	Монгол Улсын Их Сургууль
2. Акад. Х.Намсрай	Шинжлэх Ухааны Академи
3. Акад. Ц.Баатар	Шинжлэх Ухааны Академи
4. Акад. Т.Галбаатар	Шинжлэх Ухааны Академи
5. Акад. Р.Тогоо	Шинжлэх Ухааны Академи
6. Акад. С.Энхбат	Шинжлэх Ухааны Академи
7. Акад. Д.Сангаа	Шинжлэх Ухааны Академи
8. Проф. Ц.Ганцог	Монгол Улсын Их Сургууль
9. Проф. Г.Шилагарди	Монгол Улсын Их Сургууль
10. Проф. Б.Бурмаа	Монгол Улсын Их Сургууль
11. Док. П.Алтанцог	Шинжлэх Ухааны Академи

Зохион байгуулах комисс

1. Док. Н.Төвжаргал	Монгол Улсын Их Сургууль
2. Док. Ц.Энхбат	Цөмийн физикийн судалгааны төв
3. Проф. Ц.Амартайван	Монгол Улсын Их Сургууль
4. Проф. Ц.Баатарчулуун	Монгол Улсын Их Сургууль
5. Док. Б.Батгэрэл	Шинжлэх Ухааны Академи
6. Док. Ч.Алдармаа	Шинжлэх Ухаан, Технологийн Их Сургууль
7. Док. Г.Мөнхсайхан	Шинжлэх Ухаан, Технологийн Их Сургууль
8. Док. Г.Эрдэнэ-Очир	Монгол Улсын Их Сургууль
9. Док. Ц.Хос-Очир	Монгол Улсын Их Сургууль
10. Док. Г.Мөнхбаяр	Монгол Улсын Их Сургууль
11. Я.Мөнхсайхан	Монгол Улсын Боловсролын Их Сургууль
12. М.Батпүрэв	Монгол Улсын Их Сургууль
13. М.Отгонбаатар	Монгол Улсын Их Сургууль

Хурлын хөтөлбөр:

2018 оны 11-р сарын 02, Баасан гариг		
Цаг	Илтгэгч	Илтгэлийн сэдэв
09.00-09.30	Хурлын бүртгэл, МУИС-ийн Номын сан, 502 тоот	
09.30-09.50	Хурлын нээлт	Профессор Ж.Даваасамбуу, МФН-ийн ерөнхийлөгч Доктор Я.Төмөрбаатар МУИС-ийн захирал Академич Д.Рэгдэл ШУА-ийн ерөнхийлөгч
09.50-10.20	Академич Ч.Авдай Академич Ц.Баатар Профессор Г.Шилагарди Академич С.Энхбат	Академич Н.Содномын түүхэн замнал
10.20-10.35	Хурлын дарга	Академич Х.Намсрай
	M.Odsuren, G.Khuukhenkhuu, S.Davaa, K.Katō, A.Sarsembayeva	Two-body problems in the orthogonal condition model
10.35-10.50	O.Tegus, Inner Mongolia Normal University, China	Research and developments in superconductivity
10.50-11.05	Bai Narsu, Inner Mongolia Normal University, China	Ab initio study on the lattice dynamics of Fe ₂ P based giant magnetocaloric compounds
11.05-11.20	А.В.Номоев, Бурятский государственный университет, Россия	Композитные наночастицы: создание, структура, свойства и применения
11.20-11.35	Э.Номин-Эрдэнэ	Measurement of the $t\bar{t}\gamma$ production cross-section in pp collisions at a center-of-mass-energy of $\sqrt{s} = 13$ TeV with the ATLAS detector at the LHC
11.35-12.00	Цайны завсарлага	
12.00-12.10	Хурлын дарга	Академич Ц.Баатар
	П.Мөнхбаатар	2018 оны Физикийн салбарын Нобелийн шагналын тухай
12.10-12.25	Х.Намсрай, Б.Мөнхзаяа	Square-root differential equations for dark matter particles
12.25-12.40	В.Ц.Лыгденова, Бурятский государственный университет, Россия	Влияние наноразмерного порошка диоксида кремния на физико-механические, прочностные характеристики лакокрасочного покрытия из эмали ХВ-16
12.40-12.50	Т.Г.Дармаев, Бурятский государственный университет, Россия	Исследование бифуркаций периодических режимов при ламинарно-турбулентном переходе
12.50-14.20	Үдийн завсарлага	

2018 оны 11-р сарын 02, Баасан гариг, МУИС-ийн Номын сан, 502 тоот		
Цаг	Илтгэгч	Илтгэлийн сэдэв
	Хурлын дарга	Профессор Г.Хүүхэнхүү
14.20-14.35	Д.Наранчимэг, Л.Хэнмэдэх, Г.Мөнхсайхан, Н.Цогбадрах	Атомуудын өдөөгдсөн төлөвүүдийн энергийг Кон-Шэмийн тэгшитгэлээр тооцоолох нь
14.35-14.50	С.Энхтуул, Ж.Тэмүүжин	Барилгын материалын үйлдвэрлэлд ашиглагдаж буй цахилгаан станцын хаягдал үнсний цацрагийн судалгаа
14.50-15.05	А.Төрсүх, Р.Тогоо, Ж.Шинэбаяр, Д.Отгонсүрэн	Хүчилтөрөгчийн цөм фотоэмульсийн хөнгөн ба хүнд цөмтэй харилцан үйлчлэх үед гарах хоёрдогч бөөмсийн цагариган болон олгойдолтын онцлог
15.05-15.20	Т.Жамъянсүрэн, С.Одмаа	Жигд бус голомттой, цагираган өндөр температурын хийн хөргөлттэй реакторын нейтроник анализ
15.20-15.30	Д.Дамбасүрэн	Кварк ба антикваркийн холбоост төлөвийн тухайд
15.30-16.00	Цайны завсарлага, Ханын илтгэл	
	Хурлын дарга	Профессор Ш.Чадраабал
16.00-16.15	Д.Өнөрбилэг, Б.Болормаа	Геодезийн хэмжлийн нэгдмэл байдал нивелирийн рейкны хэвтээ компоратор
16.15-16.30	Б.Бумаа, Э.Уянга, Г.Сэвжидсүрэн, П.Алтанцог	Графенаар хольцолсон катализатор гарган авах, түүний шинж чанарын судалгаа
16.30-16.45	Е.М.Shpilevsky, Р.Tuvshintur, S.A.Filatov, G.Shilagardi, D.Tumurbaatar, T.Otgonchimeg	Metal-fullerene on materials for electronics
16.45-17.00	Х.Отгонзаяа, Д.Рэнцэнмядаг, Г.Эрдэнэ-Очир, Ц.Нинжбадгар	Цахиурын оксидоор бүрсэн олон цөмтэй төмрийн оксидын соронзон нанонунтгийн синтез ба физик шинж чанарын судалгаа
17.00-17.15	Б. Билгүүн, З. Лхамжав, Л. Эрдэнэбулган, Ц.Энхбат	LHC дэх лептокваркын феноменологийн судалгаа.
17.15-17.30	М.Батпүрэв	Investigation of the solid state transformation of the calcium carbonate particles
17.30-17.45	П. Баттогтох, Ч.Содбилэг, О.Качмарек, Г.Энхтуяа	Вилсон урсгалын арга ашиглан тооцоолсон цэвэр гейж SU(3) урсгалын хоолойн зарим нэг үр дүнгүүд
17.45-18.00	Хурлын хаалт, хэлэлцүүлэг	
18.30	Хүлээн авалт (Урилгаар) Хүүхдийн урлан бүтээх төвийн эсрэг талд Mongolian barbeque ресторанд	

Ханын илтгэл:

Илтгэгч	Илтгэлийн сэдэв
1. С.Мөнхцэцэг	Физикийн лабораторийн хичээлийн “Физикийн хэмжилтийн асуулга” аргын тухай
2. Г.Мөнхсайхан, Б.Одонтуяа, Л.Хэнмэдэх, Д.Наранчимэг, До. Нямсүрэн	Электрон бүтцийн тооцоололд Торын Больцманы загварыг ашиглах тооцооллын тойм
3. П.Энхцэцэг, О.Лхагва, Т.Уламбаяр	Физик сургалт ба загвар лаборатори түүний ач холбогдол
4. Ж.Далхсүрэн	Дэлхийн нам температурын цацрагийн энергийг дулаанд хувирган ашиглах боломж
5. Б.Өлзийбаяр, П.Мөнхбаатар, Ц.Хос-Очир, Ц.Баатарчулуун, Г.Мөнхбаяр, Н.Төвжаргал, М.Отгонбаатар, Г.Эрдэнэ-Очир, Ж.Даваасамбуу	Фемто секундын өдөөн судлах спектрометрийн аргыг хагас дамжуулагч материалууд дээр хэрэглэн судласан нь
6. Ch.Aldarmaa, L.Khenmedekh, G.Zorigt	Hydrogen Atom Ionization in Femtosecond Laser Field: Numerical Solution of the TDSE using CWFDVR method
7. Б.Хөхсүвд, С.Одмаа, Т.Жамъянсүрэн	Маш өндөр температурын хийн хөргүүртэй реакторын голомтын дизайны судалгаа



НАМСРАЙН СОДНОМ (1923-2002)

Намсрайн Содном 1923 оны 5-р сарын 25-нд Засагт хаан аймгийн Далай вангийн хошуу, одоогийн Завхан аймгийн Жавхлант сумын нутагт цэргийн дарга Шаравын Жалбуу, нэгэн тайжийн охин Норов нарын хүү болон төрсөн. Түүнийг 1926 онд Улаанбаатар хотын харъяат Бүх цэргийн номын багш Дондогийн Намсрай, түүний гэргий Жанцаны Чулуун хоёрт үрчлүүлжээ.

Н.Содном нь 1934 онд бага сургууль, 1938 онд дунд сургууль, 1946 онд МУИС-ийн тоо, физикийн багшийн анги, 1949-1953 онд Ломоносовын нэрэмжит Москвагийн их сургуулийн аспирантурыг дүүргэн “Налуу хэмжигч багажийн алдааг судлах” сэдвээр физик-математикийн ухааны дэд эрдэмтний зэрэг хамгаалжээ. Энэхүү судалгааны ажил нь газар хөдлөл, чичэрхийллийг хөрсний налуугаар мэдэх аргын нарийвчлалыг сайжруулахад чухал үүрэг гүйцэтгэсэн юм.

Тэрбээр 1939 онд Шинжлэх ухааны хүрээлэнгийн Хэл бичгийн тасагт судлаач-эрдэм шинжилгээний дэд ажилтнаар орж ажиллан нэрт эрдэмтэн Ц.Дамдинсүрэн, Я.Цэвэл нарын удирдлагаар дунд сургуулийн ахлах ангиудад үзэх уран зохиолын 3 номыг орос хэлнээс эх хэлнээ хөрвүүлэх, эмхэтгэх ажлыг хийж, уран зохиолын орчуулгын талаар өгүүлэл бичсэн нь сайн орчуулагч, өргөн хүрээнд сэтгэх нэрт эрдэмтэн болох их замын эхлэл нь байв.

Н.Содном 1956 онд ЗХУ-ын Дубна хотод ЦШНИ байгуулагдахад анх томилогдон очиж ажилласнаар цөмийн физикийн тулгуур судалгааны ажлаа эхэлж, тэр үед эрдэмтдийн анхаарлыг гойд татаж байсан хөнгөн цөмүүдийн нэгдэх урвалын талаархи туршилтуудыг ЗХУ, Солонгос зэрэг орны эрдэмтэдтэй хамтран тавьж сонирхолтой үр дүнгүүдийг гарган авчээ.

Энэ чиглэлийн судалгаа нь цөмийн бүтэц, урвалын механизмн талаар шинэ мэдээлэл гарган авах онолын ач холбогдолтойгоос гадна устөрөгчийн бөмбөгний тооцоонд шууд болон шууд бус шаардлагатай өгөгдлүүдийг шалгах, цаашид ийм төрлийн урвалыг хурдан нейтроны ба цөмийн эрчим хүчний үүсгүүр болгон ашиглах боломжийг тогтоох зэрэгт практик өгөөжтэй байв. Туршилтын маш нарийн багаж, төхөөрөмжүүдийг зохион бүтээсний үндсэн дээр гелий-3 ба тритийн цөмүүдийн нэгдэх урвалын янз бүрийн сувгуудын ялгаруулах энерги, хоёрдогч бөөмсийн спектр, урвалын огтлол зэргийг анх удаа нарийвчлан тодорхойлсон нь энэ

чиглэлийн сонгодог ажлуудын нэг болж олон улсын цөмийн мэдээллийн дэлхийн санд орж, одоог хүртэл судлаачид ишлэл хийж, хэрэглэж байна.

Н.Содном цөмийн физикийн тулгуур судалгаа болон түүний ололтыг үйлдвэр, аж ахуйн төрөл бүрийн салбарт хэрэглэх чиглэлээр эрдэм шинжилгээний ажлыг 40 гаруй жил хийж, 100 гаруй бүтээл туурвин гадаад, дотоодод хэвлүүлсний дотор оюутан сурагчидад зориулсан сурах бичиг, гарын авлага олныг бичиж, орчуулж нийтийн хүртээл болгосон.

Профессор Н.Содномын шууд удирдлага, санаачлагаар манай улсад анхны нейтроны генератор, микротрон зэрэг суурь төхөөрөмж бүхий цөмийн физикийн судалгааны төв байгуулагдаж, цөмийн суурь ба хавсрага судалгаа явуулах цөмийн шинжингээний томоохон хамтлаг үүсэн бий болсон бөгөөд тэрээр цөмийн физикийн анализын аргыг нөхдийн хамт боловсруулж, Эрдэнэтийн зэс, молибдений баяжмал дахь мөнгө зэрэг химийн зарим элементийн агуулгыг тодорхойлсноор экспортын орлогыг үлэмж хэмжээгээр нэмэгдүүлж байв. Түүний удирдсан цөмийн анализын шинэ арга боловсруулах чиглэлийн судалгааны ажлууд “ШБОС-81” уралдаанд I байр, БНМАУ-ын Шинжлэх ухааны байгууллагын 60, 70 жилийн ойгоор зарласан шилдэг эрдэм шинжилгээний бүтээл шалгаруулах уралдаанд I, III байр эзэлж, 1989 онд ЦШНИ-ийн II зэргийн шагнал хүртэж байсан юм.

Тэрээр Монголын ойрын ирээдүйд цөмийн эрчим хүчийг ашиглах, атомын цахилгаан станц барих боломжийг судлах, цөмийн технологийг хэрэглэх талаар судалгааны ажлыг удирдан явуулж, сургалт, судалгааны реактор авах үндэслэлийг боловсруулахаар өөрийн шавхагдашгүй эрдэм авъяасаа дайчлан амьдралынхаа эцсийн мөч хүртэл бие сэтгэлээ чилээн ажиллаж байлаа.

Н.Содном нь 1957 онд доцент, 1961 онд профессор, 1997 онд Монголын техникийн их сургуулийн хүндэт доктор цол хүртэж, 1961 онд ШУА-ийн сурвалжлагч гишүүн, 1975 онд ШУА-ийн жинхэнэ гишүүн, 2000 онд Дээд сургуулиудын шинжлэх ухааны Олон улсын академийн хүндэт гишүүнээр сонгогдсон бөгөөд тэрээр боловсрол шинжлэх ухааны байгууллагад 60 гаруй жил ажилласны дотор МУИС-ийн ректороор 17 жил, Дубна хот дахь Олон улсын ЦШНИ-ийн дэд захирлаар 6 жил ажиллаж, ШУА-ийн ерөнхийлөгч, ДТДТМБУ-ын хорооны дарга зэрэг нэр хүндтэй өндөр албыг хашиж байв.

Н.Содномын хөдөлмөр бүтээлийг төр, засгаас өндрөөр үнэлэн Сүхбаатарын одон, Хөдөлмөрийн гавъяаны улаан тугийн одон, Алтан гадас одон, ЗХУ-ын Хөдөлмөрийн улаан тугийн одон, Монгол улсын гавъяат багш цол, мөн Ардын хувьсгалын ойн медалиуд, БНМАУ-ын Засгийн газрын хүндэт жуух бичиг, Дэлхийн энх тайвны байгууллагын 20, 30 жилийн ойн хүндэт медаль, “Мөнгөн од” шагналаар шагнасан байна.

ШУА-ийн жинхэнэ гишүүн, Монгол улсын гавъяат багш, доктор, профессор Н.Содном нь Англи болон ОХУ-д хэвлэгдсэн “Дэлхийд хэн нь хэн бэ?”, “Азид хэн нь хэн бэ?”, “Дэлхийн физикчдийн намтар” лавлахуудад намтар нь бичигдсэн, монголын орчин үеийн физикчдийг төлөвшүүлэхэд асар их хувь нэмэр оруулсан олон зуун шавьтай, нэрт сурган хүмүүжүүлэгч, төр, нийгмийн томоохон зүтгэлтэн, олон улсад нэрд гарсан физикч, шинжлэх ухааны өргөн мэдлэг бүхий үндэсний сэхээтэн байлаа.

С.Даваа
П.Зузаан
Г.Хүүхэнхүү

Two-body problems in the orthogonal condition model

M.Odsuren^{1,*}, G.Khuukhenkhuu¹, S.Davaa¹, K.Katō², A. Sarsembayeva³

¹*School of Engineering and Applied Sciences and Nuclear Research Center, National University of Mongolia, Ulaanbaatar 210646, Mongolia*

²*Nuclear Reaction Data Centre, Faculty of Science, Hokkaido University, Sapporo 060-0810, Japan*

³*School of Industrial Engineering after A. Burkitbaev, Satbayev University, Almaty, 0500013, Kazakhstan*

In this work we investigate the 0^+ , 2^+ , 4^+ , 6^+ , 8^+ and 10^+ resonant states of the $\alpha+\alpha$ system and each advantage of Gaussian and Harmonic Oscillator basis wave functions in the complex scaled orthogonal condition model (CSOCM).

INTRODUCTION

The complex scaling method (CSM) [1-4] and the orthogonal condition model (OCM) [5] have been successfully utilized in the description of resonance states in light nuclei. In this work, we apply the CSOCM [4,6] to the ^8Be and investigate two-body resonances for $\alpha+\alpha$ system. We calculate resonance energies in the complex energy plane applying the CSM to the relative motion between two α -clusters. From the viewpoint of a microscopic description of the relative motion between the $\alpha+\alpha$ clusters it is important to take into account the Pauli exclusion principle in the inter-cluster motion of nucleons. The Gaussian and Harmonic Oscillator wave functions are applied. The calculation procedure of using the Pauli principle are different in these basis functions, however, the same results for two-body system are expected. Our calculated results of the resonance energy and decay width are satisfactorily in agreement with experimental data for the $J^\pi=0^+$, 2^+ and 4^+ states [7]. The purpose of this work is to calculate experimentally unknown 6^+ , 8^+ and 10^+ higher excited states of ^8Be system.

COMPLEX SCALING METHOD

In the last quarter century, a remarkable development in the description of resonances in quantum many-body systems has been realized through application of the CSM.

Originally, the CSM was proposed by Aguilar, Combes, and Balslev in 1971 [1]. Simon advocated this method as a direct approach of obtaining many-body resonances. The use of “direct” implies that the resonance wave functions are directly obtained with complex energy eigenvalues of the quantum many-

body system by solving an eigenvalue problem of the complex-scaled Schrodinger equation, $H^\theta \Psi^\theta = E^\theta \Psi^\theta$ with a real scaling angle θ . In the CSM, we take the imaginary value $i\theta$ as a parameter of the transformation.

The CSM has been proposed to solve the resonance states in the similar way as bound state problems. In the CSM, the distance of the relative coordinate is rotated as $r \rightarrow re^{i\theta}$ in the complex coordinate plane by introducing a real parameter θ . Therefore, the Schrödinger equation

$$\hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle \quad (1)$$

is rewritten as

$$\hat{H}(\theta)|\Psi^\theta\rangle = E^\theta|\Psi^\theta\rangle, \quad (2)$$

where $\hat{H}(\theta)$ and Ψ^θ are the complex scaled Hamiltonian and the wave function, respectively. $U(\theta)$ operates on a function Ψ , that is,

$$\Psi^\theta = U(\theta)\Psi(r) = e^{\frac{3}{2}i\theta}\Psi(re^{i\theta}) \quad (3)$$

The eigenvalues and eigenstates are obtained by solving the complex scaled Schrodinger equation Eq.(2). The eigenvalues of resonance states are found as $E^\theta = E_r - i\Gamma_r/2$, where E_r is resonance energy and Γ_r -width of the resonant state. More detailed explanation of the CSM is given in Refs.[1, 2]. The complex scaled Hamiltonian of inter cluster motion is given by

$$\hat{H}(\theta) = U(\theta)\hat{H}U^{-1}(\theta) \quad (4)$$

TWO BODY INTERACTION

For the alpha-alpha system the Hamiltonian is expressed as

* Electronic address: odsurenn@gmail.com

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^2 \hat{T}_i - \hat{T}_{c.m.} + V_{\alpha\alpha}^{Nuc l}(r) + V_{\alpha\alpha}^{Coul}(r).$$

As mentioned at the beginning, in this work we use two different basis sets as follows:
(i) A Gaussian basis for the radial part is given as

$$\phi_l^i(r) = N_l^i r^l \exp\left(-\frac{1}{2b_i^2} r^2\right) Y_{lm}(r).$$

Here $i = 0, 1, 2, \dots$ and N_l^i is normalization constants expressed as $N_l^i = \frac{1}{b_i^{l+3/2}} \left\{ \frac{2^{l+2}}{(2l+1)!! \sqrt{\pi}} \right\}^{1/2}$ and b_i is the size parameter of Gaussian function described as $b_i = b_0 \gamma^{i-1}$. Where b_0 and γ are the first term and a common ratio in the geometric progression, respectively.

(ii) Harmonic oscillator wave function for radial part is

$$\phi_{nl}(r) = N_l^n \left(\frac{r}{b_F}\right)^l L_n^{l+1/2} \left(\left(\frac{r}{b_F}\right)^2\right) \exp\left(-\frac{1}{2b_F^2} r^2\right) Y_{lm}(r)$$

here $L_n^{l+1/2}$ are Laguerre polynomials for the angular momentum l and N_l^n denotes the normalization constants as given by $N_l^n = \left\{ \frac{2\Gamma(n+1)}{b_F^3 \Gamma(l+n+\frac{3}{2})} \right\}^{1/2}$. The size parameter of relative motion of two alpha-cluster b_F is taken as 0.967 fm which corresponds to a single particle size parameter $b_0 = 1.3975$ fm employed to fit the observed r.m.s. radius of ^4He . In the case (i), we introduce the Pauli-potential $V_{\alpha\alpha}^P(r) = \lambda |\chi_F\rangle \langle \chi_F|$, where the strength λ is chosen as 10^7 MeV, which is enough to push up the Pauli-forbidden states into the unphysical energy region.

RESULTS AND DISCUSSIONS

In the numerical calculation, we have used two different basis set: (i) Gaussian basis function, and (ii) harmonic oscillator wave function. In Eq.5, the Buck [8] and folding [9] potentials are applied for the Gaussian basis function, but also the folding potential is employed in the harmonic oscillator wave function. According to the Buck-potential, the Pauli-forbidden states need not involve on the alpha-alpha system because of the Pauli principle effect is estimated by an appropriate choice of alpha-alpha potential. However, it is important to take into account of the forbidden states when we use the folding potential of the effective nuclear interaction.

From Eq.(2) the eigenvalues are obtained distributions of which on the complex energy plane are shown Figs. 1-2. Figs. 1-2 show the complex energy eigenvalues of 2^+ and 4^+ states which are obtained by Buck and folding potentials for Gaussian basis at different θ on the complex energy plane. The resonance energy solution must be stationary for changing the values of θ as explained in Ref. [6].

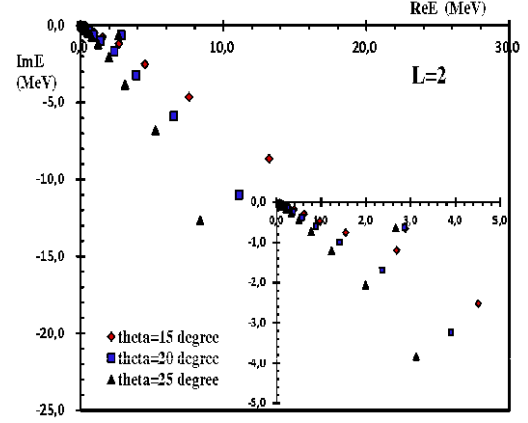


Figure 1. The resonance eigenvalues at $J^\pi=2^+$ for the different θ . Here Buck-potential is used for Gaussian basis.

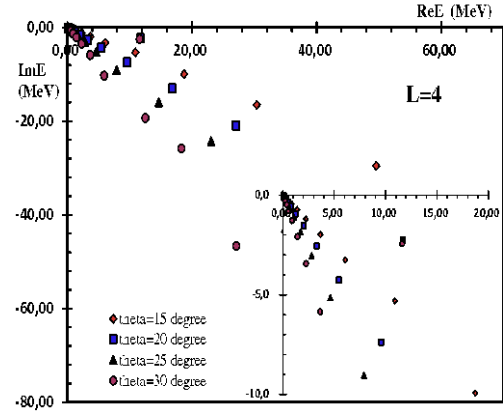


Figure 2. The resonance eigenvalues at $J^\pi=4^+$ for the different θ . The folding potential is used for Gaussian basis.

According to this explanation, we can see that for different θ segregated energy points are observed, but also these are almost unchanged the position by various θ on the complex energy plane (see Figs. 1 and 2). Fig. 1-2 show that there is significant energy point segregation around the location resonance state at the complex scaled plane.

In addition, Figure 1 and 2 present the outcome of the Gaussian basis function. Here Buck and folding potential parameters are applied at $\theta = 15^\circ, 20^\circ, 25^\circ$ and at $\theta = 15^\circ, 20^\circ, 25^\circ, 30^\circ$ on the complex energy plane, respectively. Furthermore, in

order to describe accurately the energies and widths for resonance state should be to consider the θ - and b -trajectories. In Figs. 3-4 are displayed eigenvalues which were calculated by θ - and b -trajectories.

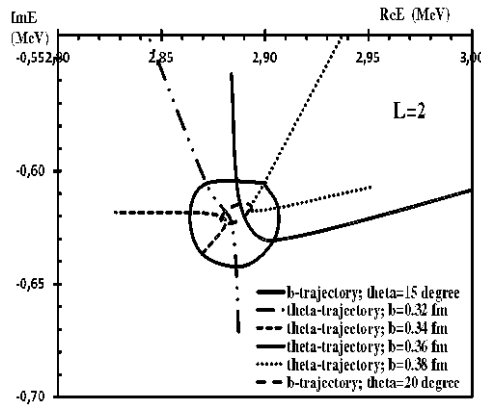


Figure 3. The θ and b -trajectory at $J^\pi=2^+$. The Buck-potential and Gaussian basis are used.

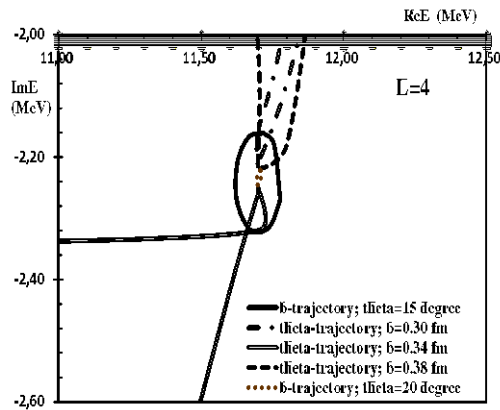


Figure 4. The θ and b -trajectory at $J^\pi=4^+$. The folding potential and Gaussian basis are used.

Therefore, the b -trajectories shapes are displayed as circles and θ -trajectories shapes like curves. b -trajectories are performed two times for each different potential parameters as shown Fig. 3-4 and θ -trajectories are calculated 4 and 3 times for Buck and folding potentials, respectively. Moreover, we chose the steps of b -trajectories by $b = b_0 + 0.1\kappa$ here $\kappa = 1, 2, \dots, 10$ which were calculated by two methods: changing parameter b and θ is fixed for each b -trajectories, and by the same b for every θ -trajectories, here θ is changing parameter and taken by $\theta = \theta_0 + \kappa$ where $\kappa = 0, 2, 4, \dots, 20$.

It can be seen from Figs. 3-4, the resonance states are accurately described when the behavior of the θ - and b -trajectories are created well. The calculated result of harmonic oscillator wave function for folding potential is displayed in Fig. 5.

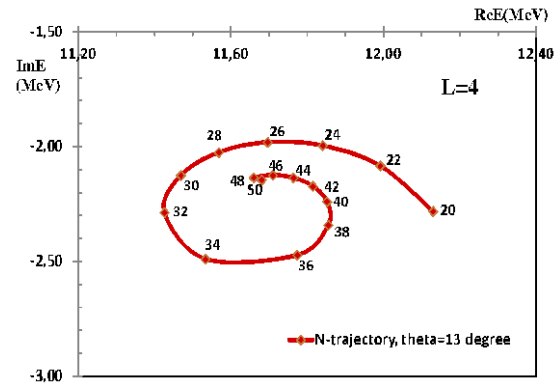


Figure 5. The N -trajectory at $J^\pi=4^+$. The folding potential and harmonic oscillator wave function are used.

Fig. 5 shows the N -trajectories at $\theta = 13$ and $N = N_0 + k$ here $k = 0, 2, 4, \dots, 30$. The accurate values of resonances are taken into account by θ - and N -trajectories for harmonic oscillator wave function. The spiral curve represents the N -trajectory followed by the basis states when its size increases. The approach of the energy point is round $N = 46 - 50$.

The results of the calculated energies with decay widths for 0^+ , 2^+ , 4^+ , 6^+ , 8^+ and 10^+ states of ^8Be , experimental data and two different potential parameters are included in Table I. The experimental data are taken from Ref. [7]. Calculated results are obtained by using the various bases within the Gaussian and harmonic oscillator wave functions. The low-lying calculated states are comparable with observed data [7]. However, there is a slight difference of energy at the 0^+ state between the calculated result for folding potential [9] and measured data. Furthermore, there is a difference between the calculated decay width of Gaussian basis and harmonic oscillator wave functions at the 0^+ state. In order to clarify a reason of this difference, it may necessary to check the convergence of solutions and increase the number of employed basis functions. In addition, the obtained results by Gaussian basis function and Buck potential are 33.4 MeV (37.2 MeV) and 51.5 MeV (92.4 MeV) energies (widths) at the 6^+ and 8^+ states, but as we know no experimental evidence to support this calculated results, however, these results are indicated a good agreement with other recent computed results [10] which are 34.38 MeV (37.19 MeV) and 53.65 MeV (93.74 MeV) at the 6^+ and 8^+ states, respectively. Furthermore, the higher excited state 10^+ is computed by two bases functions

applying both potential parameters. The calculated results are in good agreement with each other.

TABLE 1. The experimental and calculated resonance energies and widths of the ^8Be .

	EXP		Gaussian Basis function				Harmonic oscillator wave function	
	[7]							
	$E_r(\text{MeV})$	$\Gamma_r(\text{MeV})$	$E_r(\text{MeV})$	$\Gamma_r(\text{MeV})$	$E_r(\text{MeV})$	$\Gamma_r(\text{MeV})$	$E_r(\text{MeV})$	$\Gamma_r(\text{MeV})$
0+	9.1×10^{-2}	6.8×10^{-6}	9.13×10^{-2}	$\sim 10^{-6}$	6.41×10^{-1}	3.8×10^{-5}	6.06×10^{-1}	3.0×10^{-3}
2+	3.132	1.5	2.75	1.24	3.01	1.2	2.90	1.4
4+	11.49	3.5	11.78	3.56	11.75	4.4	11.7	4.4
6+	-	-	33.4	37.2	30.5	35.7	30.5	36.8
8+	-	-	51.5	92.4	51.6	120	51.6	120
10+	-	-	70.7	160	70.0	180	70.0	180
V_0			122.6225		106.09			
$\beta \text{ (fm}^{-2}\text{)}$			0.22 [8]		0.2009 [9]			
$\alpha \text{ (fm}^{-1}\text{)}$			0.75		0.5972			

SUMMARY

In this work we have presented different methods to calculate resonance state in the two-body system by CSOCM. Moreover, it can be seen that the different potential parameters able on both Gaussian and harmonic oscillator wave functions. The θ -, b - and N -trajectories are performed in order to determine the resonance states for different method.

The methods well explain all obtained resonance states of ^8Be except the width for the 0^+ state calculated by harmonic oscillator wave function. Furthermore, the results of the harmonic oscillator basis functions show that we need to employ a very large size basis functions in order to obtain converged resonance energies and widths.

It is remarkable that 6^+ , 8^+ and 10^+ higher excited energies are calculated and broad decay widths are predicted. In connection with the broad decay widths these higher excited states may not able to observe as well defined resonances in experiment.

REFERENCES

- [1] Y.K. Ho, Phys. Rep.99,1(1983).
- [2] T. Myo, Y. Kikuchi, H. Masui, K. Katō, Prog. Part. Nucl.Phys. 79, 1 (2014).
- [3] M. Odsuren, K. Kato, M. Aikawa, T. Myo, Phys. Rev. C89, 034322 (2014).
- [4] M. Odsuren, K. Kato, M. Aikawa, Nucl. Data Sheets 120, 126 (2014).
- [5] S. Saito, Prog. Theor. Phys.40, 1968, pp.893-894; 41, 1969, pp.705-722; Prog. Theor. Phys. Suppl. 62, 11 (1977).
- [6] A. T. Kruppa, K. Katō, Prog. Theor. Phys. 84, 1145 (1990).

- [7] F. Ajzenberg-Selove, Nucl. Phys. A 490, 1 (1988).
- [8] B. Buck, H. Friedrich, C. Wheatley, Nucl. Phys, A 275, 246 (1977).
- [9] E. W. Schmid, K. Wildermuth, Nucl. Phys. 26, 463 (1961).
- [10] E. Garrido, A. S. Jensen, D. V. Fedorov, Phys. Rev. C. 88 024001 (2013).

Square-Root Differential Equations for Dark Matter Particles

Namsrai Kh, Munkhzaya B.

Institute of Physics and Technology, Ulaanbaatar 13330, MONGOLIA

We propose the square root operator formalism for description of motion for a dark particle candidate. It turns out that such type particle moves randomly and fills in whole space. It seems that such particles do not create material structure of universe, like atoms, molecules, stars, planets and etc. due to their stochastic motion.

I. INTRODUCTION

Recently, concept of dark particles and dark energy plays a vital role in the cosmological theory. In last decades many experimental and theoretical studies are carried out in this direction and have obtained many interesting results. However, nature of dark particles and dark energy is unclear and does not understood very well.

Dark matter is a hypothetical type of matter distinct from baryonic matter (ordinary matter such as protons and neutrons), electrons, neutrinos and dark energy. Dark matter has never been directly observed; however, its existence would explain a number of otherwise puzzling astronomical observations [1], and its properties are inferred from its gravitational effects such as the motions of baryonic matter [2], gravitational lensing, its influence on the universe's large-scale structure, on the formation of galaxies, and its effect on the cosmic microwave background (CMB).

The standard model of cosmology indicates that the total mass- energy of the universe contains 4.9% ordinary matter, 26.8% dark matter and 68.3% dark energy [3]. Thus, dark matter constitutes 84.5% of total mass, while dark energy plus dark matter constitute 95.1% of total mass-energy content [4].

The dark matter hypothesis plays a central role in current modeling of cosmic structure formation, galaxy formation and evolution, and on explanations of the anisotropies observed in the cosmic microwave background (CMB).

The most widely accepted hypothesis on the form for dark matter is that its composed of **weakly interacting** massive particles that interact only through **gravity** and the **weak force**.

In this article, we propose the **square-root operator formalism** for the description of a dark matter particle which possesses random properties with random momentum or random mass with the definite probabilistic measure:

$$\omega(\rho) = \frac{1}{\pi} \frac{1}{\sqrt{1-\rho^2}} \quad (1)$$

with properties:

$$\int_{-1}^1 d\rho \omega(\rho) = 1, \quad (2)$$

$$\int_{-1}^1 d\rho \rho \omega(\rho) = 0, \quad (3)$$

$$\int_{-1}^1 d\rho \rho^2 \omega(\rho) = \frac{1}{2}. \quad (4)$$

II. THE GREEN FUNCTIONS OF THE USUAL PARTICLES

We know that ordinary particles such as scalar, spinor, vector fields obey the usual differential equations [5,6]

A. Scalar particle

The homogeneous Klein-Gordon equation

$$(m^2 - \square)\mathcal{D}(x) = 0 \quad (5)$$

has the solution

$$\mathcal{D}(x) = \frac{1}{2\pi} \epsilon(x^0) \delta(\lambda) - \frac{m}{4\pi\sqrt{\lambda}} \epsilon(x^0) \theta(\lambda) J_1(m\sqrt{\lambda}), \quad (6)$$

where $\lambda = x_0^2 - \vec{x}^2$, $\square = \triangle - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}$.

Moreover, the fundamental solution (the causal Green function) of the Klein-Gordon-Fock operator

$$(m^2 - \square)G^c(x) = \delta^4(x) \quad (7)$$

is given by

$$G^c(x) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^4k \frac{e^{-ikx}}{m^2 - k^2 - i\epsilon}. \quad (8)$$

An explicit form of this function is

$$\begin{aligned} G^c(x) = & \frac{1}{4\pi} \delta(\lambda) - \frac{m}{8\pi\sqrt{\lambda}} \theta(\lambda) [J_1(m\sqrt{\lambda}) - iN_1(m\sqrt{\lambda})] \\ & + \frac{mi}{4\pi^2\sqrt{-\lambda}} \theta(-\lambda) K_1(m\sqrt{-\lambda}). \end{aligned} \quad (9)$$

Here $J_1(x)$, $N_1(x)$ and $K_1(x)$ are the Bessel, the Bessel function of the second kind or the Neumann one (also denoted by $Y_1(x)$) and the modified Bessel function of the second kind (sometimes $K_1(x)$ is called the Mac' Donald function), respectively.

B. An even solution of the inhomogeneous D'Alembert equation

$$\square G^0(x) = -\delta^4(x) \quad (10)$$

is

$$\begin{aligned} G^0(x) &= G^c(x)|_{m=0} = \frac{1}{4\pi}(\delta(\lambda) - \frac{i}{\pi\lambda}) \\ &= \frac{1}{4\pi}\delta_+(-\lambda) \equiv \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty dx e^{ix(-\lambda)}. \end{aligned} \quad (11)$$

In this case, the photon Green function can be represented in the well-known form

$$G_{\mu\nu}^{ph}(x) = \frac{g_{\mu\nu}}{(2\pi)^4 i} \int d^4k \frac{e^{-ikx}}{k^2 + i\epsilon} \quad (12)$$

C. The fundamental solution of the Green function for vector field

satisfies the Prock equation

$$\left(g^{\mu\nu} + \frac{1}{m^2} \frac{\partial^2}{\partial x^\mu \partial x^\nu}\right) G_{\mu\nu}^c(x) = \delta^4(x), \quad (13)$$

where

$$G_{\mu\nu}^c(x) = \left(g^{\mu\nu} + \frac{1}{m^2} \frac{\partial^2}{\partial x^\mu \partial x^\nu}\right) G^c(x) \quad (14)$$

or

$$\begin{aligned} G_{\mu\nu}^c(x) &= \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^4k e^{-ikx} \left(g^{\mu\nu} - \frac{k_\mu k_\nu}{m^2}\right) \\ &\times \frac{1}{m^2 - k^2 - i\epsilon}. \end{aligned} \quad (15)$$

Here $G^c(x)$ is the Green function (9) for the Klein-Gordon equation (7). In this case, homogeneous equation of (13) has the solution

$$\mathcal{D}_{\mu\nu}(x) = (g^{\mu\nu} + \frac{1}{m^2} \frac{\partial^2}{\partial x_\mu \partial x_\nu}) \mathcal{D}(x), \quad (16)$$

where $\mathcal{D}(x)$ is given by the formula (6).

D. The fundamental solution or the Green function for the Dirac equation

$$\left(i\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} + m\right) S^c(x) = \delta^4(x) \quad (17)$$

is given by the formulas

$$S^c(x) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^4p e^{-ipx} \frac{m + \hat{p}}{m^2 - p^2 - i\epsilon}, \quad (18)$$

where $\hat{p} = p_0\gamma^0 - \vec{p}\vec{\gamma}$, γ^μ are the Dirac γ -matrices.

III. THE FUNDAMENTAL SOLUTION OF THE GREEN FUNCTION FOR THE WEYL EQUATION

$$\sqrt{m^2 - \square} W^c(x) = \delta^4(x). \quad (19)$$

Long time ago H. Weyl [7] proposed the square-root operator formalism, like (19) in the field theory. However, because of mathematical difficulty how to work with the differential operator under the square-root, this formalism did not developed and instead of which Klein-Gordon formalism was accepted.

It turns out that the Weyl equation (19) has remarkable properties and gives stochastic solutions over momentum variables $p_\mu \Rightarrow \rho p_\mu$ or equivalently over mass value $m \Rightarrow \rho m$, where ρ is random variable with the measure (1). To get these properties, we consider the Green function $\tilde{W}^c(p)$ in the momentum space [8]

$$\tilde{W}^c(p) = \frac{1}{\sqrt{m^2 - p^2}} \quad (20)$$

and use the Feynman parametrization formula

$$\begin{aligned} \frac{1}{a^{n_1} b^{n_2}} &= \frac{\Gamma(n_1 + n_2)}{\Gamma(n_1)\Gamma(n_2)} \int_0^1 dx x^{n_1-1} (1-x)^{n_2-1} \\ &\times \frac{1}{[ax + b(1-x)]^{n_1+n_2}} \end{aligned} \quad (21)$$

In our case $n_1 = n_2 = 1/2$, $\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$, $m^2 - p^2 = (m - \hat{p})(m + \hat{p})$, $\hat{p} = \gamma_\mu p^\mu$. The result reads

$$\tilde{W}^c(p) = \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 d\rho \frac{1}{\sqrt{1 - \rho^2}} \frac{m + \hat{p}\rho}{m^2 - p^2 \rho^2}. \quad (22)$$

Another equivalent representation (20)

$$\tilde{W}_1^c(p) = \frac{-1}{i\sqrt{p^2 - m^2}}$$

gives stochasticity over mass value m :

$$\tilde{W}_1^c(p) = \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 d\rho \frac{1}{\sqrt{1 - \rho^2}} \frac{1}{i} \frac{m\rho + \hat{p}}{m^2 \rho^2 - p^2}. \quad (23)$$

These two representations (22) and (23) are absolutely equivalent and only have different physical interpretation. The first case (22) gives the well-known spinor propagator or the causal Green function

$$\begin{aligned} W_{sp}^c(x) &= \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{d\rho}{\sqrt{1 - \rho^2}} \\ &\times \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^4p e^{-ipx} \frac{m + \hat{p}\rho}{m^2 - p^2 \rho^2 - i\epsilon} \end{aligned} \quad (24)$$

with stochastic momentum $p^\mu \rightarrow \rho p^\mu$ and stochastic energy value

$$\omega_1 = \frac{1}{|\rho|} \sqrt{m^2 + \vec{p}^2 \rho^2}. \quad (25)$$

Moreover, due to property

$$\frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 d\rho \frac{\rho}{\sqrt{1-\rho^2}} = 0,$$

the case (22) includes also scalar particles with stochastic momentum and its Green function takes the form

$$W_{sc}^c(x) = \frac{m}{\pi} \int_{-1}^1 d\rho \frac{1}{\sqrt{1-\rho^2}} \frac{1}{(2\pi)^4} \times \int d^4 p e^{-ipx} \frac{1}{m^2 - p^2 \rho^2 - i\epsilon}. \quad (26)$$

The case (23) leads to the spinor propagator with the random mass $m \rightarrow m\rho$:

$$W_{sp}^c(x) = \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{d\rho}{\sqrt{1-\rho^2}} \frac{1}{(2\pi)^4 i} \times \int d^4 p e^{-ipx} \frac{m\rho + \hat{p}}{m^2 \rho^2 - p^2 - i\epsilon} \quad (27)$$

with stochastic energy

$$\omega_2 = \sqrt{m^2 \rho^2 + \vec{p}^2}. \quad (28)$$

Averaged energy (25) for the first case gives singular value:

$$\langle \omega_1 \rangle = \frac{2}{\pi} \int_0^1 \frac{d\rho}{\rho} \frac{\sqrt{m^2 + \vec{p}^2 \rho^2}}{\sqrt{1-\rho^2}}. \quad (29)$$

In contrary, the second case (23) gives a finite value for an averaged energy

$$\begin{aligned} \langle \omega_2 \rangle &= \frac{2}{\pi} \int_0^1 d\rho \frac{1}{\sqrt{1-\rho^2}} \sqrt{m^2 \rho^2 + \vec{p}^2} \\ &= \frac{2\sqrt{m^2 + \vec{p}^2}}{\pi} E\left(\frac{\pi}{2}, \frac{m}{\sqrt{m^2 + \vec{p}^2}}\right) \end{aligned} \quad (30)$$

and

$$\langle \omega_2^2 \rangle = \frac{1}{2} m^2 + \vec{p}^2. \quad (31)$$

Here $E\left(\frac{\pi}{2}, \frac{m}{\sqrt{m^2 + \vec{p}^2}}\right)$ is the elliptic integral of the second kind

$$E(\varphi, k) = \int_0^\varphi \sqrt{1 - k^2 \sin^2 \alpha} d\alpha.$$

Notice that the first case leads to interesting consequences that in the square-root formalism averaged rest mass goes to infinite

$$\langle \omega_1 \rangle_{|\vec{p}=0} = \infty.$$

It means that the first case gives super heavy dark particle. It is natural that in this formalism the Einstein formula $E = mc^2$ for usual matter particles does changed and acquires the form

$$\langle E_0 \rangle = \frac{2m}{\pi} c^2 \quad (32)$$

due to formula (30).

In this paper, we propose that square-root or Weyl particles maybe played a role as dark matter particles in the whole Universe. Due to random diffusion, like the Brown motion detection of dark matter particles by experiments encounters difficulties, therefore they fill in whole empty space and do not make up usual matter structure.

IV. EXPLICIT FORMS OF GREEN FUNCTIONS FOR SQUARE-ROOT PARTICLES (DARK PARTICLES) IN X-SPACE

A. Scalar particle case with random momentum $p_\mu \rho$

In accountancy with the formulas (9) and (26), one gets

$$\begin{aligned} W_{sc}^c(x) &= \frac{m}{\pi} \int_{-1}^1 d\rho \frac{1}{\sqrt{1-\rho^2}} \frac{1}{\rho^2} \times \left\{ \frac{1}{4\pi} \delta(\lambda) \right. \\ &\quad - \frac{m}{8\pi\sqrt{\lambda}\rho} \theta(\lambda) \left[J_1\left(\frac{m}{\rho}\sqrt{\lambda}\right) - iN_1\left(\frac{m}{\rho}\sqrt{\lambda}\right) \right] \\ &\quad \left. + \frac{mi}{4\pi^2\sqrt{-\lambda}\rho} \theta(-\lambda) K_1\left(\frac{m}{\rho}\sqrt{-\lambda}\right) \right\}. \end{aligned} \quad (33)$$

B. Spinor particle with stochastic momentum $p_\mu \rho$

By using the formulas (24) and (9) one gets

$$\begin{aligned} W_{sp}^c(x) &= \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{d\rho}{\sqrt{1-\rho^2}} \frac{1}{\rho} \left(i\gamma^\nu \frac{\partial}{\partial x^\nu} + \frac{m}{\rho} \right) \\ &\quad \left\{ \frac{1}{4\pi} \delta(\lambda) - \frac{m}{8\pi\rho\sqrt{\lambda}} \theta(\lambda) \times \right. \\ &\quad \left. \times \left[J_1\left(\frac{m}{\rho}\sqrt{\lambda}\right) - iN_1\left(\frac{m}{\rho}\sqrt{\lambda}\right) \right] \right\} \\ &\quad + \frac{im}{4\pi^2\rho\sqrt{-\lambda}} \theta(-\lambda) K_1\left(\frac{m}{\rho}\sqrt{-\lambda}\right) \end{aligned} \quad (34)$$

C. Spinor particle with stochastic particle's mass $m\rho$

Taking into account the formulas (9) and (27) it easy to find the following causal Green-Function for a dark particle

$$W_{sp}^c(x) = \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 d\rho \frac{1}{\sqrt{1-\rho^2}} \left(i\gamma^\nu \frac{\partial}{\partial x^\nu} + m\rho \right) \left\{ \frac{1}{4\pi} \delta(\lambda) - \frac{m\rho}{8\pi\sqrt{-\lambda}} \theta(\lambda) \times \left[J_1(m\rho\sqrt{\lambda}) - iN_1(m\rho\sqrt{\lambda}) \right] + \frac{im\rho}{4\pi^2\sqrt{-\lambda}} \theta(-\lambda) K_1(m\rho\sqrt{-\lambda}) \right\}. \quad (35)$$

From the formulas (33)-(35) one can conclude that the Green function or propagator of a dark scalar particle (33) and causal Green function for a dark spinor particle (34) are singular functions with respect to integration over random variable ρ and therefore they can not play a role as causal Green functions.

In contrary, the causal Green function (35) is finite. It means that stochasticity in mass variable for a square-root or dark particle has definite physical meaning.

In conclusion, notice that from the formulas (23) and (27) one can conclude that a dark neutrino like particle coincides with the usual neutrino in the limit $m \rightarrow 0$, due to the formula (2). It mean that if an usual neutrino possesses even extremely small mass then neutrinos play a vital role in dark matter content of the Universe.

V. A SOLUTION OF THE SQUARE-ROOT KLEIN-GORDON EQUATION

Let us consider the equation

$$\sqrt{(m^2 - \square)} \Phi(x) = 0. \quad (36)$$

Here we use the following formal transformation

$$\frac{\sqrt{(m^2 - \square)} \cdot \sqrt{(m^2 - \square)}}{\sqrt{(m^2 - \square)}} \Phi(x) = \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{d\rho}{\sqrt{1-\rho^2}} \frac{m\rho + \hat{\partial}}{m^2\rho^2 - \square} (m^2 - \square) \Phi(x) = 0. \quad (37)$$

In the momentum representation a solution of equation (37) takes the form

$$\Phi(x) = \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{d\rho}{\sqrt{1-\rho^2}} \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^4p e^{ipx} \tilde{\varphi}(p) \times \delta(m^2 - p^2) \frac{m\rho + \hat{p}}{m^2\rho^2 - p^2}, \quad (38)$$

where

$$\Phi(x) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^4p e^{ipx} \tilde{\varphi}(p),$$

$$\delta(m^2 - p^2) = \frac{1}{2\omega_p} [\delta(p_0 + \omega_p) + \delta(p_0 - \omega_p)],$$

$$\omega_p = \sqrt{m^2 + \vec{p}^2}.$$

Another equivalent representation for (37) takes the form

$$\frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{d\rho}{\sqrt{1-\rho^2}} \frac{m + \rho\hat{\partial}}{m^2 - \rho^2\square} (m^2 - \square) \Phi(x) = 0 \quad (39)$$

or

$$\Phi(x) = \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{d\rho}{\sqrt{1-\rho^2}} \times \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^4p e^{ipx} \delta(m^2 - p^2) \frac{m + \rho\hat{p}}{m^2 - \rho^2 p^2} \tilde{\varphi}(p). \quad (40)$$

Here

$$\frac{1}{m^2 - \rho^2 p^2} = \frac{1}{m^2(1 + \rho)^2 + 2\rho^2 \vec{p}^2}, \quad \text{for } p_0 = -\omega_p,$$

or

$$\frac{1}{m^2 - \rho^2 p^2} = \frac{1}{m^2(1 - \rho)^2}, \quad \text{for } p_0 = \omega_p$$

$$\hat{p} = \gamma^\nu p_\nu, \quad \hat{\partial} = i\gamma^\nu \frac{\partial}{\partial x^\nu}.$$

VI. THE PAULI-JORDAN SOLUTION OF THE SQUARE-ROOT KLEIN-GORDON EQUATION

In this case, equation (36) takes the form

$$\sqrt{m^2 - \square} P(x) = 0 \quad (41)$$

where

$$P_1(x) = \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{d\rho}{\sqrt{1-\rho^2}} \int_0^\infty d\alpha e^{-\alpha(m^2\rho^2 - \square)} \times \left(m\rho + i\gamma^\nu \frac{\partial}{\partial x^\nu} \right) \mathcal{D}_{GF}(x). \quad (42)$$

or

$$P_2(x) = \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{d\rho}{\sqrt{1-\rho^2}} \int_0^\infty d\alpha e^{-\alpha(m^2 - \rho^2\square)} \cdot \left(m + i\rho\gamma^\nu \frac{\partial}{\partial x^\nu} \right) \mathcal{D}_{GF}(x).$$

Here $\mathcal{D}_{GF}(x)$ is given by the formula (6).

VII. DARK PHOTONS

An Even Solution of the Square-Root Inhomogeneous D'Alembert equation

$$\sqrt{\square}W_0(x) = \delta^4(x) \quad (43)$$

is given by the following two equivalent expressions in the momentum space:

$$\tilde{W}_0^1(p) = \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 d\rho \frac{1}{\sqrt{1-\rho^2}} \frac{p_0 + \vec{p} \cdot \rho}{p_0^2 - \vec{p}^2 \rho^2} \quad (44)$$

or

$$\tilde{W}_0^2(p) = \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 d\rho \frac{1}{\sqrt{1-\rho^2}} \frac{\rho p_0 + \vec{p} \cdot \rho}{p_0^2 \rho^2 - \vec{p}^2}, \quad (45)$$

where $\vec{p} = \sigma^i p_i$, σ^i are the Pauli matrices.

These two formulas (44) and (45) in x-space take the forms

$$W_0^1(x) = \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 d\rho \frac{1}{\sqrt{1-\rho^2}} \left(i\rho^{-1} \frac{\partial}{\partial t} + i\vec{\sigma} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \right) \cdot \frac{1}{4\pi} \left[\delta(\lambda') - \frac{i}{\pi\lambda'} \right], \quad (46)$$

$$\lambda' = x_0^2 \rho^2 - \vec{x}^2,$$

and

$$W_0^2(x) = \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 d\rho \frac{1}{\rho\sqrt{1-\rho^2}} \left(i\rho \frac{\partial}{\partial t} + i\vec{\sigma} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \right) \cdot \frac{1}{4\pi} \left[\delta(\lambda'') - \frac{i}{\pi\lambda''} \right], \quad (47)$$

$$\lambda'' = x_0^2/\rho^2 - \vec{x}^2.$$

Here

$$G_0(x) = \frac{1}{4\pi} \left[\delta(\lambda) - \frac{i}{\pi\lambda} \right] \quad (48)$$

corresponds to the Green function (the causal function) for a massless particle, like the photon, which can be represented in the well-known form

$$G_0^{ph}(x) = \frac{g_{\mu\nu}}{(2\pi)^4} \frac{1}{i} \int d^4p \frac{e^{-ipx}}{p^2 + i\epsilon} \quad (49)$$

Averaged energy for a dark photon for the second case takes the form

$$\langle E_{20}^\gamma \rangle = \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 d\rho \frac{1}{\sqrt{1-\rho^2}} \frac{1}{|\rho|} |\vec{p}| = \frac{2}{\pi} \int_0^1 \frac{d\rho}{\rho\sqrt{1-\rho^2}} |\vec{p}|. \quad (50)$$

This integral is diverged and therefore the second case does not accepted. Moreover, the first case leads to the finite energy form

$$\begin{aligned} \langle E_{10}^\gamma \rangle &= \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 d\rho \frac{1}{\sqrt{1-\rho^2}} |\rho| |\vec{p}| = \\ &= \frac{2}{\pi} \int_0^1 d\rho \rho \frac{1}{\sqrt{1-\rho^2}} |\vec{p}| = \frac{2}{\pi} |\vec{p}| \end{aligned} \quad (51)$$

for the dark photon.

Thus, family of dark matter particles consist of dark scalar, dark spinors, dark photons and dark neutrinos which coincide with usual neutrinos. All these particles possess stochastic properties with respect to the probabilistic measure (1).

Appendix A

It turns out that the probabilistic measure (1) plays a role as a filter or an intermediate mathematical trick in the square-root differential calculus. Due to this filter solutions of square-root differential equations describe wave properties of dark matter particles. To show this we consider very simple system-harmonic motion defining by the differential equation

$$\left(a^2 + \frac{d^2}{dt^2} \right) x(t) = 0, \quad (52)$$

solution of which is

$$x(t) = A \sin at. \quad (53)$$

Now let us turn to the square-root equation

$$\sqrt{a^2 + \frac{d^2}{dt^2}} X(t) = 0, \quad (54)$$

where the probabilistic measure (1) appears:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{a^2 + \frac{d^2}{dt^2}}} f(t) &= \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{d\rho}{\sqrt{1-\rho^2}} \int_0^\infty d\alpha e^{-\alpha(a^2 + \rho^2 \frac{d^2}{dt^2})} \cdot \\ &\cdot \left(a + i\rho \frac{d}{dt} \right) f(t). \end{aligned} \quad (55)$$

Here

$$\begin{aligned} e^{-\alpha\rho^2 \frac{d^2}{dt^2}} &= 1 - \alpha\rho^2 \frac{d^2}{dt^2} + \frac{\alpha^2\rho^4}{2!} \frac{d^4}{dt^4} - \dots \\ &= \sum_{n=0}^\infty \frac{(-1)^n}{n!} \alpha^n \rho^{2n} \frac{d^{2n}}{dt^{2n}}, \end{aligned}$$

and we use the following calculations

1

$$\frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{d\rho}{\sqrt{1-\rho^2}} \rho^{2n} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{\Gamma(n+\frac{1}{2})}{\Gamma(n+1)}.$$

2.

$$\int_0^\infty d\alpha \alpha^n e^{-\alpha a^2} = (a^2)^{-1-n} \Gamma(n+1).$$

3.

$$\frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{d\rho}{\sqrt{1-\rho^2}} \rho^{2n+1} = 0.$$

Then, we have nice formula

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{D}}f(x) &= \frac{1}{\sqrt{a^2 + \frac{d^2}{dt^2}}} f(t) = \frac{1}{a\sqrt{\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \\ &\cdot \frac{\Gamma(n+1/2)}{n!} \frac{1}{a^{2n}} \left(\frac{d^2}{dt^2} \right)^n f(t). \end{aligned} \quad (56)$$

In particular:

$$\hat{\mathcal{D}}C = \frac{1}{a}C, \quad \hat{\mathcal{D}}t = \frac{1}{a}t,$$

$$\hat{\mathcal{D}}t^2 = \frac{1}{a}t^2 - \frac{1}{a^3},$$

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{D}}\sin bt &= \Lambda(a, b) \sin bt, \\ \hat{\mathcal{D}}\cos bt &= \Lambda(a, b) \cos bt, \\ \hat{\mathcal{D}}e^{ibt} &= \Lambda(a, b)e^{ibt}, \\ \hat{\mathcal{D}}e^{-ibt} &= \Lambda(a, b)e^{-ibt}, \\ \hat{\mathcal{D}}e^{bt} &= \Lambda'(a, b)e^{bt}, \\ \hat{\mathcal{D}}e^{-bt} &= \Lambda'(a, b)e^{-bt}, \end{aligned}$$

and so on. Here

$$\begin{aligned} \Lambda(a, b) &= \frac{1}{a\sqrt{\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(n+1/2)}{n!} \left(\frac{b^2}{a^2} \right)^n \\ &= \frac{1}{a} \left(1 - \frac{b^2}{a^2} \right)^{-1/2}, \end{aligned} \quad (57)$$

$$\begin{aligned} \Lambda'(a, b) &= \frac{1}{a\sqrt{\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \Gamma(n+1/2)}{n!} \left(\frac{b^2}{a^2} \right)^n \\ &= \frac{1}{a} \left(1 + \frac{b^2}{a^2} \right)^{-1/2}. \end{aligned} \quad (58)$$

So that

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{D}}\sin bt &= \frac{\sin bt}{\sqrt{a^2 - b^2}}, \\ \hat{\mathcal{D}}\cos bt &= \frac{\cos bt}{\sqrt{a^2 - b^2}}. \end{aligned}$$

Finally, equation (54) takes the form

$$\begin{aligned} \hat{N}X(t) &= \sqrt{a^2 + \frac{d^2}{dt^2}} X(t) = \frac{\left(a^2 + \frac{d^2}{dt^2} \right)}{\sqrt{a^2 + \frac{d^2}{dt^2}}} X(t) \\ &= \left(a^2 + \frac{d^2}{dt^2} \right) \hat{\mathcal{D}}X(t) = \hat{\mathcal{D}} \left(a^2 + \frac{d^2}{dt^2} \right) X(t). \end{aligned} \quad (59)$$

In particular,

$$\begin{aligned} \sqrt{a^2 + \frac{d^2}{dt^2}} \sin bt &= \frac{a^2 - b^2}{\sqrt{a^2 - b^2}} \sin bt, \\ \sqrt{a^2 + \frac{d^2}{dt^2}} \cos bt &= \frac{a^2 - b^2}{\sqrt{a^2 - b^2}} \cos bt. \end{aligned}$$

Therefore, the square-root differential equation

$$\sqrt{a^2 + \frac{d^2}{dt^2}} X(t) = 0 \quad (60)$$

describes also harmonic oscillator $X(t) = A \sin at$ due to filter properties of the probabilistic measure (1). Generalization of the equation (60)

$$\sqrt{m^2 - \square} G_c(x) = \delta^4(x) \quad (61)$$

or

$$\frac{(m^2 - \square)}{\sqrt{m^2 - \square}} G_c(x) = \delta^4(x), \quad (62)$$

$$\left(\square = -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \frac{\partial^2}{\partial \vec{x}^2} \right)$$

leads to the description of the generalized causal Green function for square-root Klein-Gordon equation, where

$$\begin{aligned} G_c(x) &= \frac{1}{\sqrt{m^2 - \square}} \delta^4(x) \\ &= \frac{1}{m\sqrt{\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \Gamma(n+1/2)}{n!} \frac{1}{m^{2n}} (\square)^n \delta^4(x) \end{aligned} \quad (63)$$

is the particular case of Efimov's nonlocal or generalized function [9] describing a nonlocal or extended object. This object is distributed in a domain determined by the length

$$L = \frac{\hbar}{mc}.$$

It is obviously that the plane wave $\psi(x) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{ipx}$ ($px = p_0 x^0 - \vec{p} \cdot \vec{x}$) satisfies the square-root differential equation

$$\sqrt{m^2 - \square} e^{ipx} = \frac{m^2 - p^2}{\sqrt{m^2 - p^2}} e^{ipx} = 0, \quad (64)$$

if $m^2 = p_0^2 - \vec{p}^2$, where we have used the formula (63) with the change $\delta^4(x) \Rightarrow e^{ipx}$.

Appendix B

It turns out that in our scheme, a new force appears, we call it a fifth force or a dark force due to exchange of square-root or dark matter particles with the propagator $1/\sqrt{m^2 + \vec{p}^2}$ in the momentum space in the static limit. We know that the Coulomb and Yukawa potentials U_C , U_γ are related with the photon and scalar particles propagators in the static limit by the following formulas:

$$U_C(r) = \frac{e}{(2\pi)^3} \int d^3p e^{i\vec{p} \cdot \vec{r}} \frac{1}{\vec{p}^2} = \frac{e}{4\pi r}, \quad (65)$$

$$U_\gamma(r) = \frac{g}{(2\pi)^3} \int d^3p e^{i\vec{p} \cdot \vec{r}} \frac{1}{m^2 + \vec{p}^2} = \frac{g}{4\pi} \frac{e^{-mr}}{r} \quad (66)$$

Then by analogous with these formulas, we obtain a new potential

$$U_D(r) = \frac{\lambda}{(2\pi)^3} \int d^3p e^{i\vec{p} \cdot \vec{r}} \frac{1}{\sqrt{m^2 + \vec{p}^2}} = \frac{\lambda}{2\pi^2} \frac{m}{r} K_1(mr), \quad (67)$$

where $K_1(z)$ is the Mac Donald function, e , g and λ are some constants. Asymptotic behaviour of this potential takes the form

$$U_D(r) = \begin{cases} \frac{\lambda}{4\pi^2} m^2 \ln \frac{Cz}{2} & z = mr \rightarrow 0 \\ \frac{\lambda}{4\pi^2} \frac{m^2}{z} \sqrt{\frac{\pi}{2z}} e^{-z}, & z = mr \rightarrow \infty \end{cases} \quad (68)$$

$C = 0.57721566490\dots$. It means that a dark particle potential is short distance like the Yukawa one.

-
- [1] Overbye, Dennis (20 February 2017). "Cosmos Controversy: The Universe Is Expanding, but How Fast?". New York Times. Retrieved 21 February 2017.
- Lee, Chris (May 22, 2017). "Diving deep into the world of emergent gravity".
- [2] Trimble, v. (1987). "Existence and nature of dark matter in the universe". *Annual Review of Astronomy and Astrophysics* 25: 425–472.
- [3] Planck Mission Brings Universe Into Sharp Focus". NASA Mission Pages. 21 March 2013.
- "Dark Energy, Dark Matter". NASA Science: Astrophysics. 5 June 2015.
- Francis, Matthew (22 March 2013). "First Planck results: the Universe is still weird and interesting". Arstechnica.
- [4] Planck captures portrait of the young Universe, revealing earliest light". University of Cambridge. 21 March 2013. Retrieved 21 March 2013.
- Sean Carroll, Ph.D., Caltech, 2007, The Teaching Company, Dark Matter, Dark Energy: The Dark Side of the Universe, Guidebook Part 2 page 46, Accessed 7 October 2013, "...dark matter: An invisible, essentially collisionless component of matter that makes up about 25 percent of the energy density of the universe... it's a different kind of particle... something not yet observed in the laboratory."
- Ferris, Timothy. "Dark Matter". Retrieved 10 June 2015.
- Jarosik, N.; et al. (2011). "Seven-Year Wilson Microwave Anisotropy Probe (WMAP) Observations: Sky Maps, Systematic Errors, and Basic Results". *Astrophysical Journal Supplement*. 192 (2): 14.
- [5] Bogolubov, N.N., and Shirkov, D.V. (1980). *Introduction to the Theory of Quantized Fields*, 3rd.ed., Wiley-Interscience, New York
- [6] Vladimirov, V.S (1984). *Equation of Mathematical Physics*, Mir pub. Moscow.
- [7] Weyl, H. (1929). *Electron and Gravitation* I.Z.Physic, **56**, 330.
- [8] Weyl, H. (1929). *Electron and Gravitation* I.Z.Physic, **56**, 330.
- [9] Namsrai kh. (1998). *Square-Root Klein-Gordon Operator and Physical Interpretation*, *Inter.J.Theor.Phys.* **37** 1531.
- [10] Efimov, G.V. (1977). *Nonlocal Interactions of Quantized Fields*, Nauka, Moscow.

Measurement of the $t\bar{t}\gamma\gamma$ production cross-section in pp collisions at a center-of-mass-energy of $\sqrt{s} = 13$ TeV with the ATLAS detector at the LHC

Nomin-Erdene Erdenebat*

National University of Mongolia, 14201 Ulaanbaatar, MONGOLIA

This analysis has been performed with data collected by the ATLAS detector during 2015 and 2016 corresponding to an integrated luminosity of 36.1 fb^{-1} at a center-of-mass-energy of $\sqrt{s} = 13$ TeV, in the single lepton channels. In the single lepton channels, one lepton and at least four jets are requested, with at least one jet being b-tagged and two isolated photons with $p_T > 20$ GeV and $|\eta| < 2.37$. The event yields and kinematic distributions are compared between data and MC in the signal region.

I. INTRODUCTION

Measurements of the top-quark properties play an important role in testing the Standard Model (SM) due to its heavy mass close to the electroweak breaking scale and short life time. It also has an important role in the study of the background processes (e.g. Higgs Boson Physics) at the Large Hadron Collider (LHC). In many scenarios beyond the SM heavier particles decay into the top quarks. Studying detailed properties of the top quarks can give handles on new physics. Since there are the large number of $t\bar{t}$ pairs produced during the LHC Run 2, this high statistics will allow to measure the properties of the top quark precisely. In particular, the production of a top-quark pair in association with two photons ($t\bar{t}\gamma\gamma$) can probe the electroweak coupling between the top quark and photons.

In this analysis a measurement of the $t\bar{t}\gamma\gamma$ production cross-section is performed with data collected by the ATLAS detector during 2015 and 2016 corresponding to an integrated luminosity of 36.1 fb^{-1} at a center-of-mass-energy of $\sqrt{s} = 13$ TeV, in the single lepton channels. The final state of the $t\bar{t}\gamma\gamma$ process is similar to the $t\bar{t}\gamma$ process, but it contains two prompt photons. Thus, this analysis is built on the single-lepton $t\bar{t}\gamma$ analysis [1] in ATLAS. In the single lepton channels, one lepton and at least four jets are requested, with at least one jet being b-tagged and two isolated photons with $p_T > 20$ GeV and $|\eta| < 2.37$. The event yields and kinematic distributions are compared between data and MC in the signal region.

II. DATA AND SIMULATION SAMPLES

This analysis has been performed with proton-proton collision data collected by the ATLAS detector during 2015 and 2016, at a center-of-mass-energy of $\sqrt{s} = 13$ TeV. The corresponding total integrated luminosity is 3.21 fb^{-1} in 2015 and

32.88 fb^{-1} in 2016, respectively. The signal sample is the $t\bar{t}\gamma$ sample which has been simulated for single lepton and dilepton channels of $t\bar{t}$ at leading-order, with the MG5-aMC@NLO generator [2], using the NNPDF2.3LO parton distribution function [3]. The showering and hadronisation is done by Pythia8, i.e. interfaced to the Pythia8[4]. The first photon of the $t\bar{t}\gamma\gamma$ process is simulated from the matrix element and the second photon by the parton shower which the second photon is selected using a truth matching in this $t\bar{t}\gamma$ sample. The production of W- and Z-bosons with an associated prompt photon as well as the other vector boson production samples (W and Z-bosons + jets) are simulated using SHERPA 2.2.2 and 2.2.1, respectively, with the NNPDF30NNLO pdf set [5]. Also for the $W\gamma\gamma$ and $Z\gamma\gamma$ processes the second photon is selected using the truth matching in the $W\gamma$ and $Z\gamma$ samples. The MC sample for the inclusive $t\bar{t}$ production is generated with POWHEG-BOX v2 interfaced to PYTHIA8, using the A14 tune [6]. The $t\bar{t}$, W+jets and Z+jets samples can contain events already taking into account by the $t\bar{t}\gamma$, $W\gamma$, $Z\gamma$ samples due to the photon by the showering. This overlap is removed using the truth matching. The single top-quark t-, s- and Wt-channel samples are produced by POWHEG-Box v1 generator. The WW-, WZ- and ZZ-diboson samples are simulated using SHERPA 2.1 with the CT10(NLO) pdf set [7]. For the single top+ $\gamma\gamma$ and diboson+ $\gamma\gamma$ processes two photons are simulated by the parton shower. The $t\bar{t}H$ sample is simulated with the MG5-aMC@NLO generator, using the NNPDF2.3LO parton distribution function. In the $t\bar{t}H$ process the Higgs decay to two photons.

All MC simulation samples which are the $t\bar{t}\gamma$, $t\bar{t}$, single top-quark, diboson, $W\gamma$, $Z\gamma$, W+jets, Z+jets and $t\bar{t}H$ are normalized to the data luminosity.

III. EVENT SELECTION

In the single lepton channels, the $t\bar{t}\gamma\gamma$ final state contains two isolated photons with high- p_T , an isolated lepton (e^- or μ) with a large p_T , large missing transverse momentum originating from the neutrino in the leptonic decay of a W boson, two jets from

*Electronic address: nominerdene@num.edu.mn

the hadronic decay of the other W boson, and two b-quark jets. For e+jets (μ +jets) channels: Exactly one electron (muon) with $p_T > 25$ GeV is required and two reconstructed photons satisfying the Tight identification criteria and being isolated are required with $p_T > 20$ GeV and $|\eta_{clus}| < 2.37$. At least four reconstructed jets with $p_T > 25$ are required. At least one jet has to be b-tagged jet. For e+jets channel: An invariant mass $m(\gamma, e)$ between each prompt photon and electron has to be outside a 5 GeV mass window around the Z boson mass. Distance between each prompt photon and the lepton must be greater than 1.0. This is to limit the contribution from the photons originating from top decay products in the radiative top decay process. Event double counting removal: To avoid a double counting with the $W\gamma\gamma$, $Z\gamma\gamma$, $t\bar{t}\gamma\gamma$, the events with two prompt photons in the W +jets, Z +jets and $t\bar{t}$ MC samples are removed by using the truth matching which identifies the origin and the type of the truth particle corresponding to the reconstructed photon.

In the TABLE I the events passing above selection are shown. Selection yields a total of 28 ± 5.29

TABLE I: The event yields for each sample and e+jets(μ +jets) channel. Only statistical uncertainties are included.

Process	e+jets	μ +jets
$t\bar{t}\gamma\gamma$	11.15 ± 0.75	12.52 ± 0.84
$W\gamma\gamma$	0 ± 0	0.37 ± 0.37
$Z\gamma\gamma$	0.60 ± 0.60	0.57 ± 0.36
Single top+ $\gamma\gamma$	0 ± 0	0 ± 0
Diboson+ $\gamma\gamma$	0 ± 0	0 ± 0
$t\bar{t}H$	1.41 ± 0.17	1.04 ± 0.15
Fake Photon	3.82 ± 0.51	2.31 ± 0.66
Fake Lepton	1.10 ± 2.58	0 ± 0.84
Total	18.08 ± 2.80	16.81 ± 1.46
Data	28 ± 5.29	17 ± 4.12

and 17 ± 4.12 data events with statistical errors in the electron and muon channels, respectively. From simulation studies with the $t\bar{t}\gamma\gamma$ signal sample, 11.15 ± 0.75 and 12.52 ± 0.84 signal events with statistical errors are predicted in the electron and muon channels, respectively. Those predicted events are normalized to the total integrated luminosity of 36.1 fb^{-1} and weighted with the pile-up, MC weight and scale factors per photon, lepton, jet, b-tag.

A. Kinematic distributions

FIG.1 shows the distributions of the transverse momentum of each prompt photon with $p_T > 20$ GeV in the e+jets and μ +jets channel, respectively.

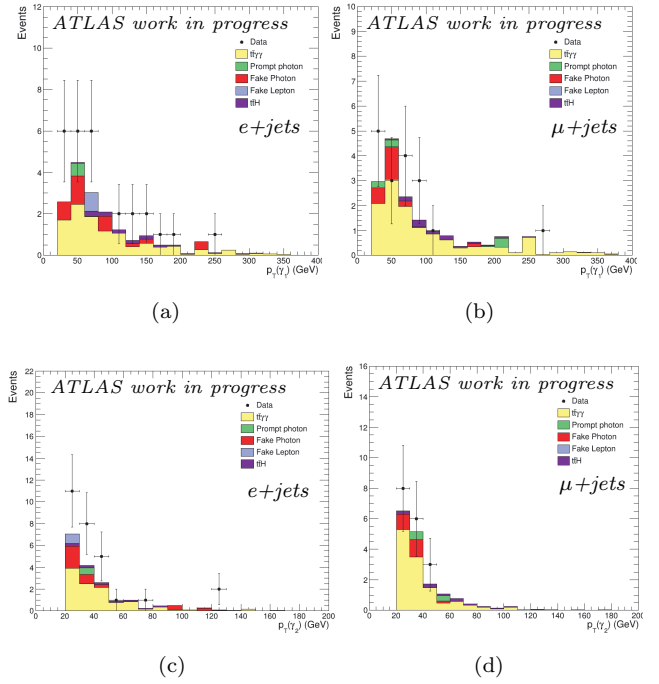


FIG. 1: The distributions of the transverse momentum of the first and second prompt photon.

The two-photon invariant mass distributions are shown in the FIG.2. The invariant mass of two photons are calculated using the energy and momentum of each prompt photon.

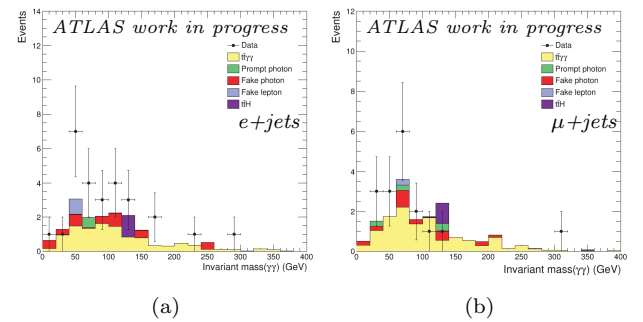


FIG. 2: The two-photon invariant mass distributions.

IV. BACKGROUND DESCRIPTIONS

There are several background contributions which come from events with prompt photon, fake photon and fake lepton in this analysis. One of the largest background contribution to the $t\bar{t}\gamma\gamma$ process is from events with fake photons. This contribution is cate-

gorized as follows: Photons originated from hadron decay (Hadronic fakes), electrons misidentified as photons (Electron fakes), events with at least one fake photon. The contribution of the hadronic fakes background comes from events the two photons coming from hadron decay. Similarly, the contribution from events with electrons misidentified as photons is considered as electron fakes background. Since the single-lepton $t\bar{t}\gamma\gamma$ final states contains two photons, one of these photons can be originating from hadron decay and another one coming from electron fakes. In this case this contribution from events with one hadronic fake and one electron fake is included in the events with at least one fake photon. In addition, the contributions of the fake lepton or QCD background which comes from fake leptons, the prompt photon background which is from non- $t\bar{t}$ events with two prompt photons and the $t\bar{t}H$ background are considered in this analysis. The TABLE II summarizes all background contributions to the $t\bar{t}\gamma\gamma$ process.

TABLE II: All background contributions to the $t\bar{t}\gamma\gamma$ process in the e+jets (μ +jets) channel. The numbers are normalized to the total integrated luminosity of 36.1 fb^{-1} . Only statistical uncertainties are included.

Process	e+jets	μ +jets
Hadronic fakes	0.48 ± 0.31	0.42 ± 0.40
Electron fakes	0 ± 0	0 ± 0
Event with at least one fake	3.34 ± 0.40	1.89 ± 0.53
Prompt Photon	0.60 ± 0.60	0.94 ± 0.52
Fake Lepton	1.10 ± 2.58	0 ± 0.84
$t\bar{t}H$	1.41 ± 0.17	1.04 ± 0.15

V. FIDUCIAL CROSS SECTION MEASUREMENT

The number of generated events in the fiducial region is derived by subtracting background events from data and applying of the correction factor [1]. To calculate the fiducial cross section, this number is divided by the integrated luminosity. Using the expression 4.3, the fiducial cross section can be calculated. Index i runs over the single lepton channels:

$$\sigma_i^{fid} = \frac{N_{data,i} - N_{bkg,i}}{L \times C_i} \quad (1)$$

where $N_{data,i}$ - number of data events corresponding to the i channel, $N_{bkg,i}$ - total number of background events corresponding to the i channel, L - total integrated luminosity, C_i - correction factor corresponding to the i channel. The correction factor

is used to unfold the number of signal selected at reconstruction level $N_{reco,i}$ in channel i to the number of generated signal events in the fiducial region $N_{gen}^{fid,i}$ corresponding to channel i [1].

$$C_i = \frac{N_{reco,i}}{N_{gen}^{fid,i}} \quad (2)$$

The predicted fiducial cross section can be calculated using the total cross section from theory prediction:

$$\sigma_i^{pred.fid} = \sigma_{theory}^{tot} \times A_i \quad (3)$$

where A_i - signal acceptance corresponding to the i channel, σ_{theory}^{tot} - total cross section from theory prediction. The signal acceptance is defined as the fraction of events falling into the fiducial region out of the total generated [1]:

$$A_i = \frac{N_{gen}^{fid,i}}{N_{gen}^{all}} \quad (4)$$

where N_{gen}^{all} is the total number of generated events and $N_{gen}^{fid,i}$ is the number of events inside the fiducial region i , with i running over the single lepton channel. The predicted fiducial cross sections for the $t\bar{t}\gamma\gamma$ process are calculated using the higher order cross section of $t\bar{t}\gamma$ process of 5.36 pb . The predicted values for the $t\bar{t}\gamma\gamma$ fiducial cross sections are a total of 1.44 fb in the e+jets channel and 1.34 fb in the μ +jets channel, respectively. The following table summarizes the predicted values and measured fiducial cross sections.

TABLE III: The predicted and measured $t\bar{t}\gamma\gamma$ fiducial cross section in the e+jets (μ +jets) channel. Also data events, predicted signal events and total backgrounds are shown.

	e+jets	μ +jets
N_{data}	28 ± 5.29	17 ± 4.12
N_{bkg}	6.93 ± 2.70	3.75 ± 1.20
N_{sig}	11.15 ± 0.75	12.52 ± 0.84
Signal Acceptance	(2.7×10^{-4}) $\pm(1.07 \times 10^{-5})$	(2.5×10^{-4}) $\pm(8.4 \times 10^{-6})$
Correction Factor	0.21 ± 0.02	0.25 ± 0.02
Predicted $\sigma_{t\bar{t}\gamma\gamma}^{fid}$	$1.44 \pm 0.06 \text{ fb}$	$1.34 \pm 0.05 \text{ fb}$
Measured $\sigma_{t\bar{t}\gamma\gamma}^{fid}$	$2.78 \pm 0.82 \text{ fb}$	$1.47 \pm 0.49 \text{ fb}$

VI. SYSTEMATIC UNCERTAINTIES

Three sources of systematic uncertainties are considered in the $t\bar{t}\gamma\gamma$ cross section measurement. All

sources are from the modelling uncertainties of the signal in the single lepton channel. The TABLE IV summarizes all systematic uncertainties on the correction factor and signal acceptance with the statistical uncertainties.

TABLE IV: The systematic uncertainties on the signal acceptance and correction factor due to the up and down variation of the initial and final state radiation uncertainty sources.

Sources	Correction Factor	Signal Acceptance
e+jets		
Showering uncertainty [%]	14.2 ± 13.9	30.6 ± 5.9
ISR/FSR uncertainty [%]	9.5 ± 13.5	3.7 ± 9.6
Scale variation uncertainty [%]	17.0 ± 8.5	26.9 ± 4.3
Total uncertainty [%]	25.9 ± 10.6	41.9 ± 5.19
μ +jets		
Showering uncertainty [%]	4.7 ± 11.8	28.6 ± 5.9
ISR/FSR uncertainty [%]	4.0 ± 14.0	4.0 ± 9.4
Scale variation uncertainty [%]	7.1 ± 8.8	28.0 ± 4.3
Total uncertainty [%]	20.3 ± 5.0	41.1 ± 5.12

VII. SUMMARY AND OUTLOOK

In this analysis the fiducial cross section measurements of the $t\bar{t}\gamma\gamma$ production are performed with

data collected by the ATLAS detector during 2015 and 2016 corresponding to an integrated luminosity of 36.1 fb^{-1} at a center-of-mass-energy of $\sqrt{s} = 13 \text{ TeV}$, in the single lepton channels. A total of 28 ± 5.29 and 17 ± 4.12 data events are observed, and from simulation studies 11.15 ± 0.75 and 12.52 ± 0.84 signal events with statistical uncertainties are predicted in the electron and muon channels, respectively. Considering the fake photon, fake lepton and prompt photon backgrounds the background estimation is done. The largest contribution to the $t\bar{t}\gamma\gamma$ process comes from events with at least one fake photon which contribute to the fake photon background. The total uncertainties for the $t\bar{t}\gamma\gamma$ fiducial cross sections are found to be 25.9 % and 20.3 % in the electron and muon channel, respectively. The $t\bar{t}\gamma\gamma$ fiducial cross sections within fiducial region are measured as:

e+jets channel:

$$\sigma_{t\bar{t}\gamma\gamma}^{fid} = (2.79 \pm 0.82|_{stat} \pm 0.89|_{sys}) \text{ fb}$$

μ +jets channel:

$$\sigma_{t\bar{t}\gamma\gamma}^{fid} = (1.47 \pm 0.49|_{stat} \pm 0.25|_{sys}) \text{ fb}$$

The fiducial measurement in the muon channel is in good agreement with the predicted fiducial cross section within experimental uncertainties. But the measured fiducial cross section in the electron channel is larger than the predicted value. Further, the $t\bar{t}\gamma\gamma$ total cross sections will be measured.

-
- [1] ATLAS note, *ATL-COM-PHYS-2017-673*, [https : //cds.cern.ch/record/2266485?](https://cds.cern.ch/record/2266485?)
 - [2] J. Alwall et al., The automated computation of tree-level and next-to-leading order differential cross sections, and their matching to parton shower simulations, JHEP 07 (2014) 079, arXiv: 1405.0301 [hep-ph].
 - [3] J. Pumplin et al., New generation of parton distributions with uncertainties from global QCD analysis, JHEP 07 (2002) 012, arXiv: hep-ph/0201195 [hep-ph]
 - [4] T. Sjstrand et al., An Introduction to PYTHIA 8.2, Comput. Phys. Commun. 191 (2015) 159, arXiv: 1410.3012 [hep-ph].
 - [5] T. Gleisberg et al., Event generation with SHERPA 1.1, JHEP 0902 (2009) 007.
 - [6] S. Frixione, P. Nason and C. Oleari, Matching NLO QCD computations with Parton Shower simulations: the POWHEG method, JHEP 11 (2007) 070, arXiv: 0709.2092 [hep-ph]
 - [7] H.-L. Lai, M. Guzzi, J. Huston, Z. Li, P. M. Nadolsky et al., New parton distributions for collider physics, Phys.Rev. D82 (2010) 074024, arXiv: 1007.2241 [hep-ph].

Влияние наноразмерного порошка диоксида кремния на физико-механические, прочностные характеристики лакокрасочного покрытия из эмали ХВ-16

В.Ц. Лыгденов¹, А.В. Номоев^{1,2,*}, С.П. Бардаханов³, Т.В. Ларина⁴

¹Бурятский государственный университет, Россия, 67000, Улан-Удэ

²Институт физического материаловедения СО РАН, 670031, Улан-Удэ

³Институт теоретической и прикладной механики СО РАН им. С.А. Христиановича, 630090, Новосибирск

⁴Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, 630090, Новосибирск

В данной статье установлено влияние наноразмерного диоксида кремния марки на Таркосил на физико-механические, прочностные свойства, структуру полимерного лакокрасочного покрытия из эмали на основе перхлорвиниловой и глифталевой смол ХВ-16. Обнаружено увеличение прочности на истирание, твердости, модуля упругости лакокрасочного покрытия по сравнению с исходным. Методами атомно-силовой микроскопии, растровой электронной микроскопии, ИК спектроскопии проведен качественный и количественный анализ структуры полученных образцов лакокрасочных покрытий. Выявлено, что изменение структуры и повышение механических свойств покрытий обусловлено появлением новых структурообразующих центров в композиционном покрытии при введении наноразмерного диоксида кремния.

ВВЕДЕНИЕ

С развитием наноиндустрии в модификации существующих и создании новых материалов широко используются наноразмерные порошки разной природы и морфологии. В настоящее время в производстве лакокрасочных материалов (ЛКМ) применяются добавки из нанопорошков, при этом их функции многообразны. Нанопорошки используются для интенсификации процесса получения ЛКМ (эмульгаторы, диспергаторы, пеногасители), для оптимизации процесса нанесения (реологические добавки-загустители, ПАВ, агенты розлива и т.д.), а также они выступают как модификаторы покрытий из ЛКМ, улучшающие их физико-механические и прочностные свойства. В качестве добавок могут использоваться кальцит, мел, кварц, тальк, сульфид цинка, диоксид титана (рутил), доломит и т.д. В состав эмали серебристого (серого) цвета вводят алюминиевую пудру. Известно, что введение добавки нанопорошков приводит к изменению физико-механических свойств полимеров, например, значительно увеличивается твердость исходных полимеров в результате добавления (менее 0,1%) наноразмерного оксида алюминия [1].

Объектом исследования в настоящей работе является лакокрасочное полимерное покрытие на основе эмали ХВ-16, используемой в том числе для нанесения на поверхность корпуса и рулевых винтов вертолета Ми-8. В условиях эксплуатации окрашенных деталей, связанных с их интенсивным абразивным износом актуальной является задача повышения износостойкости покрытий. Поскольку наноразмерные добавки в эмали ХВ-16 отсутствуют, то представляется целесообразным изучить влияние добавок нанопорошка диоксида кремния марки Таркосил [2], полученного на ускорителе электронов, на механические свойства, текстуру создаваемого лакокрасочного покрытия (ЛКП).

МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

В работе использовали лакокрасочные покрытия (ЛКП) из эмали на основе перхлорвиниловой и глифталевой смол ХВ-16 (цвет серый 842, ТУ 6-10-1301-83) и нанопорошка диоксида кремния. Образцы ЛКП для измерений размером 5x10 см² изготавливали нанесением краски краскораспылителем SATA 2000 (Китай) на грунтовое покрытие на основе кристаллического оксида цинка, которое предварительно было

* Electronic address: nomoevav@mail.ru

нанесено на алюминиевую подложку. Толщина полимеризованных образцов ЛКП варьировалась в пределах от 20 до 30 мкм и определялась ультразвуковым толщиномером ET-110 (Германия). В качестве модификатора эмали ХВ-16 использовали наноразмерный порошка диоксида кремния марки Таркосил Т-20 производства ООО «Бардаханов», полученный на ускорителе электронов, с удельной поверхностью 123 м²/г (методом БЭТ на приборе «Sorbi-M») и средним размером первичных частиц 22 нм [2]. Ускоряющее напряжение 1,4 МэВ, ток пучка 42 мА, мощность в пучке электронов, 60кВт. Модификацию проводили путем введения в эмаль ХВ-16 нанопорошка Таркосил Т-20 с использованием ультразвукового диспергатора [3]. Прочность на истирание определяли на пескоструйной установке по времени схода единицы толщины лакокрасочного покрытия под действием дозированной струи из кварцевого песка. Измерения твердости ЛКП проводили методом Виккерса на микротвердомере марки HV-1000 при нагрузке 10 г. Модуль Юнга и свойства поверхности ЛКП определяли с помощью атомно-силовой микроскопии (АСМ) на микроскопе Solver Next (Россия). Топографию поверхности образцов ЛКП проводили методом растровой электронной микроскопии (РЭМ) на микроскопе JCM-6510 LV JEOL с энергией ускоряющих электронов – 10 кэВ. Во избежание накопления заряда на непроводящих исходных и композиционных образцах ЛКП проводили осаждение слоя платины толщиной в несколько нанометров на поверхность образцов на напылительной установке JEC-3000FC (JEOL, Япония).

ИК спектры образцов регистрировали на ИК спектрометре ALPHA (Bruker, Германия) в диапазоне 400-4000 см⁻¹ методом нарушенного полного внутреннего отражения. Отнесение наблюдаемых полос сделано на основании известных литературных данных [4,5].

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Из анализа данных (рис.1) следует, что прочность к истиранию покрытия с нанопорошком диоксида кремния (оптимальное содержание порошка составляло 0,025-

0,05 мас.%) увеличивается более чем в 2 раза – с 1 мин./мкм до 2 и более мин./мкм.

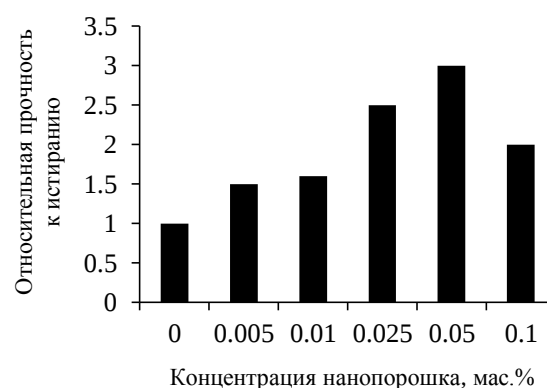


Рис. 1. Гистограмма зависимости относительной прочности к истиранию ЛКП эмали ХВ-16 от концентрации нанопорошка диоксида кремния Таркосил Т-20.

Существование максимума на гистограмме (рис.1) можно объяснить конкуренцией двух взаимоисключающих процессов. Во-первых, снижением трещинообразования по всей толщине покрытия при увеличении содержания нанопорошка в эмали в результате локализации микротрещин на наночастицах диоксида кремния, что приводит повышению микротвердости ЛКП. Во-вторых, повышением микронапряжений на границе фаз «наночастица – молекулы полимера», что снижает микротвердость. Как известно, чем меньше размер частиц наполнителя, тем больше внутренние напряжения.

На рис. 2 представлены данные по микротвердости покрытия с изменением концентрации нанопорошка диоксида кремния.

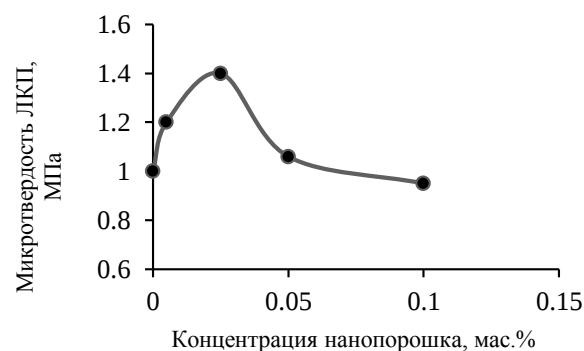


Рис. 2. Микротвердость ЛКП эмали ХВ-16 в зависимости от концентрации нанопорошка Таркосил Т-20 в полимерной краске.

Видно, что максимальное значение твердости достигается при концентрации порошка 0,025 мас.% и её значение составляет 1,4 МПа, что на

40% выше по сравнению с исходным образцом. На изменение механических свойств ЛКП, в частности прочности к истиранию, влияют несколько факторов, к наиболее важному из которых, по-видимому, следует отнести процесс «сшивания» макромолекул полимера между собой путем встраивания наночастиц диоксида кремния между ними. Возникновение мостиков из частиц диоксида кремния между молекулярными цепями, возможно, происходит за счет химической активности свободных боковых радикалов макромолекул пленкообразователя. Вследствие этого, за счет когезии молекул пленкообразователя увеличивается твердость покрытия [6]. Из сравнения РЭМ изображений ЛКП образцов эмали (рис.3) отвержденных на воздухе при комнатной температуре, с толщиной полимеризованных образцов ЛКМ от 1 мм до 1,5 мм следует, пленки ЛКП имеют каверны разного размера и глубины.

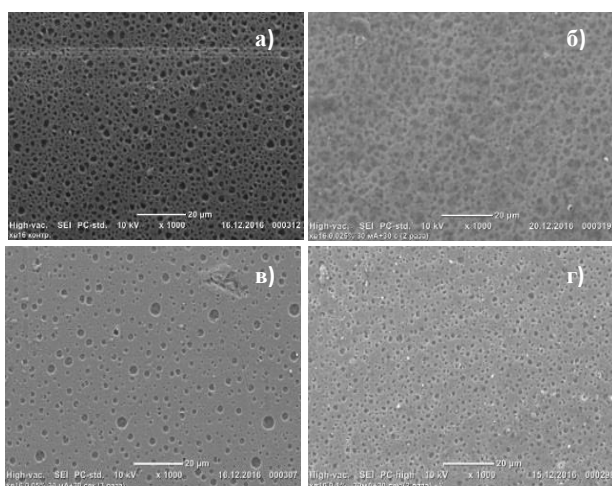


Рис. 3. РЭМ изображения образцов ЛКП эмали ХВ-16 отвержденных на воздухе при комнатной температуре при разной концентрации нанопорошка диоксида кремния: а- 0% ; б- 0,025% ; в- 0,05% ; г- 0,1% .

С увеличением концентрации порошка эти каверны уменьшаются в размере и исчезают, поверхность становится более ровной для образца 0,05 мас.%. Из приведенных данных следует, что присутствие наноразмерного порошка в эмали влияет на формирование поверхности покрытия.

Количественная оценка шероховатости ЛКП ХВ-16 была проведена методом сканирующей атомно-силовой микроскопии (АСМ). Для получения изображений использовали

полуcontactный метод, при осуществлении которого острие зонда не находится в полном соприкосновении с поверхностью образца, что позволяет минимизировать механическое воздействие со стороны зонда на объект исследования при работе с недостаточно жесткими материалами. Результаты АСМ топографии ЛКП представлены на рис.4.

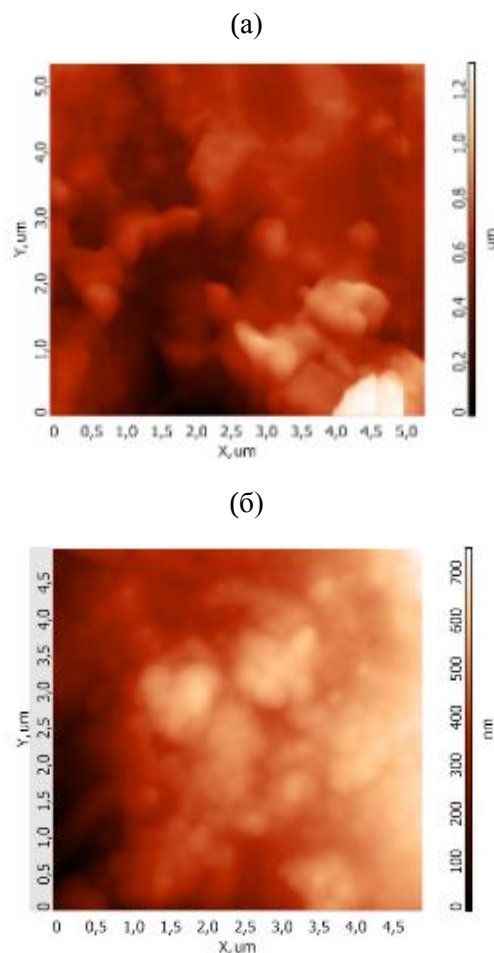


Рис. 4. АСМ изображение ЛКП ХВ-16: а) в исходном состоянии; б) с добавлением 0,05% мас. Нанопорошка Таркосил Т-20

Из рис.4 следует, что поверхность ХВ-16 с содержанием 0,05% Таркосила более гладкая (размах выступов менее 0,7 мкм) по сравнению с исходным образцом (1,2 мкм), без глубоких впадин, как показали многократные сканирования различных участков поверхности обоих образцов. Для количественного описания изменения микроструктуры поверхности использовался метод обработки изображений Image Analysis. Шероховатость по площади поверхности S_q (рис.5) имеет минимальные значения, когда содержание нанопорошка составляет 0,025-0,05 масс.%.

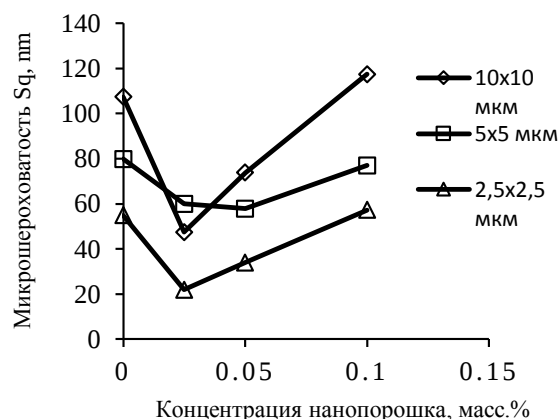


Рис. 5. Микрошероховатость поверхности Sq XB-16 от концентрации нанопорошка Таркосил при разной площади сканирования АСМ.

Известно, что у твердых веществ шероховатость поверхности уменьшается с уменьшением размера зерна, поэтому можно сделать вывод о том, что средний размер зерна в модифицированном XB-16 уменьшается в результате ее модификации по сравнению с исходным образцом. В соответствии с законом Холла-Петча, мелкозернистое состояние твердого вещества приводит к повышению твердости и прочности, что наблюдается в настоящих исследованиях.

На основании этих данных можно предположить, что наночастицы диоксида кремния играют роль пеногасителя при затвердевании лакокрасочного покрытия и создают упрочнение покрытия за счет уменьшения размеров углублений и пор. В долгосрочном плане уменьшение размеров пор должно приводить к повышению влагоустойчивости покрытия.

Методом атомно-силовой микроскопии АСМ было определено значение модуля Юнга на микроуровне для исходного и модифицированных образцов XB-16 (рис.6).

Как следует из графика, модуль Юнга принимает максимальные значения наполнения в области концентраций нанопорошка 0,025-0,03 мас.%, что коррелирует с данными по твердости и прочности на истирание образцов композиционных полимерных ЛКП XB-16.

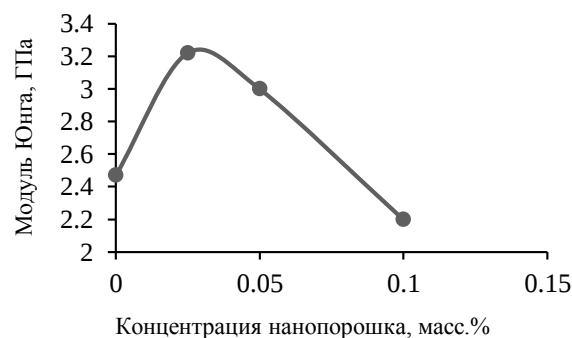


Рис. 6. Зависимость модуля Юнга ЛКП эмали XB-16 от концентрации нанопорошка Таркосил.

Таким образом, результаты по определению износостойкости, твердости и модуля Юнга хорошо согласуются между собой. Повышение перечисленных характеристик обусловлено уменьшением размера зерен и увеличением сил взаимодействия между молекулами полимера. Образование более совершенной структуры полимеров можно объяснить тем, что наноразмерные и нерастворимые в полимере вещества могут выступать в качестве искусственных зародышеобразователей (структурообразующих центров), большая концентрация которых приводит к уменьшению размеров зерен полимера вследствие того, что они ограничивают рост друг друга. При большей степени наполнения (1 масс.%) происходит опять укрупнение зерен полимера вследствие того, что при увеличении количества модификаторов происходит сближение наноразмерных частиц и образование их агрегатов. В результате увеличиваются размеры структурообразующих центров при одновременном уменьшении их количества. Соответственно прочностные характеристики этих композиционных полимеров уменьшаются.

В спектрах ИК всех образцов до и после их модифицирования частицами диоксида кремния (рис.7) не обнаружено появления новых пиков, что означает отсутствие новых функциональных групп, химических связей с введением наноразмерного диоксида кремния.

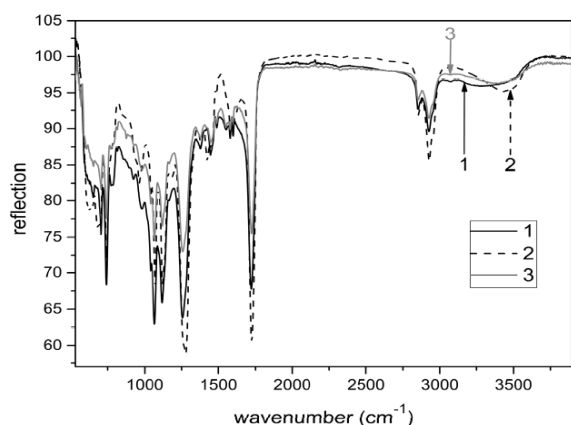


Рис. 7. Спектры ИКС ЛКП эмали ХВ-16 при различной концентрации нанопорошка ($d_{ср} \sim 20$ нм): (1 – 0 масс.%, 2 – 0,025 масс.%, 3 – 0,1 масс.%).

Но при этом наблюдается повышение интенсивности ИК отражения ЛКП при содержании 0,025 масс.% нанопорошка диоксида кремния (рис.7), а это указывает на увеличение количества существующих функциональных групп в полимере за счет новых связей данной группы, сформированных наночастицами диоксида кремния и макромолекулами полимера.

Таким образом, введение нанопорошков диоксида кремния в ЛКМ приводит к росту интенсивности пиков колебаний молекул полимерной матрицы.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Включение в эмаль ХВ-16 в качестве модифицирующей добавки наноразмерного диоксида кремния приводит к изменению механических свойств ЛКП. При добавке в эмаль ХВ-16 наноразмерного порошка марки Таркосил Т-20 повышаются механические свойства лакокрасочного покрытия (твердость, прочность на истирание и модуль Юнга). Максимальное значение твердости ЛК покрытия из эмали ХВ-16, модифицированного нанопорошком, достигается при концентрации Таркосила Т-20 равной 0,025 масс.% и составляет $HV=1,4$ МПа, что в 1,4 раза выше, чем для исходного образца. Поверхность полимерного ЛКП становится менее шероховатой при концентрациях диоксида кремния 0,025-0,05 масс.%, что очевидно связано с уменьшением размера зерна надмолекулярной структуры. Это изменение структуры обусловлено повышением интенсивности

взаимодействия молекул полимерной матрицы с молекулами наполнителей – пигментов за счет образования дополнительных структурообразующих центров, вследствие введения нерастворимых в полимере наноразмерных частиц диоксида кремния.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Байкина, Л. К. Исследование свойств диацетатцеллюлозных пленок, модифицированных нанодисперсными керамическими частицами / Л. К. Байкина, В. А. Полубояров // Известия высших учебных заведений: технология легкой промышленности. – 2011. – Т.13. – № 3. – С. 11-14.
- [2] Патент РФ №2067077, МПК7 С 01 В 33/18. Способ получения ультрадисперсной двуокиси кремния, устройство для его осуществления и ультрадисперсная двуокись кремния опубликован 27.09.1996, Бюллетень №27.
- [3] Номоев А.В., Лыгденов В.Ц., Бардаханов С.П. Влияние нанопорошка диоксида кремния на износостойкость лакокрасочного покрытия. Нанотехнологии в строительстве: научный интернет-журнал. 2010. №3. С.19-24.
- [4] Ю.А.Пентин, Г.М.Курамшина, Основы молекулярной спектроскопии, М.: Мир. 2008, 398 с.
- [5] Ч.П.Пулмл., Мир материалов и технологий. Киев. Изд. техносфера, 2009, 336.
- [6] Розельфенд И. Л., Рубинштейн Ф. И., Жигалова К. А. Защита металлов от коррозии лакокрасочными покрытиями. М.: Химия, 1987. 224 с.
- [7] Lever, A.B.P. Inorganic Electronic Spectroscopy, 2nd ed.; Elsevier: Amsterdam – Oxford – New York – Tokyo, 1987.
- [8] S. Karamat, R.S. Rawat, P. Lee, T.L. Tan, R.V. Ramanujan. Structural, elemental, optical and magnetic study of Fe doped ZnO and impurity phase formation // Progress in Natural Science: Materials International – 2014. – V 24. – P. 142–149.

Исследование бифуркаций периодических режимов при ламинарно-турбулентном переходе

Т.Г. Дармаев*

Бурятский государственный университет, Улан-Удэ

В данной работе метод инвариантной конечномерной проекции уравнений Навье-Стокса применяется для исследования плоскопараллельного течения вязкой несжимаемой жидкости над плоской полубесконечной пластиной. При этом, нелинейная начально-краевая задача для периодических возмущений основного течения сводится к конечномерной рекуррентной системе линейных краевых задач для обыкновенных дифференциальных уравнений. Предложенный универсальный алгоритм позволяет численно находить амплитудные поверхности устойчивых и неустойчивых режимов и точки тангенциальных бифуркаций периодических режимов для произвольных частот и чисел Рейнольдса.

ВВЕДЕНИЕ

Исследованию развития гидродинамических возмущений посвящено множество работ, проведено множество экспериментов, существует довольно много различных подходов, но до сих пор механизм перехода от ламинарного течения к турбулентному полностью не исследован и вызывает интерес множества исследователей. Линейная теория гидродинамической устойчивости достаточно хорошо развита, и сводится к задаче на собственные значения для линеаризованных относительно малых возмущений уравнений Навье-Стокса. Для плоскопараллельных течений – это хорошо известная задача Орра-Зоммерфельда [1]. Исследованию задачи Орра-Зоммерфельда посвящено множество работ [2]. Главными целями численного решения при заданном основном течении являются: поиск кривой нейтральной устойчивости ($c_i=0$), кривой постоянной скорости роста ($\alpha c_i=\text{const}$), вычисление собственных значений и функций для данной пары положительных значений α и R .

Первая попытка оценить влияние нелинейности на судьбу возмущений была предпринята Ландау Л.Д. [3]. С помощью качественных рассуждений он показал, что нелинейность может как стабилизировать нарастающие возмущения, создавая новый устойчивый режим течения, так и вызвать рост возмущений, устойчивых в линейном приближении. Существенный вклад в развитие

нелинейной теории был сделан Струминским В.В. [4]. Он получил решение уравнений Навье-Стокса для нелинейных возмущений в виде сходящихся рядов. Просуммировал бесконечные ряды для амплитуд возмущений и показал, что нарастающие возмущения стабилизируются, а затухающие в линейном приближении затухают и при нелинейном рассмотрении. Решения Струминского сходились на некотором расстоянии от линейной нейтральной кривой. Окрестность нейтральной кривой требовала особого рассмотрения. Впервые это сделали Стюарт и Ватсон [5,6]. Они получили нелинейные решения в виде асимптотических рядов. Численные расчёты для течения Пуазейля выполнили Рейнольдс и Поттер [7].

В данной работе метод инвариантной конечномерной проекции уравнений Навье-Стокса разработанный Б.Ю.Скобелевым [8] применяется для плоскопараллельного течения вязкой несжимаемой жидкости над плоской полубесконечной пластиной. При этом начально-краевая задача для возмущений основного течения сводится к конечномерной системе обыкновенных дифференциальных уравнений, правые части которых находятся из рекуррентной системы линейных краевых задач [9]. Существенным достоинством метода инвариантной проекции является то, что он гарантирует правильное описание асимптотического поведения решений (т.е. при $t \rightarrow \infty$) и учитывает дискретный и непрерывные спектры возмущений. Полученные расчеты

* Electronic address: dtg@bsu.ru

показывают, что в пограничном слое существует тангенциальная бифуркация периодических режимов.

МЕТОД ИНВАРИАНТНОЙ КОНЕЧНОМЕРНОЙ ПРОЕКЦИИ

Из уравнений Навье-Стокса получаем уравнение для возмущений:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + (u \nabla)u + Lu = 0, \\ \operatorname{div} u = 0 \end{aligned} \quad (1)$$

$$Lu = (v_0 \nabla) + (u \nabla)v_0 - \nabla p - \frac{1}{\operatorname{Re}} \Delta u,$$

где u , v_0 – возмущенное и невозмущенное решения, p – давление, Re – число Рейнольдса. Система координат выбрана так, чтобы ось x была направлена вдоль пластины, z -координата – поперек пластины, y -координата направлена перпендикулярно пластине, начало координат совпадает с передней кромкой пластины. В работе рассматриваются трехмерные моногармонические возмущения, периодические по продольной координате x с волновым числом α и по поперечной координате z с волновым числом β :

$$u_j^{km} = \hat{u}_j^{km}(y) e^{i\theta_{km}}, \quad j = 1, 2, 3; \quad -\infty < k, m < \infty, \quad \theta_{km} = k\alpha x + m\beta z.$$

В соответствии с методом инвариантной конечномерной проекции [8] уравнений Навье-Стокса (1) решение для возмущений ищется в виде: $u = u_{2n} + u_{\perp}$, u_{2n} – линейная функция m собственных функций оператора L , а ортогональное дополнение $u_{\perp}$ ищется в виде функции от u_{2n} : $u_{\perp} = g(u_{2n})$. Условие того, что решение принадлежит инвариантному многообразию уравнений Навье-Стокса, однозначно определяет вид функции $g(u_{2n})$.

Уравнение неразрывности системы (1) удовлетворяется введением функций тока:

$$\begin{cases} \frac{\partial \psi^{km}}{\partial y} = k\alpha u_1^{km} + m\beta u_3^{km} + \delta_{\lambda 0}(u_1^{00} + C u_3^{00}) \\ (1 - \delta_{\lambda 0}) \frac{\partial \psi^{km}}{\partial \theta} = -u_2^{km} \end{cases}$$

где δ – символ Кронекера, C – произвольная постоянная.

Из уравнения неразрывности и уравнений Навье-Стокса для завихренности $\bar{\omega}$ в [9] выводится система эволюционных уравнений для векторов $\bar{x}^{km} = (\bar{\Delta} \bar{\psi}^{km}, \bar{\omega}_2^{km}, \delta_{\lambda 0} u_3^{00})$:

$$\frac{dx}{dt} = -L_v x + N(x),$$

$$\text{где } x = \bar{x}^{km}(y) e^{i\theta_{km}}, \quad -\infty < k, m < \infty$$

В соответствии с теорией [8] динамическая система:

$$\frac{d\rho_k}{dt} = (\sigma_r^{(k)} + b^{(k)})\rho_k, \quad \frac{d\theta_k}{dt} = (\sigma_i^{(k)} + c^{(k)})\rho_k, \quad k = 1, 2, \dots, n,$$

определяет поведение траекторий на $2k$ -мерном инвариантном многообразии, где

$$\sigma^{(k)} = \sigma_r^{(k)} + i\sigma_i^{(k)} \quad - \text{собственные значения}$$

оператора $(-L_v)$, а $b^{(k)}, c^{(k)}$ – некоторые

функции, зависящие от полярных координат ρ_k, θ_k . В случае двумерной инвариантной

проекции предельное многообразие определяется функциями:

$$g^* = \sum_{|S|=2}^{\infty} g_S \rho^S, \quad b(\rho) = \sum_{n=1}^{\infty} b_{2n} \rho^{2n},$$

$$c(\rho) = \sum_{n=1}^{\infty} c_{2n} \rho^{2n}, \quad g_S = \sum_{k=-s}^s g_{sk} e^{ik\theta^*}, \quad \theta^* = \theta - \alpha x,$$

где g_{sk} удовлетворяют следующей рекуррентной системе уравнений:

$$\begin{aligned} ik\alpha [(\sigma_r - U)\Delta_k + D^2 U] g_{sk} - \frac{1}{R} (\Delta_k)^2 g_{sk} = -\delta_{k1} (b_{s-1} + ic_{s-1}) \Delta_1 f - \delta_{k,-1} * \\ * (b_{s-1} - ic_{s-1}) \Delta_1 \bar{f} - ik \sum_{q+p=s} c_q \Delta_k g_{pk} - i\alpha \sum_{q+p=s} \sum_{l+j=k} [lg_{ql} D \Delta_j g_{pj} - j D g_{ql} \Delta_j g_{pj}], \end{aligned} \quad (2)$$

$$\text{где } \tilde{\alpha}^2 = \alpha^2 + \beta^2, \quad D = \frac{d}{dy}, \quad \Delta_k = D^2 - (k\tilde{\alpha})^2, \quad U(y)$$

– профиль невозмущенного ламинарного потока, $\bar{f}$ – сопряженная собственная функция задачи Орра-Зоммерфельда.

Коэффициенты b_{s-1}, c_{s-1} для 2π -периодических функций от θ определялись из условий ортогональности и нормировки. Амплитуда периодических режимов определялась из уравнения:

$$\gamma + \sum_{n=1}^N b_{2n} A^{2n} = 0, \quad N \rightarrow \infty. \quad (3)$$

где $\gamma = \alpha \sigma_i$, – линейный коэффициент нарастания.

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ

В работе проводился численный расчет приближенных уравнений для амплитуд периодических режимов:

$$\gamma + \sum_{n=1}^{\infty} b_{2n} A^{2n} = 0.$$

при $N = 2, 3, 4, 5$, где $\gamma = \alpha \sigma_i$ – линейный коэффициент нарастания.

При численном интегрировании системы (1) граничные условия на бесконечности заменялись граничными условиями на интервале $(0, L)$, $L \gg 1$. Затем преобразованием $y = L\bar{y}$, $0 \leq y \leq L$, $0 \leq \bar{y} \leq 1$, задача сводится к интегрированию на интервале $(0, 1)$. Вычисление присутствующих в правой части собственных функций задачи Орра-Зоммерфельда, а также решение системы (1) проводилось методом ортогональной прогонки [10] на неравномерной разностной сетке.

В результате вычислений выявилась следующая картина (рис.2-3). При малых значениях волнового числа α , соответствующих нижней ветви линейной нейтральной кривой, от течения Блазиуса ответвляется устойчивый периодический режим. При некотором $\alpha = \alpha_2$ передняя складка амплитудной поверхности из нефизической области отрицательных значений квадратов амплитуд выходит в область положительных значений и происходит смена закритической бифуркации докритической ($\alpha = \alpha_3$). С увеличением числа Рейнольдса амплитуда этого режима нарастает, затем уменьшается и далее этот режим исчезает в результате слияния с неустойчивым режимом, ответвляющимся от верхней ветви линейной нейтральной кривой. Точки слияния этих режимов называются точками тангенциальной бифуркации [11], соответствующие точкам складки в теории катастроф [12]. Далее с увеличением α амплитудная поверхность периодических решений отрывается от линейной нейтральной кривой ($\alpha = \alpha_4$), и при

некотором значении α периодические решения исчезают.

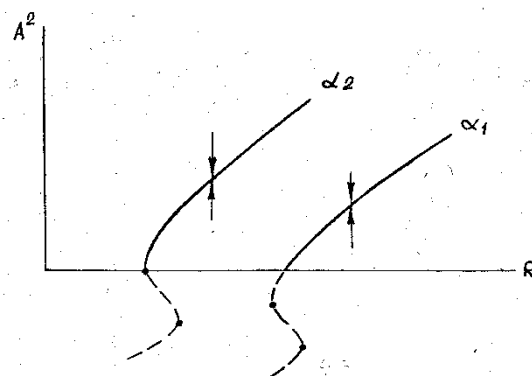


Рис.2

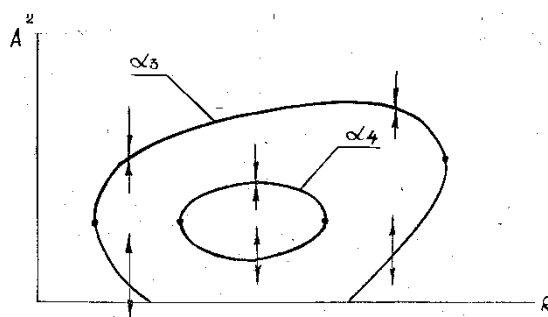


Рис.3

На рис.4 приведен срез амплитудной поверхности при $\alpha = 0.206906$, из которого видно, что при определенных начальных амплитудах периодические возмущения могут перейти либо в устойчивый периодический режим, либо в неустойчивый. На рис.5 приведены линейная нейтральная кривая (сплошная линия) и точки складок, или, что то же самое, точки тангенциальной бифуркации трехмерных режимов. Внутри нейтральной кривой возмущения нарастают, а вне – затухают.

В настоящее время экспериментально обнаружены три типа перехода. Первый был обнаружен в классической работе Клебанава и др. [13]. Он характеризуется быстрым нарастанием возмущений, высокочастотными всплесками и последующим образованием турбулентных пятен. Другой тип перехода был обнаружен в экспериментах Качанова, Козлова, Левченко [14]. Он характерен нарастанием высших гармоник двумерной волны Толлмина-Шлихтинга с последующим ростом трехмерной субгармоники. В экспериментах Козлова,

Левченко, Сарика [15] наблюдался третий тип перехода - промежуточный между первыми двумя типами.

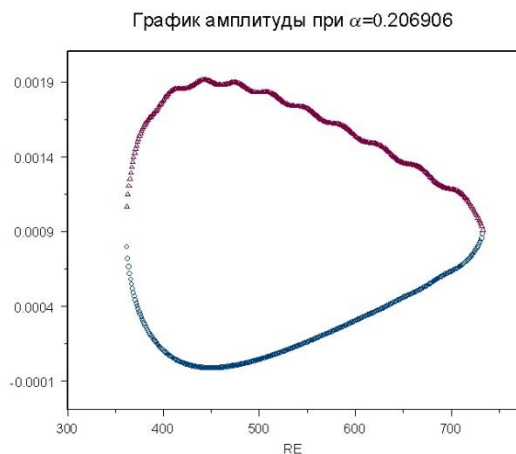


Рис.4

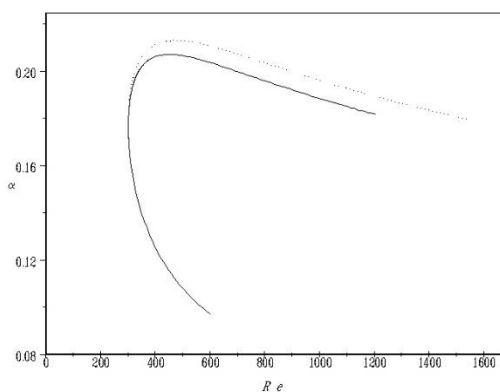


Рис.5

Для объяснения этих явлений в настоящее время существуют две основные теоретические модели. Первая была разработана Крейком [7] и по сути является обобщением метода Стюарта-Ватсона на случай взаимодействия трех резонансных волн. Другая модель - модель вторичной неустойчивости [6] исследует устойчивость двумерных нелинейных волн относительно трехмерных линейных возмущений. Полученные с помощью этих моделей области быстрого роста трехмерных возмущений достаточно хорошо совпадают с экспериментальными результатами по наблюдению первых стохастических пульсаций. Но эти работы не объясняют причину появления стохастичности.

Как известно, в экспериментах по генерации ламинарно-турбулентного перехода с помощью

вибрирующей ленточки клебановский тип перехода наблюдается только при относительно больших начальных амплитудах возмущения и характеризуется резким ростом возмущений. Таким образом клебановский тип перехода можно связать с передней верхней частью амплитудной поверхности, причем амплитуда соответствующего возмущения должна быть не меньше амплитуды периодического решения в передней точке тангенциальной бифуркации.

Если начальная амплитуда меньше критической клебановской, то возможен другой тип перехода, который можно соотнести с промежуточным типом, наблюдавшимся в эксперименте. Этот тип перехода связан с тем, что в результате нарастания возмущения становятся трехмерными и внутри нелинейной нейтральной поверхности для плоских возмущений их амплитуда может стать равной амплитуде точки тангенциальной бифуркации для трехмерных возмущений ($\beta \neq 0$).

И, наконец, при субгармоническом типе перехода в эксперименте наблюдается рост высших гармоник начальной двумерной волны Толлмина-Шлихтинга. Причем начальные амплитуды возмущений, вызывающих этот тип перехода, достаточно малы, и начальные возмущения действительно являются двумерными. Поэтому естественно связать субгармонический тип перехода с задней точкой тангенциальной бифуркации в окрестности верхней ветви линейной нейтральной кривой. Таким образом, каждому типу перехода соответствует точка тангенциальной бифуркации периодических режимов (трехмерные или двумерные). Из теории динамических систем [16] следует, что в окрестности точки тангенциальной бифуркации возникает явление перемежаемости (т.е. чередование во времени ламинарного и турбулентного режимов). Причем длительность турбулентных режимов зависит от "расстояния" до точки тангенциальной бифуркации. Наблюдающаяся в экспериментах картина дает качественное подтверждение высказанным на основе проведенных расчетов предположениям.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Линь Цзяо-цзяо. Теория гидродинамической устойчивости. М.: Изд-во иностр.лит., 1958.
- [2] Дразин Ф. Введение в теорию гидродинамической устойчивости: Пер. с англ. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2005. 288с.
- [3] Ландау Л.Д. К проблеме турбулентности // Докл.АН СССР.-1944. Т. 44 – с. 339-342.
- [4] Струминский В.В. К нелинейной теории развития аэродинамических возмущений // Докл.АН СССР.-1963. Т.153, №3. – с.547-550.
- [5] Stuart J.T. On the non-linear mechanics of hydrodynamic stability // J. Fluid Mech. – 1958. V.4. pt.1. – p. 1-24.
- [6] Watson J. On the non-linear mechanics of wave disturbances in stable and unstable parallel flows, pt.2 // J. Fluid Mech. – 1960. V.9. pt.3. – p. 371-389.
- [7] Reynolds W.C., Potter M.C. Finite-amplitude instability of parallel shear flows // J.Fluid Mech. 1967. V.27. pt.3. p.465-492
- [8] Скобелев Б.Ю. Конечномерная инвариантная аппроксимация уравнений Навье-Стокса и автоколебательные режимы течения Пуазейля // ПММ.-1990-Т.54. № 3.- С.416-429.
- [9] Дармаев Т.Г. Конечномерная инвариантная проекция трехмерных периодических возмущений в пограничном слое // Вестник БГУ. Сер.13: Математика и информатика. Вып.1. –Улан-Удэ: Изд-во БГУ, 2004. – с.124-134
- [10] Годунов С.К. О численном решении краевых задач для систем линейных обыкновенных дифференциальных уравнений // УМН. 1961. Вып.3(99). С.171-174.
- [11] Йосс Ж., Джозеф Д. Элементарная теория устойчивости и бифуркаций/ Пер.с англ.- М.: Мир, 1983.-301с.
- [12] Постон Т., Стюарт И. Теория катастроф и ее приложения / Пер.с англ. М.: Мир, 1980.- 607 с.
- [13] Klebanoff P.S., Tidstrom K.D., Sargent L.M. The three-dimensional nature of boundary-layer instability // J. Fluid Mech.-1962.- V .12.- P t.1.-P .1-34.
- [14] Качанов Ю.С., Козлов В.В., Левченко В.Я. Нелинейное развитие волны в пограничном слое // МЖГ.-1977.-№ 3-С.49-53.
- [15] Козлов В.В., Левченко В.Я., Сарик В.С.(США) Образование трехмерных структур при переходе в пограничном слое. -Новосибирск, 1983.-(Препр./ АН СССР. Сиб. отделение. ИТПМ; № 10-83).
- [16] Неймарк Ю.И., Ланда П.С. Стохастические и хаотические колебания. -М.: Наука, 1987.

Кварк ба антикваркийн холбоост төлөвийн тухайд

Д.Дамбасүрэн*

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

Физикийн ихэнх онолд тэгш хэмийн шинж чанарыг гол болгодог. Энд тэгш хэмийн бүлгийн төлөөлөл болох операторын алгебрыг ашиглав. Тухайлбал, гадаад хэлбэрийн хувьд маш энгийн мэт боловч, ихээхэн гүнзгий агуулгатай Грассманы алгебрын зарчмын нэг хэрэглээг харуулахыг оролдсон болно.

PACS numbers: 12.39.-x, 03.70.+k, 11.10.-z

Ферми системийн тохиолдолд Грассманы алгебрын байгуулагчуудын хоорондын харьцааг [1] -д тодорхойлсныг бид [2] -д ашигласан. Энэ ажилд эгэл бөөмсийн системийг авч үзэх зорилгын үүднээс Грассманы хувьсагч (Гр.х) -д бөөмийн квант тоог оруулах санааг дэвшүүлэв. Анхны a_1 Ферми бөөм зөвхөн өөртөө харгалзах "хольцтой" байж болох бөгөөд энэ нь коммутацийн харьцааг өөрчлөхгүй гэж авбал:

$$A_1 = a_1 + C_1. \quad (1)$$

Энд C_1 нь "хольц", A_1 - шинэ операторыг Ферми гээ.

$$\{A_a, a_1\} = \{a_1, a_1\} + \{C_1, a_1\} = 0$$

Иймд $\{a_1, C_1\} = 0$. $\{A_1, a_1^\dagger\} = 1$ -ээс $\{C_1, a_1^\dagger\} = 0$. Эдгээрийг ашиглавал $\{A_1, A_1^\dagger\} = 1$ ба $\{A_1, A_1^\dagger\} = 0$ хоёроос,

$$\{C_1, C_1^\dagger\} = 0, \quad \{C_1, C_1\} = 0, \quad C_1^2 = 0. \quad (2)$$

a_1 -д харгалзах C_1 нь Грассманы алгебр үүсгэх ба Гр.х болно.

Хэрэв бозе оператор b_1 -ийг авбал:

$$B_2 = b_2 + D_2. \quad (3)$$

Энд D_2 нь "хольц" болно. Өмнөхтэй адилаар операторуудын хоорондох коммутатораас:

$$[D_2, D_2^\dagger] = 0, \quad [D_2, D_2] = 0, \quad D_2^2 = 0. \quad (4)$$

Энэ нь b_2 -т харгалзах бозе-Грассман юм. Үүнийг өмнө [2] -т ашигласан бөгөөд ферми $-\Theta_1$, бозе $-\Theta_2$ гэсэн энэ Гр.х нь тухайн бөөмийн онцлогийг агуулаагүй бүгдэд ижилхэн ("глобаль") шинжтэй болохыг тэмдэглэе.

Цааш нь хэд хэдэн төрлийн ферми ба бозе бөөм бүхий системд:

$$\begin{aligned} \{C_i, C_k^\dagger\} &= 0, \quad \{C_i, C_k\} = 0, \quad C_k^2 = 0 \\ \{D_l, D_n^\dagger\} &= 0, \quad \{D_l, D_n\} = 0, \quad D_n^2 = 0, \end{aligned} \quad (5)$$

болохыг хялбархан харж болно. (1) ба (3) -ийн тухайн тохиолдлыг [3] -т гаргасан.

Кварк, антикварк хоёрын холбоост төлөвийг үзье. Каноник хувиргалтын функц F нь a_1^r кварк ба $\bar{a}_2^b$ антикваркийг $a_1^{r\dagger} \bar{a}_2^b$ хэлбэрээр агуулна. F -д нийлбэр Грассманы зэрэг тэгтэй тэнцүү байх ёстой. Тодорхойлолт [2] -оос $K(a^\pm) = \pm 1$, $K(\bar{a}) = +1$ учир $K(a_1^r \bar{a}_2^b) = -1 + 1 = 0$, $K(\Theta_0) = 0$, $F \sim a_1^r \bar{a}_2^b \cdot \Theta_0$ байна. Хувиргалт каноник байхын тулд $F - F^+$ -ийг авна. Товчоор:

$$F_1 = f \cdot (a_1^r \cdot \bar{a}_2^b \cdot \bar{C}_2^{b\dagger} C_1^{r\dagger} - hc), \quad (6)$$

болно. Хоёрдугаар боломжид:

$$F_2 = f \cdot (a_1^{r\dagger} \bar{a}_2^b \cdot \bar{C}_2^{b\dagger} C_1^{r\dagger} - hc), \quad (7)$$

болно. Энд 1,2 нь квант тоонууд, r, b нь кваркийн өнгө.

$$K(C_1^r) = -1, \quad K(\bar{C}_2) = +1, \quad K(\bar{C}_2^\dagger) = -1,$$

$$K(F_1) = -1 + 1 - 1 + 1 = 0, \quad K(F_2) = 0.$$

f -тоон коэффициент.

Кварк a_1^r ба антикварк $\bar{a}_2^b$ нь C_1^r ба $\bar{C}_2^b$ -г (квант шиг) солилцох замаар харилцан үйлчлэлцэнэ гэж авна. Бичиглэлийг хялбарчилж дараах хэлбэрээр товчлоё.

$$C_1^r = C(1, r), \quad C_1^r \cdot \bar{C}_2^{b\dagger} = \Theta_2(1, r, 2, b),$$

$$\bar{C}_2^b C_1^{r\dagger} = \Theta_2^+(2b, 1r).$$

*Electronic address: dambasuren@num.edu.mn

Иймд (7) нь

$$F_2 = f \cdot (a_1^{r\dagger} \overline{a_2^b} \cdot \Theta_2(1r, 2b) - hc). \quad (8)$$

Хаусдорфф-Кемпбеллийн томьёог ашиглан (8) - аар $a_1^r, \overline{a_2^b}$ кваркаас $\alpha_1^r, \overline{\alpha_2^b}$ квазибөөмд каноник

хувиргалтаар шилжиж, энергийн өөрчлөлтийг илэрхийлэх стационар төлөвийг (харгалзах аттрактор [4]) тодорхойлох зорилго тавья. Үүнд:

$$\alpha_1^r = a_1^r + f_1 \overline{a_2^b} \Theta_2(1r, 2b) - \frac{f_1^2}{2} \cdot a_1^r \Theta_2^+(2b, 1r) \Theta_2(1r, 2b) \quad (9)$$

$$\alpha_1^{r\dagger} = a_1^{r\dagger} + f_1 \overline{a_2^b}^\dagger \Theta_2^+(2b, 1r) - \frac{f_1^2}{2} \cdot a_1^{r\dagger} \Theta_2^+(2b, 1r) \Theta_2(1r, 2b)$$

$$\overline{\alpha_2^b} = \overline{a_2^b} + f_1 a_1^r \Theta_2^+(2b, 1r) - \frac{f_1^2}{2} \cdot \overline{a_2^b} \Theta_2^+(2b, 1r) \Theta_2(1r, 2b) \quad (10)$$

$$\overline{\alpha_2^b}^\dagger = \overline{a_2^b}^\dagger + f_1 a_1^{r\dagger} \Theta_2(1r, 2b) - \frac{f_1^2}{2} \cdot \overline{a_2^b}^\dagger \Theta_2^+(2b, 1r) \Theta_2(1r, 2b)$$

Чөлөөт кварк ба антикваркийн Гамильтониан

-гаас

$$H_0 = \varepsilon_1 \cdot a_1^{r\dagger} a_1^r + \varepsilon_2 \cdot \overline{a_2^b}^\dagger \overline{a_2^b}$$

$$\widehat{H}_1 = E_{11} a_1^{r\dagger} a_1^r + E_{12} \overline{a_2^b}^\dagger \overline{a_2^b} + f_1 (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) \left[a_1^{r\dagger} \overline{a_2^b} \cdot \Theta_2(1r, 2b) + \Theta_2^+(2b, 1r) \overline{a_2^b}^\dagger a_1^r \right].$$

Сүүлчийн гишүүн нь харилцан үйлчлэлийн эффектив потенциал V_{eff} болно. Энд $\Theta_2^\pm$ -аар дундчилахад $\langle\langle V_{eff} \rangle\rangle = 0$,

$E_{12} \neq E_{22}$ бол 3-р шат гэх мэтчилэн үргэлжилнэ. Мөн

$$E_{11} = \varepsilon_1 - (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \cdot x_1 \quad (11)$$

$$E_{21} = \varepsilon_2 + (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \cdot x_1$$

$$E_{12} = \varepsilon_1 - (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \cdot K_2(x_1 x_2)$$

$$E_{22} = \varepsilon_2 + (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \cdot K_2(x_1 x_2)$$

болно. $x_1 = f_1 \cdot \langle\langle \Theta_2^+ \cdot \Theta_2 \rangle\rangle$, $H_1 = \langle\langle \widehat{H}_1 \rangle\rangle$.

"Орчин"-той үйлчлэлцэх 1-р шатны эцэст кварк, антикваркийн системийн энерги өөрчлөгдөж (11) болов. $E_{11} \neq E_{21}$ бол энерги заавал өөрчлөгдөнө. 2-р шатанд

$$H_1 = E_{11} \cdot a_1^{r\dagger} a_1^r + E_{21} \cdot \overline{a_2^b}^\dagger \overline{a_2^b}$$

-ээс

$$H_2 = E_{12} \cdot a_1^{r\dagger} a_1^r + E_{22} \cdot \overline{a_2^b}^\dagger \overline{a_2^b}.$$

гэж бичиж болно. Энд

$$K_2(x_1 x_2) = x_1 + \widehat{x_2} \cdot x_2 = x_2 + \widehat{x_1} \cdot x_1.$$

байх тул эцсийн үр дүн каноник хувиргалтын дэс дарааллаас хамаарахгүй. n -р интеграцийн дараа $E_{1n} = E_{2n}$ бол үүнээс цааших хувиргалтад n -р шатны үр дүн инвариант байна. Өөрөөр хэлбэл:

$$\Delta_n = E_{1n} - E_{2n} = 0$$

$$E_{12} = E_{11} - \Delta_1 \cdot x_2, \quad E_{22} = E_{21} + \Delta_1 \cdot x_2$$

$$E_{1,n+1} = E_{1n}, \quad E_{2,n+1} = E_{2n}.$$

$$\Delta_1 = E_{11} - E_{21} = (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \cdot \widehat{x_1}, \quad \widehat{x_1} = 1 - 2x_1.$$

Эффектив потенциал $V_{eff} = 0$. $E_{1n} = E_{2n}$ Тодруулбал:

$$\varepsilon_1 - (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \cdot K_n(x_1, x_2, \dots x_n) = \varepsilon_2 + (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) K_n(x_1, x_2, \dots x_n).$$

Эндээс стационар үед $K_n(x_1, x_2, \dots x_n) = 1/2$ буюу аттрактор нь аль нэгэн $x_i = 1/2$ -т харгалзана.

$$K_n(x_1, x_2, \dots x_n) = x_1 + \widehat{x}_1 [1x_2 + \widehat{x}_2 [2x_3 + \dots \widehat{x}_{n-2} [n-2x_{n-1} + \widehat{x}_{n-1}x_n]]]$$

Стационар үед $K_n(x_1, x_2, \dots x_n) = 1/2$, (аль нэгэн $x_i = 1/2$ үед)

$$E_{12} = \varepsilon_1 \frac{1}{2}(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) = \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2}, \quad E_{2n} = \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2};$$

Зөвхөн a_1^r ба a_2^b -ийн үйлчлэлд энерги хадгалагдана.

$K(a_1^r a_2^b) = 2$, $\sigma = K/2 = 1$. (8) -аар үүсэх кварк, антикваркийн холбоот төлөвийн спин $\sigma = 1$ учир вектор мезонд харгалзана. Одоо F_1 , (6) -ийг авъя.

$$F_1 = f_1 \left[a_1^r a_2^b \cdot \Theta_0(2b, 1r) - hc \right]. \quad (12)$$

Өмнөхтэй адилаар тооцоолбол:

$$E_{11} = \varepsilon_1 - (\varepsilon_1 + \varepsilon_2) \cdot x_1; \quad E_{21} = \varepsilon_2 - (\varepsilon_1 + \varepsilon_2) \cdot x_1.$$

(12) -ээс $K(a_1^r \cdot a_2^b) = 0$. $\sigma = K/2 = 0$. a_1^r ба a_2^b нь $\sigma = 0$ байх псевдоскаляр төлөв үүсгэнэ. Аттракторын цэг нь $x = 1/2$. Харгалзах энерги нь:

$$E_1 = \varepsilon_1 - (\varepsilon_1 + \varepsilon_2) \cdot \frac{1}{2} = \frac{1}{2}(\varepsilon_1 - \varepsilon_2),$$

$$E_2 = \varepsilon_2 - (\varepsilon_1 + \varepsilon_2) \cdot \frac{1}{2} = -\frac{1}{2}(\varepsilon_1 - \varepsilon_2).$$

Стационар төлөв нь харилцан эсрэг энергитэй кварк, антикваркийн хос болно.

Анхнаасаа $\varepsilon_1 = \varepsilon_2$ байсан бол харилцан үйлчлэлийн энэ сувгаар $E_1 = E_2 = 0$ бүтэц үүсэх бөгөөд энэ нь каноник хувиргалтад цаашид өөрчлөгдөхгүй. Учир нь $E_1 + E_2 = 0$ -аар хязгаарлагдана.

Нэмэгдэл гаднын орон (бусад бөөмсийн хүрээллийн нөлөө) авбал кварк, антикваркийн системийн стационар төлөвийн энерги өргөн мужид өөрчлөгдөж болно.

F_2 -ийг авахад:

$$E_{11}(\Theta) = \varepsilon_1 - (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \cdot f^2 \Theta_2^+ \Theta_2$$

байсан. Гаднын оронд a_1^r -ийн энергийн өөрчлөлтийг

$$\Delta E_1 = -(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \cdot \Theta_2^+ \Theta_2 \cdot U_1,$$

a_2^b -ийг

$$\Delta E_2 = (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \cdot \Theta_2^+ \Theta_2 \cdot V_1,$$

гэе. U, V нь харгалзах коэффициент Иймд:

$$E_{11}(\Theta) = \varepsilon_1 - (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \cdot (f_1^2 + U_1) \Theta_2^+ \Theta_2,$$

$$E_{21}(\Theta) = \varepsilon_2 + (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \cdot (f_1^2 + V_1) \Theta_2^+ \Theta_2.$$

Дундчилахад:

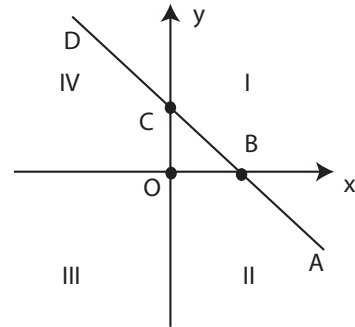
$$x_1 = (f_1^2 + U_1) \cdot \langle \Theta_2^+ \Theta_2 \rangle,$$

$$y_1 = (f_1^2 + V_1) \cdot \langle \Theta_2^+ \Theta_2 \rangle,$$

болно. U_1, V_1 нь дурын бодит тоо учраас x, y нь эерэг, сөрөг аль ч утга авах боломжтой.

$$E_{11} = \varepsilon_1 - (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \cdot x_1, \quad E_{21} = \varepsilon_2 + (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \cdot y_1.$$

$E_{11} = E_{21}$ -ээс $x_1 + y_1 = 1$ (аттракторын цэг). Энэ цэг хувиргалтын параметр x, y -ийн хавтгай дээрх шулуун $y = -x + 1$ -ээр тодорхойлогдоно (зураг.1).



Зураг 1:

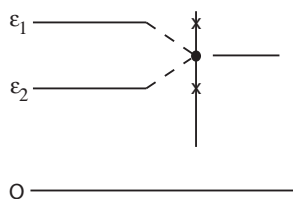
Энергийн өөрчлөлт, аттракторын цэгүүдийг $I - IV$ муж тус бүрт авч үзье. F_2 -р тодорхойлогдох сувгийн ε_1 ба ε_2 -ийн өөрчлөлтийг тоймлон үзье.

1-р муж ($x > 0, y > 0$). Шулууны СВ хэсэг (зураг.2).

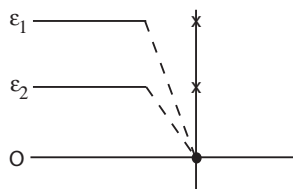
2-р муж ($x > 0, y < 0$). Шулууны ВА хэсэг (зураг.3).

3-р муж ($x < 0, y < 0$)-ийн ямарч цэг шулуун дээр оршихгүй. Шулууны ВА хэсэг.

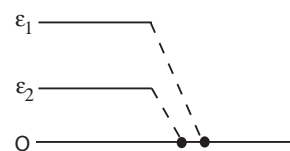
4-р муж ($x < 0, y > 0$), Шулууны DC хэсэг (зураг.4).



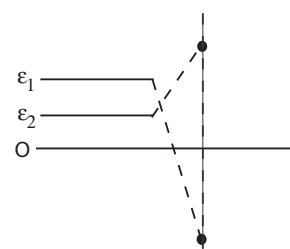
Зураг 2:



Зураг 3:



Зураг 5:



Зураг 6:

F_1 -ийг авахад:

$$E_{11} = \varepsilon_1 - (\varepsilon_1 + \varepsilon_2)x_1,$$

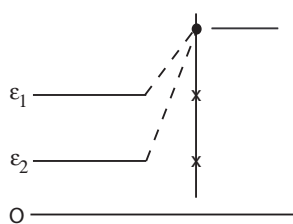
$$E_{21} = \varepsilon_2 - (\varepsilon_1 + \varepsilon_2)y_1,$$

$E_{11} = E_{21} = 0$. Мөн $x_1 + y_1 = 0$ -ээс $y = -x + 1$ (аттрактор)

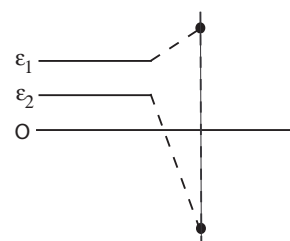
I. $E_{11} = E_{21} = 0$, $E_{11} = -E_{21}$

$$x_0 = \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}, \quad y_0 = \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}$$

(зураг.5), II. зураг.6, III. Аттракторгүй, IV. зураг.7



Зураг 4:



Зураг 7:

Талархал

Энэхүү ажлыг гүйцэтгэхэд дэмжлэг үзүүлж суурь судалгааны SST_010/2016 төслийг санхүүжүүлсэн ШУТС болон БСШУС яаманд талархал илэрхийлье.

- [1] Ф. А. Березин., "Метод вторичного квантования" Москва "Мир", 1965.
- [2] Д.Дамбасүрэн, Б.Борхүү, Н.Төвжаргал., "Грассманы хувьсагчийг ашиглан эгэл бөөмийн стационар төлөвийг тодорхойлох" Монгол улсын их сургуулийн эрдэм шинжилгээний бичиг (478), ФИЗИК сэтгүүл (25), х101, 2017
- [3] Д.Дамбасүрэн., "Боголюбовын нэгэн төрлийн бус хувиргалт" Scientific Journal of National University of Mongolia, Section Physics. №1 (104), p.75-78

(1992).

- [4] А.Лихтенберг, М.Либерман., "Регулярная и стохастическая динамика" Москва "Мир", 1984.

Hydrogen atom ionization in femtosecond laser field: Numerical solution of the TDSE using CWFDVR method

Ch.Aldarmaa*, L.Khenmedekh, G.Zorigt

Physics Department, School of Applied Sciences, University of Sciences and Technology (MUST), Mongolia

We present an discrete variable representation for solving the time-dependent Schrodinger equation for an atomic system interacting with an intense laser pulse. Instead of the usual finite difference (FD) method, the radial coordinate is discretized using the discrete variable representation (DVR) constructed from Coulomb wave functions. Our results are in excellent agreement with other accurate theoretical calculations using different methods.

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

INTRODUCTION

The study multiphoton ionization of atom by femtosecond laser pulse is a subject of interest for both experiments and theory. One way to describe such process is numerical solution of the time dependent Schrodinger equation (TDSE). “Exact” solution of TDSE with minimal computational effort still remain challenge for researchers. Different numerical methods for solution of TDSE are tested and give promising results. Among them should be emphasized the generalized pseudospectral method (GPSM) of Shih I Chu and coworkers [1-3], and matrix- iterative method of Grum Grzhimailo et al [4]. The former method based on Crank-Nicholson approximation of TDSE, gives most accurate results for ejected electron spectrum. The GPSM attractive in that, it uses the “exact” integration of TDSE by split operator method, discretizing differential operators on the pseudospectral Legendre basis, not only avoiding the Coulomb singularity, but also uses several times less, non-uniform radial grid nodes, which make this method computationally more effective. Limitation of this method is the Legendre basis doesn’t possess correct asymptotic behavior. Peng and Starace [5] developed Coulomb wave function discrete variable representation method (CWFDVR) for solution of TDSE for an atom in intense laser field. In comparison with the GPSM, the basis has correct Coulomb wave asymptotic form. In this paper, we propose Coulomb wave function discrete variable representation method to solve the TDSE.

THEORY

We solved the time-dependent Schrodinger equation (TDSE) for atomic hydrogen in an intense laser field to calculate electron energy spectra with the hydrogen atom initially in the ground state. The Schrodinger equation for atomic hydrogen in the presence of linearly polarized fields $\vec{E}(t)$ can be written as (in atomic units)

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

Here $\hat{H}_0$ is the unperturbed H atom Hamiltonian and $\hat{V}$ is the atom-field interaction:

$$\hat{H}_0 = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hat{L}^2}{2r^2} - \frac{1}{r}$$

and $V(\vec{r}, t) = \vec{p} \cdot \vec{A}(t).$ (2)

A linearly polarized laser field is used in the calculation. One can choose pulse shape either for $\vec{A}(t)$ or for $\vec{E}(t)$. Grum Grzhimailo et al pointed out that the photoelectron spectrum depends on, which one of the two vectors have a $\sin^2$ pulse envelope. If one choose for example

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

$0 \leq t \leq \tau$ the in this case the $A(t)$ determined by simple integration:

$$A(t) = -\int_0^t E(t) dt = \frac{1}{4} E_0 \left(-\frac{2 \cos[\phi_0] \cos[\omega t]}{\omega} + \frac{\tau \cos\left[\frac{2\pi t}{\tau} - \phi_0 - \omega t\right]}{-2\pi + \tau\omega} + \frac{\tau \cos\left[\frac{2\pi t}{\tau} + \phi_0 + \omega t\right]}{2\pi + \tau\omega} + \frac{2 \sin[\phi_0] \sin[\omega t]}{\omega} \right) \quad (4)$$

* Electronic address: aldaraa2004@yahoo.com

On the other hand, we choose the vector potential in the similar form of (3):

$$A(t) = A_0 \cos(\omega t + \varphi_0) \sin^2\left(\frac{\pi t}{\tau}\right) \quad (5)$$

The electric field can be determined by differentiation:

$$\vec{E}(t) = -\frac{1}{c} \frac{dA(t)}{dt} \quad (6)$$

We shall use the second-order split-operator technique in spherical coordinates for the time propagation of the Schrodinger equation:

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{r}, t + \Delta t) &\cong \exp\left(-i\hat{V}(\vec{r}, t + \Delta t) \frac{\Delta t}{2}\right) \times \\ &\exp(i\hat{H}_0 \Delta t) \times \exp\left(-i\hat{V}(\vec{r}, t) \frac{\Delta t}{2}\right) \Psi(\vec{r}, t) + \\ &O(t^3) \quad (7) \end{aligned}$$

To pursue the time propagation, we expand the total wavefunction $\Psi(\vec{r}, t)$ in Legendre polynomials:

$$\Psi(r_i, \theta_j, t) = \sum_{l=0}^{l_{max}} g_l(r_i, t) P_l(\cos\theta_j) \quad (8)$$

where the P_l is the normalized Legendre polynomials. $g_l(r_i, t)$ can be determined accurately by the Gauss-Legendre quadrature

$$g_l(r_i) = \sum_{k=1}^{l_{max}} w_k P_l(\cos\theta_k) \Psi(r_i, \theta_k, t) \quad (9)$$

Where $(\cos\theta_k)$ are the $L+1$ zeros of the Legendre polynomial $P_{L+1}(\cos\theta_k)$ and w_k are the corresponding quadrature weights.

The present method discretizes the radial coordinate using the discrete variable representation CWFDVR constructed from the positive energy Coulomb wave function. The CWFDVR greatly simplifies the evaluation of Hamiltonian matrix elements. Let us consider the following equation

$$\frac{d^2}{d\tilde{r}^2} \phi(\tilde{r}) + \left[1 + \frac{2Z}{\tilde{r}\sqrt{2E}} - \frac{L(L+1)}{\tilde{r}^2}\right] \phi(\tilde{r}) = 0 \quad (10)$$

with the solution given by regular Coulomb function

$$\phi(r) = F_0 \left(-\frac{Z}{\sqrt{2E}}, r\sqrt{2E}\right) \quad (11)$$

where E -energy, Z - nuclear charge.

We define the Lagrange interpolation cardinal function $C(r)$ as

$$C_i(r) = \frac{1}{\phi'(r_i)} \frac{\phi(r)}{r-r_i} \quad (12)$$

where r_i is the i th zero of $\phi(r)$ and $\phi'(r_i)$ is its first derivative at r_i .

$C_i(r)$ satisfies the cardinality condition

$$C_i(r_j) = \delta_{ij} \quad (13)$$

The Coulomb wave function DVR basis function defined in the following way

$$f_i(r) = \frac{1}{\sqrt{\omega_i}} C_i(r) = \frac{1}{\sqrt{\omega_i}} \frac{1}{\phi'(r_i)} \frac{\phi(r)}{r-r_i} \quad (14)$$

The potential matrix elements to draw in merely the evaluation of the interaction potential at the CWFDVR grid points. The kinetic energy matrix elements can also be calculated [5].

RESULTS

TDSE for hydrogen atom in a femtosecond laser field solved with the CWFDVR method in the following cases.

A. 2-cycle laser pulse with the peak intensity $I = 10^{15} \text{ W/cm}^2$ and central frequency of $\omega = 0.2$, (Fig.1)

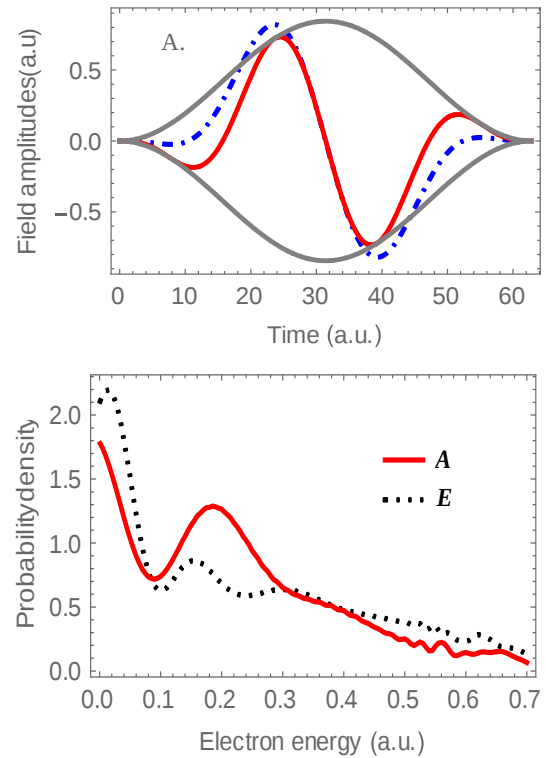


Figure 1. Laser pulse with a $\sin^2$ envelope. Ionization of atomic hydrogen in A. 2 cycle, a peak intensity of 10^{15} W/cm^2 , and central frequency of 0.2 a.u. , corresponding to a wavelength of 227.75 nm .

In this case first we compare the laser pulse vector potentials and found different shape as seen from Figure 1A, and the corresponding probability density of ejected electron spectrum also strongly different from each other (Figure 1B).

B. 4-cycle laser pulse with the peak intensity $I = 10^{15} \text{ W/cm}^2$ and central frequency of $\omega = 0.3$ (Fig.2).

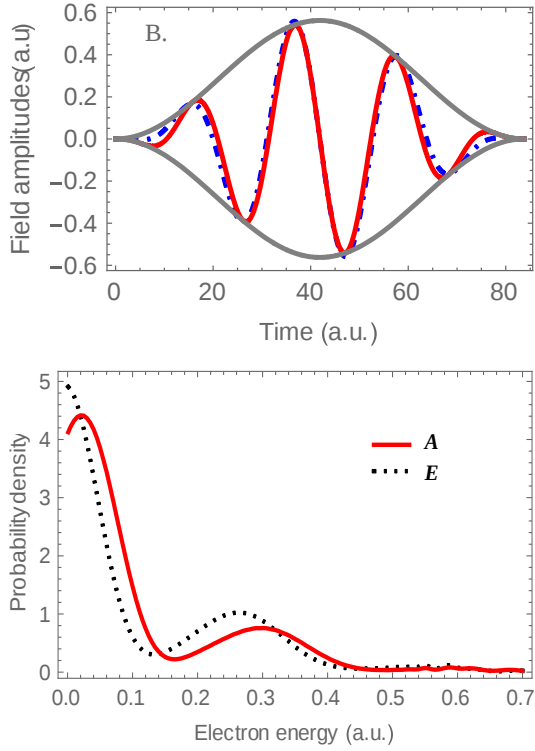


Figure 2. Laser pulse with a $\sin^2$ envelope. Ionization of atomic hydrogen in B. 4 cycle laser pulse with a $\sin^2$ envelope, a peak intensity of 10^{15} W/cm^2 , and central frequency of 0.3 a.u., corresponding to a wavelength of 151.84 nm.

C. 20-cycle laser pulse with the peak intensity $I = 10^{14} \text{ W/cm}^2$ and central frequency of $\omega = 0.114$ 3 (Fig.3).

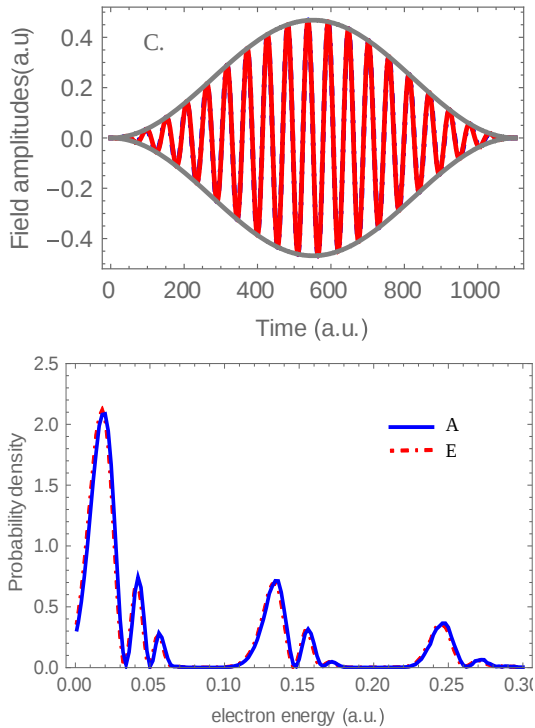


Figure 3. Laser pulse with a $\sin^2$ envelope. Ionization of atomic hydrogen in C. 20 cycle laser pulse with a $\sin^2$ envelope for the electric field, a peak intensity of 10^{14} W/cm^2 , and central

frequency of 0.114 a.u., corresponding to a wavelength of 399.57 nm.

As seen from the Fig.1, in the first case (A), didn't fit both the envelope and carrier shapes and corresponding electron spectrums are different from each other. Analogically to present case, we compare pulse shape and electron spectrum for four cycle laser pulse (case B). In this case the pulses have slightly different shape and the corresponding spectrum also differs from each other. Third we consider 20 cycle laser pulse. Figure 3 shows that both the vector potential pulse shape and the electron spectrum nearly coincides for this longer pulse. Notice that our spectrum B and C in agreement with the corresponding spectrum given in reference [2].

CONCLUSIONS

We apply the CWFDVR method to the numerical solution of TDSE for ionization of atomic hydrogen in intense laser field. The choice of $\sin^2$ envelope either for $E(t)$ or for $A(t)$ give nearly the same electron spectrum for longer (20cycle) pulse, but for four and specially for two cycle case, electron spectrum differs from each other. In the case of central frequency of 0.3 and 0.114, our calculated electron spectrums are in excellent agreement with other accurate theoretical calculations using different methods.

REFERENCES

- [1] Xiao-Min Tong, Shih-I Chu "Theoretical study of multiple high order harmonic generation by intense ultrashort pulsed laser fields: A new generalized pseudospectral time -dependent method " Chemical Physics 217 (1997) 119-130
- [2] Dmitry A.Telnov, Shih-I Chu " Above-threshold-ionization spectra from the core region of time- dependent wave packet: An *ab initio* time dependent approach" Phys. Rev 79, 043421 (2009)
- [3] Qiang Li, Xiao -Min Tong, Toru Morishita, Hui Wei, C.D.Lin " Fine structures in the intensity dependence of excitation and ionization probabilities of hydrogen atoms in intense 800nm laser pulses " Phys. Rev 89, 023421 (2014)
- [4] Alexei N Grum- Grzhimailo, Brant Abeln, Klaus Barschat, Daniel Weflen " Ionization of

atomic hydrogen in strong infrared laser field”
Phys. Rev 81, 043408 (2010)

- [5] Liang-You Peng, Anthony F Starace “
Application of Coulomb wave function discrete
variable representation to atomic systems in
strong laser fields” The journal of Chemical
physics 125, 154311 (2006).

Атомуудын өдөөгдсөн төлөвүүдийн энергийг Кон-Шэмийн тэгшитгэлээр тооцоолох нь

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

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

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

Нягтын функционалын онолын Кон-Шэмийн тэгшитгэлээр He, Li, Be-ын атомуудын нэг болон хоёр удаа өдөөгдсөн төлөвүүдийн нягт ба энергийг тооцоолсон. Кон-Шэмийн тэгшитгэлийг бөмбөлөг координаттай системд Кулоны долгион функцтэй дискрет хувьсагчийн аргаар бодсон. Энд координатыг жигд биш, оптималиар дискретчилж, нарийвчлал сайтай шийдийг гаргаж авна. Тооцооны үр дүнгүүдийг Рой нарын псевдоспектриал аргаар тооцоолсон болон туршлагын үр дүнтэй харьцуулахад He-ийн хоёр удаа өдөөгдсөн төлөвүүдийн энергийн зөрүү 0.001-0.016, Li-ийн өдөөгдсөн төлөвүүдийн энергийн зөрүү 0.0041-0.295% Be-ийн өдөөгдсөн төлөвүүдийн энергийн зөрүү 0.02-1.51% байна.

PACS numbers: 31.15.E-, 31.15.xr, 31.25.Jf.

I. ОРШИЛ

Нягтын функциональ онол (НФО) нь Хонберг-Кон [1] ийн хоёр теорем дээр үндэслэгддэг хатуу бие, молекул, атомын электроны бүтцийн тооцооллыг хийдэг квант механикийн арга юм. Кон-Шэмийн тэгшитгэлүүд нь 3 хэмжээст огторгуйд Хартри-Фокийн тэгшитгэлүүдтэй ижил боловч олон биеийн харилцан үйлчлэл нь локаль солилцоо-корреляцийн потенциалар илэрхийлэгддэг [2]. Энэ өгүүлэлд Кон-Шэмийн тэгшитгэлийг бөмбөлөг координатын системд Кулон долгионтой Дискрет хувьсагчийн аргаар бодсон [3]. Энэ арга нь Кулоны бүрэн базтай атомын системд тохирдог төдийгүй олон электронт системийн төлөвийн шинж чанарыг тооцоолоход эхлээд хуурмаг хугацааны аргыг ашиглан Кон-Шэмийн тэгшитгэлийг дифференциаль тэгшитгэлд шилжүүлнэ. Энэ өгүүлэлд ортогональ полином болон Кулоны долгион функцээр үүсгэгдсэн Дискрет хувьсагчийн аргыг товч танилцуулж, цаашид олон электронт атомын системийн Кон-Шэмийн тэгшитгэлд хэрхэн ашиглагдах талаар авч үзнэ. Тооцооны үр дүнгүүдийг бусад ажлууд болон туршлагын үр дүнтэй харьцуулсан ба энэ ажлын тооцоог атомын нэгжид хийсэн.

II. СУДАЛГААНЫ АРГА ЗҮЙ

Дискрет хувьсагчийн аргыг Харрис нар [4] үндэслэсэн бөгөөд Дикинсон ба Сершин нар [5]

өргөтгөсөн. Квант механикийн бодлогыг бодоход Дискрет хувьсагчийн аргыг ашиглах анхны оролдлогуудыг Лайт нар [6] хийсэн бөгөөд үүнээс хойш физик, химийн шинжлэх ухааны төрөл бүрийн салбаруудад өргөн хэрэглэгддэг болсон. Энэ аргаар Гамильтонианыг матрицын элементэд шилжүүлдэг бөгөөд ихэнх тохиолдолд кинетик энергийг матрицид шилжүүлснээр дифференциаль тэгшитгэлийг алгебрийн тэгшитгэлд шилжүүлнэ. ψ_j орбиталиудаар тодорхойлогдох хугацаанаас хамаарсан Кон-Шэмийн тэгшитгэл нь

$$i \frac{\partial \psi_j(\vec{r}, t)}{\partial t} = (\hat{H}_0 + v_{eff}) \psi_j(\vec{r}, t), j = \overline{1, N} \quad (1)$$

хэлбэртэй бичигддэг. Энд $\hat{H}_0$ нэг электроны атомын Гамильтониан, $v_{эф}$ -хугацаанаас хамаарсан эффектив потенциал нь электрон-электроны түлхэлцэл, цөм-электроны таталцал, солилцоо ба корреляцийн потенциалуудаас бүрдэнэ. $\psi_j(\vec{r}) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\Omega)$ нэг электроны орбитал болно.

Атомын электроны нягт нь орбиталуудын модулийн квадраттай тэнцүү:

$$\rho(\vec{r}, t) = \sum_{j=1}^N |\psi_j(\vec{r}, t)|^2. \quad (2)$$

$\psi_j(\vec{r})$ гэсэн j -р орбиталыг тодорхойлохдоо $\psi_j \cong \psi_{n00} \cong \psi_{ns}$, $\psi_j \cong \psi_{n00} \cong \psi_{np}$ байхаар тодорхойлсон. Гелийн атомын хувьд

* Electronic address: naranchimeg@must.edu.mn

солилцооны энергийн тодорхой хэлбэрийг сонгож болдог ба харин бусад системүүдэд энергийн функционалын локаль хэлбэрүүдийг сонгож авдаг [7]. Энэхүү тооцоонд корреляцийн энергийн функционалыг Вигнерийн томъёогоор бодсон. Энэ функционалыг хүчтэй лазер атомын харилцан үйлчлэл, молекул систем, атомын үндсэн ба өдөөгдсөн төлөвүүдэд бүгдэд нь хэрэглэж болдог.

Тэгшитгэлийн тоон шийд: (Дискрет хувьсагчийн арга)

Кон-Шэмийн тэгшитгэл (1) - р тэгшитгэлийг бодохын тулд бөмбөлөг координаттай системд 2-р эрэмбийн операторын хуваалтын схемийг ашиглан Δt хугацааны алхамтайгаар долгион функцийг бичвэл:

$$\psi(\vec{r}, t + \Delta t) = e^{-i\Delta t \frac{1}{2}\hat{H}_0} e^{-i\Delta t V} e^{-i\Delta t \frac{1}{2}\hat{H}_0} \psi(\vec{r}, t) \quad (3)$$

болно. Кулоны долгионтой дискрет хувьсагчийн аргаар Кон-Шэмийн тэгшитгэлийг бодоход радиал зангилааны цэгүүдээр Кулоны функцийг тодорхойлох ба $\psi(r)$ функцийг $\psi_N(r)$ - аар ойролцоолно

$$\psi(r) \cong \psi_N(r) = \sum_{j=0}^N \psi(r_j) g_j(r). \quad (4)$$

(4) тэгшитгэл дэх $\psi(r_j)$ -нь интерполяцийн функц, $g_j(r)$ кардинал функц бөгөөд $g_j(r)$ -ийг

$$g_j(r) = \frac{1}{F'(r_j)} \frac{F(r)}{r-r_j} \quad (5)$$

байдлаар тодорхойлогдоно. Энд: $F(r)$ - Кулоны функц, $F'(r)$ - r_j дээрх 1-р эрэмбийн уламжлал болох ба кардиналийн нөхцөл нь $g_j(r_i) = \delta_{ji}$ байна. Интерполяцийн функцийг атомын Гамильтониантай радиал тэгшитгэлд орлуулбал:

$$\hat{H}(r)\psi(r) = E\psi(r). \quad (6)$$

болно. (6)-р тэгшитгэл нь Кон-Шэмийн радиал тэгшитгэл буюу хувийн утгын бодлогыг бодно. Атомын Гамильтониан $\hat{H}(r) = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + V(r)$ байна.

$\hat{H}$ Гамильтонианыг дискретчилж Кон-Шэмийн тэгшитгэлийн системийг бичвэл

$$\sum_{i=1}^N \left[-\frac{1}{2} T_{ji} + V(r_i) \delta_{ji} \right] \phi_{kj} = \varepsilon_k \phi_{kj} \quad (9)$$

хэлбэртэй бичигдэнэ. Энд: ϕ_k - хувийн функц, ε_k - хувийн утга бөгөөд T_{ji} кардинал

функцийг 2-р эрэмбийн уламжлалаар тодорхойлдог.

$$(T)_{ji} = \frac{1}{3} \left(E + \frac{Z}{r} \right), j = i \quad (7)$$

$$(T)_{ji} = \frac{1}{(r_j - r_i)^2}, j \neq i. \quad (8)$$

Энд $e^{-\hat{H}_l^0 \Delta t/2} \equiv S(l)$ эволюцийн операторыг $\hat{H}_l^0$ -оор нарийвчлал сайтай илэрхийлсэн явдал нь (3) тэгшитгэл дэх хугацааны алхамд хийсэн онцлог өөрчлөлт юм. Дискрет хувьсагчийн аргаар торын дискретчлэлийг оновчтой хийж, $\hat{H}_l^0$ операторын хувийн утгын бодлогын нарийвчлалыг сайжруулснаар энэ аргыг өргөжүүлдэг. Энэ ажилд Кон-Шэмийн систем тэгшитгэлүүдийг бодох, радиал координатуудыг дискретчилэх зорилгоор 152 цэг дээр, $\Delta t = 0.001$ а.н бүхий хугацааны алхамтайгаар бодолтыг гүйцэтгэсэн болно.

III. ҮР ДҮН, ХЭЛЭЛЦҮҮЛЭГ

Энэ ажилд He, Li, Be атомуудын нэг ба хоёр удаа өдөөгдсөн төлөвүүдийн энергийг Кон-Шэмийн тэгшитгэлээр тооцоолж, Рой нарын [8] псевдоспектриал аргаар тооцоолсон үр дүнтэй харьцуулсан болно. Энэ аргаар дээрх атомуудыг тооцоолсон үр дүн хараахан хийгдээгүй бөгөөд бид энэхүү тооцооллод Кулоны долгион функцийг эффектив цэнэгийг $Z = 400$, долгион тоог $k = 3$, радиал зангилааны цэгийн тоог 152 байхаар сонгон авсан. 1-р хүснэгтэд He-ийн хоёр удаа өдөөгдсөн ns^2 ($n=2,3,4,5$) синглет төлөвийн энергийг тооцоолсон тооцооллын үр дүнг нэгтгэн харуулав. Тооцооллын үр дүнгээс үзвэл He-ийн хоёр удаа өдөөгдсөн төлөвүүдийн энергийг Рой нарын тооцоолсон энергиэс 0.115-1.832%-иар зөрүүтэй байна. Li атомын нэг удаа өдөөгдсөн $1s^2 ns^2 S$ ба $1s^2 np^2 P$ төлөвүүдийн, Be атомын нэг удаа өдөөгдсөн $1s^2 2sns^3 S$ ба $1s^2 2snp^3 P$ төлөвүүдийн энергүүдийг тооцоолж гарсан үр дүнг 2 ба 3-р хүснэгтүүдэд үзүүлсэн болно. Li ба Be-ийн нэг удаа өдөөгдсөн төлөвүүдийн энергийг Рой нарын үр дүнтэй харьцуулбал зөрүү нь 0.0041-0.295% ба 0.02-1.51% байна.

Хүснэгт 1. *He*-ийн хоёр удаа өдөөгдсөн төлөвийн энергийг тооцоолсон үр дүн (а.н.).

Төлөв	-E	-E ¹
2s ² 1S	0.7673(0.130)	0.7663
3s ² 1S	0.3453(0.115)	0.3457
4s ² 1S	0.1929(1.832)	0.1965
5s ² 1S	0.1295(1.544)	0.1275

¹A. K. Roy and S. I. Chu, Phys. Rev. A. 65, 052508 (2002).

Хүснэгт 2. *Li*-ийн нэг удаа өдөөгдсөн төлөвийн энергийг тооцоолсон үр дүн (а.н.).

Төлөв	-E	-E ¹
1s ² 3s 2S	7.3473	7.3577
1s ² 4s 2S	7.3142	7.3197
1s ² 5s 2S	7.3036	7.3046
1s ² 2p 2P	7.3901	7.4120
1s ² 3p 2P	7.3379	7.3386
1s ² 4p 2P	7.3160	7.3126
1s ² 5p 2P	7.3002	7.3005

¹A. K. Roy and S. I. Chu, Phys. Rev. A. 65, 052508 (2002).

Хүснэгт 3. *Be*-ийн нэг удаа өдөөгдсөн төлөвийн энергийг тооцоолсон үр дүн (а.н.).

Төлөв	-E	-E ¹
1s ² 2s3s 3S	14.432	14.4291
1s ² 2s4s 3S	14.342	14.3700
1s ² 2s5s 3S	14.347	14.3499
1s ² 2s2p 3P	14.346	14.5666
1s ² 2s3p 3P	14.387	14.3979
1s ² 2s4p 3P	14.391	14.3591
1s ² 2s 5p 3P	14.391	14.3393

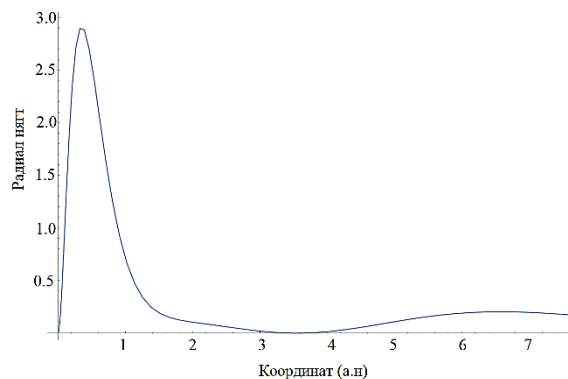
¹A. K. Roy and S. I. Chu, Phys. Rev. A. 65, 052508 (2002).

Үүний зэрэгцээ тооцооллын үр дүнгээр зурагдсан *Li*-ийн 1s²3s төлөвийн радиал нягт, координатын хамаарлын графикийг 1-р зурагт харуулсан байна.

Судалгааны ажлын үр дүнг нэгтгэн дүгнэвэл:

1. Кулоны долгионтой дискрет хувьсагчийн аргаар Кон-Шэмийн тэгшитгэлийг алгебрийн тэгшитгэлд шилжүүлэн радиал нягт, өдөөгдсөн төлөвийн энергийг тооцоолсон.

Тооцооллын үр дүнгүүдийг Рой нарын [8] псевдоспектриал аргаар бодсон үр дүнтэй маш сайн тохирч байсан.



Зураг 1. *Li* 1s²3s төлөвийн радиал нягтын график.

Цаашид энэ аргаар атомуудын төлөвийг нэмэгдүүлэн тооцоолол хийх, цөөн электронт атомын хувьд иончлолын тооцоог хийх боломжтой нь харагдаж байна.

АШИГЛАСАН НОМ

- [1] P. Hohenberg and W. Kohn, Phys. Rev. B 136, 864 (1964).
- [2] R. G. Parr and W. Yang, Density-Functional Theory of Atoms and Molecules (Oxford Univ. Press, New York, 1989).
- [3] Liang-You Peng and Anthony F. Starace J. Chem. Physics 125, 154311 (2006).
- [4] B. K. Dey 110, 6229 (1999).and B. M. Deb, J. Chem. Phys.
- [5] A. S. Dickinson and P. R. Certain, J. Chem. Phys. 49, 4209, 1968.
- [6] J. V. Lill, G. A. Parker, and J. C. Light, Chem. Phys. Lett. 89, 483,1982; R. W. Heather and J. C. Light, J. Chem. Phys. 79, 147 1983; J.
- [7] S. K. Ghosh and B. M. Deb, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 27, 381 (1994).
- [8] A. K. Roy and S. I. Chu, Phys. Rev. A. 65, 052508 (2002).

Вилсон урсгалын арга ашиглан тооцоолсон цэвэр гейж SU(3) урсгалын хоолойн зарим нэг үр дүнгүүд

П. Баттогтох^{1*}, Ч. Содбилэг¹, О. Качмарек², Г. Энхтуяа¹

¹Шинжлэх Ухааны Академи, Физик Технологийн Хүрээлэн

²Бийлефелдийн Их Сургууль, Физикийн Тэнхим

Бид градиент урсгалын аргын латтис онол дахь тухайн тохиолдол болох Вилсон урсгалын аргын хэмжилтийн алдаа бууруулах шинж чанарыг энэ судалгааны ажлаар судалж, түүнийгээ өөрсдийн програмд хэрэглэх аргачлалыг боловсруулсан. Энэ аргачлалаараа цэвэр гейж орны конфигурацуудыг $32^3 \times 8$ эзлэхүүнтэй латтис дээр, $T/T_c = 1.29$ утганд үүсгэж, $t = 0.01, 0.03, 0.05$ гэсэн урсгалт хугацааны утгууд дээр урсац конфигурацуудыг тооцоолж авсан. Энэхүү конфигурацуудаараа урсгалын хоолойн түгэлтийг кварк хоорондын зай $R = 4a - 8a$ үед тооцоолсон. Энэ үр дүнгүүд нь урсгалт хугацаа өсөх хэрээр, дохио нь илүү бага шуугиантай утгууд өгч байгаа боловч, Вилсон урсгалын смийр шинж чанар (smearing effect)-ын улмаас тухайн хэмжигдэхүүний өгөх зарим хэсэг мэдээллүүд алдагдах аюултай гэдгийг харуулж байна.

Түлхүүр үгс: Wilson flow, fluxtube, smooth field, smearing effect, SU(3) gauge theory, ultra violet fluctuation.

УДИРТГАЛ

Градиент урсгалын арга [1] нь гейж онолын судалгаанд маш чухал ач холбогдолтой арга юм. Нэмэлт урсгалт хугацааны координат t -г оруулж ирснээр SU(3) гейж орны урсгалын тэгшитгэл

$$\begin{aligned} \dot{B}_\mu(x, t) &= D_\nu G_{\nu\mu}(x, t), \\ D_\nu &= \partial_\nu + [B_\nu(x, t), \cdot] \end{aligned} \quad (1)$$

гэсэн хэлбэртэй болно. Энэ тэгшитгэлд цэгээр t -ийн нэгдүгээр эрэмбийн уламжлалыг, $G_{\nu\mu}$ -ээр гейж орны орны хүчлэгийн тензорыг тэмдэглэнэ. Нэмэлт координатыг оруулахгүйгээр гейж орон $B_\mu(x, t)$ нь үндсэн гейж орон A_μ -тэй тэнцүү байна. Урсгалийн тэгшитгэл нь [4]-ээс харахад үйлчлэлийн градиенттай пропорционал

$$D_\nu G_{\nu\mu}(x, t) \sim \frac{\delta S_G[B_\mu]}{\delta B_\mu} \quad (2)$$

буюу урсгалын дагуу гейж орон гөлгөр (smooth) байна. Энэ нь урсгал эцсийн эцэст Янг-Миллсийн үйлчлэлийн хамгийн бага цэгэн утгуудад хүрнэ гэсэн үг бөгөөд гейж орны топологийг судлахад чухал ач холбогдолтой байдаг.

Мөн гейж онолууд нь хэт ягаан туяаны мужид флуктуацтай байна. Иймд латтис гейж онолоор

тодорхойлсон хэмжигдэхүүнүүд нь энэхүү богино зайн флуктуацад нэрвэгдсэн байна. Градиент урсгал нь орныг гөлгөр болгосноор энэ хэт ягаан туяаны муж дахь флуктуацыг шүүдэг онцлогтой. Өөрөөр хэлбэл корреляцын функцүүд энэ гөлгөр оронд маш сайн тодорхойлогдсон тасралтгүйн хязгаартай байна. Энэ ажлаар бид энэхүү урсац шинжийг өөрсдийн програмд ашиглаж, зарим нэг шинж чанаруудыг нь судлах болно.

Латтис оронд урсгал тодорхойлсноор орон нь нялагдсан буюу смийрэд (smeared) шинжтэй болдог. Энэ нялалтын радиус r_{smear} -ийг холбоосын тогтмол g дээрх хөндөх онолын дээд эрэмбийн гишүүдээс олж болно. Энэ нь $r_{smear} = \sqrt{8t}$ байна. Корреляторын спектрал төлөөлөлд спектрал жинг бууруулснаар $r_{smear} \geq \tau$ зай, $\pi/r_{smear} \geq \omega$ давтамжид корреляцын функцийн хэт ягаан муж дахь флуктуацыг бууруулна.

[5] –аас урсгалын латтис томъёолол нь линк хувьсагчаар

$$\begin{aligned} \dot{U}_t(x, \mu) &= -g_0^2 \{ \partial_{x, \mu} S_W(U_t) \} U_t(x, \mu), \\ U_t(x, \mu)|_{t=0} &= U(x, \mu) \end{aligned} \quad (3)$$

гэж илэрхийлэгдэнэ. Энд $\partial_{x, \mu}$ нь SU(3) Ли-Алгебрийн утгатай дифференциал оператор. Бид S_W -ийг стандарт Вилсон үйлчлэл

* E-mail address: pbattogtokh@gmail.com

$$S_W(U) = 1/g_0^2 \sum_p \text{Re Tr}\{1 - U(x, \mu)\} \quad (4)$$

ээр сонгож авна. Энд p бүх плакетын дагуу гүйнэ. Иймээс зарим тохиолдолд градиент урсгалыг Вилсон урсгал гэж нэрлэнэ. Энэ тэгшитгэлийг тоон аргаар шийдэхдээ $f(U)$ функцэд үйлчлэх $SU(3)$ утгатай дифференциал оператор

$$\partial_{x,\rho}^a f(U) = \frac{d}{dt} f(U_t)|_{t=0}, \quad (5)$$

$$U_t(y, \sigma) = \begin{cases} e^{tT^a} U(x, \rho), & \text{if } (y, \rho) = (x, \rho) \\ U(y, \rho), & \text{бусад үед} \end{cases}$$

-ыг хамгийн эхэнд тодорхойлно. Энд T^a нь $SU(3)$ генератор. Дараа нь энэ тодорхойлолт ба плакетын илэрхийлэл мөн үржвэрийн дүрэм зэргийг хэрэглэсний дараа Вилсон урсгалын тэгшитгэлийн гол хэсгийг тооцвол $\partial_{x,\rho} S_W(U_t) = \frac{1}{2g_0^2} (\Omega(x, \rho) - \Omega^\dagger(x, \rho)) - \frac{1}{6g_0^2} \text{Tr} (\Omega(x, \rho) - \Omega^\dagger(x, \rho))$,

$$\Omega(x, \rho) = U(x, \rho) W^\dagger(x, \rho) \quad (6)$$

гэсэн маш компакт хэлбэрт орно. Энд $W^\dagger(x, \rho)$ нь гурван линк хувьсагчийн үржвэр буюу степл хувьсагчийн тодорхойлогч байна. Одоо латтис дээрх урсгалын тэгшитгэл нь

$$\frac{d}{dt} U_t(x, \mu) = \left[\frac{1}{2} (\Omega(x, \mu) - \Omega^\dagger(x, \mu)) - \frac{1}{6} \text{Tr} (\Omega(x, \mu) - \Omega^\dagger(x, \mu)) \right] U_t(x, \mu) \quad (7)$$

гэсэн хэлбэртэй болно. Энэ томьёоллыг илүү дэлгэрэнгүйгээр [2]-оос харах боломжтой. Урсгалын тэгшитгэлийн энэ томьёолол нь энгийн линк хувьсагчдаар бүрэн тодорхойлогдох бөгөөд тоон аргаар бүрэн шийдэх боломжтой байдаг.

Энэ (6) тэгшитгэлийн хэлбэр нь урсгалт хугацаа t -ээс хамааран монотонор буурдаг функц байна. Үүнээс урсгал нь хязгааргүй бага хэмжээтэй маш олон линкүүдийн нялалтаар бүтээгдсэн юм шиг буюу латтис орныг гөлгөр болгож байна гэж үзнэ [3]. Ингэснээр хэт ягаан муж дахь флуктуацыг шүүх боломжтой болно.

ТООН ТООЦООЛЛЫН ҮНДЭС

Одоо бидний гол шийдэх ажил (7) томьёогоор өгөгдсөн нэгдүгээр эрэмбийн дифференциал тэгшитгэл

$$\frac{d}{dt} U_t(x, \mu) = f(U) U_t(x, \mu)$$

-ийг бодох ажил болно. Үүний тулд тооцон бодох арга хэрэглэнэ. Олон янзын аргачлал байдаг бөгөөд тэдгээрийн дундаас хамгийн нарийвчлал сайтай хурдан шийдэх арга Рунге-Куттаг бид өөрсдийн ажилдаа авч ашигласан. Энэ хэсэгт бид уг тоон аргаар бодлогыг хэрхэн шийдэх аргачлал болон өөрсдийн програмдаа ашиглах алгоритмын онцлогуудын талаар авч үзэх болно.

Рунге-Кутта

Ерөнхий тохиолдолд аналитикаар шийдийг нь олох боломжгүй байхад бид тооцон бодох аргачлал хэрэглэдэг билээ. Ердийн дифференциал тэгшитгэл

$$y'(t) = F(t, y(t)), y(t_0) = y_0, y: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^d \quad (8)$$

-ийг анхны утгаас нь хөөж ойролцоолон бодох аргачлалыг Рунге-Кутта арга гэнэ. Энд $y(t)$ нь аналитик шийд, t_n тасралттай цэгүүд дээр тооцоолсон ойролцоо шийдийг y_n гэвэл S алхамтай Рунге-Кутта арга нь дээрх тэгшитгэлийн шийдийг Хүснэгт 1.-д өгөгдсөн алгоритмаар тооцоолно.

Хүснэгт 1. Ерөнхий Рунге-Кутта аргын алгоритм.

For $r=1:S$ **do**

$$T_r = h c_r + t_n$$

$$Y_r = h \sum_{k=1}^S a_{rk} F_k + y_n$$

$$F_r = h F(T_r, Y_r)$$

end

$$y_{n+1} = \sum_{k=1}^S b_k F_k + y_n$$

Энд h нь дараалсан t_n -ээс t_{n+1} -ийн хоорондох алхам, a_{rk}, c_r аргачлал бүрт өөр өөрөөр интеграл

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} F(t, y(t)) dt$$

-д хамаарах талбайн хэмжээснээс хамааруулан олж болох тогтмол. Үүнээс үзэхэд ерөнхий Рунге-Кутта арга нь тодорхойгүй байдаг. Харин $r \geq k$ үед $a_{rk} = 0$ болж энэ арга нь илэрхий болно. Гурван алхамтай Рунге-Кутта арга

$$\begin{aligned}
y_{n+1} &= y_n + \frac{1}{6}F_1 + \frac{4}{6}F_2 + \frac{1}{6}F_3 \\
F_1 &= hF(t_n, y_n) \\
F_2 &= hF(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}F_1) \\
F_3 &= hF(t_n + h, y_n - hF_1 + 2hF_2)
\end{aligned}$$

гэсэн хэлбэртэй байна.

Бид энэ ажлаар $SU(3)$ Ли бүлэгт тодорхойлогдсон дифференциал тэгшитгэлийг шийдэх гэж байгаа билээ. Нарийн тодорхойлбол

$$F(y) = \dot{y} = A(y)y, \quad y \in G, \quad A(y) \in \mathfrak{g} \quad (9)$$

байх ба энд G нь Ли бүлэг, $\mathfrak{g}$ Ли алгебр байна. Энэ үед $y \in G$, $z \in G$ байх тохиолдолд $y + hA(z)z \notin G$ байх учир бид (8)-д ашигласан аргаа шууд (9)-д ашиглах боломжгүй юм. Үүнийг бид Гроуч-Гроссман [7] арга ашиглан шийднэ. Энэ нь шинэчлэл хийх хэсэг $hA(y)$ -ийг $e^{hA(z)}y$ -ээр сольж оруулснаар шийдэгдэнэ. Энэ нь маш олон тооны экспоненциал бодох шаардлага үүсгэдэг боловч бид эдгээрийг Мунте-Кассын арга [8] ашиглан хялбархан шийднэ. Ингээд Ли бүлгийн элементүүдийн хувьд бичсэн гурван түвшинт Рунге-Кутта алгоритмыг Хүснэгт 2-д харуулав.

Хүснэгт 2. Ли бүлгийн элементүүдийн хувьд бичсэн гурван түвшинт Рунге-Кутта алгоритм.

For $r=1:S$ **do**

$$Y_r = \exp(\sum_k \alpha_{rj}^k F_k) \dots \exp(\sum_k \alpha_{r1}^k F_k) y_n$$

$$F_r = hF_{Y_r} = hA(Y_r)$$

end

$$y_{n+1} = \exp(\sum_k \beta_j^k F_k) \dots \exp(\sum_k \beta_1^k F_k) y_n$$

Энд $\alpha_r^k = \sum_{j=1}^J \alpha_{rj}^k$, $b^k = \sum_{j=1}^J \beta_j^k$ байна. Бид тусгай тохиолдолд Ли бүлэг нь шугаман огторгуйтай тэнцүү гэвэл экспоненциалууд нь $\exp(hF_p)y_n = y_n + hF_p$ гэж бичигдэж болно. Энэ үед энэ алгоритм энгийн стандарт Рунге-Кутта аргын алгоритм болно.

[1]-д Мартин-Люшер илэрхий гурван гишүүнт Рунге-Куттагийн коэффициентуудыг

$$\begin{aligned}
y_{n+\epsilon} &= \exp\left(\frac{3}{4}F_2 - \frac{8}{9}F_1 + \frac{17}{36}F_0\right)Y_2 \\
Y_0 &= y_n \\
Y_1 &= \exp\left(\frac{1}{4}F_0\right)Y_0 \\
Y_2 &= \exp\left(\frac{8}{9}F_1 + \frac{17}{36}F_0\right)Y_1 \\
F_i &= \epsilon A(Y_i)
\end{aligned}$$

гэж олсон байдаг. Энд ϵ нь алхмын хэмжээ юм. Нийт үйлдлийн алдаа ϵ^3 байхад энэ үед үүсэх ойролцооллын алдаа нь ϵ^4 байна.

Програмчлахад хэрэгтэй алхмууд

Дээрх Вилсон урсгалын програм нь маш их тооцооллын хугацаа шаарддаг. Тиймээс бид эл аргыг програмчлахдаа параллельчлэн хурдасгах шаардлагатай тулгардаг. Үүний тулд бид эхлээд латтисыг нэг GPU-ний цөмүүд дээр, эсвэл салангид олон GPU дээр дэд хэсгүүд болгон хуваарилна. Бидний хувьд нэг GPU-д зориулан програмаа зохиосон билээ. Үүний дараа линк нялалтыг бүх дэд латтисууд дээр параллелиар гүйцэтгэнэ.

Хүснэгт 3. Рунге-Кутта аргыг програмчлах дараалал.

1. Эхний гейж орны линк хувьсагчдын утгаар F_0 -ийн утгыг тооцоолж хоёр дахь гейж оронд хадгална.
2. Өмнө тооцоолсон F_0 -оор Y_1 -ийг тооцоолж нэгдүгээр гейж оронд хадгална.
3. Халонууд солилцох.
4. 1 болон 2-р гейж орныг ашиглан $\frac{8}{9}F_1 - \frac{17}{36}F_0$ -ийг тооцоолж үр дүнг 2-р оронд хадгална.
5. 2-р оронд хадгалсан үр дүнгүүдийн экспоненциалаар Y_2 -ийг тооцоолж үр дүнг 1-рт хадгална.
6. Халонууд солилцох.
7. 1 болон 2-р гейж орныг ашиглан эцсийн нялагдсан орон $y_{n+\epsilon}$ -ийг тооцоолно.

Энэ үед нэг дэд латтис дотор тооцоолол хийхэд тухайн үйлдэлтэй холбоотой латтисын холбоос шугамуудын өгөгдөл л зөвхөн хэрэгтэй байдаг. Тиймээс энэ орчинд хийж буй үйлдлүүдийн хооронд ямар нэг өгөгдөл шилжүүлэх шаардлага гардаггүй. Харин дэд латтисуудын захын холбоос шугамуудад эргэн тойрныхоо үйлдлүүдээс мэдээлэл хүлээж авах, хувиуллах шаардлага үүснэ. Иймд захын холбоосууд дээрх бүх үйлдлүүдийг хало (halo – гэрэлт хүрээ) гэж нэрлэгдэх нэмэлт санах ойн огторгуйд байршуулах шаардлагатай болдог. Эндээс мэдээлэл солилцоноор дэд латтисын захын холбоос хувьсагчид хоорондоо холбогдоно.

Үүнийг солилцооны халонууд (exchange halos) гэнэ.

Сүүлд нь гуравдугаар эрэмбийн Рунге-Кутта аргыг програмчилна.

Рунге-Кутта аргыг програмчлахдаа эхлээд хоёр тусдаа гейж орныг тодорхойлно. Эхний гейж орон нь нялагдсан гейж орныг хадгална. Харин нөгөөх нь Рунге-Кутта алгоритм дахь экспонентуудын үр дүнд үүсэх түр зуурын орны утгуудыг хадгална. Рунге-Кутта алгоритм нь Хүснэгт 3.-ээр үзүүлсэн схемийн дагуу ажиллана.

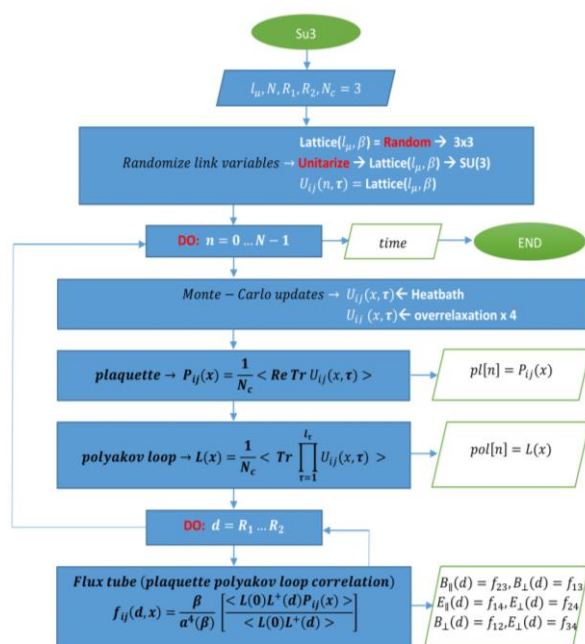
Энэ алгоритмыг хүссэн урсгалт хугацаа $t_d = n\epsilon$ болтол n удаа давтана. Энэ үед сонгож авсан урсгалт хугацааны утгууд дээрх урсгалт орны конфигурацуудыг дата хэлбэрээр хадгалж авч ашиглана. Эдгээрийг урсац конфигурац гэе.

ПРОГРАМЧЛАЛ

Энэ ажлыг гүйцэтгэхдээ бид хоёр салангид програм ашиглан хэмжилтийн алдааг бууруулах аргачлал боловсруулсан. Эхний програм нь урсгалын хоолойн түгэлтийг бодоход зориулан өөрсдөө зохиосон $SU(3)$ CUDA програм. Хоёр дахь нь Бийлефелдийн их сургуульд зохиогдсон нэг GPU-нд зориулсан ParallelGPUCode гэх програм. Эхний програмаар цэвэр гейж орны конфигурацуудыг тооцоолон хадгалаад дараа нь түүнийгээ хоёр дахь програмаар бодуулж орны урсац конфигурацуудыг гаргаж авсан. Эцэст нь эхний програмаараа уг урсац конфигурацуудаараа уншуулан урсгалын хоолойг бодуулж үр дүн хэсэгт тодорхойлсон операторуудыг тооцоолсон.

Манай програм

Бид өмнө ашиглаж байсан CUDA хэлээр бичигдсэн $SU(2)$ цэвэр гейж онолын програм болон Португалийн физикчдийн зохиосон $SU(3)$ цэвэр гейж онолын програм [9]-ыг ашиглан өөрсдийн шинэ тооцооны програмаа боловсруулсан. Манай програм нь цэвэр гейж конфигурацуудыг нэг псевдо хитбат дөрвөн оверрелаксешн алгоритм ашиглан үүсгэдэг бөгөөд уг конфигурацуудаараа плакет, Поляков гогцооны магадлалын утга, Поляков гогцооны корреляц, урсгалын хоолойн түгэлтийг хэмждэг. Програмын ерөнхий алгоритмыг Зураг 1.-д харууллаа. Манай програмын талаар илүү их мэдээллийг [6] –аас унших боломжтой.



Зураг 1. Урсгалын хоолой хэмжих $SU(3)$ програмын алгоритм.

ParallelGPUCode

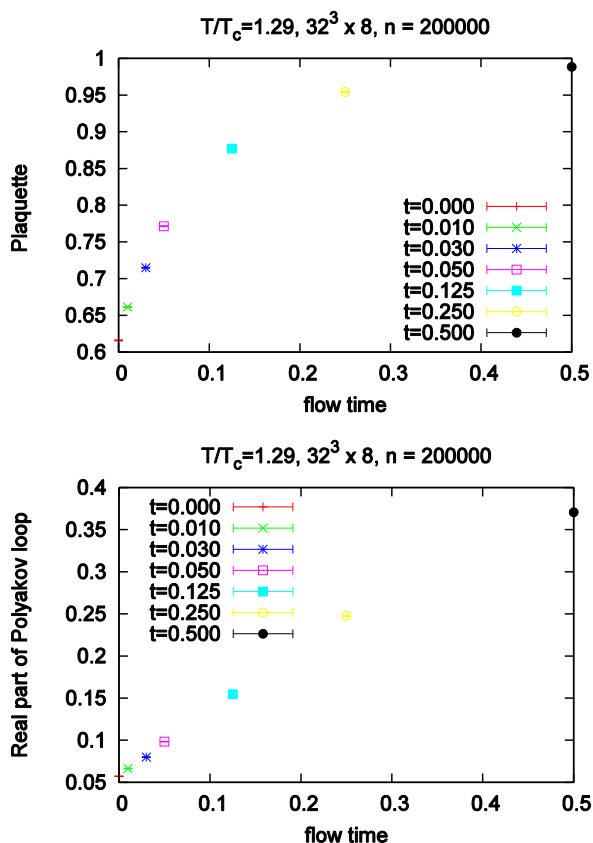
Энэ нь Бийлефелдийн их сургуулийн физикийн тэнхмийн латтис судалгааны багийн нэг GPU –нд зориулан зохиосон багц програм юм. Энэхүү програмыг 2018 оны хавар ХБНГУ-д гүйцэтгэсэн хоёр сарын томилолтын хугацаанд эзэмшиж, ажиллагааг шалгаж, зарим нэг алдааг засаж тохируулах ажилд оролцон, цаашид судалгаандаа ашиглах боломжтой болсон билээ. Энэ програмын нэг чухал боломж нь цэвэр гейж орны болон динамик кваркын хэмжилтүүдээс үүссэн конфигурацуудын датаг урсац конфигурац болгон тооцоолох боломж юм. Энэ програм нь ажиллах зарчмын хувьд латтисыг дэд хэсгүүдэд хувааж, хало функционал ажиллагаагаар параллельчлэгдэж, өмнөх тоон тооцооллын үндэс бүлэгт загварчилсан схемийн дагуу ажилладаг. Энэ програмын холболтын интерфейс болон дата унших, бичих дэд хэсгүүд нь МПИ (MPI - Messaging Passing Interface) –д суурилсан байдаг.

Мөн програм нь бүхий л латтис тооцоололд шаардлагатай суурь багцуудыг агуулсан бөгөөд цаашид бид өөрсдийн судалгааны операторыг энэхүү програмын нэг хэсэг болгон програмчлах болно.

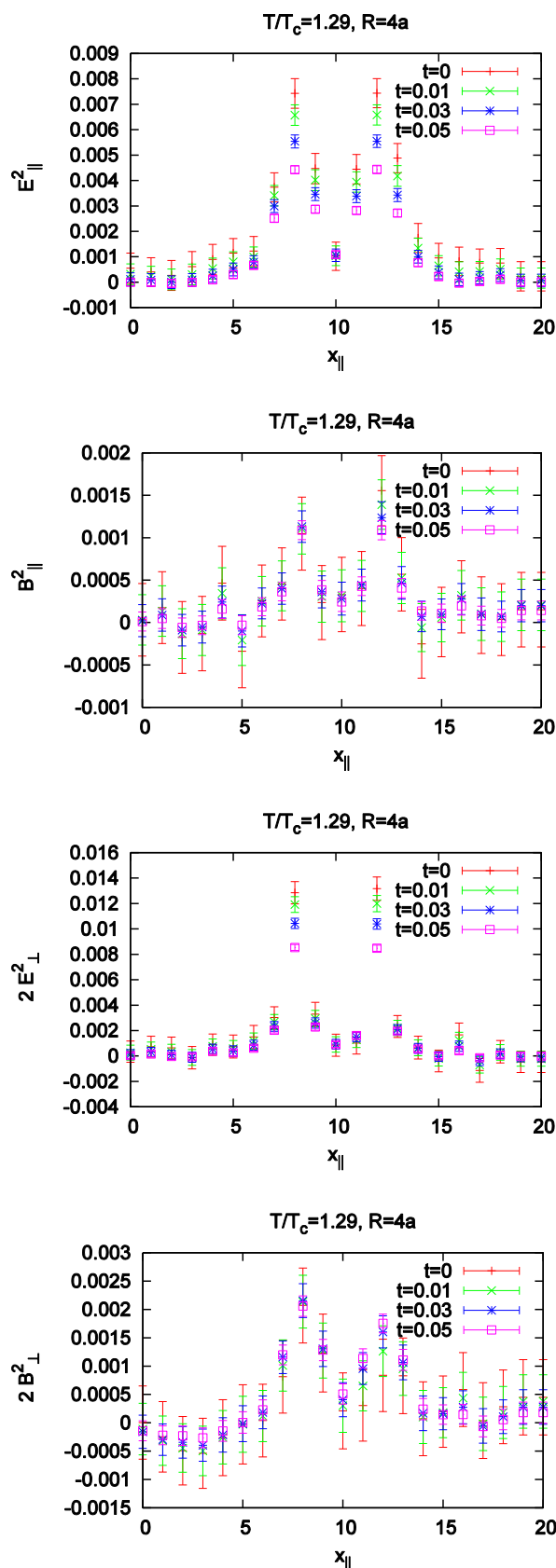
ҮР ДҮН

Энэ ажлаар бид Вилсон урсгалын аргаар хэмжилтийн алдааг бууруулах аргачлалыг боловсруулж, тооцоолол хийж гарсан үр дүнд нь

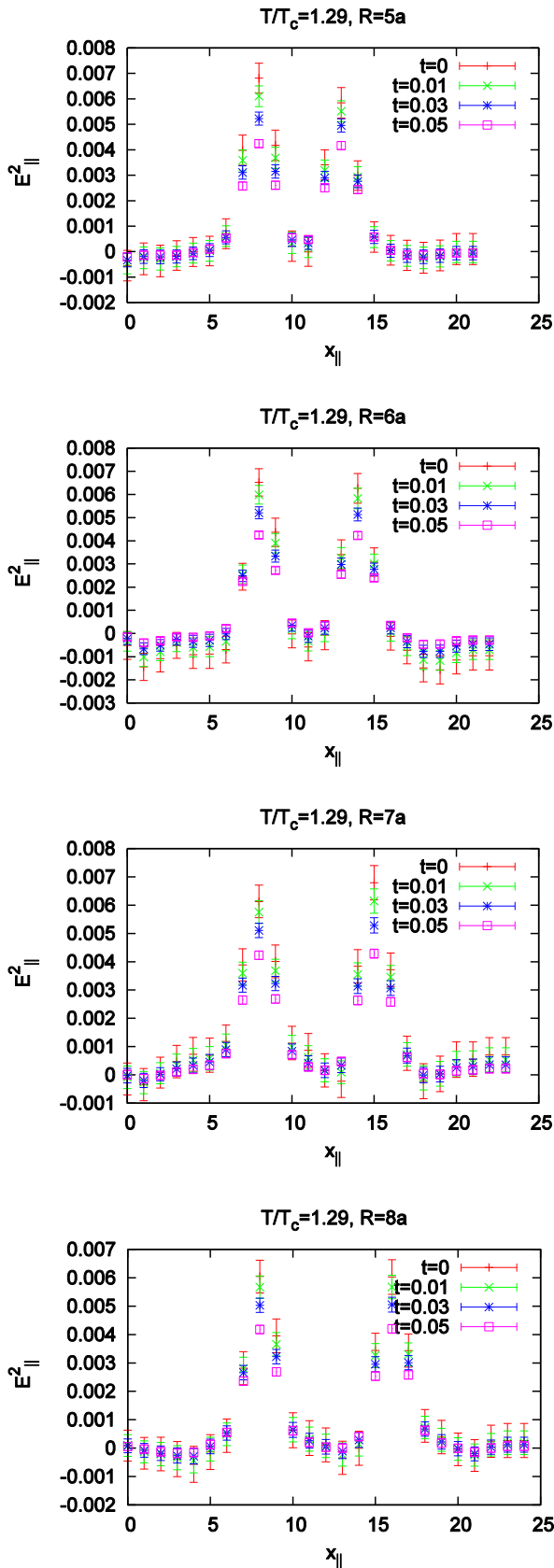
шинжилгээ хийлээ. Тухайн аргачлал маань зөв ажиллаж буй эсэхийг шалгахдаа Бийлефельдийн их сургуульд цэвэр гейж орны конфигурацын алдааг бууруулж гарган авсан плакет болон Поляков гогцооны магадлалын утгуудыг өөрсдийн програмаар дахин тооцоолж гарган авсан утгуудтайгаа харьцуулж үзсэн. Энэ үед хэмжигдэхүүний утгууд таслалаас хойш 5 болон 6 дахь орон хүртлээ таарч, түүнээс хойш зөрж байсан. Энэ нь энгийн дабл презишн (double precision) ашиглан хийж байгаа тооцоонд хангалттай нарийн үр дүн тул бидний програмын ажиллагаа хэвийн гэж үзэхэд хүрсэн. Бидний тодорхойлсон утгууд Зураг 2.-д харагдаж байна.



Зураг 2. Урсгалт хугацаанаас хамаарах плакет болон Поляков гогцооны магадлалын утгууд.



Зураг 3. Урсгалт хугацаанаас хамаарах урсгалын хоолойн түгэлт.



Зураг 4. Өөр өөр кварк хоорондын зайн дээрх өнгөт цахилгаан орны параллель байгуулагчийн түгэлт.

Энэ зурагт $32^3 \times 8$ эзлэхүүнтэй латтис дээр температурын $T/T_c=1.29$ утгад 200000 Монте-Карло давталттай үед цэвэр гейж орны конфигурацуудыг үүсгэж, түүнийхээ урсац

утгыг $t=0, 0.01, 0.03, 0.05, 0.125, 0.25, 0.5$ гэсэн утгууд дээр тооцоолж, тус бүрд нь операторуудаа тодорхойлсон үр дүнгүүд харагдаж байна.

Дараагийн алхамд Вилсон урсгалын арга коррелятор хэмжигдэхүүн болох урсгалын хоолойн түгэлтийн хувьд алдааг хэрхэн бууруулж байгааг судлах зорилгоор дээрх үүсгэж авсан цэвэр гейж орны конфигурацуудаараа урсгалт хугацааны гурван өөр утга $t=0.01, 0.03, 0.05$ -д кварк хоорондын зай $R=4a$ үед урсгалын хоолойн түгэлтийг тооцоолсон. Эдгээр утгууд болон алдаа бууруулах арга хэрэглээгүй үр дүнг Зураг 3.-д харуулсан байна. Улаан нэмэх тэмдгээр $t=0$, ногоон битүү дөрвөлжин цэгээр $t=0.01$, хөх хэрээсэлсэн дөрвөлжин цэгээр $t=0.03$, ягаан хоосон дөрвөлжин цэгээр $t=0.05$ -ийн утгыг тус тус тэмдэглэв. Хамгийн эхний плот өнгөт цахилгаан орны параллель байгуулагч, хоёр дахь плот өнгөт соронзон орны параллель байгуулагч харин гуравдугаар плотод цахилгаан орны хөндлөн түгэлтийг сүүлчийн плотод соронзон орны хөндлөн түгэлтийг хоёр кваркыг холбосон тэнхлэгийн дагуу дүрслэв. Бүх плотууд урсгалт хугацааны өсөх утгад сигнал-шуугианы харьцаа улам ихсэж, сайн үр дүн гарч байгааг харуулж байна. Гэвч тус бүрийнх нь тоон утгууд буурч байгаа нь зарим чухал дохио алдагдаж байгааг харуулсан байна. Үүнээс бид урсгалт хугацааны тохирох утгыг маш нарийн тодорхойлох шаардлагатай гэдэг нь харагдаж байна.

Эцэст нь бид урсгалын хоолойн түгэлтийн шуугиан бууруулахад кварк хоорондын зайнаас хамаарсан өөрчлөлт орох эсэхийг шалгасан. Зураг 4.-д $R=5a, 6a, 7a, 8a$ гэсэн дөрвөн өөр зайн дээрх параллель өнгөт цахилгаан орны түгэлтийг хоёр кваркыг холбосон шулууны дагуух тэнхлэг дээр нь $t=0, 0.01, 0.03, 0.05$ утгууд дээр дүрсэлж, харуулсан байна. Бүх плотууд дээрх урсгалт хугацаанаас хамаарсан урсгалын хоолойн түгэлтэд ямар нэг мэдэгдэхүйц корреляц ажиглагдахгүй байна. Өөрөөр хэлбэл Вилсон урсгалын арга нь бүх зайн утгад ижилхэн ажиллаж байгаа нь програмыг ямар нэг алдаагүй ажиллаж байгааг харуулж байна.

ДҮГНЭЛТ

Вилсон урсгалын аргыг ашиглан хэмжилтийн шуугианыг дарах шинэ аргачлалыг өөрсдийн програмд нэвтрүүллээ. Энэ арга нь дараах үе шаттайгаар ажиллана.

1. Өөрсдийн зохиосон програмаар цэвэр гейж конфигурацыг дата хэлбэрээр үүсгэх.
2. Бийлефелдийн ParallelGPUCode –ийг ашиглан урсац конфигурац болгон бодуулж дата болгон хадгалж авах.
3. Өөрсдийн програмд уг датаг уншуулж холбогдох операторуудыг бодуулах.

Цэвэр гейж орны конфигурацуудыг анх $32^3 \times 8$ эзлэхүүнтэй латтис дээр температурын $T/T_c=1.29$ утгад 200000 Монте-Карло шинэчлэлээр үүсгэсэн бөгөөд урсац конфигурацуудыг $t=0.01, 0.03, 0.05, 0.125, 0.25, 0.5$ гэсэн утгууд дээр бодуулж хадгалж авсан. Эдгээр конфигурацуудаараа плакет болон Поляков гогцооны магадлалын утгууд, урсгалын хоолойн түгэлтийг хэмжиж холбогдох дүгнэлтүүдийг хийлээ. Эхний хоёр магадлалын утгаас програмын ажиллагаа хэвийн гэж дүгнэсэн. Харин коррелятор хэмжигдэхүүн болох урсгалын хоолойн үр дүнгээс харахад урсгалт хугацааны утга өсөх тусам дохио шуугианы харьцаа мэдэгдэхүйц ихсэж байна. Гэвч урсгалт хугацааны утга өсөх үедээ дохионы зарим хэсгийг устгаж байна. Иймээс бид цаашид энэ аргыг хэрэглэхдээ урсгалт хугацааг нарийн нягталж, сонгох хэрэгтэй гэдэг нь энэ ажлаас харагдаж байна.

ТАЛАРХАЛ

“Кварк конфайнмент үзэгдлийн механизмын латтис онолын судалгаа” суурь судалгааны төслийг санхүүжүүлж, уг ажлыг гүйцэтгэх боломж олгосон Монгол улсын Шинжлэх ухаан технологийн санд талархал илэрхийлье!

Мөн санхүү, програм болон техник хангамжийн тал дээр харамгүй тусалсан ХБНГУ-ын Бийлефелдийн их сургуулийн физикийн тэнхим, физикийн болон програмчлалын асуудлуудыг хэлэлцэж, нөхөрсөгөөр хамтран ажилласан тус тэнхимийн латтис группын хамт олонд талархал илэрхийлье!

ИШЛЭЛ

- [1] M. Luescher, Properties and uses of the Wilson flow in lattice QCD, Journal of High Energy Physics 8, p.71 (2010).
- [2] L. Mazur, Applications of the Gradient Flow method in Lattice QCD, Master dissertation, (2017).
- [3] C. Morningstar, M. Peardon, Analytic smearing of SU(3) link variables in lattice QCD, Phys. Rev. D69 (2004).
- [4] A. Ramos, The gradient flow in a twisted box, PoS Lattice2013, p. 053, (2014).
- [5] M. Luescher, Trivializing Maps, the Wilson Flow and the HMC Algorithm, Communications in Mathematical Physics 293, p. 899, (2010).
- [6] S. Chagdaa, B. Purev, E. Galsandorj, Results of programming static meson system in SU(3) lattice gauge theory, submitted into Journal of Mongolian Physical Society, (2017).
- [7] P. E. Crouch, R. Grossman, Numerical integration of ordinary differential equations on manifolds, Journal of NonLinear Science 3, p. 1– 33, (1993).
- [8] H. Munthe-Kaas, High order Runge-Kutta methods on manifolds, Applied Numerical Mathematics 29.1, p. 115 –127, (1999).
- [9] P. Bicudo, M. Cardoso, N. Cardoso, SU(3) quark-antiquark QCD flux tube, arXiv:1401.6008 [hep-lat], (2014).

Жигд бус голомттой, цагираган өндөр температурын хийн хөргөлттэй реакторын нейтроник анализ

Т.Жамъянсүрэн^{a,*}, С.Одмаа^{a,b}

^aЦөмийн физикийн судалгааны төв, Монгол улсын их сургууль

^bХими, биологийн инженерчлэлийн тэнхим, Хэрэглээний шинжлэх ухаан, инженерчлэлийн сургууль, Монгол улсын их сургууль

Реакторыг амжилттай унтраасны дараа голомтод хуримтлагдсан хуваагдлын бүтээгдэхүүнүүдийн задралаас үүсэх дулааныг идэвхгүйгээр зайлуулах чадвартай, цагираган хийцтэй, төвдөө нэг ойлгогчин блокой, призмэн блокуудаас бүрдэх 100 МВт дулааны чадалтай, 1123 К температурт ажиллах ӨТХР-ийн голомтын дизайныг хийж түлш, шатдаг хорлолт материал жигд байх үеийн нейтроник үзүүлэлтүүдийг өмнөх ажилд гарган авсан. Энэхүү ажилд голомтын дизайныг илүү оновчтой болгохын тулд түлш, шатдаг хорлолт материалын агууламжыг жигд бус болгон өөрчилж реактивитийн хугацааны өөрчлөлтийг бууруулах тооцооллуудыг гүйцэтгэн, реактор ажиллах нийт хугацааны туршид үүссэн бага хэмжээний реактивитийг удирдлагын савааг голомтод оруулах замаар хангалттай хэмжээнд бууруулж, чадлын пикийн факторын түгэлтийг жигд болгосон. Түүнчлэн реактивитийн температурын болон чадлын коэффициентыг үнэлэв.

Түлхүүр үг: шатдаг хорлолт материал, удирдлагын саваа, реактивитийн температурын коэффициент, реактивитийн чадлын коэффициент.

1. ОРШИЛ

Цөмийн эрчим хүчийг нийтийн хэрэгцээнд ашиглаад хагас зуун жилийг үдсэн хэдий ч цөмийн эрчим хүчний реакторын аюулгүй байдлыг бүрэн хангах тал дээр асуудалтай байсаар ирсэн. 2011 онд Фүкүшима Дай-ичи цөмийн цахилгаан станцын ослын дараанаас дэвшилтэт дизайнтай, аюулгүй байдлын шаардлагыг өндөр түвшинд хангасан бага, дунд чадлын реакторын голомтын дизайнуудыг сонирхон судлах нь ихэссэн. Дэвшилтэт дизайнтай буюу IV үеийн гэж нэрлэгдэх цөмийн эрчим хүчний реакторууд нь аюулгүй байдлыг хангах тал дээр төрөлхийн аюулгүй шинж чанартай буюу байгалийн хуулиар өөрийгөө зохицуулж удирддаг загварын шийдлүүд дээр үндэслэж байгаа нь дэвшилтэт реакторын шинэ шийдэл болж байна. Ялангуяа түлш, хийцийн материалын физик, химийн шинж чанар тэдгээрийн хоорондын зохицол, дулаан зөөгчийн шинэ шийдэл, осол болох нөхцөлүүдийг багасгах боломжууд зэргийг бүгдийг нь багтаасан дизайныг боловсруулж байна [1].

Бидний судалж байгаа Өндөр Температурын Хийн Хөргөлттэй Реактор (ӨТХР) нь өндөр температурыг (1873 К) даах чадвартай керамик

давхаргууд бүхий TRISO түлш, дулаан багтаамж өндөртэй бал чулуун голомт, гели инертийн хийн хөргүүртэй учраас хэвийн бус ажиллагааны үед голомт болон хөргүүрийн температур хурдан ихсэхгүй, осолд хүргэх магадлал бага байдаг. Ялангуяа бал чулуу нь нейтрон шингээлт бага, цацрагийн нөлөөллөөс болж материалын өөрчлөлт нь бага буюу тогтмол, дулаан дамжуулах чадвар сайн, дулаан багтаамж өндөртэй зэрэг онцлогуудтай. Үүнээс гадна бал чулуу нь нейтроны эдийн засгийг сайжруулснаар ажиллах хугацааг уртасгадаг[2]. Бид өмнөх судалгааны ажлуудаар реакторыг амжилттай унтраасны дараа голомтонд хуримтлагдсан хуваагдлын бүтээгдэхүүнүүдийн задралаас үүсэх дулааныг идэвхгүйгээр зайлуулах чадвартай, голомтын төвдөө нэг блокон ойлгогчтой, газар дээр байрлах призм төрлийн ӨТХР-ийн дизайны параметруудийн хамаарлыг гарган авч 100 МВт-ийн дулааны чадалтай, 2.49 м голомтын эквивалент радиустай, 6.38 м эффектив өндөртэй, төвийн ойлгогчийн радиус 0.18 м, голомтын дундаж чадлын нягт 0.82 Вт/см³ байх, 20% баяжуулсан UO₂ бүхий TRISO түлш ашигласан голомтын дизайныг хийж, критик байдлын болон түлшний шаталтын тооцооллыг гүйцэтгэсэн. Үүний дараа реактор ажиллаж эхлэх үеийн илүүдэл

* Electronic address: t.jamiyansuren@gmail.com

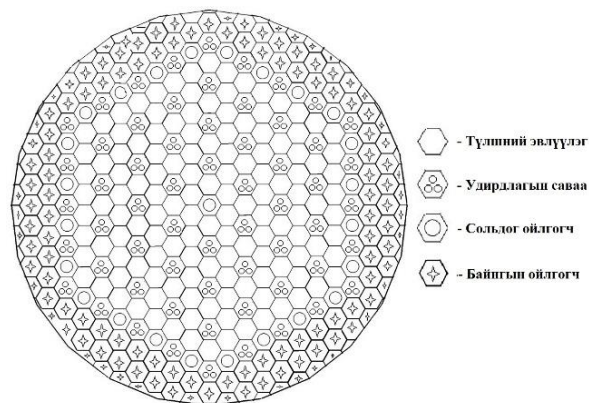
реактивитийг бууруулахын тулд шатдаг хорлолт материал бүхий бөөмсийг голомтонд жигд агууламжтайгаар нэмж өгөх замаар реактивитийн хугацааны өөрчлөлтийг жигдрүүлэх оролдлогын тооцооллуудыг хийсэн [3, 4].

Энэ ажилд голомтыг илүү оновчтой болгож ажиллах хугацааны турш илүүдэл реактивити болон чадлын пикийн факторын түгэлтийг жигд болгохын тулд голомт дахь түлш болон шатдаг хорлолт материалын агууламжийг өөрчлөх замаар тооцоолол хийв. Реактор ажиллах хугацааны турш реактивити бага зэрэг их байсныг бууруулахын тулд голомтонд удирдлагын саваа оруулан реактивитийн өөрчлөлтийг багасган, жигдрүүлсэн болно. Үүний дараа реактивитийн температурын болон чадлын коэффициентийг үнэлэв.

Энэхүү ажилд Японы Атомын Энергийн Агентлагаас хөгжүүлсэн тасралтгүй энергитэй нейтроны шилжилтийг Монте Карло аргаар тооцоолдог MVP2.0 [5] болон MVPBURN [6] компьютерийн кодуудыг цөмийн урвалын өгөгдлийн сан JENDL-4.0 [7]-ийн хамт ашиглан бүх нейтроник тооцооллыг хийсэн.

2. ГОЛОМТЫН ДИЗАЙН

Бид голомтын дизайндаа Японы Атомын Энергийн Агентлагын хөгжүүлсэн 30 МВт дулааны чадалтай Өндөр Температурын Тест Реакторын (ӨТТР) голомтыг бүрдүүлэгч түлшний эвлүүлгийн, удирдлагын савааны болон ойлгогчийн блокуудыг (өргөн = 36 см, өндөр = 58 см) ашигласан ба эдгээр зургаан өнцөгт призмэн блокуудыг давхарлан өрж цагираг хэлбэрийн голомтыг үүсгэнэ [3, 4, 9]. Тооцоололд эдгээр блокын хэмжээсийг өөрчлөөгүй тул эдгээрээс бүрдсэн голомтын хэмжээс дизайны параметруудийн хамаарлаас үнэлсэн утгуудаас бага зэрэг ялгаатай байж болно. Гэхдээ голомтын жинхэнэ эзлэхүүнтэй адил эзлэхүүнтэй байхаар эквивалент радиус болон эффектив өндрийн хэмжээсийг авсан [3]. Голомтын үндсэн үзүүлэлтүүдийг Хүснэгт 1-д, голомтын хөндлөн зүсмэгийг Зураг 1-д тус тус харуулав.



Зураг 1. Голомтын хэвтээ зүсмэг.

Хүснэгт 1. Голомтын үндсэн үзүүлэлтүүд

Дулааны чадал, МВт	100
Голомтын температур, К	1123
Төвийн ойлгогчийн радиус/зузаан, м	0.18/0.36
Дулаан дамжууллын тооцооллоос олсон голомтын радиус/өндөр, м	2.5/6.24
Голомтын эквивалент радиус/өндөр, м	2.47/6.38
Дундаж чадлын нягт (Вт/см ³)	0.82
Түлш	UO ₂
Баяжуулалт (wt%)	20%
Хөргүүрийн материал	Гелийн хий
Ойлгогчийн зузаан, м:	
· Дээд, доод	0.58
· Гадна захын	0.87
Түлшний эвлүүлгийн тоо	1452
Давхаргын тоо	11
Нэг давхаргад байх удирдлагын савааны тоо:	
· Голомт	36
· Ойлгогч	24
Нэг давхаргад байх төвийн/гаднах сольдог ойлгогчин блокын тоо	1/24

3. НЕЙТРОНИК АНАЛИЗ

3.1 Түлш шатдаг хорлолт материал жигд бус түгэлттэй үеийн тооцоолол

Бидний ашиглаж байгаа MVP2.0 код нь санамсаргүй процессийг тооцдог Монте Карло аргад үндэслэн бөөмсийн харилцан үйлчлэлийн процессуудын санамсаргүй үзэгдлийг үнэлдэг тул бодлого тус бүрт хамгийн оновчтой болгох нөхцлийг тогтоох шаардлагатай байдаг. Манай голомтын тооцооллын хувьд реакторт үүссэн нэг нейтрон 50000 ялгаатай харилцан үйлчлэл хийнэ, нийтдээ хуваагдлын 100 нейтроны санамсаргүй харилцан үйлчлэлийг авч үзэхээр нөхцлийг сонгосон. Статистик боловсруулалтын

үр дүнг сайжруулахын тулд эхний 20 нейтроны харилцан үйлчлэлийг тооцоогүй болно. Нейтроник тооцоолол бүрийг бүтэн голомтод гүйцэтгэсэн.

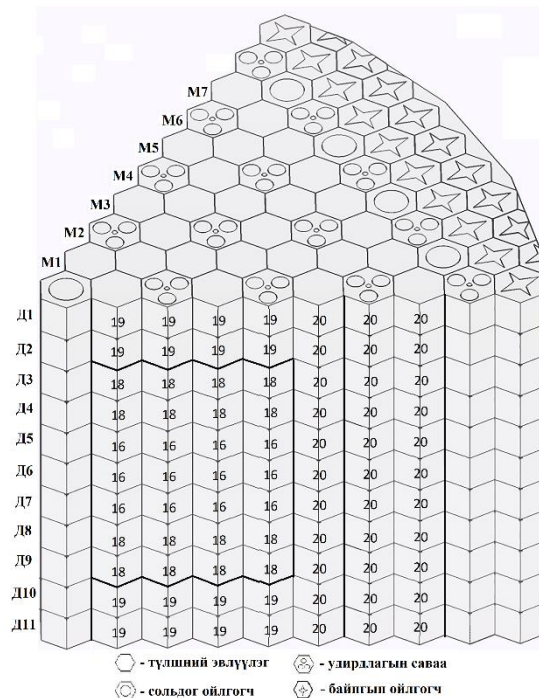
Реакторыг ажиллаж байх нийт хугацааны туршид критик төлөвт байх шаардлагатай. Ингэснээр реакторыг аюулгүй ажиллуулах үндсэн нөхцлийг хангаж байна гэж үздэг. Өмнөх ажилд [3, 4] гарган авсан дүнгээс харвал голомт даяар түлш, шатдаг хорлолт материалын агууламж жигд тохиолдолд реактор ажиллаж эхлэх үеийн эффектив нейтрон үржүүлэх фактор ($K_{эфф}$) буурсан хэдий ч, реактор ажиллах нийт хугацааны мужид илүүдэл реактивити үүсч, голомт дахь чадлын пикийн факторын түгэлт нь жигд бус хэвээр байсан (Зураг 3,4-т бас харуулав).

Хүснэгт 2. Голомт даяарх түлшний баяжуулалтын тархалтын хамгийн оновчтой нөхцөл. Д-давхарга, М-муж.

Түлшний баяжуулалт (%)							
	M1	M2	M3	M4	M5	M6	M7
Д1	19	19	19	19	20	20	20
Д2	19	19	19	19	20	20	20
Д3	18	18	18	18	20	20	20
Д4	18	18	18	18	20	20	20
Д5	16	16	16	16	20	20	20
Д6	16	16	16	16	20	20	20
Д7	16	16	16	16	20	20	20
Д8	18	18	18	18	20	20	20
Д9	18	18	18	18	20	20	20
Д10	19	19	19	19	20	20	20
Д11	19	19	19	19	20	20	20

Тиймээс голомт даяарх түлш, шатдаг хорлолт материалын агууламжийг өөрчлөн реактор ажиллах нийт хугацааны турш голомт даяарх илүүдэл реактивити, чадлын пикийн факторын түгэлтийг жигд болгох шаардлагатай. Чадлын пикийн фактор нь голомтын тухайн хэсгийн үйлдвэрлэх локал чадлын нягтыг дундаж чадлын нягтыг харьцуулсан харьцаагаар тодорхойлогдох ба голомтын хаана байрлаж байгаагаас шалтгаалан түлшний баяжуулалт болон нейтрон шингээгч огтлол өндөртэй материалын агууламжийг өөрчлөх замаар реактор ажиллах хугацааны турш реактивити болон чадлын пикийн факторын түгэлтийг жигдрүүлэх боломжтой. Голомтыг хэвтээ тэнхлэгийн дагуу долоон муж, босоо тэнхлэгийн

дагуу арван нэгэн давхарга буюу нийт 77 хэсэгт хуваан тооцооллуудыг гүйцэтгэсэн. Голомт дахь хэсэг тус бүрийн түлшний баяжуулалтын хамгийн оновчтой нөхцлийг Хүснэгт 2-т, голомтын зургааны нэг хэсгийн гурван хэмжээст зургийг Зураг 2-т харуулав.



Зураг 2. 1/6 голомтын гурван хэмжээст зураг: Д-давхарга, М-муж.

Зураг 4-д харуулсанчлан түлш, шатдаг хорлолт материал голомтод жигд агууламжтай үед голомтын төв хэсэгт чадлын пикийн фактор хамгийн их байгааг бид өмнөх ажилд харуулсан [4,8]. Учир нь голомтын төвд ойлгогч байрлуулснаар түүн рүү сарнисан нейтронууд голомтруу буцаж ойн хуваагдал нэмж явуулж байгаа тул тухайн хэсгийн дулааны энергитэй нейтроны тоо огцом ихсэж байна. Тиймээс төвийн ойлгогчийн ойролцоо байрлах түлшний баяжуулалтыг бууруулж, шатдаг хорлолт материалын агууламжийг өөрчилснөөр реактор ажиллах хугацааны турш реактивитийн өөрчлөлтийг тогтвортой байлгаж, чадлын пикийн факторын түгэлтийг жигдрүүлсэн. Реакторын голомтыг илүү оновчтой болгох үндсэн зорилго нь реакторыг ажиллах хугацааны туршид критик төлөвт байлгах, чадлын пикийн факторын түгэлтийг жигд байлгах учиртай. Реактор критик төлөвт ажилласнаар агшин зуурын критик ослоос зайлсхийж чадна.

Хүснэгт 3. Төвдөө ойлгогчтой реакторын нэгэн жигд болон нэгэн жигд биш голомтын нейтроник тооцооллын үр дүн.

№	Голомтын хэсэг	Түлшний баяжуулалт (wt%)	В ₄ С		Gd ₂ O ₃		Кэфф,0 (алдаа, %)	Δk/k-ийн ХИУ (%)	t _{голомт} (жил)	PPF-ийн ХИУ
			D _{ШХМ} (см)	V _{Түлш} /V _{ШХМ}	D _{ВР} (см)	V _{Түлш} /V _{ШХМ}				
1	Төвдөө	20	-	-	-	-	1.4977 (0.02)	33.23	26.4	2.87
	Дундаа									
	Захдаа									
2	Төвдөө	20	0.02	140	0.02	490	1.0337 (0.03)	3.83	19.9	2.94
	Дундаа									
	Захдаа									
3	Төвдөө	16-18	0.02	140	0.02	490	1.0096 (0.02)	2.57	19.3	2.23
	Дундаа	19-20								
	Захдаа	20								
4	Төвдөө	16-18	0.02	99	0.02	400	1.0067 (0.03)	0.94	22.0	1.85
	Дундаа	19-20		138		490				
	Захдаа	20		171		800				

Тайлбар:

ШХМ – Шатдаг хорлолт материал

D_{ШХМ}- ШХМ бөөмсийн диаметр

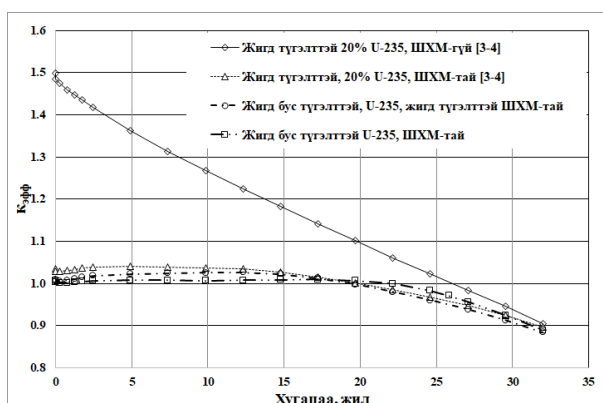
V_{Түлш}/V_{ШХМ}- голомт дэх түлш болон ШХМ-ийн

эзэлхүүний харьцаа

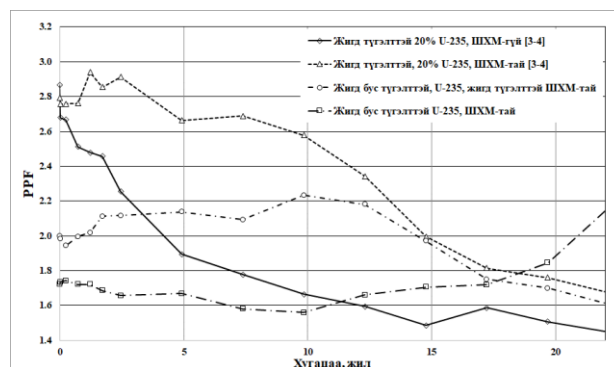
ХИУ-хамгийн их утга

PPF –чадлын пикийн фактор

Голомт дахь түлш, шатдаг хорлолт материалын жигд бус түгэлттэй үеийн тооцооны үр дүнгээс харвал реактор ажиллаж байгаа хугацааны нийт муж дахь илүүдэл реактивити жигдэрч ХИУ нь 33.23(Δk/k %)-аас 0.94(Δk/k %) хүртэл буурч голомт даяарх чадлын пикийн факторын түгэлт нэгэн жигд болсон. Реактор ажиллах хугацааны туршид Кэфф утгын жигд бус түгэлттэй үеийн нейтроник тооцооллын үр дүнг Хүснэгт 3 болон Зураг 4-д тус тус өгөв. Голомт даяарх чадлын пикийн факторын түгэлтийг хугацаанаас хамааруулан Зураг 4-д үзүүлэв.



Зураг 3. Реактор ажиллах нийт хугацааны турш дахь эффектив нейтрон үржүүлэх факторын өөрчлөлт.



Зураг 4. Реактор ажиллах нийт хугацааны турш дахь голомт даяарх чадлын пикийн факторын түгэлт.

3.2 Голомт руу удирдлагын саваа оруулах замаар илүүдэл реактивитийг бууруулах

Түлш болон шатдаг хорлолт материалын жигд бус түгэлттэй голомтын дизайныг гүйцэтгэсний дараа голомтын нийт ажиллах хугацаанд Кэфф буурсан хэдий ч, бага хэмжээний илүүдэл реактиви (>0.65 % Δk/k) хугацааны зарим мужид үүссэн хэвээр байна. Тиймээс илүүдэл реактивитийг дарахын тулд голомтод удирдлагын савааг оруулж болно. Удирдлагын савааны блок нь ӨТТР-ийн удирдлагын савааны дизайнтай адилхан [3, 4, 9]. ӨТХР-ийн голомтын дизайны тооцоололд ашиглагдаж байгаа удирдлагын савааны блоконд байх гурван нүх нь нейтрон шингээгч материалаар дүүргэгдсэн байдаг [3, 4, 8].

Эхлээд реакторын ажиллах хугацаанд голомт руу удирдлагын савааг ижил хэмжээтэй оруулсан. Дараа нь түлшний шаталтын алхам дахь эффектив нейтрон үржүүлэх факторын

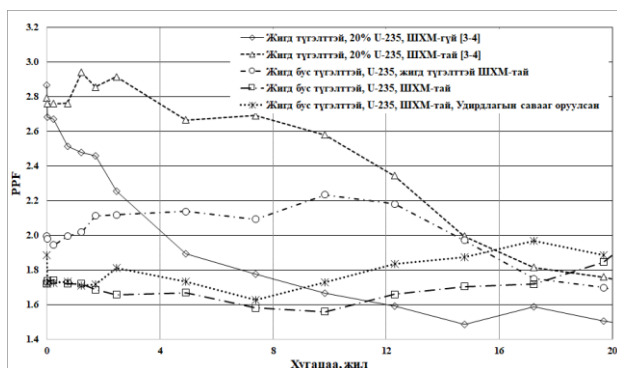
утгаас хамаарч голомтод оруулах хэмжээг өөрчлөн тооцооллуудыг явуулж хамгийн оновчтой нөхцлийг олов. Гарган авсан үр дүнг хүснэгт 4-д өгөв.

Хүснэгт 4. Төвдөө ойлгогчтой реакторын голомтын илүүдэл реактивити удирдлагын савааг голомт руу оруулан гүнээс хамаарч өөрчлөгдөх нь.

№	1		2		3		4	
t	d (см)	$\Delta k/k(\%)$	d (см)	$\Delta k/k(\%)$	t	d (см)	$\Delta k/k(\%)$	d (см)
0.00	0	0.67	1	0.45	0.00	0	0.67	1
0.02	0	0.28	1	0.11	0.02	0	0.28	1
0.25	0	0.17	1	-0.07	0.25	0	0.17	1
0.74	0	0.17	1	-0.06	0.74	0	0.17	1
1.23	0	0.29	1	0.11	1.23	0	0.29	1
1.72	0	0.43	1	0.24	1.72	0	0.43	1
2.46	0	0.68	1	0.47	2.46	0	0.68	1
4.92	0	0.77	1	0.61	4.92	0	0.77	1
7.38	0	0.70	1	0.48	7.38	0	0.70	1
9.84	0	0.70	1	0.48	9.84	0	0.70	1
12.30	0	0.78	1	0.60	12.30	0	0.78	1
14.76	0	0.88	1	0.72	14.76	0	0.88	1
17.22	0	0.94	1	0.70	17.22	0	0.94	1
19.68	0	0.66	1	0.39	19.68	0	0.66	1

Тайлбар: t- реакторын ажилласан хугацаа, d- удирдлагын саваануудыг голомт руу оруулсан гүн

Голомтод удирдлагын савааг оруулахад тухайн хэсгийн нейтроны урсгал бага зэрэг өөрчлөгдөж түүнээс хамаарч тухайн хэсэг дэх чадлын пикийн фактор өөрчлөгддөг. Тиймээс удирдлагын савааг голомтод оруулах үед голомт даяарх чадлын пикийн факторын түгэлтийг давхар хянаж байх шаардлагатай. Манай тохиолдолд голомтод удирдлагын савааг оруулсан хэдий ч савааны голомтод орсон хэмжээ бага учраас түүнээс хамаарч чадлын пикийн фактор өөрчлөгдөх хэмжээ маш бага байсан. Удирдлагын савааг голомтод оруулсны дараах голомт даяарх чадлын пикийн факторын түгэлтийг Зураг 5-д харуулав.



Зураг 5. Голомт даяарх чадлын пикийн факторын түгэлт хугацаанаас хамаарч өөрчлөгдөх нь.

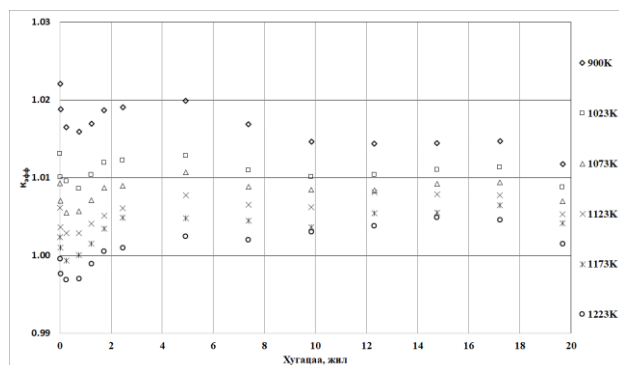
3.3 Реактивитийн температурын болон чадлын коэффициент

Реактор ажиллаж байх үед реактивитид нөлөөлөх хүчин зүйлийн нэг нь голомтын температур юм. Голомтын температураас хамаарч реактивити хир зэрэг өөрчлөгдөхийг реактивийн температурын өөрчлөлт харуулдаг. Өөрчлөлтийн хэмжээ, үзүүлэх нөлөөлөл нь реакторын аюулгүй байдал болон хяналтанд чухал ач холбогдолтой байдаг. Реакторын голомтын чадал болон температур өөрчлөгдснөөр эффектив нейтрон үржүүлэх фактор дагаж өөрчлөгддөг. Голомтын температур ихэсч, чадал буурахад $k_{эфф}$ буурах ба үүнийг реактивитийн температурын сөрөг коэффициент гэж нэрлэдэг. Реактивитийн температурын коэффициент нь дараах томъёогоор илэрхийлэгддэг.

$$\alpha_T = \frac{dp}{dT}$$

Төвдөө ойлгогчтой 100 МВт чадалтай 1123К температурт ажиллаж байгаа ӨТХР-ийн реактивитийн температурын коэффициентыг үнэлэхийн тулд өмнө гүйцэтгсэн тооцооллын үндсэн нөхцлүүд хэвээр хадгалагдаж, зөвхөн голомтын температурыг 50 К-ээр өөрчилж

тооцооллуудыг гүйцэтгэж реактивитийн температурын коэффициентийг олов. Реакторын ажиллах хугацааны турш эффектив нейтрон үржүүлэх фактор температураас хамаарсан хамаарлыг Зураг 6-д болон Хүснэгт 5-д харуулав.



Зураг 6. Эффектив нейтрон үржүүлэх фактор температураас хамаарч өөрчлөгдөх нь.

Үр дүнгээс харвал эффектив нейтрон үржүүлэх факторын температурын хамаарал нь эхний 10 жилийн турш өндөр хэлбэлзэлтэй байгаа ба үүнээс хойш илүү тогтвортой болсон байна. Голомтын температураас хамаарч нейтроны энергийн спектр өөрчлөгддөг. Реактор ажиллах тусам голомт дэх U^{238} -аас үүсэх Pu^{239} болон Pu^{241} ихээр хуримтлагдаж дулааны энергитэй нейтроныг шингээх тул хугацааны сүүл үед k_{eff} үл ялиг буурч тогтвортой болж байна.

Реактор ажиллах хугацааны турш реактивитийн коэффициентийн хамгийн их, хамгийн бага болон дундаж утгыг Хүснэгт 5-д бас харуулав.

Хүснэгт 5. Реактивитийн температурын коэффициент.

$V_{түлш,т}$ ГВтӨ/т н	$\alpha_T(рст/К)$				
	900K	1023K	1073K	1173K	1223K
10	-1.27	-0.54	-0.24	0.09	0.37
40	-0.83	-0.34	-0.19	0.20	0.23
80	-0.64	-0.30	-0.14	0.09	0.28
ХИУ	-0.61	-0.19	-0.02	0.29	0.48
ХБУ	-1.56	-0.60	-0.30	0.09	0.22
ДУ	-1.06	-0.43	-0.19	0.18	0.34

Тайлбар:

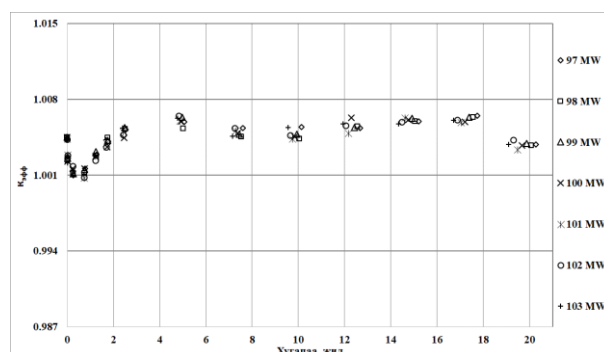
$V_{түлш,т}$	Түлшний шаталт	ХБУ	Хамгийн бага утга
ХИУ	Хамгийн их утга	ДУ	Дундаж утга

Үүнээс гадна реакторын аюулгүй байдлыг илэрхийлдэг өөр нэг коэффициент нь реактивитийн чадлын коэффициент юм. Энэ нь реакторын чадал нэгж хэмжээгээр өөрчлөгдөхөд

реактивити хир зэрэг өөрчлөгдөхийг харуулах ба дараах байдлаар илэрхийлдэг.

$$\alpha_p = \frac{d\rho}{dP}$$

ӨТХР-ийн чадлыг 97 МВт-аас 103 МВт-ийн хооронд өөрчлөн, үндсэн нөхцлийг хэвээр хадгалан тооцооллуудыг явуулж реактивитийн чадлын коэффициентийг тодорхойлсон. Реакторын чадлаас хамаарч эффектив нейтрон үржүүлэх факторын хугацаанаас хамаарсан хамаарлыг Зураг 7-д, реактивитийн чадлын коэффициентийг Хүснэгт 6-д өгөв. Үр дүнгээс харахад чадлын өөрчлөлт эффектив нейтрон үржүүлэх факторт нэгэн утгатай өөрчлөлт үзүүлэхгүй байна. Реакторын чадлыг ихэсгэснээр агшин зуур түлшний температур нэмэгдэж үүний үр дүнд хөргүүрийн температур ч дагаж ихэсдэг. Эдгээр температурын өөрчлөлтөөс нейтроны спектр, хөргүүрийн нягт, урвалын огтлол өөрчлөгдсөнөөр голомтын реактивити өөрчлөгддөг. Дээрх өөрчлөлтүүд нь реактивитид эерэг, сөрөг нөлөө үзүүлдэг.



Зураг 7. Реакторын чадлын өөр өөр утганд эффектив нейтрон үржүүлэх факторын хугацааны өөрчлөлт.

Хүснэгт 6. Реактивитийн чадлын коэффициент.

$V_{түлш,т}$ ГВт Ө/тн	$\alpha_T(рст/МВт)$					
	97 MW	98 MW	99 MW	101 MW	102 MW	103 MW
10	-0.80	-0.84	-0.97	-0.55	-0.28	-0.88
40	-0.90	0.17	-0.25	0.21	-0.14	-0.83
80	-0.09	0.03	-0.16	0.43	-0.51	-0.08
ХИУ	0.98	0.84	0.91	1.45	0.77	0.56
ХБУ	-0.90	-0.89	-0.97	-0.59	-0.55	-0.88
ДУ	-0.15	0.04	-0.16	0.12	-0.05	-0.06

Тайлбар: тэмдэглэлгээнүүд Хүснэгт 5-ынхтай адил

4. ДҮГНЭЛТ

1. Энэ ажилд голомтын дизайныг илүү оновчтой болгохын тулд түлш, шатдаг хорлолт материалын агууламжыг өөрчлөх замаар жигд бус түгэлттэй болгон илүүдэл реактивитийн утгыг $0.78\Delta k/k(\%)$ хүртэл бууруулж реакторын голомт даяарх чадлын пикийн факторын түгэлтийг жигдрүүлэв.
2. Реактор ажиллах хугацаанд реактивитийг ерөнхийдөө жигд болгосон боловч бага хэмжээний илүүдэл реактивитийг дарахын тулд голомт руу удирдлагын саваа оруулж хамгийн их реактивитийн утгыг $0.65 \Delta k/k(\%)$ -аас бага болгож, голомт даяарх чадлын пикийн факторын түгэлтийн хамгийн их утгыг 1.97 болгож жигдлэв.
3. Реактивитийн температурын болон чадлын коэффициентуудыг үнэлэв.

ТАЛАРХАЛ

МУИС-ийн харьяа ЦФСТ-ийн МИНАТО кластер серверийн тогтвортой ажиллагааг хангаж, тооцоолол явуулах боломж олгосон МУИС-ХШУИС-ийн дэд профессор Б.Мөнхбатад талархал илэрхийлье.

АШИГЛАСАН МАТЕРИАЛ

- [1] Fourth Generation reactor concept M. Ragneb 3/11/2014
- [2] The status of graphite development for gas cooled reactors IAEA-TECDOC-690
- [3] S.Odmaa, T.Jamyansuren, O.Toru, N.Norov and B.Munkhbat. Design parameters in an annular, prismatic HTGR for passive decay heat removal. Annals of Nuclear Energy, 111 (2018) 441-448.
- [4] С. Одмаа, Т. Жамъянсүрэн, Н. Норов. Задралын дулаанаа идэвхгүйгээр зайлуулах чадвартай, төвдөө ойлгогчтой, өндөр температурын хийн хөргөлттэй реакторын голомтын дизайны судалгаа. МУИС, Физик.25(478) 2017, 34-40
- [5] Nagaya Y et al. MVP/GMVP II: general-purpose Monte Carlo code for neutron and photon transport calculations based on continuous energy and multigroup methods. JAERI-1348. Japan: Japan Atomic Energy Research Institute; 2005.
- [6] Okumura K et al. MVP-BURN user's manual. Japan: Atomic Energy Agency; 2005.

- [7] K. Shibata, O. Iwamoto, T. Nakagawa, N. Iwamoto, A. Ichihara, S. Kunieda, S. Chiba, K. Furutaka, N. Otuka, T. Ohsawa, T. Murata, H. Matsunobu, A. Zukeran, S. Kamada, and J. Katakura: "JENDL-4.0: A New Library for Nuclear Science and Engineering," J. Nucl. Sci. Technol.. 48(1), 1-30(2011).
- [8] S.Odmaa and T.Obara. Neutronic and thermo-hydraulic analyses of a small, long-life HTGR for passive decay-heat removal. Journal of Nuclear Science and Technology, 52, Issue 12, 2015, pp1519-1529. <http://dx.doi.org/10.1080/00223131.2015.1017546>.

Геодезийн хэмжлийн нэгдмэл байдал нивелирийн рейкны хэвтээ компаратор

Д.Өнөрбилэг^{1*}, Б.Болормаа²

¹ Монгол Улс, Стандарт, хэмжил зүйн газрын Хэмжил зүйн хүрээлэн

² ШУТИС Геологи, Уул Уурхайн Сургууль

СХЗГ-ын уртын эталоны лабораторид 3 м урт бүхий зурааст, бар код бүхий нивелирийн рейк ба 1 метрийн хяналтын ган ба латунь шугамыг шалгах зориулалттай хэвтээ компараторыг зохион бүтээлээ. Энэ компараторыг ашиглан OIML R-35-1,2:2007 стандартын дагуу хамгийн дээд нарийвчлалын ангийн шаардлагад нийцэх, бүх төрлийн рейк, хяналтын латунь шугамын шалгалт тохируулгыг гүйцэтгэх ба барилга, зам гүүр, геодези, зураг зүйн ажилд уртын үндэсний эталоноос нэгж дамжуулах, хэмжлийн нэгдмэл байдлыг хангахад чухал үүрэг гүйцэтгэнэ. Хэвтээ компараторын систем нь 3 м урттай хос ган зам, гүйгч тэргэнцэр бүхий механик хэсэг ба лазер интерферометр, цацраг хуваагч, ретро ойлгогч толь бүхий оптик хэсгээс тогтоно. Механик хэсгийг маш тэгш гадаргуутай хүнд ширмэн плитаг төмөр ширээн дээр байрлуулсан. Хос рельс замын дагуу гүйх тэргэнцэр нь өсгөгч микроскоп, 2 ш микрометр толгой, гэрэлтүүлэг зэргээс тогтох ба түүн дээр ретро ойлгогчыг байрлуулсан. Гүйгч тэргэнцэрийн шилжилтийг, ретро ойлгогч болон лазер интерферометрын тусламжтай тодорхойлон, рейк болон хяналтын шугамын хэвийн уртын бодит уртыг тогтооно. Лазер интерферометрийн долгионы урт 632,9 нм (тогтворжилт нь $3,4 \times 10^{-8}$) энэ нь уртын анхдагч эталон Ге-Не лазераас нэгж дамжуулсан. Нивелирийн рейк ба метрийн хяналтын шугамын шалгалт тохируулгын хэмжлийн өргөтгөсөн эргэлзээ 95%-ийн итгэх түвшинд 90 мкм орчим байна. Шалгалт тохируулгын зарчим ба эргэлзээний төсвийн талаар дэлгэрэнгүй өгүүлнэ. Хэвтээ компараторын урт хугацааны тогтворжилт, олон удаагийн туршилтын үр дүнгүүд OIML R-35:2007 стандартаар тавигдах шаардлагад нийцэж байна.

Түлхүүр үг: хуваарьт рейк, лазер интерферометр, шалгалт тохируулга, хэмжлийн эргэлзээ.

1. УДИРТГАЛ

Манай улсын өндрийн сүлжээний геодезийн хэмжлийн чанар, үр дүн нь өндөр нарийвчлалын цахилгаан оптик зайн хэмжлийн багажны болон бүх төрлийн нивелир ба түүнтэй хамт хэрэглэгддэг рейкны хуваарийн алдаа, нэгж дамжуулалтаас ихээхэн хамаардаг. Энэ төрлийн хэмжүүрийг манай улсад шалгалт тохируулга огт хийдэггүй учир геодезийн компаниуд нь I, II ангийн нивелирдлэгийн ажилд хэрэглэж буй бар код бүхий рейкийг БНХАУ, ОХУ-ын хэмжилзүйн лабораторид өндөр үнэ ханштайгаар шалгалт тохируулга хийлгүүлж байна. Мөн барилга, авто болон төмөр зам, гүүр хоолой, инженерийн байгууламж, эрчим хүч, уул уурхай зэрэг нийгэм эдийн засгийн салбарт хэрэглэж байгаа 1500 гаруй рейкийг шалгахгүй байгаа нь тухайн ажлын нарийвчлалд чанарт сөргөөр нөлөөлж байгаа юм.

Газрын гадаргуугийн өндрийн зөрүүг хэмжих зориулалттай өндөр нарийвчлалын тоон нивелир

нь нивелирийн рейкны хамт хэрэглэгддэг. Нивелирийн рейк нь инвар, мод болон бусад материалаар хийсэн 3 м урт, 100 мм өргөн, 5 мм зузаантай хуваарьт уртын хэмжүүр юм. Хээрийн нөхцөлд цаг агаарын янз бүрийн нөхцөлд ашигладаг рейкны гадаргуугийн гузайлт, деформац нь тоон нивелирийн заалт буюу рейкны хуваарийн өөрчлөлтөд нөлөөлөх учир OIML R-35-1,2:2007 стандартын дагуу анхдагч баталгаажуулалт, шалгалт тохируулгыг гүйцэтгэх нь маш чухал юм.

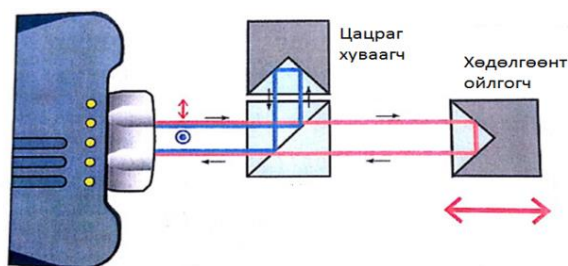
2012 онд БНЧУ-ын буцалтгүй тусламжаар ХЗХ-ийн уртын эталоны лабораторид 633 нм долгионы урттай, иодоор тогтворжуулсан Ге-Не лазерын үүсгүүр, зайн хэмжлийн лазер интерферометр суурилуулан геодези, зураг зүйн ажилд уртын үндэсний эталоноос нэгж дамжуулах нөхцөл бүрдсэн. Тиймээс уртын эталоны лабораторид дотоод нөөц бололцоог ашиглан нивелирийн рейк шалгалт тохируулгын 3 м урттай хэвтээ компаратор байгуулсан нь

* Electronic address: unurbileg@masm.gov.mn

геодезийн хэмжлийн нэгдмэл байдлыг хангахад нэн чухал ач холбогдолтой юм.

2. НЭГЖ ДАМЖУУЛАЛТ

СХЗГ-ын уртын эталоны лабораторид хадгалагдаж буй 633 нм долгионы урттай иодоор тогтворжуулсан Гели-Неон лазер үүсгүүр нь олон улсын хэмжигдэхүүний нэгжийн SI системийн тодорхойлолтод нийцсэн уртын хэмжлийн нэгж дамжуулалтын шатлалын дээд түвшиний анхдагч эталон юм. Уртын хэмжлийн нэгж “метр”-ийн хэмжээг материаллаг (биет) хэмжүүрт дамжуулах үндсэн арга нь лазер интерферометрийн систем юм. Техник технологи үсрэнгүй хөгжсөн өнөө үед маш олон төрлийн хийц, зориулалттай интерферометрийг үйлдвэрлэж байна. Үүнээс зайн хэмжилт буюу шугаман шилжилт тодорхойлох зориулалттай Майклсоны интерферометрийг уртын хэмжилд гол төлөв ашигладаг. Майклсоны интерферометр нь гэрлийн интерференцийн үзэгдэл дээр үндэслэсэн. Үндсэн зарчим нь цацраг хуваагчид туссан лазерын туяа харилцан перпендикуляр 2 хэсэгт хуваагдах ба хөдөлгөөнт ойлгогч толь болон үл хөдлөх толиноос ойсон туяаны нийлбэрээр үүсэх интерференцийн судлыг тоолон уртын нэгжид хувиргадаг байна. (Зураг.1 хар)



$$L = f_D \cdot \frac{\lambda}{2} = N \cdot \frac{\lambda}{2}$$

Зураг.1 Майклсоны интерферометрийн зарчим.

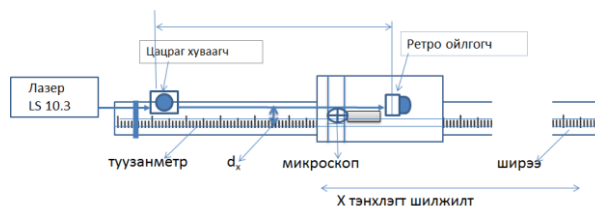
3. ТОНОГ ТӨХӨӨРӨМЖ

3.1 Оптик хэсэг

Хэвтээ компараторын лазер интерферометрийн хэмжлийн систем нь 633 нм долгионы урт бүхий LS 10.3 лазерын үүсгүүр, удирдлагын программ хангамж, тэжээлийн хэсгийг агуулах интерфейс LS 30.20 цацраг хуваагч, ретро ойлгогч толь зэргээс тогтоно.

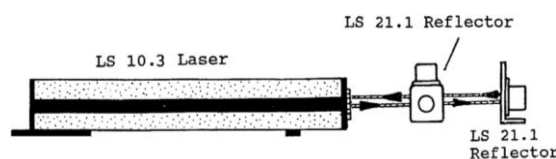


Зураг.2 LIMTEK – LMS хэмжлийн систем.



Зураг.3 Интерферометрийн шалгалтын бүдүүвч.Энд LS 10.3 - лазерын үүсгүүр LS 30.20 - удирдлагын программ хангамж, LS 20.1 - цацрагийн хуваагч LS 21.1 - ретро ойлгогч толь.

Удирдлагын интерфэйс нь WiFi эсвэл Ethernet сүлжээгээр компьютерийн программ хангамжтай холбогдон хэмжлийн өгөгдлийг бүртгэнэ.



LS 10.3 лазерын туяаны тусгалын чиглэл суурийн тавцан ширээтэй параллель байх ба лазерын үүсгүүрээс гарсан туяа, цацраг хуваагчаар дамжин ретро ойлгогчид ойгоод цацраг хуваагчид буцсан цацрагууд лазерын үүсгүүрийн оролт буюу дохио хүлээн авагч уруу давхацсан байх нөхцлийг хангахаар ретро ойлгогч болон цацраг хуваагч, лазер үүсгүүрийн харилцан байрлалыг сайтар тохируулах шаардлагатай. Үүний тулд цацраг хуваагчийн шилжилтийг X, Y, Z тэнхлэгт бага зэрэг тохируулах боломжтой байх суурийг угсран ширмэн плита дээр байрлуулсан. Ретро ойлгогчийг гүйгч тэргэнцэрийн их биеийн нэг хэсэг болох X, Y тэнхлэгт шилжин хөдлөх боломжтой тавцан дээр ширмэн плитатай перпендикуляр байхаар наасан.

3.2 Механик хэсэг

Хэвтээ компараторын ерөнхий зураглалыг харуулав. Ретро ойлгогч, оптик микроскопыг

байрлуулсан тэргэнцэр чөлөөтэй гүйх зориулалт бүхий хос рельс замыг гадаргуугийн өнгөлгөө сайтай тус бүр 3.2 м урттай, 38х38 мм ган квадратыг сонгон суурийн ширмэн плита дээр шууд байрлуулсан. Хос замын дунд талд 100 мм өргөнтэй 3.2 м урт полоса төмөр байрлуулсан хос замын хоёр талаар түүний хөндлөн шилжилтээс хамгаалсан соронзон бэхлэгчүүдийг байрлуулсан. Энэ нь тэргэнцэрийн хөдөлгөөнд үл нөлөөлөх ба лазерийн үүсгүүртэй харьцангуй хэвтээ байрлалыг өөрчлөн тохируулах боломжтой болно. Гүйгч тэргэнцэрийг эхлэл цэгээс ширээний төгсгөл хүртэл 3 м аажим гүйлгэхэд ретро ойлгогчоос ойсон лазерын туяаны буцах тусгал хүлээн авагчид очиход дохионы далайц нэгэн жигд, алдаа өгөхгүй байх нөхцөлийг хангасан.



Зураг.4 Уртын эталоны лаборатори - Хэвтээ компаратор.

Гүйгч тэргэнцэрийн хувьд ММИ-2 маягийн оптик микроскопыг ашигласан ба бүтцийг бага зэрэг өөрчилсөн. ММИ-2 нь янз бүрийн шаблоны геометр хэмжээг тодорхойлох

зориулалттай хэмжлийн микроскоп бөгөөд үндсэн бүтэц нь 10 дахин өсгөгч дуран нь хөдөлгөөнгүй байх ба шалгагдаж буй шаблоны хөндлөн ба босоо шилжилтийг доороос нь гэрэлтүүлэн сүүдрийн аргаар хэмжихээр хийгдсэн байдаг.



Зураг.5 ММИ-2 микроскопи.



Зураг.6 Шинэчлэсэн микроскоп- гүйгч тэргэнцэр.

Бид оптик микроскопын өсгөгч дуранг их биенээс салган авч Х-У тэнхлэгт тавцантай хамт шилждэг байхаар 90^0 тэгш өнцгөөр бэхлэн гагнасан. Микроскопын суурь хэсгээс рейк чөлөөтэй багтах хэмжээтэй тайран, үлдсэн хэсэгт тэргэнцэр замын дагуу чөлөөтэй гүйх нөхцөлийг хангаж 8 ш подшипникт ролик, холбогч эргээс болт зэргийг нэмж угсарсан. Шинэчлэсэн микроскопын (зураг.6) өсгөгч дуран нь Х, У тавцантай хамт шилждэг байх ба суурьт бэхлэсэн подшипникт роликийн тусламжтай хос рельсын дагуу түүний дунд байрлуулсан рейкны дээгүүр чөлөөтэй гүйнэ. Шаблон тавих хэсгийн оронд туузан гэрэл

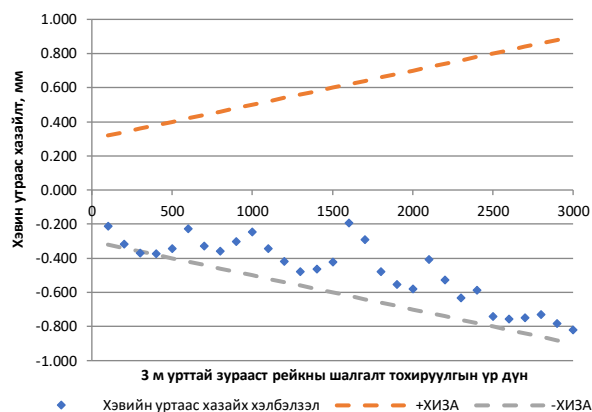
байрлуулан рейкны зураасыг өсгөгч дуранд шууд ажиглах бөгөөд дурангийн торны нарийн шилжилтийг 0,005 мм унших чадвартай микрометрийн толгойг ашиглан гүйцэтгэнэ. Ретро ойлгогчыг мөн Х, Y тавцантай хамт тогтоосон тул гүйгч тэргэнцэрийн өчүүхэн шилжилтийг лазер интерферометрийн системээр шууд хэмжих боломжтой болсон.

4. ХЭМЖИЛ, ҮР ДҮНД НӨЛӨӨЛӨХ ХҮЧИН ЗҮЙЛҮҮД

Энэ систем нь рейкыг хэвтээ байрлуулан зураасны бодит уртыг лазерын долгионы уртаар шууд тодорхойлж, хэмжлийн өгөгдлийг компьютерт дамжуулах программ хангамжаар хангагдсан. Лазер интерферометрийн LMS программ хангамж нь ретро ойлгогчийн зайн шилжилтийн утгуудыг шууд бүртгэн харуулах ба дурын цэгээс эхлүүлэх, давших болон буцах чиглэлд давтан хэмжих зэрэг сонголттой бөгөөд агаарын хүчин зүйлийн залруулгыг оруулах боломжтой. Мөн түүнчлэн гүйгч тэргэнцэрийг операторийн урьдчилан сонгосон цэгт хэвийн уртаас хэлбэлзэх зөрүүг шууд харуулахаас гадна дохионы далайцын диаграммыг ажиглах боломжтой.

Хэмжлийн үр дүнд нөлөөлөх хүчин зүйлүүд: системийн босоо ба хэвтээ өнцгийн Авве шилжилт, лазерын туяаны чиглэл ба гүйгч замын хоорондох зэрэгцээ байдал, лазерын долгионы далайц, агаарын хугарлын илтгэгч, орчны нөхцөл, температурын градиент зэрэг болно. Компараторын хэвтээ ба босоо өнцгийн шилжилтийг ретро ойлгогчийн 200 мм зай тутам дах тусгалыг тэмдэглэн босоо ба хэвтээ тэнхлэг дэх шилжилтийг тэмдэглэх замаар хэмжсэн бөгөөд Аввегийн босоо тэнхлэг дэх алдаа ± 2.02 мрад, хэвтээ тэнхлэг дэх алдаа ± 1.15 мрад байна. Компараторын нийт уртын хүрээнд лазерийн туяаны гаралтын дохионы далайц 112% – 125% хэлбэлзэж байгаа нь интерферометрийн заалтын 10 нм түвшинд нөлөөлж байна. Энэ нь рейкны зөвшөөрөгдөх алдааны утгаас олон дахин бага юм. Туршилтын хэмжилтэд 2 м урттай рейк, 3 м урттай угсардаг хуваарьт рейкны үнэмлэхүй уртыг 100 мм тутамд лазерийн долгионы уртаар тодорхойлсон. Үүнд хэвийн уртаас хазайх хэлбэлзэл нь MNS OIML R 35-1:2015

стандартын нарийвчлалын II ангийн хамгийн их зөвшөөрөгдөх алдаанаас ихгүй байна. (зураг.7)



Зураг.7 Зурааст нивелирийн рейкны шалгалт тохируулгын үр дүн.

5. ХЭМЖЛИЙН ДҮН БА ХЭЛЭЛЦҮҮЛЭГ

Рейкны хуваарийн бодит уртын 20°C дах утгыг дараах томъёогоор олно.

$$L = L_{opt} + \Delta T_{20} \cdot \alpha \cdot L + \Delta l_c + \Delta l_s + \delta_m$$

$$L_{opt} = \frac{\lambda_0}{n}$$

Энд: α - дулаан тэлэлтийн коэффициент

ΔT_{20} - жишиг 20°C температураас хазайх хазайлт

Δl_c - системийн косинусын алдаа

Δl_s - Авве алдаа

δ_m - хуваарийн хэмжлийн алдаа

n - агаарын хугарлын илтгэгч

λ_0 - лазерийн вакуум дах долгионы урт

Агаарын хугарлын илтгэгчийг Сиддорын томъёогоор бодох ба томъёоны эргэлзээ

$$u_n = 1 \cdot 10^{-8} \text{ гэж авна.}$$

$$(n-1) \cdot 10^8 = \left(8342.54 + \frac{2406147}{130 - 1/\lambda_0^2} + \frac{15998}{38.9 - 1/\lambda_0^2} \right) \times \left(\frac{p}{96095.43} \right) \left[\frac{1 + 10^{-8}(0.601 - 0.00972t)p}{1 + 0.003661t} \right] - R(8.753 + 0.036588t) \left(0.0373345 - \frac{0.00040 \cdot T}{\lambda_0^2} \right)$$

Энд p - агаарын даралт [Па], T - агаарын температур [$^{\circ}\text{C}$], R - харьцангуй чийг [%]

Хэмжлийн өргөтгөсөн эргэлзээг хэмжлийн эргэлзээг илэрхийлэх олон улсын ISO GUM удирдамжийн дагуу тооцоолсон ба

$U = \sqrt{a^2 + b^2} \cdot L^2$ хэлбэрээр илэрхийлсэн ба хамрах коэффициент $k=2$ болно. Энд a – тогтмол хэсэг, b – уртаас хамаарах хэсэг ба L – хуваарийн

хэвийн урт. Хэмжлийн эргэлзээний төсвийн хураангуйг хүснэгтээр харуулав.

Хүснэгт 1. Эргэлзээний төсөв.

Эргэлзээний үүсвэр	Стандарт эргэлзээ
Лазерын долгионы урт	$2 \times 10^{-8} * L$
Хоосон явалтын алдаа	0,027 мкм/°C
Агаарын хугарлын илтгэгч	$3,3 \times 10^{-7} * L$
Дулаан тэлэлтийн коэффициент	$2,3 \times 10^{-6} * L$
Температурын градиент	$8,8 \times 10^{-8} * L$
Косинусын алдаа	0,316 мкм
Авве алдаа	44,317 мкм
Хуваарийн хэмжлийн алдаа	8,16 мкм
Өргөтгөсөн эргэлзээ, $k=2$	
$U = \sqrt{90.1^2 + (6.13 + L)^2}$ мкм	

Рейкны шалгалт тохируулгын өргөтгөсөн эргэлзээний утгад хамгийн их нөлөөлж буй үзүүлэлт нь лазерын туяаны босоо тэнхлэг дэх хазайлт болон Авве-гийн алдаа юм. Үүнийг гүйгч тэргэнцэрийн хөдөлгөөн, эд ангийг сайжруулах, ретро ойлгогчийг шалгагдаж буй хэмжүүрт аль болох ойрхон байрлуулах зэргээр бууруулах боломжтой. Энэхүү хэвтээ компараторыг ашиглан зөвхөн зурааст рейкны хуваарийн бодит уртыг тодорхойлохоос гадна инвар бар код бүхий хос рейкны өндрийн зөрүүг тодорхойлж болно.

6. ДҮГНЭЛТ

СХЗГ-ын уртын эталоны лабораторид 3 м урттай хуваарьт, бар код бүхий нивелирийн рейкны хэвтээ компараторыг дотоод нөөц бололцоог ашиглан байгуулсан. Хэмжлийн эргэлзээ болон үр дүн нь MNS OIML R 35-1:2015 “Ерөнхий зориулалтын хуваарьт уртын хэмжүүр-хэмжил зүйн ба техникийн шаардлагууд” стандартын шаардлагад бүрэн нийцэж байна. Цаашид энэ системээр зөвхөн нивелирийн рейкны төдийгүй 1 метрийн хяналтын ган ба латунь шугамын шалгалт тохируулгыг гүйцэтгэх техникийн боломж бүрдлээ. Өмнө нь манай улсад энэ төрлийн хэмжүүрийн шалгалт тохируулгыг хийдэггүй байсан тул хэрэглэгчид өөрсдийн хэмжүүрийг ОХУ ба БНХАУ-ын холбогдох лабораторид өндөр өртөгөөр шалгалт тохируулгад

хамруулдаг байсан; тухайлбал тоон нивелир, тоон нивелирийн бар кодтой рейкны шалгалт тохируулга хийх багажны тоног төхөөрөмжийн үнэ өртөг өндөр учир улсын өндрийн сүлжээний ажил, I, II ангийн нивелирдлэгийн хэмжилт хийхийн тулд Герман улсын лабораторид явуулж 3 сарын хугацаанд 2000 \$ -оор рейкны шалгалт тохируулга хийлгэсэн байна. ГЗБГЗЗГ-ын хэмжил зүйн лабораторид жилд 1500 гаруй геодезийн хэмжих хэрэгсэл баталгаажуулалтад хамрагддаг, үүнээс 30 гаруй хувь нь тоон нивелир эзэлж байгаагаас харахад улсын хэмжээнд 500 гаруй нивелирын рейкыг огт шалгалт тохируулгад хамруулахгүй ашиглаж байгаа юм. Тиймээс хуваарьт, бар код бүхий нивелирийн рейкны хэвтээ компараторыг байгуулснаар геодези, зам гүүр, барилга төмөр замын салбарт уртын хэмжлийн нэгж дамжуулах, хэмжлийн нэгдмэл байдал хангагдах нөхцөл бүрдсэнээс гадна гадаад улс орон уруу гарах хөрөнгө мөнгө хэмнэсэн чухал ач холбогдолтой ажил боллоо.

7. ТАЛАРХАЛ

Тус нивелирийн рейкны хэвтээ компаратор хийхэд туслалцаа үзүүлсэн Гео Сет ХХК-д (Г.Батсүх) гүн талархал илэрхийлье.

АШИГЛАСАН НОМ

- [1] H.S.Suh, J.A.Kim et al “50 m linear measuring interferometer for calibration of survey tape” KRISS,
- [2] C.B Bosenberg, C.S. Muxteanu, “Calibration of flexible tapes to ppm accuracy level” NPL, Teddington, UK
- [3] T.Yandayan, B.Ozgun, “A motorized 5 m tape comparator for traceable measurements of tapes and rules” Measurement 49.2014.
- [4] JCGM 100:2008 “Evaluation of measurement data – Guide to the expression of uncertainty in measurement”, JCGM (2008)
- [5] Д.Өнөрбилэг “Хэмжил зүйн үндэс” ISBN 978-99962-57-95-7, 2016
- [6] MNS OIML R-35-1,2:2015 “Ерөнхий зориулалтын хуваарьт уртын хэмжүүр – хэмжил зүйн ба техникийн шаардлагууд” үндэсний стандарт.

Графенаар хольцолсон катализатор гарган авах, түүний шинж чанарын судалгаа

Б.Бумаа*, Э.Уянга, Г.Сэвжидсүрэн, П.Алтанцог

ШУА-ийн Физик, Технологийн хүрээлэн, Энхтайваны өргөн чөлөө 54Б, Улаанбаатар

Энэхүү ажилд катализаторт ашиглах полианилины цахилгаан дамжуулах болон каталитик шинж чанарыг сайжруулах зорилгоор графен нэмж хольцлох туршилтыг явуулж бүтэц, шинж чанарын судалгааг авч үзлээ. Графенаар хольцолсон полианилин нано-файберын хориотой бүсийн өргөн 2.7 эВ, гадаргуун талбай 84 м²/г байв. Түүнчлэн графенаар хольцолсон полианилинд цагаан алт (Pt) суулгаж катализатор бэлтгэв.

Түлхүүр үгс: графен; алтернатив суурь материал; полианилин; цахилгаан-химийн шинж чанар;

ОРШИЛ

Энергийн үүсгүүрийн дэвшилтэд технологийн нэг болох түлшний элементэд түүний электро-катализатор нь хамгийн чухал үүрэгтэй байдаг. Учир нь цахилгаан үйлдвэрлэх гол процесс болох исэлдэн-ангжрах урвал нь уг катализатор дээр явагдах тул түүний тогтвортой урт хугацаанд ажиллах эсэх нь катализаторыг хийсэн суурь материалын шинж чанараас хамаардаг [1,2].

Дамжуулагч шинж чанартай органик полимер нэгдэл полианилин (PANI) нь өнөө үед эрчимтэй судлагдаж байгаа суурь материалуудын нэг юм. Учир нь PANI нь цахилгаан дамжуулал (10-1 - 10² С/см), хувийн гадаргуун тайлбай (34 м²/г) харьцангуй багатай боловч хүчил, шүлтийн орчинд химийн тогтворжилт өндөртэй, маш сайн исэлдэн ангижрах (redox) шинж чанартай, гарган авах арга нь энгийн, үнэ хямд зэрэг олон давуу талуудтайгаас гадна түүний ион болон электроныг зэрэг дамжуулдаг онцгой шинж чанар нь суурь материалаар сонгох үндсэн шалтгаан нь болдог [3]. Катализаторын суурь материалын хувьд цахилгаан дамжуулал болон хувийн гадаргуугийн талбай нь ач холбогдолтой үзүүлэлт юм. Иймээс PANI-ийн эдгээр шинж чанарыг сайжруулахын тулд нүүрстөрөгчийн төрлийн нано хэмжээст материалуудаар хольцолдог [4, 5] бөгөөд энэ судалгаанд бид графеныг ашиглав. PANI-ыг графенаар хольцолсноор тэдгээрийн молекулуудын хооронд цахилгаан таталцал, мөн химийн π-π давхар холбоо болон устөрөгчийн холбоосууд

үүссэнээр PANI-ийн цахилгаан дамжуулал ихэсч, каталитик шинж чанар сайжрах боломжтой.

Графен нь sp² эрлийзжилттэй нүүрстөрөгчийн атомуудын дан үеэс тогтох ба цахилгаан дамжуулах чанараараа металл дамжуулагчуудаас (зэсээс 1000 дахин их) илүү гэж тогтоогдоод байгаа цорын ганц металл биш дамжуулагч юм [6].

Энэхүү ажлын хүрээнд нам температурын түлшний элементэд ашиглах органик суурьтай цагаан алтан катализатор материалуудыг гарган авч бүтэц, шинж чанаруудыг харьцуулан судаллаа. Бид энэ ажлаар таван төрлийн дээжүүдийг гарган авсан.

ТУРШИЛТЫН ХЭСЭГ

Туршилтанд ашигласан химийн бодис, урвалжууд:

Анилин (C₆H₅NH₂, Sigma-Aldrich, 99.9%), Аммонийн пероксидисульфат (APS, (NH₄)₂S₂O₈, Sigma-Aldrich, >98%), Графит (Wako, >98%), Калийн перманганат (KMnO₄, 99%), Цагаан алтны хлоридын давс (H₂PtCl₆ · 6H₂O, >99%), Хүхрийн хүчил (H₂SO₄, 98%), Фосфорын хүчил (H₃PO₄, ≥85%), Хлорформ (CHCl₃, ≥99%), Давсны хүчил (HCl, 99%), Этиленгликоль (C₂H₆O₂, 99%), Устөрөгчийн хэт исэл (H₂O₂, 30%), Идэмхий натри (NaOH, 99%), Нафионы уусмал (Sigma-Aldrich), Ионгүйжүүлсэн ус.

Графен оксидын химийн синтез:

Графен оксидын химийн синтезийг Хаммерын арга [6] –аар графитийг хүчтэй хүчлийн орчинд

* Electronic address: bumaab@mas.ac.mn

калийн перманганат (KMnO_4)-аар исэлдүүлж, ионгүйжүүлсэн усаар угааж гарган авсан. Үүссэн дээжээ вакуум зууханд 60°C -т 12 цаг хатааж, графены оксид (цаашид GO гэх)-ийг гарган авсан.

Полианилины химийн синтез:

Полианилины нано-файбер болон полианилины нано-партиклыг бидний өмнөх ажил [7]-д хэрэглэсэн үе хооронд полимержих аргаар синтезлэн гарган авсан.

Графенаар хольцолсон полианилины химийн синтез:

Полианилиныг графенаар хольцлохдоо өмнө ашигласан цэвэр полианилин гарган авах аргыг хэрэглэсэн. GO-ыг $m_{\text{ANI}}:m_{\text{GO}}=10:1$ харьцаагаар нэмж графенаар хольцолсон полианилины нано-файбер (цаашид PANI-NF/GO гэх) болон графенаар хольцолсон полианилины нано-партикл (цаашид PANI-NP/GO гэх) гэсэн хоёр төрлийн нунтаг дээжүүдийг гарган авсан.

Катализаторын химийн синтез:

Гарган авсан полианилины нано-файбер болон нано-партиклд суурилсан цагаан алтан катализатор (цаашид Pt/PANI-NF/GO болон Pt/PANI-NP/GO гэх)-ыг бидний өмнө хийсэн ажил [7]-д хэрэглэсэн этиленгликолиор ангижруулах аргаар гарган авсан.

Судалгааны аргууд

Бүтэц, шинж чанарын судалгааг XRD, FT-IR, UV-vis аргуудаар судаллаа. XRD анализыг Maxima_X7000 дифрактометрээр тасалгааны температурт, $10\text{--}90^\circ\text{C}$ (2θ) сарнилын өнцгийн мужид, 0.02 алхамтайгаар, алхам тус бүр дээр 0.9 сек шарах хугацаатайгаар гүйцэтгэв.

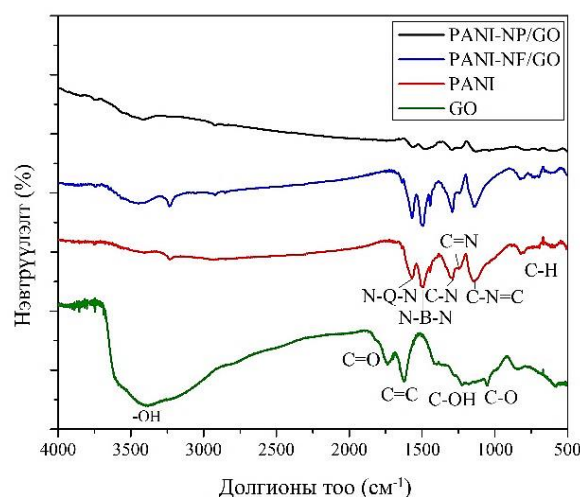
Нил улаан туяаны спектрийн анализийг IR Prestige-21 маркийн спектрометрээр $4000\text{--}400$ cm^{-1} мужид болон хэт ягаан туяаны спектрийн анализийг UV-2550 спектрофотометрээр $200\text{--}700$ нм мужид тус тус судалсан.

Гарган авсан материалуудаар ажлын электродыг бэлтгэж Powerstat-20 потенциометрээр CV анализыг гүйцэтгэсэн. Ажлын электродод 3мм диаметртэй нүүрстөрөгчийн (glassy carbon) электродыг ашигласан. Инкийг 5мг нунтаг электродын материал, $5\mu\text{л}$ нафионы уусмалыг ($5\text{wt}\%$) 1мл этанолд хийж 20 минут хэт авиагаар үйлчлүүлэн бэлтгэнэ. Үүссэн инкээр электродын

гадаргуу дээр нимгэн үе үүсгэж, потенциалыг 1M H_2SO_4 электролитийн уусмалд, Ag/AgCl харьцуулагч электрод ашиглан тодорхойлсон.

ҮР ДҮН БА ХЭЛЭЛЦҮҮЛЭГ

Гарган авсан суурь материалуудын молекул бүтцийг UV-vis болон FT-IR аргуудаар тодорхойллоо. Цэвэр PANI-NF, графены оксид, графенаар хольцолсон полианилины PANI-NF/GO, PANI-NP/GO суурь материалуудын нил улаан туяаны шингээлтийн спектрүүдийг Зураг 1-д үзүүлэв.

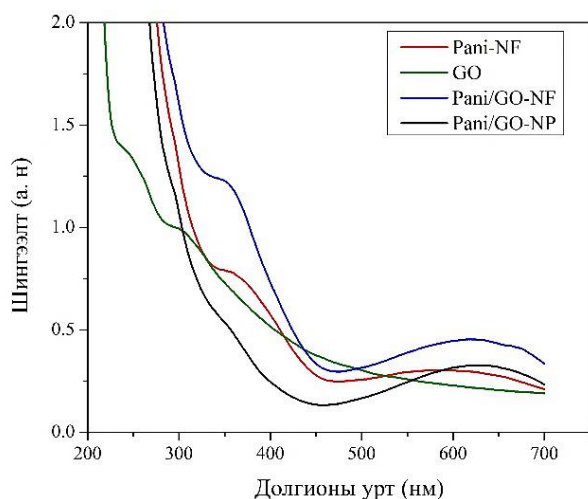


Зураг 1. Гарган авсан суурь материалуудын FT-IR спектрүүд.

Графены оксидын FT-IR спектрт -ОН шингээлтийн зурвас нь 3402 cm^{-1} , карбонилын бүлгийн C=O , C=C холбооны шингээлтийн зурвас нь 1734 болон 1618 cm^{-1} , C-OH , C-O валентын хэлбэлзэл нь 1227 болон 1051 cm^{-1} мужид илэрсэн нь графитыг исэлдүүлж графен оксидыг үүсгэсэн болохыг үзүүлж байна.

Цэвэр PANI-NF-ын хувьд үндсэн шингээлтийн зурвасууд болох N-ын давхар холбоостой хинонын цагирагийн (quinoid ring vibration) валентийн хэлбэлзэл (1571 cm^{-1}), бензолын цагирагийн (benzene ring vibration) хэлбэлзэлүүд (1505 cm^{-1}) бүртгэгдсэн нь полианилины бүтэц үүссэнийг илэрхийлж байна. Мөн 1290 cm^{-1} , 1241 cm^{-1} болон 810 cm^{-1} мужид C-N, C=N, C-H холбоосын валентийн хэлбэлзлийн шингээлтийн зурвасууд ажиглагдсан. Графенаар хольцолсон дээжнүүдийн хувьд цэвэр полианилины спектртэй ижил боловч графены хольцын улмаас нэмэлтээр 3462 cm^{-1} мужид -ОН валентийн хэлбэлзэл үүссэн байна. PANI-NP/GO

дээжний хувьд харьцангуй сул спектр бүртгэгдсэн.



Зураг 2. Гарган авсан суурь материалуудын UV-vis спектрүүд.

Зураг 2 –т гарган авсан материалуудын хэт ягаан туяаны спектрийг үзүүлэв. Графены оксидын спектрт ароматик C—C болон нүүрстөрөгчийн давхар C=C холбоосууд 245 болон 302 нм долгионы мужид ажиглагдсан нь дан үет графен үүссэнийг илэрхийлж байна. Харин цэвэр PANI болон графенаар хольцолсон дээжүүдэд полианилины бензол болон хиноны бүтцэд харгалзах пикүүд 350 болон 620 нм долгионы мужид илэрсэн. Хэмжилтийн спектрээс цахилгаан дамжуулах чадварын гол хүчин зүйлүүдийн нэг болох хориотой бүсийн өргөнийг тооцоолоход Pani-NF/GO нано-файбер 2.7 эВ байна. Энэ үр дүн нь худалдааны Pani-NF ($E_g \approx 2.8$ эВ) –ээс бага гарсан ба графенаар хольцолсон полианилины цахилгаан дамжуулах чадвар сайжирсныг үзүүлж байна (Хүснэгт 1).

Хүснэгт 1. Гарган авсан дээжнүүдийн хориотой бүсийн өргөн болон гадаргуун талбайг тодорхойлсон үр дүн.

Дээжүүд	Хориотой бүсийн өргөн (эВ)	Идэвхит гадаргуун талбай ($\text{м}^2/\text{г}$)
Pani-NF	2.87	14
Pani-NF/GO	2.70	84
Pani-NP/GO	2.74	16

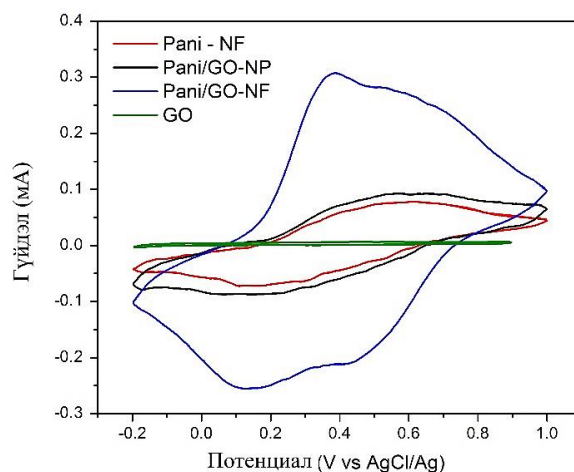
Суурь материалын гүйдэл-хүчдэлийн хамаарлын CV хэмжилтийн үр дүнг зураг 3-т

үзүүлээ. Идэвхит гадаргуун талбайг дараах томъёогоор тооцож, Хүснэгт 1-т үзүүлэв.

$$A_{\text{ид.гад.}} = \frac{Q_H}{m_{Pt} \cdot 0.21}$$

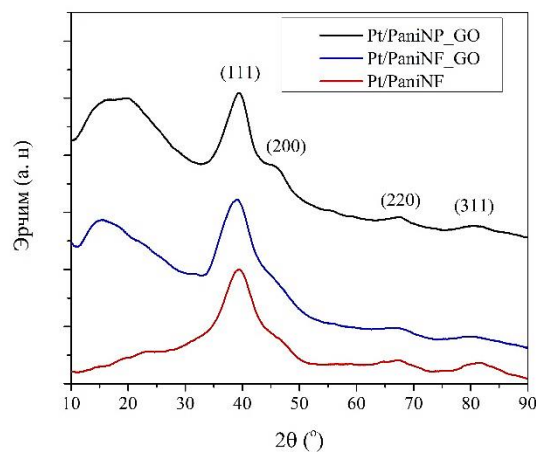
Энд: Q_H – H^+ ионы дисорбцийн үеийн дундаж цэнэгийн хэмжээ буюу пикийн талбай [мКл], 0.21 – Pt (100) хавтгай дээрх H^+ ионы хувийн цэнэг [мКл/ см^2], m_{Pt} –цагаан алтны агуулга [г].

Хольцолсон Pani-NF/GO нано-файбер нь хамгийн их идэвхит гадаргуун талбайтай буюу $84 \text{ м}^2/\text{г}$ байсан бол хольцлоогүй цэвэр Pani-NF нь $14 \text{ м}^2/\text{г}$ буюу хамгийн бага талбайтай гарсан. Графен хольц нь полианилины гадаргуугийн талбайг ихэсгэж байгаа нь харагдаж байна.

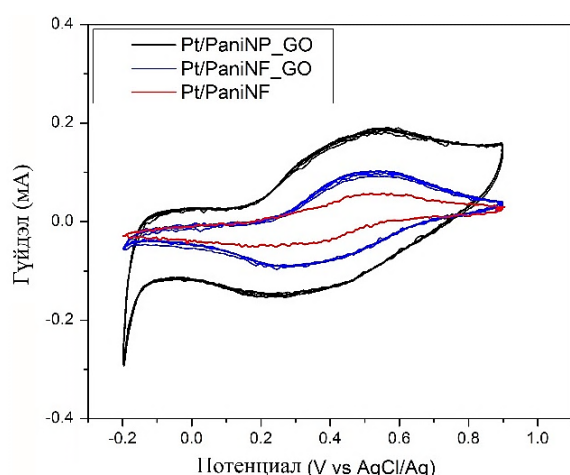


Зураг 3. Гарган авсан дээжнүүдийн гүйдэл хүчдэлийн хамаарлын муруй. (1M H_2SO_4 уусмал, 50 мВ хүчдэл).

Суурь материалууд дээр цагаан алт суулгаж гарган авсан катализаторуудын рентген дифракцын спектр болон цахилгаан химийн CV хэмжилтийн үр дүнг Зураг 4 болон 5-д үзүүлээ.



Зураг 4. Pt/Pani_GO катализаторуудын рентгеннограмм



Зураг 5. Pt/Pani_GO катализаторуудын CV хэмжилтийн үр дүн.

Рентген дифракцын спектрт полианилин болон графен нь $2\theta = 30^\circ$ -аас урагш бүртгэгдсэн бөгөөд цагаан алт $2\theta = 39^\circ, 45^\circ, 68^\circ, 81^\circ$ сарнилын өнцгийн мужид Pt(111), Pt(200), Pt(220), Pt(311) хавтгайн пикүүд илэрсэн.

Энэ үр дүн нь цагаан алтны партикл гарган авсан суурь материал дээр суусныг баталж байна. Кристаллитын хэмжээг Шеррерийн тэгшитгэл [8]-ээр Pt(111) пикийн хувьд тооцоолов (Хүснэгт 2).

Pt/PANI-NF/GO нано-файбер болон Pt/PANI-NP/GO нано-партикл электродуудын гүйдэл хүчдэлийн хамаарлыг хэмжиж идэвхит гадаргуун талбай буюу исэлдэн-ангирх урвал явагдаж байгаа талбайг тооцоолж Хүснэгт 2-т үзүүлээ.

Хүснэгт 2. Гарган авсан дээжнүүдийн кристаллитын хэмжээ болон электродын идэвхит гадаргуун талбайг тодорхойлсон үр дүн.

Дээжүүд	Кристаллитын хэмжээ (Å)	Идэвхит гадаргуун талбай (m^2/g)
Pt/Pani-NF	10.2 ± 0.02	12
Pt/Pani-NF/GO	15.1 ± 0.03	23
Pt/Pani-NP/GO	16.3 ± 0.04	52

Цагаан алт нэмсэн нано-файбер катализаторын хувьд идэвхит гадаргуун талбай нь Pani-NF нано-файбер суурь материалын утгаас бага гарсан. Харин Pani-NP нанопартиклын хувьд гадаргуун талбай нь цагаан алт нэмсний дараа $16 \text{ m}^2/\text{g}$ утгаас $52 \text{ m}^2/\text{g}$ хүртэл өссөн байна. Эндээс үзэхэд полианилины нано-файбер суурь

материалын хувьд Pt суулгах этиленгликолиор ангижруулах аргыг хэрэглэх нь зохимжгүй болох нь харагдаж байна.

ДҮГНЭЛТ

Судалгааны ажлаар графен хольцолсон (10:1=Pani:GO) полианилины нано-файбер, нано-партикл бүхий суурь материалуудыг химийн синтезийн аргаар гарган авч, улмаар цагаан алт (Pt)-ны партиклыг суулгаж катализатор материалыг бэлтгэсэн. Молекул бүтцийн FTIR болон кристалл бүтцийн XRD хэмжилтийн үр дүнгээс бид графенаар хольцолсон суурь материалууд болон катализаторуудыг гарган авсныг үзүүлж байна. Графенаар хольцолсноор суурь материалын цахилгаан химийн шинж чанар сайжирч (гадаргуугийн талбай $12 \text{ m}^2/\text{g}$ -аас $52 \text{ m}^2/\text{g}$ хүртэл), хориотой бүсийн өргөн багассан ($2.84 - 0.08 = 2.76 \text{ eV}$ хүртэл). Эдгээр үр дүн нь полианилины цахилгаан дамжуулал, гадаргуун талбайг графенаар сайжруулах боломжтойг баталж байна. Гэхдээ Pt суулгах химийн синтезийн арга нь нано-файберийн хувьд тохиромжгүй болох нь CV үр дүнгээс харагдаж байна. Цаашид графен хольцын хэмжээг ихэсгэх, цагаан алт суулгах өөр химийн синтезийн арга турших ажлуудыг гүйцэтгэх шаардлагатай байна.

ТАЛАРХАЛ

Энэхүү судалгааны ажил нь ШУТ Сангийн ШуСс-2018/12 санхүүжилтээр гүйцэтгэгдсэн болно. XRD болон FT-IR хэмжилтийг гүйцэтгэхэд тусалсан ФТХ-ийн Аналитик лабораторийн инженер Э.Баянжаргал, Ц.Бямбасүрэн нарт талархал илэрхийлье.

НОМ ЗҮЙ

- [1] Jiujun Zhang, PEM Fuel Cell Electrocatalysts and Catalyst layers, Springer, Canada (2008).
- [2] G. Sevjidsuren, S. Zils, S. Kaserer, A. Wolz, F. Ettingshausen, D. Dixon, A. Schoekel, C. Roth, P. Altantsog and D. Sangaa, Effect of different support morphologies and Pt particle sizes in electrocatalysts for fuel cell applications. Journal of Nanomaterials, 1–9 (2010).
- [3] E. Antolini and E. R. Gonzalez, Polymer supports for low temperature fuel cell catalysts, Applied Catalysis A: General, 365, 1–19 (2009).

- [4] G. A. Rambu, C. L. Jackson and K. Scott, Platinum / carbon / polyaniline based nanocomposites as catalysts for fuel cell technology, Journal of Optoelectronics and Advanced materials, 8, 611–619 (2006).
- [5] D. He, C. Zeng, C. Xu, N. Cheng, H. Li, S. Mu and M. Pan, Polyaniline-functionalized carbon nanotube supported platinum catalysts, Langmuir, 27, 5582–5588 (2011).
- [6] E. Antolini, Graphene as a new carbon support for low-temperature fuel cell catalysts, Applied Catalysis B, Environmental, 123-124, 52–68 (2012).
- [7] B. Bumaa, G. Sevjidsuren, B. Li-Hong, N. Tuvjargal and P. Altantsog, Study of PANI nanofibers supported Pt catalysts for fuel cell, Inner Mongolia Normal University, Shinjlekh ukhaan academic journal quarterly №1.2017, 15–22 (2017).
- [8] P. Scherrer, Göttinger Nachrichten Gesell., Vol. 2, 1918, p 98.

Metal-fullerene on materials for electronics

E.M.Shpilevsky¹, P.Tuvshintur^{2*}, S.A.Filatov¹, G.Shilagardi², D.Tumurbaatar², T.Otgonchimeg²

¹A.V. Luikov Institute of heat and mass transfer to them. NAS of Belarus, Minsk, Belarus

²National University of Mongolia, Ulaanbaatar, Mongolia

The results of studying the physical properties of film materials containing metals and fullerenes are presented. It is shown that the use of these materials in electronics, optoelectronics, biomedicine significantly increases the capabilities of tools and mechanisms.

INTRODUCTION

Fullerenes are unique carbon nanoparticles. The molecules of C₆₀ fullerenes, due to the high symmetry and closure of all σ bonds, have high stability (up to 1700 K in an inert medium), can attach up to 6 free electrons, in addition to the formation of chemical compounds, external molecules can interact with different atoms (creation of endohedral fullerenes). The adiabatic affinity to the electron in the solution is 2.1-2.2 eV [1]. The fullerene C₆₀ molecule can receive up to 12 electrons [1,2] and give up one electron [3], i.e. the charge on the C₆₀ molecule can vary from +1 to minus 12. The polarizability of the C₆₀ fullerene molecule is large (~ 85 Å) by several times the polarizability of the molecules of other acceptors. Therefore, polarization van der Waals forces play an important role in the formation of donor-acceptor complexes and ion-radical fullerene salts. Important physiological results have been obtained by physicists, chemists, materials scientists, biologists and physicians since the discovery of fullerenes, a number of different applications of materials containing fullerenes have been proposed and implemented [1-5].

In this paper we present the results of studying the physical properties of film materials containing metals (Au, Ag, Cu, Ti, Fe, Sn, Ga) and fullerenes. It is shown that the use of these materials in electronics, optoelectronics, biomedicine, significantly increases the capabilities of instruments and mechanisms.

EXPERIMENTAL DETAILS

The formation of metal-fullerene materials from a combined atomic-molecular flow in vacuum was

carried out in three stages: 1) degradation of the starting materials; 2) delivery of building components to the substrate; 3) the structuring of the film on the substrate. The formation of new phases. Over the past 15 years, with the participation of the authors of this work, various methods for obtaining new types of nanostructured metal fullerene materials have been developed and their physical and physicochemical properties have been studied. The simplest way of obtaining materials based on metals and fullerenes is evaporation and their joint condensation in a vacuum. This method provides high purity of materials, control of the structure and concentration of condensates, it is easy to implement on standard vacuum equipment, does not require large quantities of raw materials. Since the fullerenes begin to sublime at temperatures below 700 K, and the evaporation temperatures of most metals are more than 1200 K, two evaporators were used to obtain combined atomic-molecular fluxes. The studies carried out show that materials containing fullerenes have special mechanical, tribological, optical, sorption properties, often combining in one material incompatible properties (for example, low density with high strength, high adhesion and low coefficient of friction, high strength and high plasticity).

The production of films with different contents of fullerenes was provided by varying the densities of the atomic cluster flows of the components, which in turn was achieved by adjusting the temperature of the evaporators and changing their location relative to the substrate. The real concentration of fullerenes in metal-fullerene films was determined by X-ray microanalysis using the intensity of characteristic X-ray radiation, taking into account the thickness of the films and coatings.

* Electronic address: tuvshintur@num.edu.mn

As raw materials, especially pure metals were used: copper, aluminum, tin, titanium (not worse than 99.99), and fullerite powder C_{60} of 99.9% purity, manufactured according to the previously described [6] technology. Substrates were oxidized silicon and steel. The annealing temperature was 470 and 670 K.

The phase composition of the samples was monitored on a diffractometer "DRON 3.0" in copper K radiation using an automation system based on a personal computer that includes all the functions of controlling the goniometer. The structure and elemental composition of the samples was investigated with a scanning electron microscope LEO 1455 VP at an accelerating voltage of 20 keV. The structure of some samples was investigated using an atomic force microscope (AFM). Measurement of electrical characteristics was performed by resistometric methods using low-resistance and high-resistance potentiometers. Friction coefficients were determined with a TEU-2 tribometer, volumetric wear was calculated from the depths of grooves of the friction path measured by the interferometric method (Linnik interferometer, MI-4).

RESULTS AND DISCUSSION

The mechanical, tribological, optical, sorption properties of composite materials based on fullerene molecules and metal atoms are directly related to the surface interaction of the contacting phases. It was found that fullerenes are not only stable nanoparticles, which change the properties of the material due to its presence as a filler component of the composite material, but acts as an instrument for influencing the structure of the bond matrix, as a stimulator of synergistic structuring processes.

It is established that a condensation in a vacuum of a metal (for example, copper, aluminum) and fullerene C_{60} forms an ultradisperse structure with a particle size of 10 ... 80 nm. It is shown that the structure of metal-fullerene films depends on the technological conditions of their production: the substrate temperature, the condensation rate, the effects on the atomic-molecular flow in the reactor space on approach to the substrate. In this case, heterophase films under the same condensation conditions have smaller dimensions (10-40 nm) of

the structure elements in comparison with homophase films.

Using vacuum technologies, layers of fullerite with fcc and hcp structures, metal-fullerene layers with heterophase structure possessing metallic and semiconductor properties have been obtained with the participation of authors [6-8]. For some compositions of metal-fullerene layers ($Cu-C_{60}$, $Sn-C_{60}$), the formation of chemical compounds (Cu_6C_{60} , Sn_xC_{60}) has been established [9]. Note that copper and tin with atomic carbon do not form chemical compounds, and their mutual solubility is negligible.

Endohedral fullerenes are of great interest. Since the inner diameter of the fullerene shell is much larger than the diameter of the encapsulated atom, when the valence electrons are transferred to the outer surface of the fullerene shell, the equilibrium position of the encapsulated atom shifts relative to the geometric center of the fullerene shell. This determines the presence of a sufficiently large constant dipole moment for such molecules. Such crystals must have anisotropic properties and can find interesting applications in electronic devices. The restructuring of the electronic structure of the endohedral complex leads to the fact that the metal atoms transmit, partially or completely, their valence electrons to the outer part of the fullerene shell, practically losing their chemical identity. The transition of the valence electrons of the metal to the outer shell is reflected in such electronic characteristics of the molecules as its ionization potential and electron affinity [10, 11].

Nonlinear optical effects in fullerene-containing materials (third harmonic generation, limiting the intensity of the outgoing radiation, as well as a magneto-optical effect consisting of a decrease in microhardness (an increase in plasticity) under the action of a magnetic field are established [12, 13]. Diamond-like films are obtained from fullerenes with a coefficient of friction of 0.01. The coefficient of friction between steel surfaces is reduced to values of 0.1 ... 0.2 when fullerenes are added to the boundary grease [14].

Specific features of diffusion in metal-fullerene layers, which are a high migration rate of metal atoms compared with the migration rate of C_{60} molecules, and an increase in the metal concentration (in particular, copper for the $Cu-C_{60}$

system) in the near-surface layer are established [15].

Metal-fullerene materials have the widest range of physical and physical-chemical properties. The introduction of fullerenes into materials, even in small fractions (up to 1.0 wt.%), Significantly (in some cases, at times) alters their physical and physico-chemical properties. However, for

electronics, electrical and optical properties and their variation under various influences (temperature, pressure, radiation, adsorption, etc.) are most important.

The table shows the systems we studied, the concentration and temperature intervals, and the limits of the values of certain characteristics of metal fullerene films.

Table 1. The studied systems, temperature intervals and limits values of some characteristics of metalfullerene films.

Systems	Compositions $n_M/n_{C_{60}}$	R, Om	$\rho \cdot 10^3$, Om·sm	Coefficient. Friction, μ	Temperature Intervals, T, K
Ti- C_{60}	2-200	3.5 – 260	200-3.0	0.32	293-593
Fe- C_{60}	10-100	9.0 – 210	180-2.0	0.22	293-593
Cu- C_{60}	2-150	3.0 – 220	150-1.5	0.37	293-493
Sn- C_{60}	2-150	5.0 - 360	200-3.0	0.25	293-493
Ga-Ag- C_{60}	1:1:1	5.0	$5.0 \cdot 10^{-5}$	0.35	273-393
Ag- C_{60}	0.01	5.5	$5.4 \cdot 10^5$	0.28	293-493
Au- C_{60}	0.01	6.2	$6.0 \cdot 10^5$	0.24	293-493

The specific electrical resistivity at the direct current of metal-fullerene films (if no new phases are formed) can vary within the limits of the values of the resistivity of the metal and fullerite. The interaction of C_{60} molecules with one another and with metal atoms can lead to the appearance of ordered structures. In this case, phase inclusions can significantly change the form of the concentration dependence of the specific electrical resistivity of fullerene-containing films.

Values of the coefficient of strain resistance of metalfullerene composites are several times higher than the values for platinum, which is the most effective and often used for tensometry. Figure 1 shows the dependence of the coefficient of strain resistance and the resistivity on the ratio of the number of titanium atoms to the number of fullerene molecules in the alloy.

The specific electrical resistivity at the direct current of metal-fullerene films (if no new phases are formed) can vary within the limits of the values of the resistivity of the metal and fullerite. The interaction of C_{60} molecules with one another and with metal atoms can lead to the appearance of ordered structures. In this case, phase inclusions can

significantly change the form of the concentration dependence of the specific electrical resistivity of fullerene-containing films.

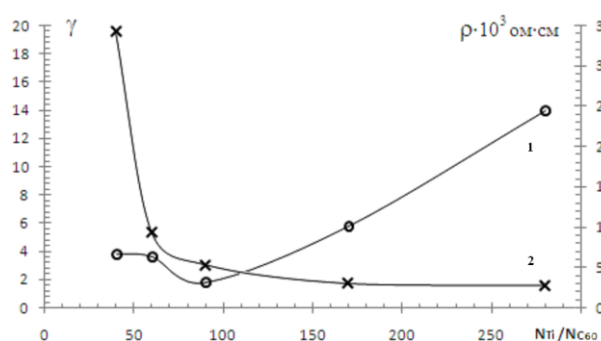


Fig. 1. Change in the coefficient of sensitivity of γ (1) and specific electric resistance ρ (2) from the fractional ratio $n_{Ti} / n_{C_{60}}$ of the components of titanium-fullerene films.

The electrical resistance of the alloys when measured with alternating current depends on the frequency, which indicates the presence of a capacitive component of the electrical resistivity. Figure 2 shows the dependence of the electrical conductivity of $Cu-C_{60}$ films on the composition of the components measured at different frequencies.

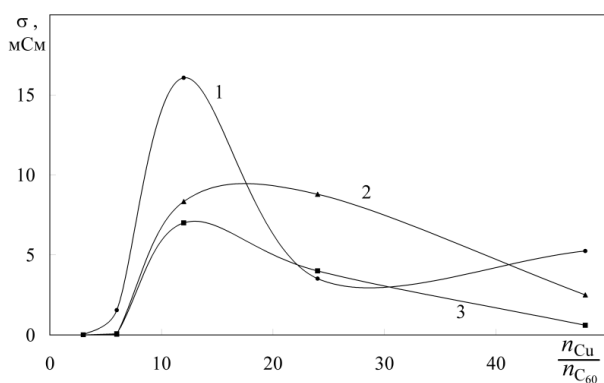


Figure 2. Dependence of the electrical conductivity of Cu-C₆₀ films on different frequencies of alternating current from the calculated number of copper atoms per molecule of C₆₀: 1 - 1 MHz; 2 - 10 kHz; 3 - 100 Hz.

An increase in the fraction of fullerite nanoparticles in the metal fullerene structure for alternating current entails a change in the value of both the capacitive and resistive components of the electrical resistivity.

A new titanium-fullerene material is obtained, which exhibits the properties of R-C-L-chains at alternating current. On the basis of this material, a high-pass filter has been developed, for which the position of the minimum electrical resistance on the frequency dependence is determined by the proportional ratio of titanium and fullerite [16].

Fullerenes, complexes of fullerenes with other atoms and molecules are promising components for the formation of optoelectronic systems and elements possessing unique electrical and optical properties. Such structures will not only increase the speed, the density of information recording, reduce the dimensions of devices, reduce the power consumption, but will also solve a number of fundamental problems (for example, the high stability of fullerenes and fullerene-like formations will solve the problem of degradation of the properties of structures with time, and will allow creating fundamentally new electro- and optomechanical devices). The fullerenes and fullerene-like particles introduced into the metal matrix can form functional optoelectronic devices of nanometer dimensions, including those with superconducting properties.

CONCLUSION

To date, many ideas have been voiced to create memory devices with a high data recording density. Active development of new types of devices based

on the principles of quantum mechanics (for example, one-electron transistors).

Perhaps non-lithographic construction of cellular ordered nanometric-sized structures on the basis of islet films or fullerene clusters in lipid matrices. Porous oxides (for example, Al₂O₃) can also serve as the basis for the formation of fullerene-containing nanosized cells that have new optical and electronic properties.

The presented results of the investigation of the properties of film materials containing metals and fullerenes allow us to conclude that the use of these materials in electronics, optoelectronics, biomedicine, significantly increase the capabilities of instruments and mechanisms.

REFERENCES

- [1] Gusev A.I. Nanomaterials, nanostructures, nanotechnologies. - Moscow: Fizmatlit. 2005. - 416 pp.
- [2] Vityaz P.A., Svidnovich N.A., Kuis D.V. Nanomaterials: Proc. Allowance. Minsk: Higher Education. 2015. - 511 c.
- [3] Vityaz P.A., Stelmakh V.F., Shpilevsky E.M. Fullerenes and fullerene-containing materials // Fullerenes and fullerene-containing materials: coll. sci. tr. Minsk: BSU, 2002. pp. 5-26.
- [4] Hirahara K., Bandow S., Koto H., Okazaki T., Chino-hara H. One-dimentional metallofullerene crystal generated inside single-walled carbon nanotubes // Phys. Rev. Lett. 2000. No. 85. P. 5384-5387.
- [5] Shpilevsky E.M., Zamkovets A.D., Shpilevsky M.E., Filatov S.A., Shilagardi G. Spectral manifestation of plasmon resonance in metal-fullerene nanostructures. // Vacuum technology, materials and technologies. Moscow: NOVELLA, 2015. P.170-175.
- [6] Dmitrenko OP, Shpilevsky EM, Kulish NP, et al. Electronic and Vibrational Structure of C60 Films with Metals, Phys. and chemical surface. 2007, No. 4. P. 152-156.
- [7] Shpilevsky E.M., Shpilevsky M.E., Solovey D.V. Reception and study of copper fulleride films // Vacuum technology, materials and technology. M.: FSUE "Research Institute of Vacuum Technology SA Vekshinsky." 2013. P. 151-155.
- [8] Shpilevsky E. M., Shpilevsky E. M., Prylutskyy Y. I., Matzuy L. Y., Zakharenko M. I., Le Normand F. Structure and properties of C60 fullerene films with titanium atoms // Mat.-wiss. u. Werkstofftech. 2011. Vol. 42, No. 1. P. 59-63.

- [9] Baran LV, Shpilevsky EM, Ukhov VA The formation of phases in copper-fullerite layers during annealing in vacuum // Vacuum Technology and Technology. 2004. T. 14. № 1. Pp. 41-46.
- [10] Shpilevsky E. M., Zhdanok S. A., Schur D. V. Containing carbon nanoparticles materials in hydrogen energy. Hydrogen Carbon Nanomaterials in Clean Energy Hydrogen Systems - II. Dordrecht: Springer Science, 2011. P. 23-39.
- [11] Shpilevsky E.M. Structure and physical properties of metal-fullerene thin films. // Vacuum science and technology, 2014. T.23, №1. Pp. 73-77.
- [12] Shpilevsky EM, Zamkovets A.D., Shpilevsky M.E., Filatov S.A., Shilagardi G. Spectral manifestation of plasmon resonance in metal-fullerene nanostructures. // Vacuum technology, materials and technologies. Moscow: NOVELLA, 2015. P.170-175.
- [13] Shpilevsky E.M., Penyazkov O.G., Filatov S.A., Shilagardi G., Tuvshintur P., Timur-Bator D., Ulam-Orgikh D. Modification of materials by carbon nanoparticles // Solid State Phenomena Shweizarland, 2018.V. 271. P.70-75.
- [14] Vityaz P.A., Shpilevsky E.M. Fullerenes in matrices of different substances // Journal of Engineering Physics and Thermophysics. 2012, Volume 85, Issue 4, Page 780-78.
- [15] Shpilevsky E.M., Gorokh G.G., Shpilevsky M.E. Diffusion mass transfer in systems with nanometric elements of the structure. // Materials of the XV Minsk International Forum on Heat and Mass Transfer (May 23-26, 2016, Minsk) in 3 volumes. T.2. Minsk: ITMO it. A.V. Lykov of the NAS of Belarus. 2016. P.300-304.
- [16] The patent of the Republic of Belarus №3117, priority from 24.02.06. High-pass filter. Authors S.A. Zhdanok, E.M. Shpilevsky, I.I. Vasiliev.

Маш өндөр температурын хийн хөргүүртэй реакторын голомтын дизайны судалгаа

Б.Хөхсүвд^{1,2,*}, С.Одмаа^{1,2}, Т.Жамъянсүрэн²

¹Хими, биологийн инженерчлэлийн тэнхим, Хэрэглээний шинжлэх ухаан, инженерчлэлийн сургууль, Монгол улсын их сургууль

²Цөмийн физикийн судалгааны төв, Монгол улсын их сургууль

Энэхүү судалгааны ажлаар дэвшилтэт дизайнтай, 100 МВт чадалтай, Маш Өндөр Температурын Хийн-хөргүүртэй Реакторын (МӨТХР) голомтын дизайныг хийж, нейтроник анализыг гүйцэтгэн критик байдлын болон түлшний шаталтын тооцооллыг хийв. Энд уламжлалт TRISO түлшин дээр ZrC давхарга нэмсэн 20% баяжуулалттай сайжруулсан түлш TRIZO ашигласан. Сайжруулсан түлштэй голомтын дизайны үр дүнг уламжлалт TRISO түлштэй Өндөр Температурын Хийн Реактор (ӨТХР)-ын голомтын дизайнтай харьцуулахад реакторын ажиллах жил буурч байсан хэдий ч түлшний шаталт ихэсч байсан. Үүний шалтгааныг тодруулахын тулд ZrC давхаргын зузааныг өөрчлөн шинэ тооцооллуудыг гүйцэтгэв. Мөн ураны оксид түлшийг ураны оксикарбид түлшээр сольж, түүний нейтроник анализыг хийж харьцуулав. Уг судалгааны ажилд тасралтгүй энергитэй нейтроны харилцан үйлчлэлийг Монте Карло аргаар тооцоолдог Японы Атомын Энергийн агентлагаас хөгжүүлсэн компьютерийн код болох MVP2.0, MVPBURN-ийг цөмийн өгөгдлийн сан JENDL-4.0-ийн хамт ашиглав.

Түлхүүр үгс: МӨТХР, ZrC агуулсан сайжруулсан түлш TRIZO, сольдог ойлгогч, ураны оксикарбид түлш, нейтроник анализ.

I. ОРШИЛ

Дэлхий даяар эрчим хүчний хэрэгцээ ихсэх тусам цөмийн эрчим хүчний хэрэглээ улам нэмэгдэж байна. Өнөөгийн цөмийн эрчим хүчний станцууд нь тогтвортой зардлаар эрчим хүчийг үйлдвэрлэж, дэлхий дахинд тулгамдаж буй хамгийн том асуудлын нэг болох нүүрстөрөгчийн ялгаруулалтыг багасгахад томоохон нөлөө үзүүлэхээс гадна маш олон давуу талуудтай. Ийм шалтгааны үүднээс IV үеийн дэвшилтэт дизайнтай, аюулгүй ажиллагаатай цөмийн эрчим хүчний реакторуудын голомтын дизайны судалгааг олон улсын судалгааны төвүүд болон их сургуулийн эрдэмтэн, судлаачид ихэд сонирхон хийх болсон. IV үеийн реакторууд эдийн засгийн өндөр үр ашигтай, аюулгүй ажиллагааг сайжруулсан, хаягдлын хэмжээг багасгасан, цөмийн зэвсгийн материал дэлгэрүүлэхээс хамгаалагдсан байхаар загварчлагдсан байна [1]. Маш өндөр температурын хийн-хөргүүртэй реактор (МӨТХР) нь IV үеийн реакторын нэг болон судлагдаж байгаа ба үүнд голомтын дизайны хийцийн материалууд чухал ач холбогдолтой. МӨТХР нь өндөр температурт

аюулгүй ажиллагааг сайжруулсан олон давхаргат TRIZO түлш, дулаан багтаамж өндөртэй бал чулуун голомт болон гелийн инертийн хийн хөргүүртэй учраас ердийн бус ажиллагааны үед ч голомт ба хөргүүрийн температур хурдан ихсэхгүй тул осолд хүргэх магадлал багатай байдаг [2, 3]. Мөн МӨТХР-ийн гол сайжруулалт нь ZrC агуулсан сайжруулсан TRIZO түлш бөгөөд уг түлш нь түлшний чөмөгт үүссэн хуваагдлын хатуу болон хий хэлбэртэй бүтээгдэхүүнийг гадагш алдахгүй барих олон давхаргаас бүрдэнэ. Эдгээр давхаргууд нь маш өндөр температурт буюу 1600°C-т түлшний механик шинж чанарыг алдагдуулахгүй [3]. Энэ нь аюулгүй ажиллагааны горимыг хангах ба түлшийг үр ашигтай шатах боломжийг өгч ингэснээр ашигласан болон ашиглагдаагүй түлшийг бусад зориулалтаар хэрэглэгдэхийг хязгаарлана. Цаашлаад, бал чулуун удаашруулагч нь нейтроны шингээлт бага, цацрагийн нөлөөгөөр материалын бүтцийн өөрчлөлт бага, дулаан дамжуулах чадвар сайн, дулаан багтаамж өндөртэй байдаг. Хийн хөргүүрийн хувьд мөн дулаан багтаамж өндөртэй, нейтрон шингээлтийн хөндлөн огтлол багатай ба химийн шинж чанарын хувьд

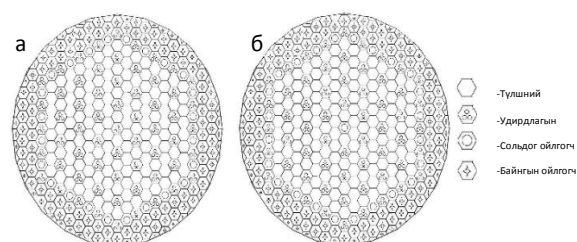
* Electronic address: b.khukhsuvd@gmail.com

инертийн хий, фазын өөрчлөлтгүй, гаралтын температурыг ихэсгэснээр дулааны үр ашигтай байдлыг нэмэгдүүлдэг зэрэг онцлог шинж чанаруудтай. Өмнө нь гүйцэтгэсэн судалгааны ажлуудад реакторыг амжилттай унтраасны дараа голомтод хуримтлагдсан хуваагдлын бүтээгдэхүүнүүдийн задралаас үүсэх дулааныг идэвхгүйгээр зайлуулах чадвартай, голомтын төвдөө ойлгогчгүй болон ойлгогчтой, газар дээр байрлах призмат MTR -ийн голомтын дизайны параметруудийн хамаарлыг гарган авсан байдаг [4, 5]. Бидний энэ ажилд дизайны ижил параметртай, 100 МВт чадлын MTR -ийн голомтын дизайныг гүйцэтгэн, нейтроник анализ хийж, критик байдлын болон түлшний шаталтыг тодорхойлж, өмнөх судалгааны ажлын уламжлалт TRISO түлштэй MTR -ийн үр дүнтэй харьцуулах зорилго тавив.

II. СУДАЛГААНЫ АРГА ЗҮЙ

А. Голомтын дизайн

Төвдөө ойлгогчтой болон ойлгогчгүй MTR -ийн голомт нь хяналтын саваа, байнгын болон сольдог ойлгогч, түлшний блокуудаас бүрдэнэ. Эдгээр зургаан талт блокын хэмжээ болон дизайныг Японы Атомын Энергийн Агентлагын өндөр температурын тест реакторын голомтыг бүрдүүлэх блокуудтай адилханаар загварчилсан [6-9]. Төвдөө ойлгогчгүй болон ойлгогчтой MTR -ийн голомтын үндсэн үзүүлэлтийг Хүснэгт 1-т, голомтын хөндлөн зүсмэгийг Зураг 1-т тус тус харуулав. Өмнөх [4, 5] ажилд гарган авсан параметрийн нөхцлөөс тус хоёр голомтын хэмжээсүүдийг тодорхойлсон.



Зураг 1. Голомтын хэвтээ зүсмэг а) Төвдөө ойлгогчгүй MTR -ийн голомтын дизайн б) Төвдөө ойлгогчийн нэг блоктор MTR -ийн голомтын дизайн.

Хүснэгт 1. Хоёр голомтын үндсэн үзүүлэлтүүд.

Үзүүлэлтүүд	Төвдөө ойлгогчгүй дизайн	Төвдөө ойлгогчтой дизайн

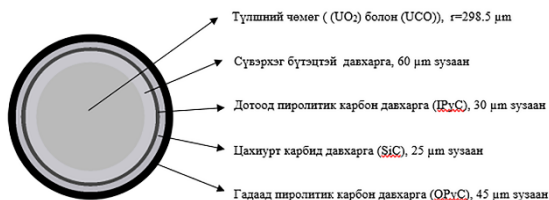
Реакторын дулааны чадал, МВт	100	
Голомтын температур, °C	850	
Голомтын эффектив өндөр, м	6.38 [1]	6.38 [2]
Голомтын эквивалент радиус, м	2.46 [1]	2.47 [2]
Дотоод ойлгогчийн радиус, м	0	0.18/0.36
Дээд болон доод ойлгогчийн зузаан, м	0.58	0.58
Хажуугийн ойлгогчийн зузаан, м	0.39	0.87
Дундаж чадлын нягт, Вт/см³	0.82	
Хөргүүрийн материал	Гелийн хий	
Түлш	UO ₂	
Түлшний баяжуулалт (wt%)	20	
Түлшний блокны нийт тоо	1452	
Давхаргын тоо	11	
Удирдлагын савааны тоо голомтонд/гадаад ойлгогчинд	407/264	396/264
Дотоод/гадаад ойлгогчийн нийт блокны тоо	0	11/264

Б. Түлшний дизайн

MTR -ийн түлш нь сайжруулсан TRISO буюу түлшний чөмгийг бүрхсэн 5 давхаргатай. (Зураг 2а). Уг түлш нь 1446°C-д 500 өдөр шарагдахад хуваагдлын бүтээгдэхүүнүүдийг гадагш алдалгүйгээр механик болоод аюулгүй ажиллагааны шинж чанарыг багтаасан дэвшилтэт дизайн юм [3]. Зураг 2б-д ердийн TRISO түлшний зүсмэгийг харуулав. Бид мөн уг судалгааны ажлаар сайжруулсан TRISO түлшний ураны диоксид чөмгийг ураны оксикарбид түлшний чөмгөөр сольж, үр дүнг харьцуулав. Карбид түлш нь оксид түлшнээс ялгаатай нь дулаан дамжуулах чадвар сайтай. Түүнчлэн өндөр температурт түлшний нүүлт хийдэггүйгээс гадна түлшний давхаргуудтай харилцан үйлчлэл багатай [10].



Зураг 2а. Сайжруулсан TRISO түлшний зүсмэг.



Зураг 2б. Ердийн TRISO түлшний зүсмэг.

В. Нейтроник анализ

Энэхүү ажилд нейтроник анализын тооцооллыг тасралтгүй энергитэй нейтроны харилцан үйлчлэлийг Монте Карло аргаар тооцоолдог, Японы атомын энергийн Агентлагийн хөгжүүлсэн компьютерийн код болох MVP2.0 [11], MVPBURN [12]-ийг цөмийн урвалын өгөгдлийн сан JENDL4.0 [13]-ийн хамт ашиглан гүйцэтгэв. Тооцооллыг бүх удирдлагын савааг голомтоос гарган, үүсэх орон зайг гелийн хийгээр дүүргэсэн тохиолдолд хийсэн. Өөрөөр хэлбэл реактор бүрэн чадлаар ажиллаж байна гэж үзсэн. MVP 2.0 [11] кодоор реакторын голомт дэхь эффектив нейтрон үржүүлэх фактор ($k_{\text{эфф}}$)-ыг тодорхойлохдоо голомт дотор үүссэн нейтонуудын санамсаргүй алхалтуудыг тэдний мөрийн урт, мөргөлдөөний нягт зэргийг үнэлэх замаар үр дүнг гаргана. Тооцоолол хийхдээ реакторт үүссэн нэг нейтрон 50000 ялгаатай харилцан үйлчлэл хийнэ, нийтдээ хуваагдлын 100 нейтроны санамсаргүй харилцан үйлчлэлийг авч үзсэн. Статистик боловсруулалтын үр дүнг сайжруулахын тулд эхний 20 нейтроны харилцан үйлчлэлийг тооцоогүй болно. Реакторын голомтын нейтроник анализын тооцоолол бүр дээрх нөхцлөөр явагдсан.

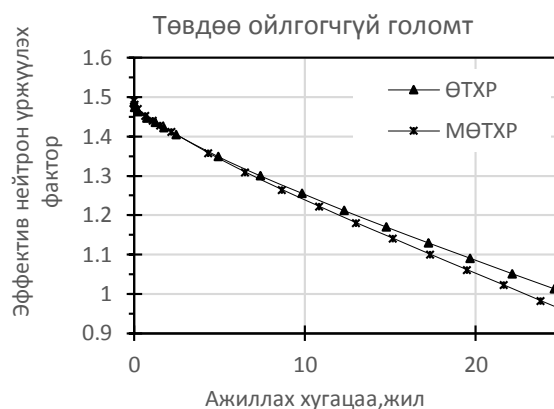
III. ҮР ДҮН БА ХЭЛЭЛЦҮҮЛЭГ

А. ZrC давхаргын нөлөө

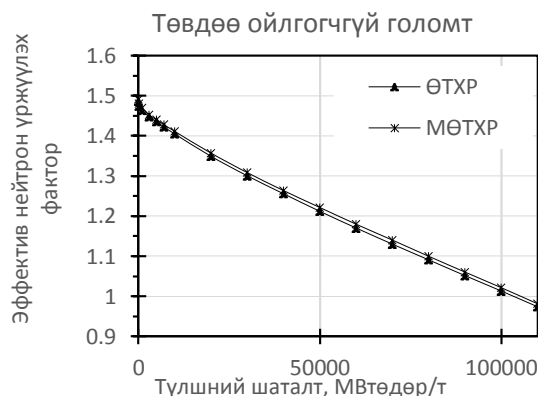
100 МВт дулааны чадалтай, 850°C температурт ажиллаж байгаа төвдөө ойлгогчгүй болон ойлгогчтой МӨТХР-ийн голомтын нейтроник анализын үр дүнг Хүснэгт 2 болон Зураг 3, 4-д харуулав.

Хүснэгт 2. 100 МВт чадлын МӨТХР болон ӨТХР-ийн голомтуудын нейтроник анализын үр дүн.

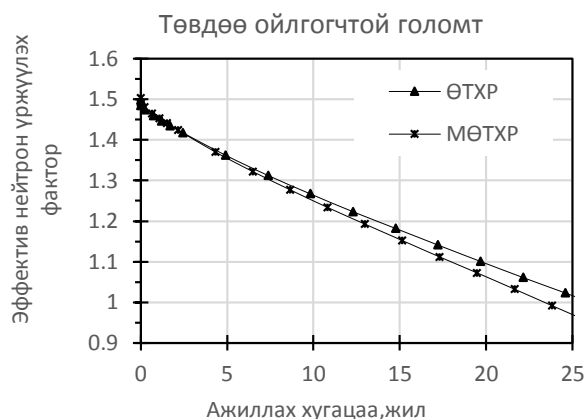
Реакторын төрөл	$k_{\text{эфф}}$, (алдаа%)	Голомтын ажиллах хугацаа(жил)	Түлшний шаталт (ГВт*өдөр/тн)
Төвдөө ойлгогчгүй ӨТХР [4]	1.4862 (0.0205)	24.4	100.0
Төвдөө ойлгогчгүй МӨТХР	1.4921 (0.0228)	22.8	106.0
Төвдөө ойлгогчтой ӨТХР [5]	1.4977 (0.0183)	26.4	106.0
Төвдөө ойлгогчтой МӨТХР	1.5025 (0.0207)	23.4	108.0



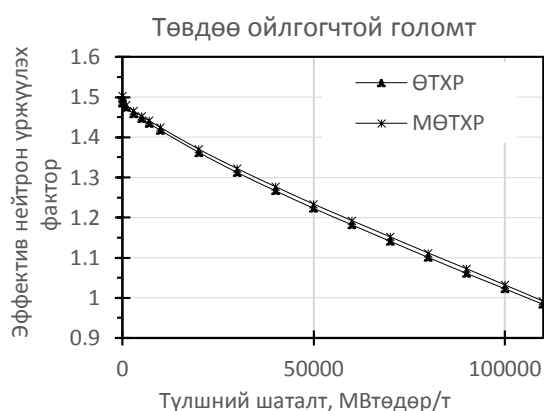
Зураг 3а. Төвдөө ойлгогчгүй ӨТХР болон МӨТХР-ийн голомтын эффектив нейтрон үржүүлэх факторын хугацаанаас хамаарсан өөрчлөлт.



Зураг 3б. Төвдөө ойлгогчгүй ӨТХР болон МӨТХР-ийн голомтын эффектив нейтрон үржүүлэх факторын түлшний шаталтнаас хамаарсан өөрчлөлт.



Зураг 4а. Төвдөө ойлгогчтой ӨТХР болон МӨТХР-ийн голомтын эффектив нейтрон үржүүлэх факторын хугацаанаас хамаарсан өөрчлөлт.



Зураг 4б. Төвдөө ойлгогчтой ӨТХР болон МӨТХР-ийн голомтын эффектив нейтрон үржүүлэх факторын түлшний шаталтнаас хамаарсан өөрчлөлт.

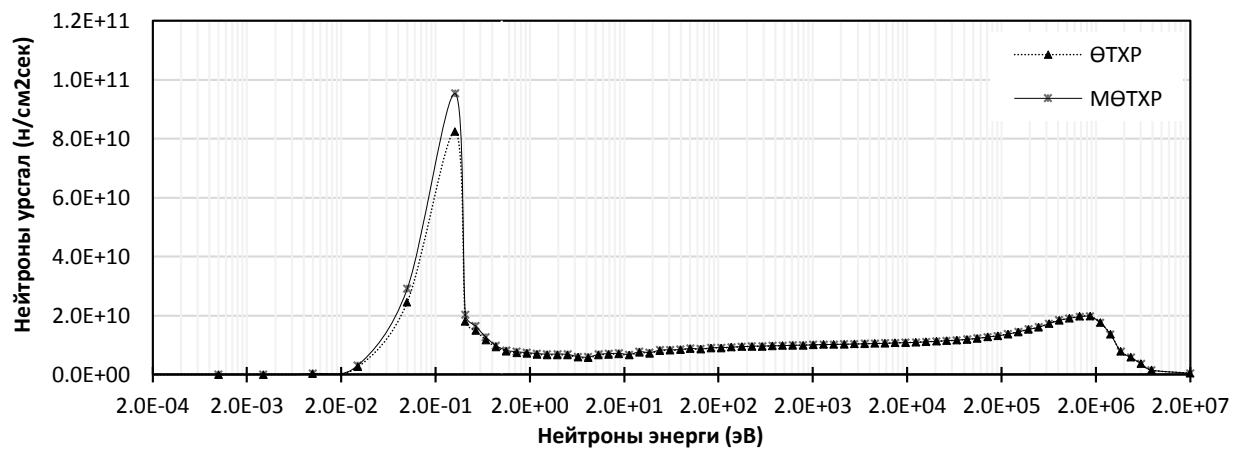
Үр дүнгээс харахад нэмэлт ZrC давхаргын нөлөөгөөр реакторын ажиллагааны эхэн үед эффектив нейтрон үржүүлэх фактор болон түлшний шаталт ихэсч байсан хэдий ч реакторын ажиллах жил багассан. Мөн төвийн ойлгогчийн нөлөөгөөр нейтроник үр дүнгүүд сайжирсан учраас дараагийн анализуудыг төвдөө ойлгогчтой реакторын голомт дээр хийв. Уламжлалт TRISO түлштэй, төвдөө ойлгогчтой реакторын дизайныг өмнөх судалгааны ажлаар гүйцэтгэж, судалсан [5].

Сайжруулсан TRISO түлш ашигласнаар реакторын ажиллах жил багасч, түлшний шаталт ихэссэн үр дүнгийн шалтгааныг тайлбарлахын тулд ZrC нэмэлт давхаргатай, давхаргагүй TRISO түлштэй төвдөө ойлгогчтой реакторын голомтоорх нейтроны урсгал болон хуваагдлын урвалын хурдыг харьцуулав. Зураг

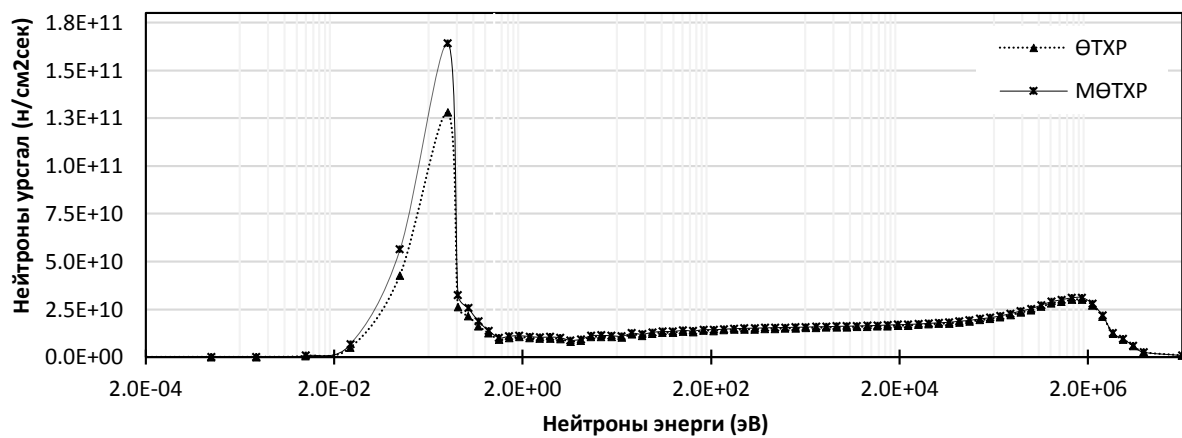
5а болон 5б-д реакторын ажиллагааны эхэн болон сүүл үеийн МӨТХР болон ӨТХР-ийн нейтроны урсгалыг харуулав. Зургаас ZrC давхаргын нөлөөгөөр нейтроны урсгал нь реакторын ажиллагааны турш нейтроны энергийн бүх мужид арай өндөр байгаа нь харагдана. Үүний учир нь ZrC давхарга нь нейтрон шингээх биш харин сарниулан ойлгож байгааг харуулна. Харин Зураг 6а, 6б нь ӨТХР болон МӨТХР-ийн реакторын ажиллагааны эхэн болон сүүл үед голомт даяарх ^{235}U изотопын хуваагдах урвалын хурдыг харуулж байна. Сайжруулсан TRISO түлштэй голомтын хувьд ^{235}U изотопын хуваагдах урвалын хурд арай илүү байгаа нь энд дулааны нейтроны өндөр урсгалтай холбоотой. Тиймээс Хүснэгт 2-т харуулснаар МӨТХР-ийн ажиллагааны эхэн үеийн эффектив нейтрон үржүүлэх фактор нь ӨТХР-тэй харьцуулахад бага зэрэг илүү байна. МӨТХР-ийн ажиллагааны сүүл үед ^{235}U изотопын хуваагдах урвалын хурд ч, нейтроны урсгал ч өндөр байгаа нь МӨТХР-ийн түлшний шаталт ӨТХР-тай харьцуулахад их болохын шалтгаан болно. МӨТХР-ийн хувьд нейтроны өндөр урсгалаас болж реакторын ажиллах жил бага зэрэг буурсан.

В. ZrC давхаргын зузааны нөлөө

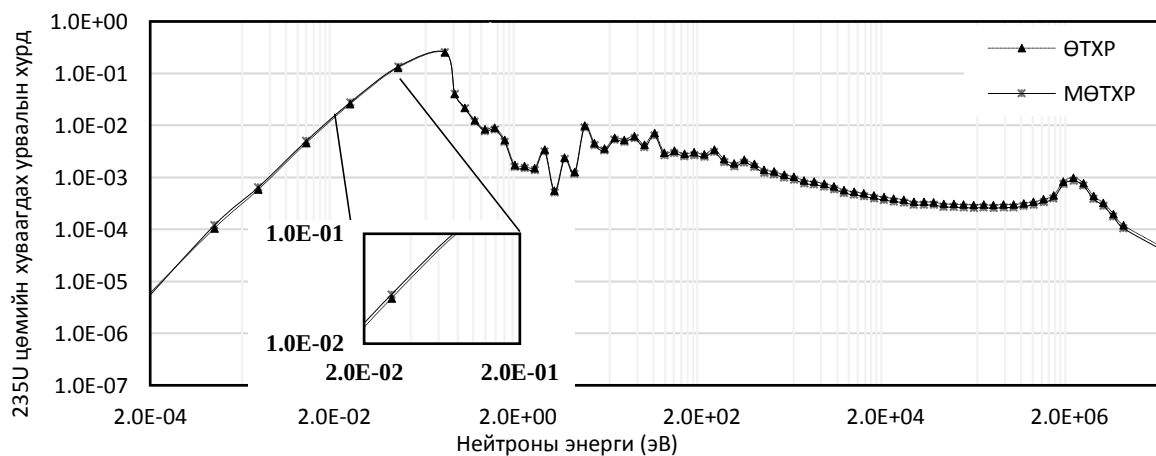
Бид дараагийн тооцололдоо төвдөө ойлгогчтой МӨТХР-ийн түлшний ZrC давхаргын 20 мкм зузааныг 10 мкм, 40 мкм болгон өөрчилж, түүний нейтроник анализын үр дүнг Хүснэгт 3 болон Зураг 7-д харуулав. Үр дүнгээс харахад түлшний ZrC давхаргын зузаан нэмэгдэх тусам голомтын түлшний нэг циклийн үргэлжлэх хугацаа багасч байсан хэдий ч реактор ажиллаж эхлэх үеийн эффектив нейтрон үржүүлэх фактор болон түлшний шаталт ихэсч байсан. ZrC давхаргын зузаан ихэсэхэд хуваагдагч материалын дэргэд нейтроныг сарниулж, удаашруулан ойлгох материалын хэмжээ ихэссэнээр ^{235}U -ын хуваагдал хурдтай явагдаж, нейтроны урсгал ихэснэ. Үүнтэй холбоотойгоор дээрх үр дүн гарна.



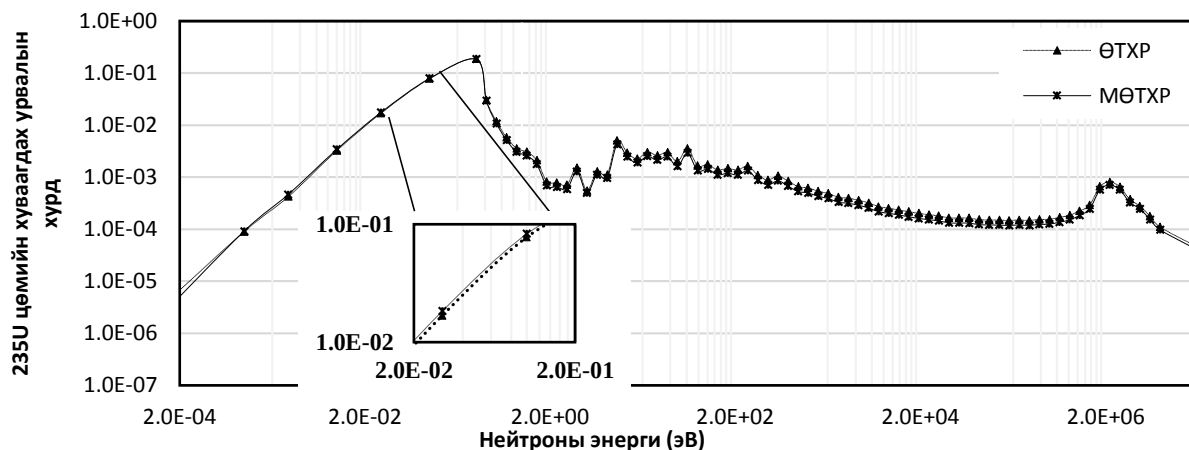
Зураг 5а. Төвдөө ойлгогчтой THX болон MTHX -ийн ажиллагааны эхэн үеийн нейтроны спектр.



Зураг 5б. Төвдөө ойлгогчтой THX болон MTHX -ийн ажиллагааны сүүл үеийн нейтроны спектр.



Зураг 6а. Төвдөө ойлгогчтой THX болон MTHX -ийн ажиллагааны эхэн үед ^{235}U цөмийн хуваагдах урвалын хурд.



Зураг 6б. Төвдөө ойлгогчтой OTXP болон MOTXP-ийн ажиллагааны сүүл үед ^{235}U цөмийн хуваагдах урвалын хурд.

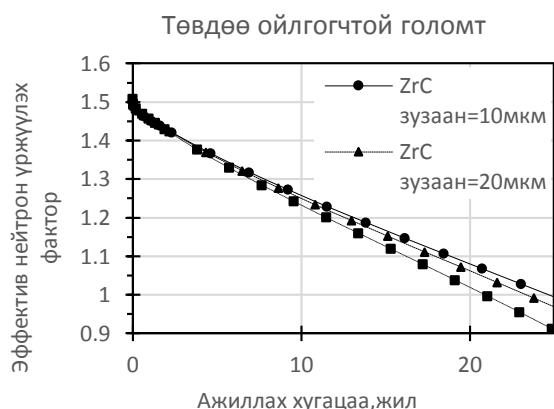
Хүснэгт 3. MOTXP голомтын гүйцэтгэлд ZrC давхаргын зузааны нөлөөлөл.

ZrC давхаргын зузаан	Кэфф. (алдаа%)	Голомтын ажиллах хугацаа(жил)	Түлшний шаталт (ГВт*өдөр/тн)
10 мкм	1.5010 (0.0187)	24.7	107.0
20 мкм	1.5025 (0.0207)	23.4	108.0
40 мкм	1.5072 (0.0213)	20.9	109.2

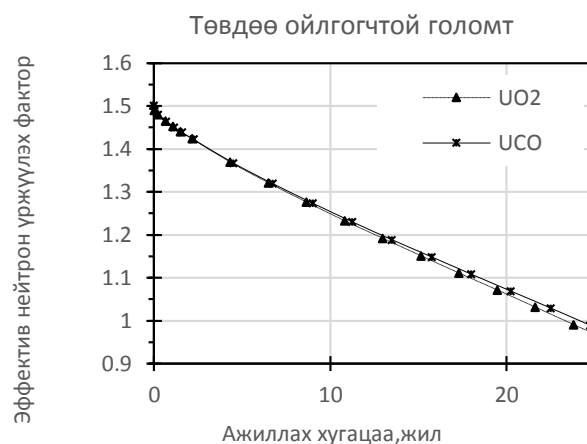
нейтрон үржүүлэх фактор болон түлшний шаталт бага зэрэг буурсан ба үр дүнг Хүснэгт 4 болон Зураг 8а, 8б-д харуулав.

Хүснэгт 4. UCO чөмөгтэй TRIZO түлш бүхий төвдөө ойлгогчтой MOTXP-ийн голомтын нейтроник анализын үр дүн.

Түлшний чөмгийн төрөл	Кэфф. (алдаа%)	Голомтын ажиллах хугацаа(жил)	Түлшний шаталт (ГВт*өдөр/тн)
UO ₂	1.5025 (0.0207)	23.4	108.0
UCO	1.5014 (0.0191)	24.2	107.4



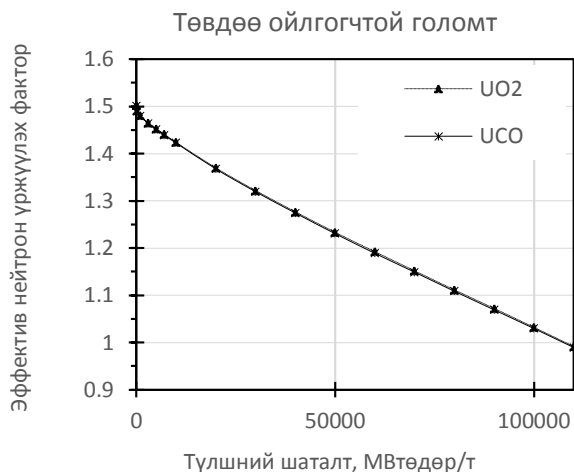
Зураг 7. Төвдөө ойлгогчтой MOTXP-ийн голомтын эффектив нейтрон үржүүлэх факторын хугацаанаас хамаарсан өөрчлөлтөд ZrC давхаргын зузаан нөлөөлөх нь.



Зураг 8а. Өөр өөр чөмөг бүхий TRIZO түлштэй, төвдөө ойлгогчтой MOTXP-ийн голомтын эффектив нейтрон үржүүлэх факторын хугацаанаас хамаарсан өөрчлөлт.

С. TRIZO түлшний чөмөгт UCO ашиглах нь

Ураны оксид түлшийг ураны оксикарбид түлшээр сольж, нейтроник анализын үр дүнг харьцуулахад карбидын нөлөөнөөс болж голомтын ажиллах хугацаа уртасч, эффектив



Зураг 8б. Өөр өөр чөмөг бүхий TRIZO түлштэй, төвдөө ойлгогчтой МӨТХР-ийн голомтын эффектив нейтрон үржүүлэх факторын түлшний шаталтнаас хамаарсан өөрчлөлт.

IV. ДҮГНЭЛТ

1. Энэ ажилд 100МВт чадлын төвдөө ойлгогчтой болон ойлгогчгүй, сайжруулсан түлш ашигласан МӨТХР-ийн голомтын дизайныг хийж, реакторын нейтроник анализ гүйцэтгэн критик байдлын болон түлшний шаталтын тооцооллыг гүйцэтгэв.

2. МӨТХР-ийн нейтроник анализын үр дүнг МӨТХР-ийн үр дүнтэй харьцуулахад реакторын ажиллах жил багассан хэдий ч эффектив нейтрон үржүүлэх фактор болон түлшний шаталт ихэсч байгааг олж тайлбарлав.

3. TRISO түлшний ZrC нэмэлт давхаргын зузаан нейтроник анализын үр дүнд хэрхэн нөлөөлөхийг олж тогтоов.

4. Төвдөө ойлгогчтой МӨТХР-ийн TRIZO бүхий түлшний ураны оксид чөмгийг ураны оксикарбид чөмгөөр сольж, тооцоолол хийн нейтроникийн үр дүнг гаргаж авав.

V. ТАЛАРХАЛ

МУИС-ЦФСТ-ийн МИНАТО кластер серверийн тогтвортой ажиллагааг хангаж, тооцоолол явуулах боломж олгосон МУИС-ХШУИС-ийн дэд профессор Б.Мөнхбатад талархал илэрхийлж байна.

НОМ ЗҮЙ

- [1] Very-High Temperature Reactor (VHTR), The Generation IV International Forum, [Cited 2016 October], Available from: <http://www.gen-4.org/gif/jcms>

/c_42153/very-high-temperature-reactor-vhtr, (2000).

- [2] HAYASHI K., et al.: Assessment of Fuel Integrity of HTTR and Its Permissible Design Limit, Japan: JAERI-M-89-162, (1989).
- [3] R.J.M Konings: Comprehensive nuclear material, Vol 3, 215-236, (2012)
- [4] ODMAA, S., et al: Neutronic and Thermo-Hydraulic Analysis of a Small, Long-Life HTGR for Passive Decay-Heat Removal, Journal of Nuclear Science and Technology, (2015)
- [5] ODMAA, S., et al: Design Parameters in an Annular, Prismatic HTGR for Passive Decay Heat Removal, Annals of Nuclear Energy, (2018)
- [6] SAITO, S., et al.: Design and Safety Consideration in the HTTR, Energy, (1991)
- [7] SAITO, S., et al.: Design of HTTR, JAERI-1332, Japan: Japan Atomic Energy Research Institute, (1994)
- [8] SHIOZOWA, S., et al.: Overview of HTTR Design Features, Nucl. Eng. And Design, (2004)
- [9] Evaluation of HTGR Performance: Benchmark Analysis Related to Initial Testing of the HTTR and HTR-10, IAEA-TECDOC 1382, IAEA: Vienna, (2003)
- [10] CHARLES M. BARNES et al.: Fabrication process and product quality improvements in advanced gas reactor UCO kernels, Proceedings of the 4th International Topical Meeting High Temperature Reactor Technology HTR2008, USA, (2008)
- [11] NAGAYA, Y., et al.: MVP/GMVP II: General Purpose Monte-Carlo Code for Neutron and Photon Transport Calculations Based on Continuous Energy and Multigroup Methods, JAERI-1348, Japan: Japan Atomic Energy Research Institute, (2005)
- [12] OKUMURA, K., et al.: MVP-BURN User's Manual, Japan: Atomic Energy Agency, 2005
- [13] SHIBATA, K., et al.: Japanese Evaluated Nuclear Data Library-JENDL-4.0, A New Library for Nuclear Science and Engineering, J.Nucl.Sci.Tech, 48(1). 1-30, (2011).

Электрон бүтцийн тооцоололд Торын Больцманы загварыг ашиглах тооцооллын тойм

Г.Мөнхсайхан*, Б.Одонтуяа, Л.Хэнмэдэх, Д.Наранчимэг, До. Нямсүрэн

Шинжлэх Ухаан Технологийн Их Сургууль, Хэрэглээний Шинжлэх Ухааны Сургууль

Энэхүү ажилд Нягтын функционалын онол болон кинетик онолын хоорондын шинэ уялдаа холбоог тодорхойлсон торын Больцманы аргын талаарх тоймыг харуулсан. Энэ аргад Кон-Шэмийн (КШ) тэгшитгэлүүдийг нэг бөөмийн кинетик тэгшитгэлд нийцсэн тогтвортой төлөвийн шийдийн макроскопик хязгаар хэмээн томъёолдог. Үүний зэрэгцээ электрон бүтцийн тооцоололд торын кинетик дөхөлтийг ашиглах үндсэн санааг авч үзсэн болно.

PACS number: 31.25.Qm, 31.15.E-, 31.15.-p

Түлхүүр үг: Олон бөөмийн систем, Кон-Шэмийн тэгшитгэл, Торын Больцманы арга.

ОРШИЛ

Харилцан үйлчлэлцэж буй олон биеийн системийн физик шинж чанарын тооцоолол нь орчин үеийн физик, хими болон хатуу биеийн судалгааны хамгийн гол асуудал болж байна. Энэ төрлийн судалгаанд Шредингерийн тэгшитгэлийн системийг огторгуйн $3N$ болон спиний N хувьсагчаар боддог (N нь системийн бөөмийн тоо). Атомуудын хувьд электроны тоо нь $N \sim 1 - 100$, жижиг молекулуудын хувьд 100 -аас их, хатуу биеийн хувьд $N \sim 10^{23}$ байна. Иймд дээрх нийлмэл системүүдийг тооцоолох дөхөлт загварыг хөгжүүлэх явдал нь нэн чухал юм. Эдгээр тохиолдлуудын дийлэнхэд долгион функцийг тооцоолохоос илүүтэй холбоос энерги, туйлшрал, дамжуулал зэрэг хэмжигддэг хэмжигдэхүүнүүдийг тооцоолох нь нэн чухал байдаг. Олон бөөмийн системийн тооцоололд Хознберг, Кон [1], Кон-Шэм [2-3] нарын боловсруулсан нягтын функционалын онолыг ашигласнаар тооцооллын өртгийг бууруулах боломж бүрдсэн юм. НФО-н Кон-Шэмийн дөхөлтөөр харилцан үйлчлэлцэж буй олон бөөмийн системийн тодорхойлолтыг эффектив харилцан үйлчлэлгүй системээр “тодорхой” илэрхийлэх боломжтой. Эффектив потенциалыг харилцан үйлчилж буй системийн бүрэн электроны нягтаар бүрэн тодорхойлдог тул нягтын функционал гэж нэрлэгддэг. Гэвч системийн үндсэн төлөвийн энерги нь нягтын функционал байх бөгөөд олон биеийн квант

бодлогын шинж чанар нь нилээд төвөгтэй байдаг тул энэ функционалын тодорхой илэрхийлэл нь мэдэгдээгүй хэвээр байна. Гэвч сүүлийн жилүүдэд хийгдсэн олон тооны нарийвчлал сайтай ажлуудын үр дүнд нарийвчлал сайтай ойролцооллууд бий болсоор байна [4,5].

Сүүлийн үед Торын Больцманы арга хэмээх шингэний динамикийн аргуудыг төрөл бүрийн физик системүүдийн тооцоололд ашиглаж эхэлсэн бөгөөд энэ арга нь дээрх төрлийн нийлмэл тооцоололд харьцангуй тохирч байна [6]. Торын Больцманы арга нь шингэний динамик, цахилгаан соронзон, квант механик, Бозе-Эйнштейны конденсац зэрэг [7] шугаман болон шугаман бус тухайн дифференциал тэгшитгэлээр илэрхийлэгддэг олон төрлийн нийлмэл динамик системүүдийн тооцоололд ашиглагддаг төдийгүй электрон бүтцийн тооцоололд ашиглагдаж болохыг Мендоза нар [8] судалж, Кон-Шэмийн тэгшитгэлийн торын кинетик томъёолол хүчин төгөлдөр болохыг харуулжээ.

НЯГТЫН ФУНКЦИОНАЛЫН ОНОЛ

Кон-Шэмийн тэгшитгэл. N_I ион ба N_e электроноос тогтох молекулын квант механик шинж чанар нь N биеийн долгион функцийн ($\psi(r_1, \dots, r_{N_e}; R_1, \dots, R_{N_I}; t)$) хувьд Шредингерийн тэгшитгэлээр илэрхийлэгдэнэ.

$$i\hbar \partial_t \psi = H\psi \quad (1)$$

* Electronic address: munerd@yahoo.com

Энд: H - системийн Гамильтониан буюу кинетик энерги, электрон-электрон, электрон-ионы Кулоны харилцан үйлчлэл юм. Тооцооллын хувьд энэ тэгшитгэл бодогдох боломжгүй тул ийм системүүдийг бодох ойролцоолсон загваруудыг хөгжүүлдэг.

Кон-Шэмийн томъёолол. 1960-аад оны эхээр Кон, Хозенберг нар квант олон биеийн системийн үндсэн төлөвийн энерги нь $\rho(\vec{r})$ гэсэн нэг биеийн электрон нягтаар цор ганц тодорхойлогдоно гэдгийг баталсан [2]. Энэ үр дүнд тулгуурлан Кон-Шэм нар

$$H_{KS}\phi_j = E_j\phi_j \quad (2)$$

хэлбэр бүхий нэг биеийн хугацаанаас үл хамаарах эффектив Шредингерийн тэгшитгэлүүдийн системийг гаргасан. Энд: $\phi_j(\vec{r})$ нь E_j энерги бүхий j – p орбитын долгион функц ба H_{KS} Гамильтонианыг дараах хэлбэрээр бичсэн. Үүнд:

$$H_{KS} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_j^2 + \int \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|}d^3r' + \sum_l Z_l \int \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{R}_l-\vec{r}'|}d^3r' + V_{XC}[\rho] \quad (3)$$

Энд: R_l ба Z_l нь цөмийн координат ба цэнэг болно. (3) тэгшитгэл дэх V_{XC} нь солилцоо-корреляцийн энерги бөгөөд энэ нь олон биеийн үл мэдэгдэх харилцан үйлчлэл ба Паулийн хоригийн зарчмыг багтаадаг. Кон-Хозенбергийн теоремоор V_{XC} гэсэн хэсэг нь зөвхөн нийт электроны нягтаас

$$\rho(\vec{r}) = \sum_j |\phi_j(\vec{r})|^2 \quad (4)$$

хамаарна. Энэ хамаарлыг тооцвол Кон-Шэмийн тэгшитгэл нь тодорхой болж олон биеийн бодлого хялбарчлагддаг.

Нөгөө талаас Кон-Шэмийн тэгшитгэлүүд нь зөвхөн $\rho(\vec{r})$ гэсэн нийт нягтаар илэрхийлэгдэх нэг бөөмийн хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлийн систем болно. Цаашид орбиталиуд нь $N_e(N_e + 1)/2$ гэсэн глобал хязгаарлалтууд бүхий

$$\int \phi_j(\vec{r})\phi_k(\vec{r})d\vec{r} = \delta_{jk} \quad (5)$$

гэсэн ортогональчлалын нөхцлийг хангах ёстой.

КОН-ШЭМИЙН КИНЕТИК ОНОЛЫН ДӨХӨЛТ

$t \rightarrow t' = -it$ гэсэн Викийн (эргэлт) буцаалтыг хийхэд хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэл нь нэг бөөмийн нэвчилт-урвалын тэгшитгэл болох ба урвалын хэсэг нь потенциал энергийг агуулна:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\hbar}{2m}\nabla^2\psi - \frac{V}{\hbar}\psi \quad (6)$$

Энд: ψ – долгион функц, V – потенциал энерги. Урвал-нэвчилтийн тэгшитгэл нь Больцманы тэгшитгэлийн үндсэн суурь болсон макроскопик хязгаар байдлаар үүсдэг тул долгионы функцийг “шингэн” хэмээн үзэж долгион функцийг кинетик ойлголтыг

$$\sum_p f_p(\vec{r}; t') = \psi(\vec{r}; t') \quad (7)$$

байдлаар таамаглаж болно.

Дээр дурьдсан $p = 0, \dots, b$ бүхий $f_p(\vec{r})$ нь t хугацаанд $\vec{r}$ байрлал дээр $\vec{v}_p$ хурдтай “бөөм” олодох магадлал ба b нь дискрет хурдны векторын нийт тоо юм. Тухайн эгшинд “бөөм” гэдэг нь физик утгагүй тооцоололд ашиглах квази-бөөм юм. ψ долгион функцийг хувьд дурын анхны нөхцөл сонгосон гэж үзвэл үүнийг

$$\psi(\vec{r}; t') = \sum_k a_k \phi_k(\vec{r}) \exp(-E_k \cdot t'/\hbar) \quad (8)$$

гэсэн ортогональ орбиталийн базис ашиглан өргөтгөж болно. Энэ нь тодорхой хугацааны дараа $\psi(\vec{r}; t') = a_0 \phi_0(\vec{r}) \exp(-E_0 \cdot t'/\hbar)$ болох ба нормчлолын дүнд хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлийн үндсэн төлөвийн шийдэнд хүрнэ:

$$E_0 \cdot \phi_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\phi_0 - V\phi_0 \quad (9)$$

f_p – түгэлтийн функцийг Торын Больцманы тэгшитгэлээр тодорхойлно:

$$f_p(\vec{r} + \vec{v}_p; t + 1) = f_p(\vec{r}; t) - \omega(f_p - f_p^e) + V_p \quad (10)$$

Энд: ω – нь $D = \hbar/m$ гэсэн квант нэвчилтийг тохируулагч релаксацийн давтамж, f_p^e – масс хадгалалтыг тодорхойлох локаль тэнцвэр, V_p – потенциал энергийн сарнилтай уялдсан бөөмийн алдагдал/авалтыг илэрхийлэгч үүсгүүрийн хэсэг болно. Торын нэгжээр $\Delta x = \Delta t = 1$ тул

$$D = C_S^2 \left(\frac{1}{\omega} - \frac{1}{2} \right) \quad (11)$$

болно. Энд: C_S – нь торын дууны хурд тул ω – г өөрчлөх байдлаар электроны эффектив массыг

тодорхойлох боломжтой. Ийм байдлаар тэнцвэрт түгэлтийн тодорхой илэрхийллийг гаргана:

$$f_p^e = \xi_p \psi \quad (12)$$

Энд: $\xi_p = (1 + (D - C_S^2)q_p)$, ω_p – нэгж болгон нормчлосон торын жин, $q_p = (v_p^2 - 3C_S^2)/2C_S^4$ – хоёрдугаар эрэмбийн торын Эрмитын полином. V_p – сарнилын үүсгүүрийг

$$V_p = \chi_p \frac{v}{h} \psi \quad (13)$$

гэж бичнэ. Энд $\chi_p = \omega_p [1 - (v_p^2 - 3C_S^2)/2C_S^2]$ ба 1 ба 2-р эрэмбийн импульсууд тэг байгаа эсэхийг нягтална. $\sum_p f_p \vec{v}_p = 0$, $\sum_p f_p \vec{v}_p \cdot \vec{v}_p = 0$. Иймд долгион функцийг импульс болон энергид нөлөөлөхгүй.

KS-тэгшитгэлийг бодохын тулд бидэнд j – р орбиталын түгэлтийн функц шаардлагатай. Өөрөөр хэлбэл $f_p \rightarrow f_{jp}$, $\psi = \psi_j$ байх ба V потенциал энерги нь электрон-электроны, ион-электроны харилцан үйлчлэл болон солилцоо корреляцийн потенциалыг агуулна. Үүнд харгалзах электроны Торын Больцманы тэгшитгэл нь

$$f_{jp}(\vec{r} + \vec{v}_p; t + 1) = f_{jp}(\vec{r}; t) - \omega(f_{jp} - f_{jp}^e) + V_{jp} + W_{jp} \quad (14)$$

болно. Энд: W_{jp} – нь (5) томъёонд харуулсан ортогональчлалыг агуулсан үүсгүүрийн хэсэг юм. Тэнцвэрийн түгэлт ба сарнилын потенциалын тодорхой илэрхийллийг дараах байдлаар бичих:

$$f_{jp}^e = \xi_p \psi_j, \quad V_{jp} = \chi_p \frac{v}{h} \psi_j \quad (15)$$

ба ортогональчлалын потенциал нь

$$W_{jp} = -\xi_p \omega \sum_{k < j} \Lambda_{jk} \psi_k \quad (16)$$

хэлбэрт шилжинэ. Энд: $\Lambda_{jk} = \langle \psi_j | \psi_k \rangle / \langle \psi_k | \psi_k \rangle$ нь Гильбертын огторгуйн j ба k орбиталиудын хоорондох өнцгийн косинус юм. Хоёр орбиталь нь харилцан ортогональ буюу $\Lambda_{jk} = 0$ тул энерги нь W_{jp} потенциалд хандив өгөхгүй.

Ортогональчлалын потенциалын үүргийг ойлгох зорилгоор дараах уламжлалыг авч үзье. Бүх орбиталиуд нь $\psi_j(\vec{r}) = \psi(\vec{r})$ гэсэн ижил

долгион функцээр эхэлдэг гэж үзэх тул (14)-р тэгшитгэлд үзүүлсэн ямар ч ортогональчлалын потенциалыг авч үзэхгүй буюу $W_{jp} = 0$ гэж үзнэ. Дээр дурдсан тайлбараас үзвэл долгион функцийг $\phi_k(\vec{r})$ ортогональ базисын өргөтгөл байдлаар бичиж болно.

$$\psi_j(\vec{r}; t') = \sum_p f_{jp} = \sum_k a_{kj} \phi_k(\vec{r}) \exp(-E_k \cdot t'/h) \quad (17)$$

Энд: $a_{kj} = \langle \psi_k | \psi_j \rangle$ нь проекцийн коэффициент. Тодорхой хугацааны дараа нийлбэрийн эхний хэсэг нь үндсэн төлөвийн орбиталь болох ба $\psi_j(\vec{r}; t') = a_{0j} \phi_0(\vec{r}) \exp(-E_0 \cdot t'/h)$ болно. Ийм тохиолдолд торын кинетик дөхөлт дэх бүх орбиталиуд нь ижилхэн үндсэн төлөвт хүрнэ. Одоо ψ_1 долгион функцийг ψ_0 долгион функцээс хасвал

$$\psi_1(\vec{r}; t') = \sum_k a_{k1} \phi_k(\vec{r}) \exp(-E_k \cdot \frac{t'}{h}) - \Lambda_{10} \psi_0(\vec{r}; t') \quad (18)$$

Энэ тэгшитгэлийг ойролцоогоор

$$\psi_1(\vec{r}; t') \sum_k \left(\langle \psi_k | \psi_1 \rangle - \frac{\langle \psi_1 | \psi_0 \rangle \langle \psi_k | \psi_0 \rangle}{\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle} \right) \phi_k(\vec{r}) \exp(-E_k \cdot \frac{t'}{h}) \quad (19)$$

гэж бичнэ. ψ_0 орбиталийн тэгшитгэлийг үнэлбэл энэ нь эцсийн дүндээ Φ_0 үндсэн төлөв рүү шилжинэ. Иймд $k = 0$ үед нийлбэр дэх эхний хэсэг нь устаж үлдсэн хэсэг нь

$$\psi_1(\vec{r}; t') = \sum_{k > 0} a_{k1} \phi_k(\vec{r}) \exp(-E_k \cdot \frac{t'}{h}) \quad (20)$$

болно. Иймд ψ_1 орбиталь нь эцэстээ ϕ_1 гэсэн эхний өдөөгдсөн төлөвт шилжинэ. Энэ процессуудыг долгион функц бүрийн хувьд давтан бичвэл

$$\psi_j(\vec{r}; t') \sum_k \left(\langle \psi_k | \psi_j \rangle - \sum_{l < j} \frac{\langle \psi_j | \psi_l \rangle \langle \psi_k | \psi_l \rangle}{\langle \psi_l | \psi_l \rangle} \right) \phi_k(\vec{r}) \quad (21)$$

буюу

$$\psi_j(\vec{r}; t') = \sum_k a_{kj} \phi_k(\vec{r}) \exp(-E_k \cdot \frac{t'}{h}) - \sum_{l < j} \Lambda_{jl} \psi_l(\vec{r}; t') \quad (22)$$

болох ба нормчлолын дүнд долгион функц бүр нь Кон-Шэмийн орбиталь тус бүртэй нийлж $\psi_j \rightarrow \Phi_j$ болно. Долгион функцийг үнэлгээнд энэ процедурыг оруулахын тулд j -р долгион функцийг

$$\psi_j^*(\vec{r}; t') = \psi_j(\vec{r}; t') - \sum_{l < j} \Lambda_{jl} \psi_l(\vec{r}; t') = \sum_p f_{jp} - \sum_{l < j} \Lambda_{jl} \psi_l(\vec{r}; t') \quad (23)$$

-д нийцүүлэх хэрэгтэй. Үүнийг хийхийн тулд тэнцвэрийн түгэлт дэх ψ_j -г ψ_j^* -оор орлуулж

$$f_{jp}(\vec{r} + \vec{v}_p; t + 1) = f_{jp}(\vec{r}; t) - \omega(f_{jp} - \xi_p \psi_j^*) + V_{jp} \quad (24)$$

гэсэн торын кинетик тэгшитгэлийг гаргана. Тэгшитгэлийг эмхэтгэн бичвэл

$$f_{jp}(\vec{r} + \vec{v}_p; t + 1) = f_{jp}(\vec{r}; t) - \omega(f_{jp} - \xi_p \psi_j) + V_{jp} - \xi_p \omega \sum_{l < j} \Lambda_{jl} \psi_l(\vec{r}; t') \quad (25)$$

болох ба энэ нь бидний өмнө гарган авсан ортогональчлалын потенциал бүхий торын кинетик тэгшитгэлд хүрнэ. Тодорхой хугацааны дараа $\psi_j \rightarrow \psi_j^* \rightarrow \Phi_j$ болохыг тооцно уу. Энэ процесс нь хугацаанаас хамаарсан Грэм-Шмидтын процедуртай төстэй болно. Энд юуны өмнө ψ_0 долгион функцийг үнэлж, үндсэн төлөвийг олсоны дараа ψ_1 -ийг үнэлнэ гэх мэт цааш бодолтыг хийнэ. Ингэснээр нийт электроны үндсэн төлөвийг олоход их хэмжээний тооцооллын хугацааг зарцуулна.

КОНКУРЕНТ ДИНАМИК

Торын Больцманы аргыг зөвхөн үндсэн төлөвийн тооцоололд ашигладаг ба энд электроны түгэлтийг ионы бодит байрлал $R_l(t)$ ээр тодорхойлогдох Борн-Оппенгеймерийн гадаргууд тохируулдаг. Иймд нийт энергийг үндсэн төлөвийн утганд хүртэл нь хувиргана. Энэ нь стандарт Борн-Оппенгеймерийн дүр төрх юм.

Кон-Шэмийн Торын Больцманы аргыг конкурент динамикаар өргөтгөж болох ба энд электрон болон ионууд нь нэгэн зэрэг хөдөлдөг гэж үздэг [9]. Энэ тохиолдолд энерги хадгалагддаг тул (14)-р тэгшитгэл дэх үл буцах релаксацийн операторыг U потенциалээр нөхөх хэрэгтэй. U потенциалын хувьд системд энерги өгөгдөх үед нягт ба импульс нь хадгалагдана.

Иймд Торын-Больцманы тэгшитгэл нь

$$f_{jp}(\vec{r} + \vec{v}_p h; t + h) = f_{jp}(\vec{r} - \vec{v}_p h; t - h) + 2h(U_{ij} + iV_{ij} + iW_{ij}) \quad (26)$$

хэлбэртэй болно. Энд: h - нь хугацааны алхам юм. U_{jp} илэрхийлэл нь

$$U_{jp} = k\omega_p q_p E_j \phi_j \quad (27)$$

болох ба k нь энергийг E_j утгатай байлгах тохируулгын параметр юм. Одоо уг алгоритм нь хоёр алхамтай болох бөгөөд энерги хадгалагдах шаардлагад нийцсэн байна.

ХЭЛЭЛЦҮҮЛЭГ, ДҮГНЭЛТ

Торын Больцманы аргын хүчинтэй болохыг харуулахын тулд Мендоза нар [7,8] H, He, Be, B ба C гэсэн атомуудын солилцоо, корреляцын энергийг тооцож тухайн тохиолдол бүрт торын хэмжээг $32^3, 40^3, 56^3$ ба 58^3 байхаар сонгосон байна. He атомын хувьд 36^3 , $a_0 = 6.5$ Борын радиус, $\hbar/m = 1$, $\tau = 1$ (бүх хэмжигдэхүүн нь тоон нэгжтэй) хэмжээтэй систем сонгож тэнцвэрийн түгэлт ба үүсгүүрийн хэсэгт зориулан 4-р эрэмбийн Эрмитын цуваа ашигласан байна. Солилцоо, корреляцын тооцоологдсон утгуудыг тооцоолж Беке, Ли нарын [4,5] ажлуудтай харьцуулхад маш сайн тохирсон нь энэ аргын үр дүнтэй болохыг харуулж байна.

Мендоза нар энэ аргаар метан болон усны молекулын тооцоололд тооцоог хийж холбоос хоорондын зай болон өнцгийг $0.95^\circ A$, 104.4° хэмээн тооцоолсон нь онолын болон туршилтын ажлуудын утгуудтай сайн тохирч байв [10,11].

Эцэст нь Борн-Оппенгеймер ба конкурент динамикийн аргуудыг харьцуулсан ба конкурент динамикийн аргыг хүчин төгөлдөржүүлэхийн тулд Борн-Оппенгеймерийн аргыг зөв үр дүн өгнө хэмээн таамагласан байдаг. Ийм зорилгоор H_2 молекулыг торыг сонгон авч, ионуудын хөдөлгөөний тэгшитгэлийг ашиглан (14)-р тэгшитгэлээр электроны ионы үндсэн төлөвийг тооцоолсон байна. Нөгөө талаас конкурент динамикийн хувьд (26)-р тэгшитгэлийн дискрет хувилбарыг ашиглан ионууд болон электроны орбиталиудыг тооцоолсон.

Дээрх бүгдийг нэгтгэн дүгнэвэл Торын Больцманы аргыг ашиглан электроны нягтын функционалын онолын кинетик томъёоллын цаана орших гол санаа харуулахын зэрэгцээ ортогональчлалын потенциалыг ашиглан Кон-Шэмийн орбиталь бүхий системийг олж илрүүлэх боломжтой байна.

НОМ ЗҮЙ

- [1] Gross E and Dreizler R 1995 Density Functional Theory NATO ASI Series: Physics (Springer)
- [2] Hohenberg P and Kohn W 1964 Phys. Rev. 136(3B) B864–B871
- [3] Kohn W and Sham L J 1965 Phys. Rev. 140(4A) A1133–A1138
- [4] Becke A D 1988 Phys. Rev. A 38(6) 3098–3100
- [5] Lee C, Yang W and Parr R G 1988 Phys. Rev. B 37(2) 785–789
- [6] Succi S 2008 The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems 64 471–479
- [7] Mendoza M, Karlin I, Succi S and Herrmann H 2013 Physical Review D 87 065027
- [8] Mendoza M, Succi S and Herrmann H J 2014 Phys. Rev. Lett. 113(9) 096402
- [9] Car R and Parrinello M 1985 Phys. Rev. Lett. 55(22) 2471–2474
- [10] Sprik M, Hutter J and Parrinello M 1996 The Journal of chemical physics 105 1142–1152
- [11] Benedict W, Gailar N and Plyler E K 1956 The Journal of Chemical Physics 24 1139-1165

Физик сургалт ба загвар лаборатори, түүний ач холбогдол судалгаа

П.Энхцэцэг^{1*}, О.Лхагва², Т.Уламбаяр³

¹Хөдөө Аж ахуйн Их Сургууль, Инженер технологийн сургууль

²Монгол Улсын Их Сургууль, Шинжлэх ухааны сургууль

³Монгол Улсын Боловсролын Их Сургууль, Компьютер Мэдээллийн Технологийн Сургууль

Мэдээлэл харилцааны технологи нь аливаа үзэгдлийг математикт шингээн компьютер загвараар илэрхийлсэнээр физикийн тулгуур хуулийг тооцоот туршилтаар нээх боломж бүрдэж байна. Физик дэх мэдээллийн технологийн гол судас нь физикийн 2D, 3D загвар лаборатори бүтээх ажил юм. Дэлхийн өндөр хөгжилтэй орнуудад хичээл сургалтанд загвар лаборатори, тооцоот туршилтыг техникт туршилтын нэгэн адил хэрэглэдэг болсон байна.

Математик загварчлал нь байгаль нийгмийн аливаа үзэгдлийг математикаар илэрхийлсэн үзэгдэл хувьсалд түүнийг илэрхийлэх математик тэгшитгэлд оноож болно. Загварчлал гэдэг бол математик, тооцоолох арга, тоон мэдээлэлд шилжүүлэх тооцоо туршилтаар байгаль нийгмийн шинэ зүй тогтол илэрвэл нэн даруй технологийн туршилт хийдэг болжээ.

Хэрэгжих арга зүй. Анхан шатны сургалтанд бол эл лабораторийг хөдөлгөөнт үзүүлэн байдлаар ашиглаж болно. Ахлах ангид сурагчид физик үзэгдэл, хуулийг “нээх” зорилго тавьж тооцоо-дүрслэлт туршилт үйлдээд хэмжилтийн дүнг “KAMTASIA” програмаар хөдөлгөөнт мэдээлэлд хувиргана. Дараа нь туршилтын эл ший-зураг баримтыг тойруулан ухааныг уралдуулан ном хаялцах замаар асуудлын шийд рүү хамтаар тэмүүлнэ. Ургуулан сэдэж сэтгэх амин үйлийг өрнүүлэн мэтгэсээр шийдэлд хүрээд сурагчид тулгуур хуулийг өөрснөө “нээгээд”, математик томъёог гаргана. Тооцоо-дүрслэлт туршилтыг үйлдэх, утга тайллыг хийхэд багш эрдмийн удирдагчийн өндөрлөгт байж сурагчдыг “хол” төөрүүлэхгүй чиглүүлэхийг чанд эрхэмлэнэ.

Түлхүүр үгс: мэдээллийн технологи, загвар лаборатори, компьютер график, физик сургалт, физик зарчим.

ФИЗИК СУРГАЛТ

Эл лабораторийн гоц онцлог бол суралцагсад тооцоо-дүрслэлт туршилт үйлдээд баримтыг тойруулан ном хаялцсаар тулгуур хуулиудыг Кулон, Фарадей, Ньютон, Максвеллийн ... адилаар өөрснөө нээх боломж бүрдүүлж байгаад оршино.

Мэдээлэл харилцааны технологит суурилсан бичил лабораторийг нэвтрүүлснээр физик сургалтын чанарыг цаашид сайжруулж, сурагчидад сэтгэлгээний дадал олгох чухал хэрэглүүр бий болно. Үүнийг дэлхий нийтийн туршлага харуулж байна.

Физик сургалт дахь мэдээлэл харилцааны технологи нь юуны өмнө физикийн тулгуур туршлага, үзэгдлийн компьютер загвар болон онолын ойлголтыг компьютертэй “ном хаялцах” байдлаар турших, тооцоолох, сэтгэж хууль жам, зүй тогтлыг суралцагчдаар өөрсдөөр нь “нээлгэхэд” шууд чиглэж байна.

Туршилт тооцооноос ургуулан сэтгэж шийдэхүй.

Үзэгдэл юмсын хувирлын өрнөх зүй жамыг сурагчдаар яаж нээлгэх арга замыг тоймловол:

Нээдүгээрт: Загвар лабораторийг ашиглан хичээл заах нь үлгэр, домог мэт сонсгож, томъёог тулган заадаг байдлаас ангижирч, суралцагсад тухайн үзэгдлийн мөн чанарыг нь ухан ойлгож, хууль дүрэм, томъёог өөрсдөө нээн илрүүлнэ..

Хоёрдугаарт: Тооцоо-дүрслэлт туршилт болон тоон баримтыг тойруулан ном хаялцаж хуулийг нээх шийдэлд хүрэх юм.

Гуравдугаарт: Өмнөх үйлдлийг хийснээр суралцагчид физик томъёоллыг өөрсдөө гаргана.

Дөрөвдүгээрт: Багш бол мэдээллийг дамжуулагч, сонсгогч биш эрдэм шинжилгээний удирдагч байна.

Сурагчдыг хөгжүүлэх, хүмүүжүүлэх ач тус.

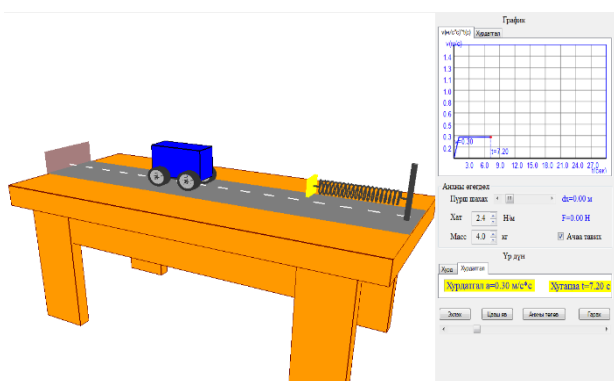
Энэхүү лабораторийг сургалтанд ашигласнаар сурагчдын төлөвшил, хөгжилд чухал ач тустай болно. Үүнд:

1. Сурагчдын физик сэтгэлгээ, сэтгэн бодох чадварыг хөгжүүлнэ.

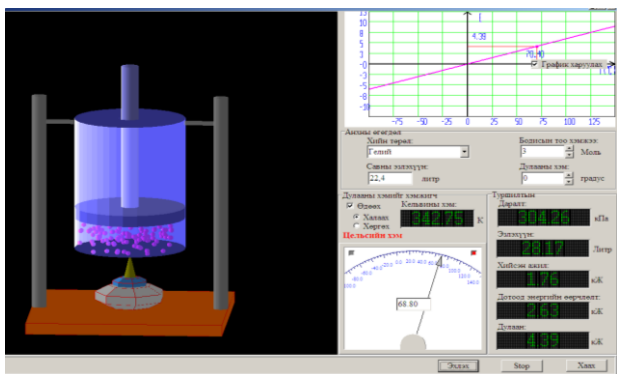
* Electronic address: enkhsetseg@mul.s.edu.mn

2. Хэмжилт, тооцооноос ургуулан сэтгэж, асуудлыг шийдвэрлэх арга барилыг эзэмшинэ.
3. Хамтаараа ном хаялцан асуудлын шийдэлд хүрэх чадвар эзэмшинэ.
4. Физикийн хичээлээр сурагчдыг нийгэмшүүлж хамтран ажиллах, үг дуулах төлөвшил олгоно.

Бүтээсэн загвар лаборатори



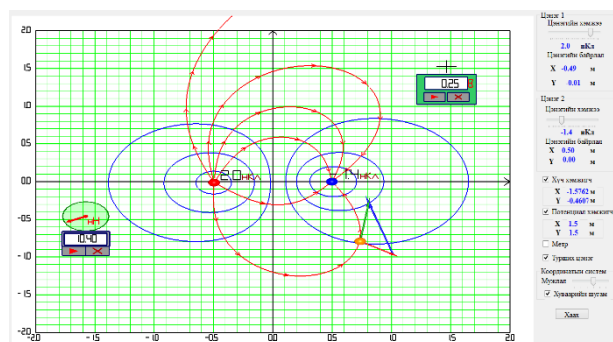
Зураг-1. Ньютоны 2-р хуулийг нээн илрүүлэх загвар лаборатори.



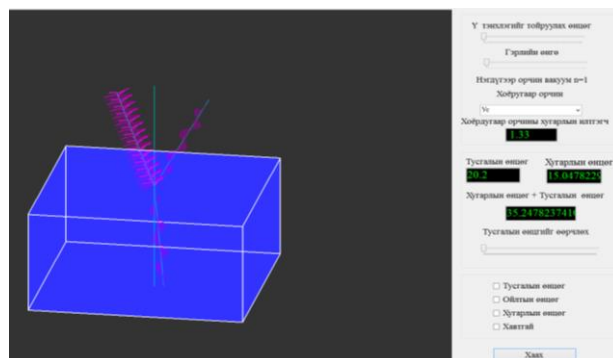
Зураг-2. Термодинамикийн 2-р хуулийг судлах загвар лаборатори.



Зураг 3. Кирхгофын 2-р дүрэмийг судлах 3D загвар.



Зураг-4. Хоёр цэнэгийн цахилгаан орныг судлах загвар лабораторийн ажиллах талбар



Зураг-5. Брюстеровын хуулийг судлах загвар лаборатори, түүний ажиллах талбар.

Тооцоо-дүрслэлт туршилтаар физик зүй тогтлыг илрүүлэх зарчим

Жишээ-1: Ажил, потенциалын ялгаварыг тодорхойлох физик зарчим

Хэмжилт-1. Потенциалын радиусын дагуух буюу цэнэгийн орон дахь хамаарлыг хэмжих

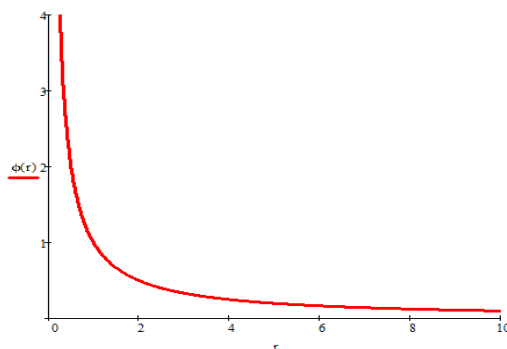
№	$q(\text{нКл})$	$\phi(\text{В})$	$r(\text{м})$
1	1.6	20.28	0.72
2	1.6	12.06	1.21
3	1.6	9.03	1.60

Шинжилгээ-1: $r_1 < r_2 < r_3$ байхад

$\phi_1 > \phi_2 > \phi_3$. Потенциал зайнаас урвуу

хамааралтай. $\phi \sim \frac{1}{r}$

Дүрслэл-1:



Зураг-6. Потенциал зайнаас хамаарсан график.

Хэмжилт-2: Тухайн цэг дээр хүчлэгийн хэмжээг тооцоолох

№	$q(\text{нКл})$	$F(\text{нН})$	$r(\text{м})$
1	1.6	27.61	0.72
2	1.6	10.01	1.21
3	1.6	5.54	1.60

Тооцоо - 2:

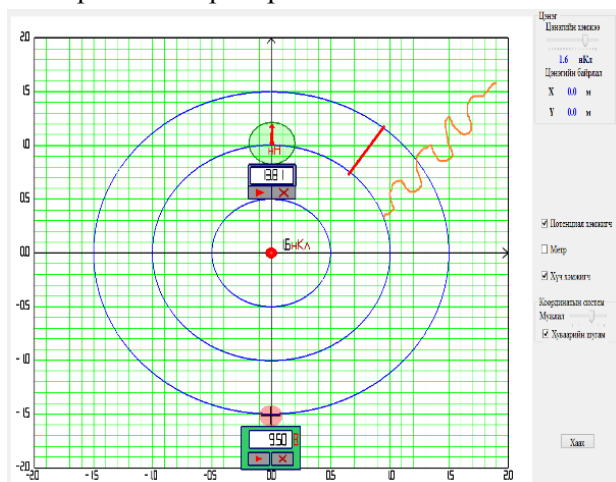
$$E = \frac{F}{q} = \frac{27.61 \text{ нН}}{1.6 \text{ нКл}} = \frac{27.61 \cdot 10^{-9} \text{ н}}{1.6 \cdot 10^{-9} \text{ Кл}} = 17.3 \text{ н / Кл}$$

$$F = \frac{k \cdot q}{r^2} = \frac{9 \cdot 10^9 \text{ н} \cdot \text{м} / \text{Кл}^2 \cdot 1 \cdot 10^{-9} \text{ Кл}}{(0.72 \text{ м})^2} = 17.3 \text{ н} \cdot \text{м} / \text{Кл}$$

$$E = F$$

1нКл цэнэгт үйлчлэх хүчний хэмжээг цахилгаан орны хүчлэг гэнэ.

Дүрслэл-2: Цэнэгийг зөөхөд хийсэн ажил замын хэлбэрээс хамаарахгүй.



Зураг-7. Цахилгаан оронд цэнэг зөөхөд хийсэн ажил нь замын хэлбэрээс хамаарахгүй.

Хэмжилт-3: Ажлыг тооцоолох.

№	$q(\text{нКл})$	$F(\text{нН})$	$r(\text{м})$
1	1.6	27.61	0.72
2	1.6	10.01	1.21
3	1.6	5.54	1.60

Тооцоо: Төгсгөлгүй алсаас төвийн түлхэх хүчний эсрэг 1нКл цэнэгийг зөөхөд хийсэн ажлыг тооцоолох: $F \cdot S = A$

$$A_1 = 20.28 \text{ н} \cdot \text{м}, \quad A_2 = 12.06 \text{ н} \cdot \text{м},$$

$$A_3 = 9.03 \text{ н} \cdot \text{м}$$

Шинжилгээ-2: Дээрх хүснэгтээс харвал: $\varphi = A$.

№	$q(\text{нКл})$	$\varphi(\text{В})$	$A(\text{н} \cdot \text{м})$
1	1.0	20.28	20.28
2	1.0	12.06	12.06
3	1.0	9.03	9.03

Потенциал нь төгсгөлгүй алсаас 1 нКл эерэг цэнэгийг зөөхөд хийсэн ажилтай тэнцүү:

$$\varphi = \frac{A}{q}$$

Цэнэгийг зөөхөд хийсэн ажил нь:

$$A = q \cdot \Delta \varphi$$

Жишээ-2: Хугарлын хуулийг нээн илрүүлэх зарчим

Хэмжилт-1:

Хүснэгт-1

1-р орчны материал	1-р орчны хугарлын илтгэгч (n_1)	2-р орчны материал	2-р орчны хугарлын илтгэгч (n_2)	Тусгалын өнцөг (φ)	Хугарлын өнцөг (ψ)
Хөнгөн цагаан	1.39	Ус	1.33	36.87	38.8338
		Мөнгө	1.35		38.1539
		Мөс	1.473		34.4855
		Шил	1.55		32.5526

Шинжилгээ-1: Хэмжилтээс харвал $n_2 \sim \frac{1}{\sin \psi}$

урвуу хамааралтай байна.

Хэмжилт-2:

Хүснэгт-2

1-р орчны материал	1-р орчны хугарлын илтгэгч (n_1)	2-р орчны материал	2-р орчны хугарлын илтгэгч (n_2)	Тусгалын өнцөг (φ)	Хугарлын өнцөг (ψ)
Ус	1.33	Мөнгө	1.35	45.03	044.1867
Хөнгөн цагаан	1.39				46.7551
Мөс	1.473				50.5259
Шил	1.55				54.3158

Шинжилгээ-2: Хэмжилтээс харвал $n_1 \sim \sin \psi$ хамааралтай байна.

Хэмжилт-3:

Хүснэгт-3

1-р орчны материал	1-р орчны хугарлын илтгэгч (n_1)	2-р орчны материал	2-р орчны хугарлын илтгэгч (n_2)	Тусгалын өнцөг (φ)	Хугарлын өнцөг (ψ)
Мөс	1.473	Шил	1.55	27	25.5589
				39.59	37.2746

				46.56	43.6328
				55.07	51.1821

Шинжилгээ-3: Хэмжилтээс харвал
 $\sin \varphi \sim \sin \psi$ хамааралтай байна.

Шинжилгээг нэгтгэн дүгнэвэл:

$$n_2 \sim \frac{1}{\sin \psi} \quad n_1 \sim \sin \psi \quad \sin \varphi \sim \sin \psi$$

$$\text{Эндээс:} \quad \frac{n_1 \sin \varphi}{n_2} \sim \sin \psi \quad \frac{n_1}{n_2} \sim \frac{\sin \psi}{\sin \varphi}$$

Пропорционалийн коэффициент оруулбал:

$$\frac{n_1}{n_2} = k \frac{\sin \psi}{\sin \varphi} \quad k = \frac{n_1 \sin \varphi}{n_2 \sin \psi} \quad \bar{k} = 1$$

$$\frac{n_1}{n_2} = \frac{\sin \varphi}{\sin \psi} \quad - \text{Хугарлын хууль}$$

ДҮГНЭЛТ

1. Энэхүү физикийн загвар програмуудыг бүтээснээр туршилтын техникт бааз, лаборторгүй сургуулиудад физик туршилтыг хийх боломж бий болно.
2. Загвар лаборторийг ашиглан хичээл заах нь үлгэр, домог мэт сонсгож, томъёог тулган заадаг байдлаас ангижирч, суралцагсад тухайн үзэгдлийг мөн чанарыг нь ухан ойлгож, хууль дүрэм, томъёог өөрсдөө физик зүй тогтлыг нээн илрүүлдэг сургалтын шинэ аргыг бий болгоно.
3. Бид энэхүү физик үзэгдлийн загвар програмуудыг хийснээр загварчлалын, ялангуяа физик загварчлалын програмуудыг боловсруулах баялаг туршлагыг хуримтлууллаа.
4. Бид цаашид олж авсан мэдлэг, туршлагынхаа үндсэн дээр химийн, биологийн гэх мэт бусад үзэгдэл хувирлын загвар програмуудыг бүтээх боломжтой гэж үзэж байгаа.

АШИГЛАСАН МАТЕРИАЛ

- [1] П.Энхцэцэг, О.Лхагва, Т.Уламбаяр, Б.Алтанхүү “Физикийн 3D загвар лаборторийн CD” 2017 он.
- [2] Enkhtsetseg Purevdagva, Lkhagva Oidov, Ulambayar Tortogtokh “Virtual laboratory for physics teaching” Management and education innovation (ICMEI 2012), Vol-37, May 5-6, 2012, Kuala Lumpur, Malaysia.
- [3] O.Lkhagva, Kh.Otgonmunkh, T.Ulambayar, Kh.Tsookhuu, L.Erdenetuya “Use of physics laboratory model pilot for physics and distance learning” 2005

- [4] Enkhtsetseg Purevdagva, Lkhagva Oidov, Ulambayar Tortogtokh “Innovation in numerical experiment for teaching of elementary physics” and “Innovation in numerical experiment for teaching of elementary physics” ICNS 2018 international conference on modern trends in natural sciences and advanced technologies in science education, August 20-23, 2018 Ulaanbaatar, Mongolia.

Дэлхийн нам температурын цацрагийн энергийг дулаанд хувирган ашиглах боломж

Ж.Далхсүрэн*

Шинжлэх Ухаан Технологийн Их Сургууль, Хэрэглээний Шинжлэх Ухааны Сургууль

Манай дэлхийн гадарга орчимын температур нь нам температурт харгалзах учираас уг гадарга нь урт долгионт цацраг буюу 5 мкм – 100мкм хүртэл долгионы урттай цацрагийг гаргадаг. Богино болон урт долгионт цацрагуудаар тодорхой хэмжээний энерги зөөгддөг. Хийн атом,молекулууд цацрагийн энергийг өөртөө шингээх замаар түүнийг дулааны энергид хувиргадаг онцлогтой. Дэлхийн гадаргаас 6м – 15м гүнд түүний абсолют температур дунджаар 278K –289K байх ба ийм температурын үед түүнээс гарах дулааны цацрагуудын долгионы урт нь 4мкм –80мкм–ийн завсарт харгалзана. Харин энэ завсарын цацрагуудаас хамгийн их энергитэй цацрагийн спектрт харгалзах долгионы урт нь 9мкм– 12мкм –ийн завсарт байдаг. Гэтэл нүүрсхүчлийн хийн молекулууд 13мкм – 17мкм,усны молекулууд 5мкм – 8мкм ба 14мкм –50мкм, озоны молекулууд 8.5мкм – 10.3мкм ба 13мкм –14.5мкм долгионы урттай цацрагуудын энергийг 40%– 99% шингээх чадвартай юм. Иймд эдгээр хийнүүд дунджаар 278K –289K температурт байгаа дэлхийн гадаргаас гарч буй дулааны цацрагуудын нийт энергийн 70 орчим хувийг шингээж авах замаар цацрагийн энергийг дулааны энергид хувиргах боломжтой байна. Ийм учираас дээрхи хийнүүдийг ашиглан дэлхийн гадарга орчимын урт долгионт цацрагийн энергийг дулааны энергид хувирган ахуйн хэрэглээнд ашиглах боломж байна.

PACS numbers: 33.22Ea, 33.20Fb, 33.20N.

ОРШИЛ

Абсолют тэг температураас ялгаатай температурт байгаа ямарч бие өөрөөсөө дулааны буюу температурын цацраг гаргадаг. Энэхүү цацрагийн долгионы урт нь биеийн температураас хамаарч янз бүр байна. Температурын цацрагийг долгионы уртаас нь хамааруулан богино ба урт долгионт цацраг гэж ангилдаг. Нам температурт байгаа биеүүд урт долгионт цацраг гаргадаг. Манай дэлхийн гадарга орчимын температур нам температурт харгалзах учираас уг гадарга нь урт долгионт цацраг буюу 5 мкм – 100мкм хүртэл долгионы урттай цацрагийг гаргадаг. Богино болон урт долгионт цацрагууд нь өөртөө тодорхой хэмжээний энергийг зөөдөг. Цацрагийн энергийг бодисын атом,молекулууд өөртөө шингээх замаар дулааны энергид хувиргадаг.Өөрөөр хэлбэл цацрагийн энергийг шингээсний дүнд хийн молекулуудын атомын хувийн хэлбэлзлийн тоо хэмжээ буюу хувийн хэлбэлзлийн давтамж, далайц нь нэмэгдэнэ. Үүний дүнд хийн молекулуудын эмх цэгцгүй хөдөлгөөний хурд мөн кинетик энерги нь ихсэнэ. Ийм хэлбэрээр цацрагийн энергийг дулааны энергид хувиргадана. Урт долгионт цацрагуудыг маш сайн шингээдэг бодисуудыг

ашиглан дэлхийн гадарга орчимын урт долгионт цацрагийн энергийг дулааны энергид хувиргах боломжтой. Тухайлбал, усны молекулууд 5мкм – 8мкм ба 13мкм–50мкм, озоны молекулууд 8.5мкм – 10.3мкм ба 13мкм–14,5мкм, нүүрсхүчлийн хий молекулууд 13мкм – 17мкм долгионы урттай цацрагуудыг 60% – 98% шингээдэг онцлогтой. Ийм учираас эдгээр хийнүүдийг ашиглан дэлхийн гадарга орчимын урт долгионт цацрагийн энергийг дулааны энергид хувирган ахуйн хэрэглээнд ашиглах боломжтой юм. Дэлхийн гадаргаас 6м – 15м гүнд түүний абсолют температур дунджаар 278K –289K байх ба ийм температурын үед түүнээс гарах дулааны цацрагийн долгионы урт нь 4мкм –80мкм–ийн завсарт харгалзана.Харин энэ муж дахь долгионы урттай цацрагуудаас хамгийн их энергитэй цацрагийн спектрт харгалзах долгионы урт нь 9мкм– 12мкм –ийн завсарт байдаг. Гэтэл нүүрсхүчлийн хийн молекулууд 13мкм – 17мкм,усны молекулууд 5мкм – 8мкм ба 14мкм –50мкм, озоны молекулууд 8.5мкм – 10.3мкм ба 13мкм –14.5мкм долгионы урттай цацрагуудын энергийг 40%– 99% шингээх чадвартай байгаа нь дунджаар 278K–289K температурт байгаа дэлхийн гадаргын дулааны цацрагуудаар зөөгдөж буй энергийн 70 орчим

* Electronic address: jdalkhsuren@yahoo.com

хувийг шингээж түүнийг дулааны энергид хувиргах боломжтой байна.

ОНОЛЫН ХЭСЭГ

Дэлхийн озоны давхаргыг бүрдүүлдэг O_3 -ын молекулууд Нарнаас ирж байгаа цацрагийн энергийн 12% буюу 168 Вт/м^2 цацрагийн эрчимийг шингээсний улмаас озоны давхарга $50-70^\circ\text{C}$ хүртэл температуртай болтлоо халдаг. Тэгвэл Дэлхийн гадаргаас 6м – 15м гүнд түүний абсолют температур дунджаар $278\text{K} - 289\text{K}$ байх тул тэндээс гарах дулааны цацрагийн эрчим дунджаар 328 Вт/м^2 байна. Энэ эрчимийн 70%-ийг шингээж авах замаар дулаанд хувиргаж чадвал 230Ж дулааны энергийг секунд тутамд 1м гадаргаас авна. Энэ энергийн 70%-ийг тогтоон барьж чадвал секунд тутамд дунджаар 160 Ж дулааны энергийг үйлдвэрлэх боломжтой байна. Энэ нь ийм хэмжээний энергийг шингээж байгаа хийн холимогийн температур $50^\circ\text{C} - 70^\circ\text{C}$ –д хүрэх боломжтой юм.

Абсолют тэг температураас ялгаатай температурт байгаа ямарч бодит биеийн цацрагийн эрчимийг Стефан –Больцманы хуулиар: $I = \delta \sigma T^4$ гэж тодорхойлно. Тухайн температурт байгаа биеээс гарч буй хамгийн их энергитэй цацрагийн спектрт харгалзах долгионы урт нь Винийн хуулиар:

$$\lambda_m = \frac{b_1}{T}$$

гэж тодорхойлогдоно. Энд b_1 – Винийн тогтмол $b_1 = 0.28978 \cdot 10^{-2} \text{ м} \cdot \text{К}$

Термодинамик тэнцвэрийн төлөвт байгаа абсолют хар биеийн гадаргын 1 м^2 талбайгаас 1с тутамд гарч байгаа цацрагийн энергийн спектр түгэлтийн график нь Планкын

$$B_\lambda d\lambda = \frac{2c^2 h}{\lambda^5} \frac{d\lambda}{e^{\frac{ch}{k\lambda T}} - 1}$$

хууль ёсоор зураг 1–д үзүүлсэн хэлбэртэй байна.



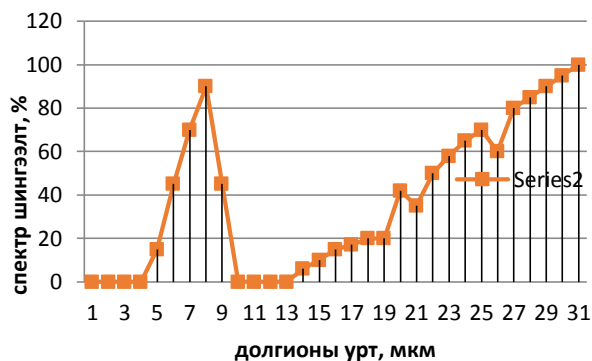
Зураг 1. 283 К температуртай биеийн дулааны цацрагийн энергийн эрчимийн $4 \text{ мкм} - 50 \text{ мкм}$ долгионы уртын завсар дахь түгэлт.

Графикаас харахад хамгийн их энергитэй цацрагийн спектрт цацрагийн харгалзах долгионы урт нь Винийн хууль ёсоор 10.2 мкм байна. Долгионы уртын 10.2 мкм -аас 4 мкм хүртэл интервалд цацрагийн энерги огцом буурч байна. Харин долгионы уртын 10.2 мкм -аас 30 мкм хүртэлх интервалд цацрагийн энерги аажмаар буурч байна. 1–р зургийн муруйгаар хязгаарлагдсан дүрсийн талбайн хэмжээ 283K температурт байгаа биеийн эрчимийн хэмжээтэй тэнцүү. Урт долгионт цацрагийн $4 \text{ мкм} - 50 \text{ мкм}$ долгионы уртын интервал дахь цацрагийн энергийг бүрэн шингээх чадвартай хийн атом молекулуудаар 283K температурт байгаа биеийн цацрагийн энергийг бүрэн шингээх замаар дулааны энерги үйлдвэрлэх юм. Эрдэмтэн судлаачид урт долгионт цацрагийн энергийг шингээх өндөр чадамжтай бодисууд буюу хийнүүдийг судалгаагаар тогтоож улмаар тэдний шингээлтийн хувь хэмжээг нь тодорхойлж чадсан байдаг. Тухайлбал, усны уурын молекулууд, нүүрсхүчлийн хийн молекулууд, озоны молекулууд урт долгионт цацрагийн энергийг спектрин тодорхой мужуудад сайн шингээдэг байна.

а. Усны уурын молекулуудын цацраг шингээлт, түүний онцлог

Агаар дахь усны уурын молекулууд нарны цацрагийн холын хэт ягаан туяа, үзэгдэх гэрлийн спектрин мужид сулавтар, ойрын хэт улаан цацрагийн спектрин мужид идэвхитэй, холын хэт улаан цацрагийн спектр мужид маш сайн шингээдэг **болох** нь олон судлаачдын удаан хугацааны судалгаагаар өндөр нарийвчлалтай тогтоогдсон байдаг.

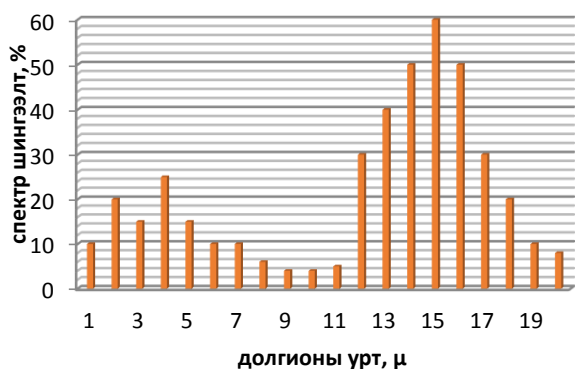
Агаар дахь усны уурын цацраг шингээлт нь агаар дахь усны молекулын концентрациас болон цацрагийн долгионы уртаас ихээхэн хамаардаг болох нь Д.Макдональд, Ф.Фоуля нарын судалгаагаар маш нарийн тогтоосон байна. (1) 1 дүгээр зурагаас (Ч.Д.Уолшоу, ЭЛзассер нарын судалгаа) (2) хөрсний чийг цацрагийн ойрын хэт улаан, холын хэт улаан мужуудад өндөр шингээлттэй болох нь харагдаж байна.



Зураг 2. Усны молекулуудын холын хэт улаан цацрагийн муж дахь спектр шингээлт.

б. Нүүрс хүчлийн хийн (CO_2) цацраг шингээлт, түүний үр дагавар

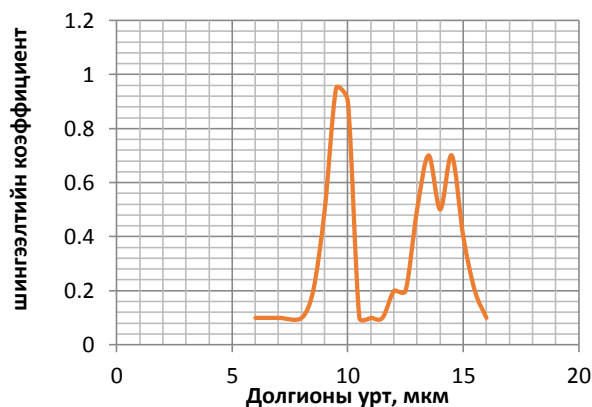
Агаар мандалд өсөн нэмэгдэж буй нүүрс хүчлийн хий нь нарны цацрагийн холын хэт ягаан туяаны 100нм–200нм мужид шингээлттэй нь судлаачдын судалгаагаар нотлогдсон байна. Үүнээс гадна холын хэт улаан туяаны мужид хамгийн их энергитэй спектрийн 12,9мкм–17 мкм–ийн завсарт 15мкм–д төвтэй цацрагийн спектрыг маш сайн шингээдэг нь олон жилийн судалгаагаар батлагдсан байдаг. (1). 3 дугаар зураг. (В.Н.Кондратьев, А.В.Яковлев нарын судалгаа).



Зураг 3. Цацрагийн спектрийн 1мкм–20мкм завсарт нүүрс хүчлийн хийн цацраг шингээлт.

в. Озоны (O_3) цацраг шингээлт, түүний үр дагавар

Озон (O_3) нь ойрын хэт ягаан туяанаас гадна холын хэт улаан туяаг, ялангуяа өндөр энергитэй, 9мкм–10 мкм–ийн интервал дахь цацрагийг бараг 100% шингээдэг болох нь судалгаагаар тогтоогдсон. (3) Ийм учраас Озон дэлхийн гадаргаас болон агаар мандлаас цацаргаж буй холын хэт улаан цацрагийн хувьд хамгийн өндөр энергитэй, спектрийн 9мкм–10мкм завсар дахь цацрагийг бараг 100% шингээдэг онцлогтой.



Зураг 4. Озоны молекулуудын холын хэт улаан цацрагийн муж дахь спектр шингээлт.

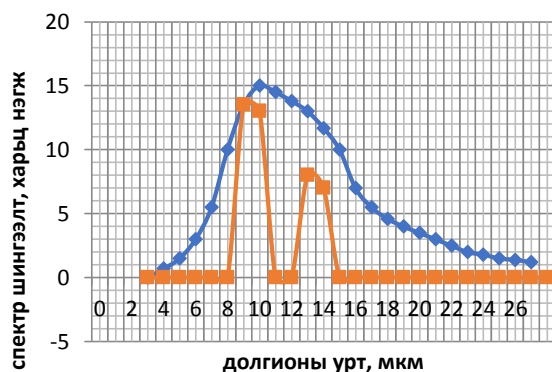
ТООЦООЛОЛ, СУДАЛГААНЫ ХЭСЭГ

А. Цацрагийн энергийг шингээж авах арга технологи

Шингээх чадвар нь Онол, практикын хувьд батлагдсан хийнүүдийг ашиглан холын хэт улаан туяаны энергийг шингээж авна. Тодруулбал, 283К температуртай биеийн цацрагийн эрчим Стефана–Больцманы хуулиар: $I = \delta \sigma T^4 = 0.9 \cdot 5.67 \cdot 283^4 = 326.59 \text{ вт/м}^2$ байх тооцоо гарч байна. Үүний 70% – ийг нь дулааны энергид хувиргаж чадвал гадаргын 1 м^2 талбайгаас 1с тутамд 228.6 Ж дулааны энерги гаргаж авна. Винийн хуулиар 283К температурт байгаа биеийн хамгийн их энергитэй цацрагийн спектрт харгалзах долгионы урт нь 10.2 мкм байна. 10.2 мкм долгионы урттай цацрагийн энергийг озоны молекулууд 80% шингээх чадвартай. 283К температурт байгаа бие 5 мкм–100мкм хүртэл долгионы урттай цацрагийг гаргадаг бөгөөд энэ интервалд харгалзах энергийн ихэнх хувь нь 5 мкм–300мкм долгионы уртын завсарт ноогддог учраас энэ

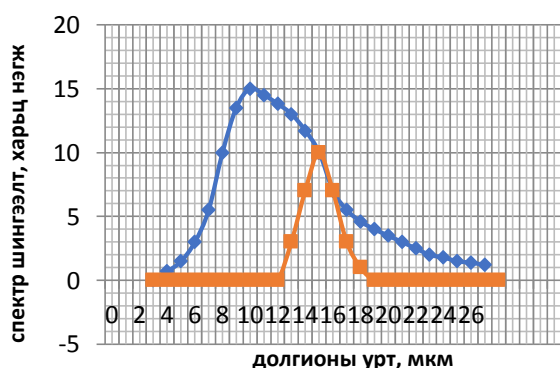
завсарын энергийг шингээж авахад бидний гол зорилго оршино.

1. Озоны молекулуудын шингээлтийн спектрүүдийг 283К температурт байгаа биеийн цацрагийн спектрүүдтэй харгалзуулан /давхцуулан / үзэхэд озоны молекулууд 5 мкм – 300мкм долгионы уртын завсарт ноогдох энергийн 26.4% хувийг шингээх боломжтой болох нь дараах графикаас харагдаж байна. Зураг 4.



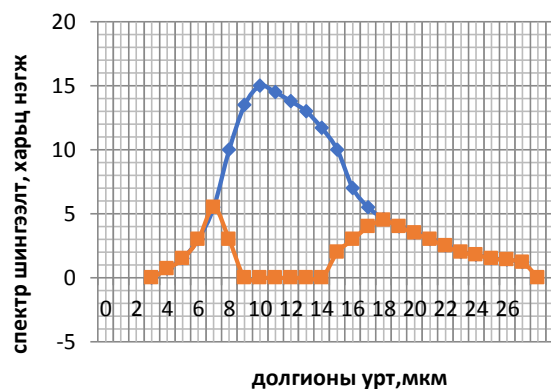
Зураг 4. 4мкм – 30мкм долгионы уртын завсарт озоны /O₃/ спектр шингээлт.

2. Нүүрсхүчлийн /CO₂/ хийн молекулуудын шингээлтийн спектрүүдийг 283К температурт байгаа биеийн цацрагийн спектрүүдтэй харгалзуулан /давхцуулан / үзэхэд 4мкм – 30мкм долгионы уртын завсарт ноогдох энергийн 17,6% хувийг нүүрсхүчлийн /CO₂/ хийн молекулууд шингээхээр байгаа нь дараах графикаас харагдаж байна. Зураг 5.



Зураг 5. 4мкм – 30мкм долгионы уртын завсарт нүүрсхүчлийн /CO₂/ хийн спектр шингээлт.

3. Усны уурын /H₂O/ молекулууд 4мкм – 30мкм долгионы уртын завсарт цацрагийн энергийн 29% хувийг өөртөө шингээж авах боломжтойг дараах графикаас харж болно. Зураг 6.



Зураг 6. Хэт улаан туяаны 4мкм – 30мкм долгионы уртын завсарт усны уурын /H₂O/- спектр шингээлт.

Шингээлтийн нийт хувь хэмжээ 26,4% /O₃/ + 17.6 / CO₂/ + 29% / H₂O/ = 73% байна. Энэ гурван хийн молекулууд 283К температуртай биеийн цацрагийн / 326.59вт/м² /эрчимийн 73%–ийг буюу 238.4вт/м² эрчимийг бүрэн шингээж улмаар цацрагийн энергийг дулааны энергид хувиргах боломжтой гэсэн тооцоо гарч байна.

Б. Шингээлтийн дүнд бий болсон дулааны энергийг алдагдал багатайгаар хадгалаж хуримтлуулах арга

Идэвхтэй хийнүүдийн үйлдвэрлэсэн /хувиргасан / дулааны энергийг цацрагийн болон дулаан дамжуулалтын хэлбэрээр гадагш алдах магадлал маш өндөр байдаг тул аль болох алдагдал багатайгаар ашиглах нь бидний гол зорилго билээ. Ийм учраас дулааны энергийн алдагдалыг бага байлгахын тулд толин ойлт болон вакуумжилтын арга технологийг ашиглана. Хий хадгалах савны дотор ханыг толиор доторлож гадна талыг дулаан муу дамжуулагч материалаар бүрж өгнө. Харин дулааны цацраг орох /нэвтрэх / зориулалттай хэсэг буюу савны ёроолыг вакуумжуулсан нимгэн шилэн хавтангаар хийнэ. Ийм технологиор савыг хийсэн тохиолдолд дулаан алдагдал 25–30%–иар буурна гэж тооцоолж байна. Дулаан алдагдалыг ийм хэмжээгээр бууруулахад дунджаар 168вт/м² эрчимтэй дулаан /дулааны энерги / үйлдвэрлэх боломжтой байна. Ийм эрчимтэй энергиэр цаг тутамд 1м² талбайтай гадаргаас 604.8 кЖ дулааныг үйлдвэрлэнэ. Энэ дулаанаар 10 °С температурт байгаа 3.6 л усыг нэг цагт 50°С температуртай болтол халаана.

ДҮГНЭЛТ

1. Озон, нүүрсхүчлийн CO_2 / хийн болон усны уурын молекулуудын спектр шингээлтийг ашиглан Дэлхийн нам температурын цацрагийн энергийн ойролцоогоор 73%–ийг дулааны энергид хувиргах боломжтой байна.
2. Шингээлтээр гаргаж авсан дулааны энергийн 70 орчим хувийг гадагш алдалгүйгээр хадгалаж, хуримтлуулж чадвал нэг цаг тутамд гадаргын 1м^2 тутмаас 604.8 кЖ дулааны энергийг гарган авч ахуйн хэрэглээндээ ашиглаж болохоор байна.
3. 8мкм –9мкм, 10мкм –14мкм долгионы уртын завсарт 90%–100% спектр шингээлттэй атом,молекулуудыг судалгаагаар олж тогтоож чадвал Дэлхийн нам температурын цацрагийн энергийг 100% дулааны энергид хувирган ашиглах боломж бүрдэхээр байна.

АШИГЛАСАН НОМ

- [1] К.Я.Кондратьев “Актинометрия”. г.Москва. Издательство “Мир” 1965год. стр 111,113, 235-236,296,312
- [2] А.Х.Харгиан “Физика атмосферы”. Г.Ленинград. Издательство “Наука” 1982года. стр 333, 411
- [3] С.П.Хромов, М.А.Петросянц. “Метеорология и климатология” г.Москва. Издательство “Наука” 1985 год.стр 129,258.
- [4] М.С.Эйгенсон “Солнце и Земля”.г.Москва. Издательство” наука” 1947 год.

Фемто секундын өдөөн судлах спектрометрийн аргыг хагас дамжуулагч материалууд дээр хэрэглэн судласан нь

Б.Өлзийбаяр^{1*}, П.Мөнхбаатар¹, Ц.Хос-Очир¹, Ц.Баатарчулуун², Г.Мөнхбаяр¹,
Н.Төвжаргал¹, М.Отгонбаатар¹, Г.Эрдэнэ-Очир¹, Ж.Даваасамбуу¹

¹Лазерын судалгааны лаборатори, Физикийн Тэнхим,

Шинжлэх Ухааны Сургууль, МУИС, Улаанбаатар 210646, Монгол Улс

² Геологи-Геофизикийн Тэнхим, Шинжлэх Ухааны Сургууль, МУИС, Улаанбаатар 210646, Монгол Улс

Хоёр ялгаатай өдөөн-судлах (ӨС) схемүүдийг өөр өөр фемтосекундын лазерын пульс ашиглан амжилттай хөгжүүлсэн. Хэт-богино пульс лазер ашигласан ӨС схемийг хэрэглэж, хөгжүүлсэн схемийн нарийвчлалыг тодорхойлох болон тохируулга хийх зорилгоор GaAs дахь когерент фононуудын өдөөлтийг хэмжсэн. Энэ когерент фонон давтамжууд нь бусад судлаачдын мэдээллэсэн утгуудтай [1, 2] сайн тохирч байсан. ZnSe болон GaAs-ийг харгалзан нэвтрэлт болон ойлтоор судалсан. ӨС туршилтын дохиог хэт-богино пульс лазер ашигласан үед баланслагч фото диодоор хэмжсэн болно. Өөр нэг ӨС туршилтын схемийн хувьд, ZnSe -ийн нэвтрэлтийн өөрчлөлтийг спектрээс нь хамааруулж хэмжих зорилгоор өмнөх ӨС схемд ашигласнаас өөр лазерын үүсгүүр ба бүртгэгч ашигласан. Спектрээс хамаарсан ӨС туршилтын схемд хүчтэй пульс лазер ашигласан хэмжилт мөн амжилттай болсон. Өргөн зурвастай, өндөр-нягтралтай спектрометрээр (HR4000CG-UV-NIR) бүртгэсэн болно.

PACS numbers: 78.47.J-, 78.66.Db

I. УДИРТГАЛ

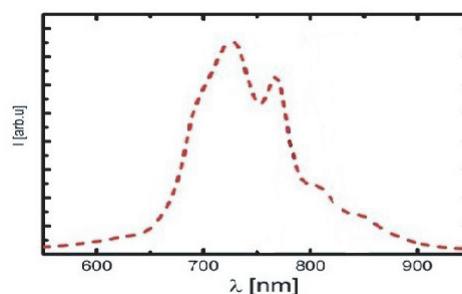
1980аад оны эхэн үеэс хойш олон судалгааны багууд оптик пульс өдөөн-судлах аргыг ашиглан фемтосекундын хугацааны хэмжээтэй /нарийвчлалтай/ оптик пульсээр материал системийн хариу үйлчлэлийг судлаж байна[3, 4]. Эдгээр туршилтын хэд хэдэн тохиолдолд, Раман өдөөх процессоор үүсгэгдсэн хэлбэлзлүүд, хоёр фотоны шингээлт ажиглагдсан. Сүүлийн үед фемтосекундын өдөөн-судлах арга нь металл болон хэт дамжуулагчийн судалгаанд ашиглагдаж байна. Хагас дамжуулагч болон металл материалууд дээр хийсэн хэд хэдэн өдөөн-судлах туршилтанд, дээжийн оптик фонон моодуудтай тохирох давтамжуудтай хэлбэлзлүүд ойлтоор (эсвэл нимгэн дээжээр нэвтрэх нэвтрэлтээр) судлах үед ажиглагдаж байсан [5, 6]. Эдгээр хагас дамжуулагч дээжүүдийн хэлбэлзлүүдийг импульслэг албадмал Раман сарнилыг агуулсан шугаман бус оптик мэдрэх чадвараар тайлбарладаг [7]. Зарим хагас дамжуулагч дээжүүдэд оптик шинж чанарын огцом өөрчлөлт нь хоёр фотоны шингээлтийг агуулсан шугаман бус оптик мэдрэх чадвараар тайлбарладаг [8].

Энэ өгүүлэлт, бид хоёр ялгаатай өдөөн-судлах туршилтын аргын тохируулга хэмжилтийн үр дүнг үзүүлээ. 1-рт, хэт-богино пульс лазертай (6фс-ын үргэлжлэх хугацаатай) өдөөн-судлах туршилтанд ZnSe дахь эгшин зуурын нэвтрэлт, GaAs дахь когерент фононы хэлбэлзлийг хэмжсэн. 2-рт, хүчтэй пульс лазертай (пульсын энерги

нь 1 мЖ) спектрээс хамаарсан өдөөн-судлах туршилтыг ZnSe дээж дээр хийсэн. ZnSe болон GaAs -ийн хувьд өдөөн-судлах туршилтын үр дүн нь бусад судлаачдын үр дүнтэй сайн тохирсон[1, 10].

II. ТУРШИЛТ 1

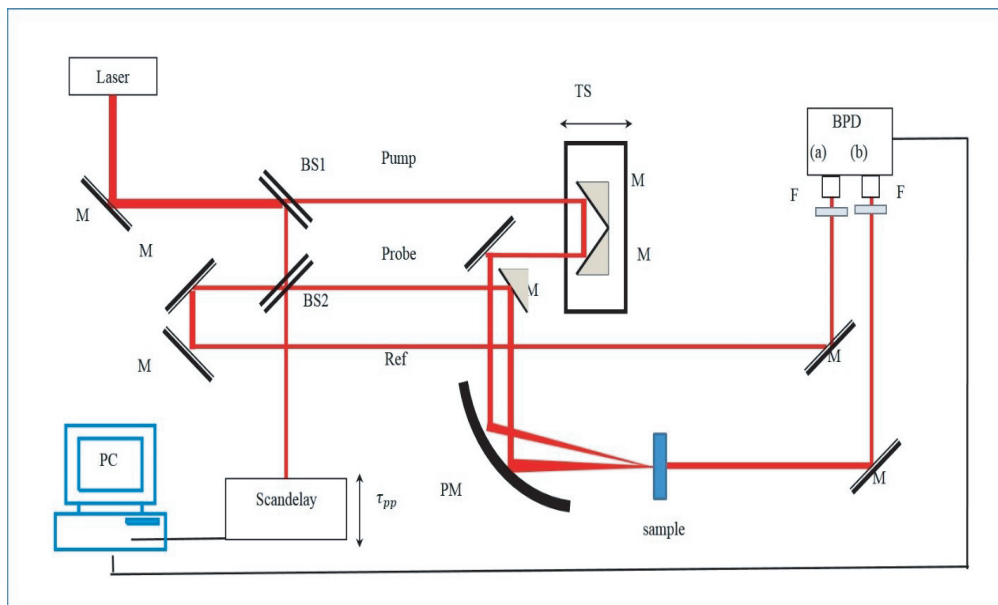
Энэхүү ажлаар хэт-богино пульс лазерыг ашиглан өдөөн судлах туршилтын схемийн тохируулга хийсэн. Туршилтанд ашиглаж байгаа пульс лазерын төв долгионы урт нь 740нм (1.5эВ) байна. Пульсын үргэлжлэх хугацаа 6 фс. Лазерын давталтын хурд нь 75МГц байх үед пульсын энерги нь 4нж. Пульс лазерын спектрийг зураг 1 дээр тасархай шугамаар үзүүлэв.



Зураг 1: Пульс лазерын спектр (Rainbow 2)

Туршилтын схемийг зураг 2-т 2т үзүүлэв. Тусан пульсын 1-р цацраг хуваагч (ЦХ)-аар нэвтэрсэн хэсгийг өдөөгч пульс болгож ашигласан бөгөөд тусан пульсын ойтсон хэсэг нь 2-р цацраг хуваагчаар дахин хуваагдсан болно. 2-р цацраг ху-

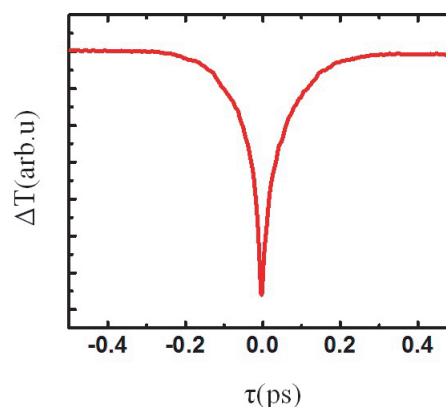
*Electronic address: ulziibayarb@num.edu.mn



Зураг 2: Хэт-богино пульсын лазер (Rainbow 2) ашигласан нэвтрэлт хэлбэрийн өдөөн судлах туршлагын схем. BS - цацраг хуваагч, TS - шилжүүлэгч хавтан, M - толь, Scan delay - хэлбэлзэгч толь, PC - компьютер, PM - парабол толь, Sample - дээж, BPD - баланслагч фото диод

ваагчаар нэвтэрсэн пульс нь судлагч пульсээр, харин түүнээс ойсон пульс нь харьцуулах пульс болон ашиглагдсан. Гараар тохируулж болдог шилжүүлэгч хавтан дээр суурилсан хөдлөгч толь байх бөгөөд түүнээс ойсон өдөөгч пульс нь парабол толины тусламжтайгаар дээж рүү чиглүүлэгддэг. Харин хэлбэлзэгч толиноос ойсон судлагч пульс нь 2-р цацраг хуваагчаас дахин ойх бөгөөд дээж рүү хавтгай болон парабол толиор чиглүүлэгдэнэ. Өдөөгч ба судлагч пульсууд нь дээж дээр парабол толины тусламжтай фокуслагдана. Дээжээр нэвтэрсэн судлагч пульс нь баланслагч фото диод (БФД)-ийн нэг диод руу тусна. Харьцуулагч пульс нь хавтгай толины тусламжтай БФД-ийн нөгөө нэг диод руу тусна. БФД нь лазерын шуугианыг арилгах замаар судлагч болон харьцуулагч пульсуудын хоорондох эрчмийн маш бага ялгаврыг хэмждэг. ЦХ-аар нэвтрэн гарсан өдөөгч пульсыг хаалтаар халхалсан үед БФД дээр бүртгэгдэх дохио "0" байхаар тохируулсан. Ингэснээр өдөөгч пульсээр дээжийг өдөөх үед БФД нь зөвхөн түүгээр үүсгэгдсэн дохиог бүртгэнэ. Энэхүү өдөөгчөөр үүсгэгдсэн дохиог хэлбэлзэгч толь хөдөлж байх явцад хэмжиж авсан. Давтамж нь 1Гц, үр дүнг 100 удаагийн хэмжилтийн дунджаар тодорхойлж байгаа болно.

Туршилтын системийн тохируулга хийхээр ZnSe (хаалттай бүсийн өргөн 2.8 эВ) материал дээр нэвтрэлт хэлбэртэй өдөөн судлах туршилтыг гүйцэтгэсэн. Энэхүү дээж нь туссан пульс лазерын спектрийн мужид тунгалаг байдаг материал юм. Өдөөгч пульс, судлагч пульстай ойр



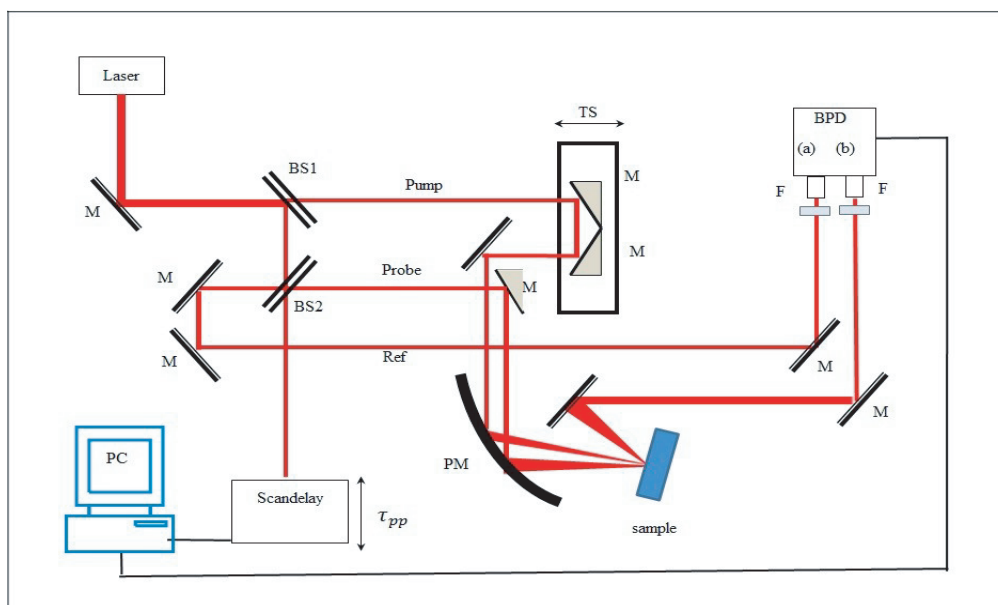
Зураг 3: ZnSe-ийн хувьд хугацаанаас хамаарсан нэвтрэлтийн өөрчлөлт ΔT

буюу давхцаж байх хугацаанд нэвтрэлтийн өөрчлөлт /зураг 3-т үзүүлсэн/ ажиглагдсан байна.

III. ТУРШИЛТ 2

Энэхүү ажлаар хэт-богино пульсын лазер (Rainbow 2) ашигласан ойлт хэлбэрийн өдөөн судлах туршлагын схемийг тохируулав. Уг схемийг зураг 4-т үзүүлсэн болно.

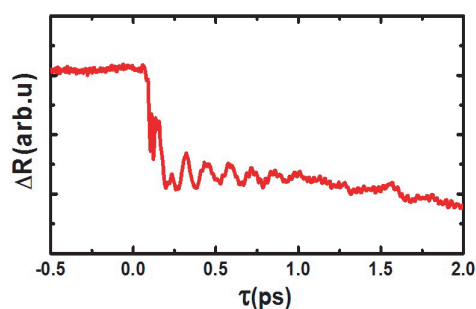
Туссан пульсын 1-р цацраг хуваагчаар нэвтэрсэн хэсгийг өдөөгч пульс болгож ашигласан бө-



Зураг 4: Хэт-богино пульсын лазер (Rainbow 2) ашигласан ойлт хэлбэрийн өдөөн судлах туршлагын схем. BS - цацраг хуваагч, TS - шилжүүлэгч хавтан, Sample – дээж, M - толь, Scan delay - хэлбэлзэгч толь, PM - парабол толь, BPD - баланслагч фото диод, PC - компьютер

гөөд туссан пульсын ойсон хэсэг нь 2-р цацраг хуваагчаар дахин хуваагдсан болно. 2-р цацраг хуваагчаар нэвтэрсэн пульс нь судлагч пульсээр, харин түүнээс ойсон пульс нь харьцуулах пульс болон ашиглагдсан. Гараар тохируулж болдог шилжүүлэгч хавтан дээр суурилсан байх хөдлөгч толинуудаас ойсон өдөөгч пульс нь парабол толины тусламжтайгаар дээж рүү чиглүүлэгддэг. Харин хэлбэлзэгч толиноос ойсон судлагч пульс нь 2-р цацраг хуваагчаас дахин ойх бөгөөд дээж рүү хавтгай болон парабол толиор чиглүүлэгдэнэ. Өдөөгч ба судлагч импульсууд нь дээж дээр парабол толины тусламжтай фокуслагдана. Дээжийн гадаргуугаас ойсон судлагч пульс нь хавтгай толиор чиглүүлэгдэн БФД руу тусна. Харьцуулагч пульс нь хавтгай толины тусламжтай БФД-ийн нөгөө нэг диод руу тусна. БФД нь лазерын шуугианыг арилгах замаар судлагч болон харьцуулагч импульсуудын хоорондох маш бага ялгаврыг хэмжих боломжтой байдаг. Мөн БФД нь судлагч болон харьцуулагч импульсуудын хоорондох эрчмийн ялгаврыг хэмжих боломжтой байдаг. Системийг өдөөгч пульс нь хаалтаар халхлагдсан үед БФД дээр бүртгэгдсэн дохио “0” байхаар тохируулсан байна. Ингэснээр өдөөгч импульсээр дээжийг өдөөх үед БФД нь зөвхөн түүгээр үүсгэгдсэн дохиог бүртгэнэ. Энэхүү өдөөгчөөр үүсгэгдсэн дохиог хэлбэлзэгч толь хөдөлж байх явцад хэмжиж авсан.

Туршилтын системийг тохируулахаар GaAs (хаалттай бүсийн өргөн 1.5 эВ) материал дээр ойлт хэлбэртэй өдөөн судлах туршилтыг гүйцэт-

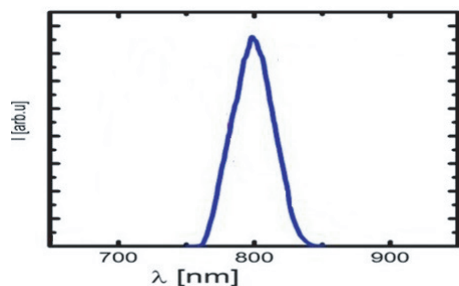


Зураг 5: GaAs-ийн хугацаанаас хамаарсан ойлтын өөрчлөлт ΔR

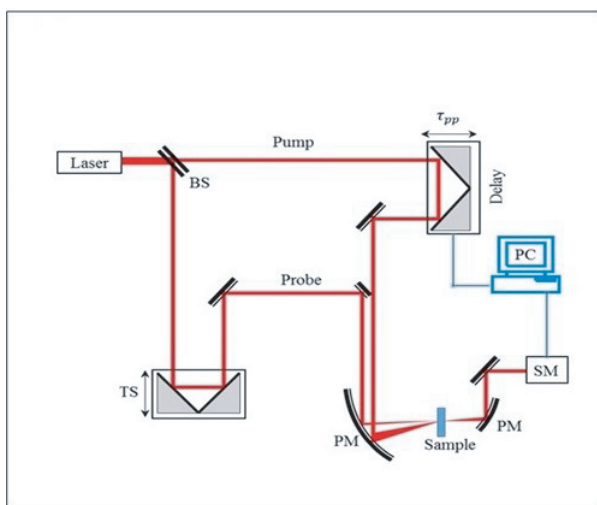
гэсэн. Системийн үр дүн нь бага далайцтай когерент хэлбэлзлүүдийг харуулж байна. Давамгайлагч хэлбэлзэл нь 8.8 ТГц-ийн давтамжтай байсан бөгөөд энэ нь бусад туршилтын ажлын мэдээлэгдсэн утгуудтай сайн тохирч байна. Энэ нь зураг 4-т үзүүлсэн схем горимоороо зөв ажиллаж байгааг баталж байна.

IV. ТУРШИЛТ 3

ZnSe кристалл дээж дээр өдөөгч болон судлагч импульсуудын спектрийн нэвтрэлтийн өөрчлөлтийг янз бүрийн хугацааны хоцрогдолтой хэмжихийн тулд хүчтэй пульс лазер (Solstice Ace) ашигла-



Зураг 6: Хүчтэй пульс лазерн спектр (Solstice Ace)

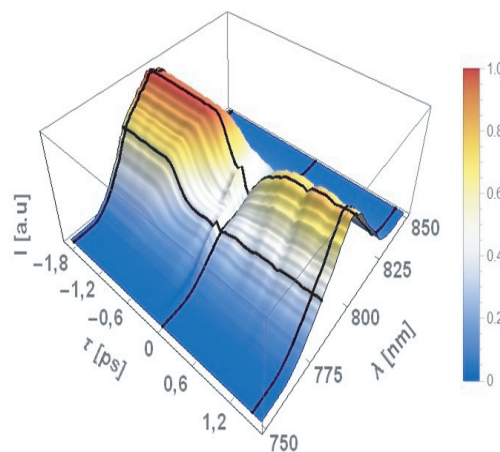


Зураг 7: Хэт хурдан өсгөгч систем (Solstice Ace) ашиглан спектрээс хамаарсан өдөөн судлах туршилтын схем. BS - цацраг хуваагч, TS - шилжүүлэгч хавтан, M - толь, delay - моторт шилжүүлэгч хавтан, SM - спектрометр, PM - парабол толь, Sample - дээж, PC - компьютер

сан спектрээс хамаарсан өдөөн судлах туршилтыг хийсэн юм. Хэт хурдан өсгөгч систем (Solstice Ace) ашиглан спектрээс хамаарсан өдөөн судлах туршилтыг тохируулсан байгааг зураг 7-д үзүүлэв. Пульс лазерн төв долгионы урт нь 800нм (1.5эВ) байна. Пульсын үргэлжлэх хугацаа 120 фс (35-120фс-ийн хооронд гараар тохируулах боломжтой). Лазерын давталтын хурд нь 5кГц байх үед пульсын энерги нь 1.6мЖ буюу хүчтэй пульс энерги байна. Пульс лазерн спектрийг зураг 6 дээр үргэлжилсэн шугамаар үзүүлэв.

Энэ туршилтын ажлын хувьд туссан пульс нь цацраг хуваагчаар хуваагдана. ЦХ-аар нэвтэрсэн пульс нь өдөөгч пульс болон ашиглагдана. Энэхүү өдөөгч пульс нь компьютероос удирдагддаг, моторт шилжүүлэгч хавтан дээр суурилсан хөдлөгч толинууд руу тусах ба дээж рүү хавтгай болон парабол толиор чиглүүлэгдэнэ. ЦХ-аас ойсон пульс нь гараар тохируулдаг шилжүүлэгч хавтан дээр

суурилсан толинд ойх бөгөөд хоёр хавтгай болон парабол толиор дээж рүү чиглүүлэгдэнэ. Өдөөгч болон судлагч пульсууд нь дээж дээр фокуслагдана. Судлагч пульс нь дээжийн гадаргууд эгц тусах ба өдөөгч болон судлагч пульс хоорондох өнцөг нь ойролцоогоор 4° болно. Дээжээр нэвтэрсэн өдөөгч пульс нь хоёр дахь парабол толиноос ойсны дараагаар хаалтаар халхлагдана. Дээжээр нэвтэрсэн судлагч пульсыг цуглуулж спектрометр рүү илгээхийн тулд өөр нэг парабол толь ашигладаг. Өдөөгч пульстай харьцангуй судлагч пульсын хугацааны хоцрогдлыг өөрчлөхийн тулд шилжүүлэгч хавтан хөдлөж байх үед судлагч пульсын эрчмийг спектрометрээр хэмжсэн. Дээж (ZnSe)-ийн өдөөгчөөр өдөөгдсөн спектрийн нэвтрэлтийн өөрчлөлт нь зураг 8-д үзүүлсэн эрчмийн хэмжилтээс харагдана.



Зураг 8: Хэт хурдан өсгөгч систем (Solstice Ace) ашиглан спектрээс хамаарсан өдөөн судлах туршилтын схем. BS - цацраг хуваагч, TS - шилжүүлэгч хавтан, M - толь, delay - моторт шилжүүлэгч хавтан, SM - спектрометр, PM - парабол толь, Sample - дээж, PC - компьютер

ZnSe кристалл дээж дээр өдөөгч болон судлагч пульсуудын спектрийн нэвтрэлтийн өөрчлөлтийг янз бүрийн хугацааны хоцрогдолтой хэмжихийн тулд мөн л хүчтэй пульс лазер (Solstice Ace) ашигласан спектрээс хамаарсан өдөөн судлах туршилтыг хийсэн юм. Пульсын спектрийн мужид тунгалаг байдаг /нэвтрүүлэгч/ ZnSe кристалл нь өдөөгч пульс судлагч пульстай давхцах хугацаанд шингээгч шинж чанартай болж байсан. Иймд энэхүү дээж нь хоёр фотоны шингээлтийг судлахад таатай материал юм. ZnSe дээжийн хаалттай бүсийн өргөн (2.8эВ, [11]) нь пульс лазерн төв давтамжийн энергийн фотоноосойролцоогоор хоёр дахин их учраас энэ нь хоёр фотоны шингээлтийн процесс байж болно [10, 12] .

V. ДҮГНЭЛТ

Бид өдөөн-судлах туршилтын схемийг хүчтэй пульс лазер (Solstice Ace) болон хэт-богино пульс лазер (Rainbow 2)-ын оролцоотой хөгжүүлсэн болно. Эдгээр хөгжүүлсэн схемээ шалгах болон тохируулга хийх зорилгоор GaAs дахь когерент фононуудын өдөөлт ба өдөөгчөөр өдөөгдсөн нэвтрэлтийн өөрчлөлтийг хэмжсэн. Уг хөгжүүлсэн схемийг ашиглан хэмжсэн үр дүн маань энэ төрлийн бусад судалгааны ажлын мэдээлэгдсэн утгуудтай нийцэж байгаа явдал нь пульс лазерууд болон туршилтын схем маань цаашдын судалгаанд хэ-

рэглэх боломжтойг харуулж байна. Пульс лазерууд нь когерент хэлбэлзэл, дээд эрэмбийн шугаман бус эффект, аттосекундын пульс үүсгэх болон терагерцийн долгион үүсгэх зэрэг үзэгдлийг судлахад хэрэглэх боломжтой.

ТАЛАРХАЛ

Энэхүү судалгааны ажил нь ШУТС (Grants No. SSA 014/2016, SSA 017/2016), МУИС-ийн зочин судлаач төсөл (code P2017-2407)-ийн дэмжлэгтэйгээр хийгдэв.

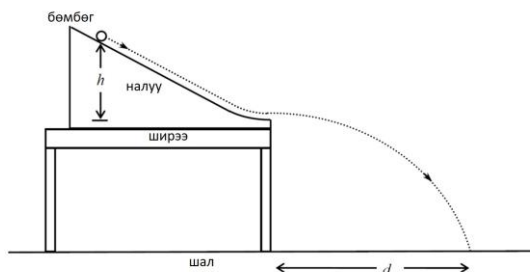
-
- [1] G. C. Cho, W. Kutt and H. Kurz, Phys. Rev. Lett. **65**, 764 (1990).
 - [2] S. Adachi, J. Appl. Phys. **58**, R1 (1985).
 - [3] E. P. Ippen and C. V. Shank, Ultrashort Light Pulses, edited by S. L. Shapiro (Springer-Verlag, Berlin, 1984).
 - [4] C. B. Harris, E. P. Ippen, G. A. Mourou, and A. H. Zewail, Ultrafast Phenomena Springer-Verlag, Berlin (1990).
 - [5] H. J. Zeiger, J. Vidal, T. K. Cheng, E. P. Ippen, G. Dresselhaus, and M. S. Dresselhaus, Phys. Rev. **B 45**, 768 (1992).
 - [6] S. De Silvestri, J. G. Fujimoto, E. P. Ippen, E. B. Bamble, L. R. Williams, and K. A. Nelson, Chem. Phys. Lett. **116**, 146 (1985).
 - [7] M. J. Rosker, F. W. Wise, and C. L. Tang, Phys. Rev. Lett. **57**, 321 (1986).
 - [8] J. M. Chwalek, C. Uher, J. F. Whitaker, G. A. Mourou, and J. A. Agostinelli, Appl. Phys. Lett. **58**, 980 (1991).
 - [9] H. Kurz, QELS Digest 11, **58** (1991).
 - [10] J. Shen, Z. Zhang, and Z. Hua, Appl. Phys. Lett. **88**, 011113 (2006).
 - [11] D. J. Chadi, Phys. Rev. Lett. **72**, 534 (1994).
 - [12] X. Wan, X. Yao, M. Wang, and H. Hao, J. Electroceramics **21**, 737 (2008).

Физикийн лабораторийн хичээлийн “Физикийн хэмжилтийн асуулга” аргын тухай

С.Мөнхцэцэг*

Физикийн тэнхим, Байгалийн ухааны салбар, Шинжлэх ухааны сургууль, Монгол Улсын Их Сургууль

Их сургуулийн бакалаврын түвшний физикийн лабораторийн хичээлээс суралцагчийн олж авах мэдлэг нь хэмжилтийн үр дүнг тооцоолох, тайлагнах, хэмжилтийн үр дүнгийн алдаа буюу хазайлт эсвэл тодорхой бусын чанарыг ойлгох чадвар байна. Энэхүү чадварыг суралцагчийн хийсэн лабораторийн ажлын тайлангаас шалгаж үнэлнэ. Физикийн лабораторийн ажлын тайлангийн судалгаанд суурилсан үнэлгээний хэрэглэгдэхүүн болгож “Физикийн хэмжилтийн асуулга (ФХА)” (Physics Measurement Questionnaire (PMQ)) –ын аргыг боловсруулсаныг олон улсын их сургуулиуд (түүний дотор, Шведийн Уппсала их сургууль [1], АНУ-ийн Хойд Каролинагийн их сургууль [2], Мэриленд Коллеж Хүрээлэн [3, 4] болон Колорадо Бойлдерийн их сургууль [5], Өмнөд Африкийн Кэйп Тауны их сургууль [6-8] г.м.) амжилттай хэрэгжүүлжээ. Эдгээр сургуулиудад ФХА аргыг физикийн лабораторийн хичээлийн удиртгал хичээл болгон оруулснаар уламжлалт ба орчин үеийн сургалтын “либерал арт” системийн үнэлгээ болгон хэрэглэж байна.



ФХА аргын жишээг доор үзүүлэв. Өгөгдсөн нөхцөл: Дараах физикийн лабораторийн ажлыг оюутан гүйцэтгэжээ. Зурагт үзүүлсэн шиг налуу модон хавтанг ширээний өнцөгт хавчаараар тогтоожээ. h өндрөөс бөмбөгийг гулгуулахад бөмбөг хэвтээ чиглэлд налууг орхих ба ширээний өнцгөөс d зайд унав. Шалан дээр тусгай цаас дэвссэн бөгөөд бөмбөг унахдаа түүнд тэмдэг тавих юм.

Оюутны хийх даалгавар: h өндрийг өөрчлөхөд d зай хэрхэн өөрчлөгдөх вэ? h ба d –г метр ашиглан хэмжинэ үү.

Асуулт: Оюутан группээр хэмжилт хийнэ. Эхний даалгавар бол $h=400$ нм байхад d –г тодорхойлох. Нэг групп энэхүү даалгаварыг гүйцэтгээд d зайг 436 нм гэж хэмжив.

Оюутнуудын дунд дараах хэлэцүүлэг болов:

Та хэнтэй нь санал нэг байна вэ?

А	Б	В
---	---	---

Хариултаа тайлбарлана уу.



ФХА нь лабораторийн ажлын дата үр дүнд анализ хийх, үр дүнгээ дүрсжүүлэх, физик параметр хоорондын хамаарлаар үзүүлэх, компьютер тооцоо хийх болон үр дүнгийн тодорхой бус байдалд дүн шинжилгээ хийх чадварыг хөгжүүлэхэд чиглэсэн байна.

Хэмжилтийн үр дүнгийн тодорхой бус байдал нь бүхий л шинжлэх ухааны судалгаа шинжилгээний дотоод шинж чанарын асуудал юм. Шинжлэх ухаан нь өөрөө мэдлэгийг хөөн шинжлэх буюу ажиглалт ба туршлагаар дата цуглуулах, таамаг, гипотезийг хэлбэршүүлэх, амь оруулах, туршихад оршино.

Хэмжилтийн үр дүнгийн тодорхой бус байдалд хандах суралцагчийн хандлагаас харахад физикийн багшийн зүгээс “суралцагчдад

* Electronic address: munkhtsetsegs@gmail.com

хэмжилтийн үр дүнд анализ хийхэд хүндрэлтэй байдаг” гэсэн хэвшмэл ойлголтоос шалтгаалсан хүндрэл байдаг.

Дараах хэдэн ерөнхий характер суралцагчдад байдгийг ажиглалтаас харжээ:

- Суралцагч нь хэмжилтийн үр дүнд дүгнэлт өгөхдөө хэмжсэн хоёр утгын хоорондын тохирох эсэхэд эргэлздэг.
- Яагаад чухам хэмжилтийн энэ аргыг хэрэглэсэн болох ерөнхий ойлголтоо суралцагч ухаараагүй байна.
- Хэмжилтийн тодорхой үр дүнг тайландаа авдаг, харин үр дүндээ баталгаа хайдаггүй.
- Суралцагчийн хэмжилтийн тайландаа өгсөн дүгнэлт тодорхой хязгаартай байдаг. Жишээ нь, бид хэмжилтийн үр дүндээ компьютер ашиглан анализ хийсэн бөгөөд бидний хэмжилт алдаагүй байв. Эсвэл, хэмжилтийн алдаа нь гадны нөлөөний улмаас үүсэв. г.м.

Дээрх байдлаас гарахын тулд ФХА-г лабораторийн удиртгал хичээл болгон оруулж, физикийн лабораторийн хичээлийг судалгаанд суурилсан лаб хичээлийн түвшинд аваачих алхам хийх хэрэгтэйг тэмдэглэе.

НОМ ЗҮЙ

- [1] R. Lippmann Kung, C. Linder, NorDiNa 4, 40 (2006).
- [2] D. S. Abbot, Ph.D. thesis, North Carolina State University, (2003).
- [3] R. F. Lippmann, Ph.D. thesis, University of Maryland, College, Park (2003).
- [4] R. L. Kung, Am J Phys 73, 771 (2005).
- [5] H. J. Lewandowski, Robert Hobbs, Jacob T. Stanley, Dimitri R. Dounas-Frazer, Benjamin Pollard. Physics Education Research Conference 2017, Part of the PER Conference series. Cincinnati, OH: July 26-27, P. 244-247 (2017).
- [6] A. Buffler, F. Lubben, and B. Ibrahim, Int J Sci Educ 31, 1137 (2009).
- [7] A. Buffler, S. Allie, and F. Lubben, Int J Sci Educ 23, 37 (2001).
- [8] B. Campbell, F. Lubben, A. Buffler, and S. Allie, AJRMSTE, 1 (2005).

Барилгын материалын үйлдвэрлэлд ашиглагдаж буй цахилгаан станцын хаягдал үнсний цацрагийн судалгаа

С. Энхтуул*, Ж. Тэмүүжин

ШУА-ийн Хими, Химийн Технологийн Хүрээлэн

Нүүрсийг түлш болгон ашигладаг цахилгаан, дулааны болон дулааны цахилгаан станцуудын гаргаж буй үнс нь дэлхий дахинд хаягдаж буй 5 дахь том хаягдал түүхий эд гэж тооцогддог. Олон улсад үнсийг барилгын материал, бетоны нэмэлт, цеолит нийлэгжүүлэх, геополимерийн үйлдвэрлэл, шингээгч материал, керамикийн түүхий эд, хөрс бэхжүүлэгч, будгийн түүхий эд, дэвшилтэт шилэн керамик материал гарган авахад ашиглах боломжтойг дурдсан судалгаа ихээр хийгдэж байгаагаас зарим технологи нь үйлдвэрлэлийн түвшинд ашиглагдаж байна. Харин манай улсад цахилгаан станцын хаягдал үнсийг төдийлөн ихээр ашиглахгүй байсан нь нийгэмд уламжлал хэлбэрээр оршиж буй үнсэнд цацраг асар их хэмжээгээр агуулагдаж байдаг гэсэн туйлширсан ойлголттой холбоотой юм. Хэдийгээр нүүрсний үндсэн бүрэлдэхүүн хэсэг нь органик гаралтай боловч органик бус эрдэс болон бага агуулгатай мөр төдий (trace elements) хольцод байгалийн цацраг идэвхит элемент агуулагдаж болдог.

Цацраг идэвхит изотопууд нь альфа болон бета бөөмүүд болон гамма туяаг ялгаруулдаг. Альфа бөөм нь МэВ (MeV) хязгаарт хэмжигдэх өндөр энергитэй боловч масс ихтэйн улмаас нимгэн цаасыг ч нэвтрэх чадваргүй юм. Бета бөөмс нь хурдан электронууд бөгөөд тэдгээрийн энергийн хязгаар нь хэдэн зуун КэВ-оос хэдэн МэВ-д оршдог. Электронууд нь гелийн атомоос хөнгөн учраас альфа бөөмөөс илүү нэвтрэх чадвартай бөгөөд тэд агаарт бага зэргийн зайд нэвтрэн, нимгэн хуванцар юмуу маш хөнгөн металлыг нэвтрэн орох боломжтой. Гамма цацраг нь фотоны урсгал бөгөөд энерги нь ихэвчлэн хэдэн КэВ-оос хэдэн МэВ хүрдэг. Гамма цацраг нь хөнгөн цагааны нимгэн хальсыг нэвтэлж чадахгүй байж болох боловч бас энергийн хэмжээнээсээ хамааран хар тугалган хаалтыг ч нэлээн гүнзгий нэвтэрч болно. Үнсний

цацрагийн үзүүлэлтийн нэг нь инерт хий болох радон (Rn) юм. Гэсэн хэдий ч цахилгаан станцын нүүрсний шаталтын температур 1400-1500°C-д явагдаж аморф бүтэц бүхий бөмбөлөг үүсдэгээс радон хийний ялгарал харьцангуй бага байдаг нь судалгаагаар тогтоогдсон байна.

Бид энэхүү судалгаандаа Монгол улсын стандартын (MNS 6469 -2014) дагуу хаягдал үнсэн нэмэлттэй бетон бэлтгэхэд цацрагийн үзүүлэлт нь стандартад тавигдах шаардлагыг хангаж байгааг тодорхойлсон.

Цахилгаан станцын хаягдал үнсний цацрагийн үзүүлэлт тогтмол биш байдаг нь ашиглалтын явцад хүндрэл учруулах боловч дүүргэгч материалтай хольсны дараа стандартын шаардлагыг бүрэн хангаж байгааг 1-р хүснэгтэнд үзүүлэв.

1-р хүснэгт. Үнс болон үнсээр хийсэн геополимер тоосгоны цацрагийн үзүүлэлт.

№	Бүтээгдэхүүн	Изотопын идэвхи, Бк/кг			Радийн эквивалент (Ra _{экв}), Бк/кг
		A _{Ra-226}	A _{Th-232}	A _{K-40}	
1	Багануурын үнс (2011)	242.4	31.1	381.6	314.4
3	Багануурын үнс (2013)	1169.2	26.9	355.1	1233.6
6	Багануурын үнсэнд (2013) суурилсан бетон (үнс 20% + хайрга 80%)	119.2	13.1	697.9	195.7

Багануурын нүүрсний 2013 онд цуглуулсан үнсний цацрагийн үзүүлэлт өндөр байсан боловч бетоны дүүргэгч нэмсэний дараа стандартад тавигдах шаардлагыг хангаж байгаа нь Багануурын үнсийг цацраг идэвхит хаягдал бус харин бетонд хэрэглэгдэх үнэт түүхий эд гэж үзэж болохыг харуулж байна.

Түүнчлэн энэхүү судалгаанд цацрагийн агуулга өндөртэй үнсийг олон улсад хэрхэн

* Electronic address: ensurenjav@gmail.com

боловсруулж, ашиглаж байгааг тодорхой жишээнүүд дээр тоймлон харууллаа.

АШИГЛАСАН МАТЕРИАЛ

- [1] Бетонд хэрэглэх дулааны цахилгаан станцын шүүлтүүрийн үнс, Техникийн шаардлага, MNS 6469 -2014
- [2] Ж.Тэмүүжин, Нүүрсний үнсний шинж чанар, иж бүрэн боловсруулалт, хэрэглээ, 2017. Никель-Дикел, Монограф, 196 х
- [3] J.Temuujin, E.Surenjav, C.Ruescher, J.Vahlbruch, Processing and uses of fly ash addressing radioactivity (critical review), Chemosphere, 2018 (in press).

ГАРЧИГ

1.	Two-body problems in the orthogonal condition model M.Odsuren, G.Khuukhenkhuu, S.Davaa, K.Katō, A. Sarsembayeva	1
2.	Square-Root Differential Equations for Dark Matter Particles Namsrai. Kh, Munkhzaya. B	5
3.	Measurement of the $t\bar{t}\gamma\gamma$ production cross-section in pp collisions at a center-of-mass-energy of $\sqrt{s} = 13$ TeV with the ATLAS detector at the LHC Nomin-Erdene. E	12
4.	Влияние наноразмерного порошка диоксида кремния на физико-механические, прочностные характеристики лакокрасочного покрытия из эмали ХВ-16 В.Ц. Лыгденов, А.В. Номоев, С.П. Бардаханов, Т.В. Ларина	16
5.	Исследование бифуркаций периодических режимов при ламинарно-турбулентном переходе Т.Г. Дармаев	21
6.	Кварк ба антикваркийн холбоост төлөвийн тухайд Д.Дамбасүрэн	26
7.	Hydrogen atom ionization in femtosecond laser field: Numerical solution of the TDSE using CWFDVR method Ch.Aldarmaa, L.Khenmedekh, G.Zorigt	30
8.	Атомуудын өдөөгдсөн төлөвүүдийн энергийг Кон-Шэмийн тэгшитгэлээр тооцоолох нь Д.Наранчимэг, Л.Хэнмэдэх, Г.Мөнхсайхан, Н.Цогбадрах	34
9.	Вилсон урсгалын арга ашиглан тооцоолсон цэвэр гейж SU(3) урсгалын хоолойн зарим нэг үр дүнгүүд П.Баттогтох, Ч.Содбилэг, О.Качмарек, Г.Энхтуяа	37
10.	Жигд бус голомттой, цагираган өндөр температурын хийн хөргөлттэй реакторын нейтроник анализ Т.Жамъянсүрэн, С.Одмаа	44
11.	Геодезийн хэмжлийн нэгдмэл байдал нивелирийн рейкны хэвтээ компаратор Д.Өнөрбилэг, Б.Болормаа	51
12.	Графенаар хольцолсон катализатор гарган авах, түүний шинж чанарын судалгаа Б.Бумаа, Э.Уянга, Г.Сэвжидсүрэн, П.Алтанцог	56
13.	Metal-fullerene on materials for electronics E.M.Shpilevsky, P.Tuvshintur, S.A.Filatov, G.Shilagardi, D.Tumurbaatar, T.Otgonchimeg	61

14. Маш өндөр температурын хийн хөргүүртэй реакторын голомтын дизайны судалгаа Б.Хөхсүвд, С.Одмаа, Т.Жамъянсүрэн	66
15. Электрон бүтцийн тооцоололд Торын Больцманы загварыг ашиглах тооцооллын тойм Г.Мөнхсайхан, Б.Одонтуяа, Л.Хэнмэдэх, Д.Наранчимэг, До.Нямсүрэн	73
16. Физик сургалт ба загвар лаборатори, түүний ач холбогдол судалгаа П.Энхцэцэг, О.Лхагва, Т.Уламбаяр	78
17. Дэлхийн нам температурын цацрагийн энергийг дулаанд хувирган ашиглах боломж Ж.Далхсүрэн	82
18. Фемто секундын өдөөн судлах спектрометрийн аргыг хагас дамжуулагч материалууд дээр хэрэглэн судалсан нь Б.Өлзийбаяр, П.Мөнхбаатар, Ц.Хос-Очир, Ц.Баатарчулуун, Г.Мөнхбаяр, Н.Төвжаргал, М.Отгонбаатар, Г.Эрдэнэ-Очир, Ж.Даваасамбуу	87
19. Физикийн лабораторийн хичээлийн “Физикийн хэмжилтийн асуулга” аргын тухай С.Мөнхцэцэг	92
20. Барилгын материалын үйлдвэрлэлд ашиглагдаж буй цахилгаан станцын хаягдал үнсний цацрагийн судалгаа С.Энхтуул, Ж.Тэмүүжин	94