

МОНГОЛ УЛСЫН ИХ СУРГУУЛЬ
ШИНЖЛЭХ УХААНЫ СУРГУУЛЬ

МУИС-ийн Эрдэм шинжилгээний бичиг

ФИЗИК

№32 (553)

2021 он

Редакцийн зөвлөл:

Зөвлөлийн дарга:

Док. Дэд проф. Ж.Ванчинхүү
Монгол Улсын Их Сургууль

Гишүүд:

- | | |
|-----------------------------------|---|
| 1. Док. Проф. Ц.Ганцог | Монгол Улсын Их Сургууль |
| 2. Док. Проф. Б.Жадамба | Монгол Улсын Боловсролын Их Сургууль |
| 3. Док. Проф. Н.Цогбадрах | Монгол Улсын Их Сургууль |
| 4. Док. Проф. Ц.Амартайван | Монгол Улсын Их Сургууль |
| 5. Док. Дэд проф. Д.Улам-Оргих | Монгол Улсын Их Сургууль |
| 6. Док. Ш.Мөнхжаргал | Монгол Улсын Их Сургууль |
| 7. Док. Дэд проф. Ц.Баатарчулуун | Монгол Улсын Их Сургууль |
| 8. Док. Дэд проф. С.Мөнхцэцэг | Монгол Улсын Их Сургууль |
| 9. Док. Дэд проф. Н.Төвжаргал | Монгол Улсын Их Сургууль |
| 10. Док. Дэд проф. М.Одсүрэн | Монгол Улсын Их Сургууль |
| 11. Док. Дэд проф. Д.Эрдэнэбаатар | Монгол Улсын Их Сургууль |
| 12. Док. Дэд проф. Г.Зоригт | Шинжлэх Ухаан Технологийн
Их Сургууль |
| 13. Док. Ж.Эрдэнэтогтох | ШУА, Физик, Технологийн Хүрээлэн |
| 14. Док. Э.Уянга | ШУА, Физик, Технологийн Хүрээлэн |
| 15. Док. Б.Амарсанаа | ШУА, Хими, Химийн Технологийн
Хүрээлэн |

Дугаарыг эмхтгэсэн:

Редакцын зөвлөлийн нарийн бичгийн дарга

Док. Дэд проф. Г.Эрдэнэ-Очир Монгол Улсын Их Сургууль

МУИС-ийн ШУС-ийн Физикийн тэнхим,
© Монгол улсын их сургууль,
Их сургуулийн гудамж-1, Сүхбаатар дүүрэг,
Улаанбаатар – 14200, Монгол улс, 2021

ISSN 2311-1097

Effective Raman Hamiltonian revisited

Tuguldur Kh. Begzjav,^{1,2,*} Zhenhuan Yi,² and Jonathan S. Ben-Benjamin²

¹*Physics Department, National University of Mongolia, Ulaanbaatar, 14200, Mongolia*

²*Texas A&M University, College Station, TX 77843, USA*

In this paper, the effective Raman Hamiltonian is revisited. A common way to obtain the effective Raman Hamiltonian is by using the time-dependent perturbation method (TDPT) along with Fermi's golden rule to keep the total energy and probability constant. However, for a non-resonant Raman process the obtained effective Hamiltonian is not convenient because it is not Hermitian. Hence, we present the Magnus expansion method for obtaining the effective Raman Hamiltonian, which has the advantages of being Hermitian and featuring effects absent in the TDPT effective Hamiltonian. To our knowledge, this is the first time that the Magnus expansion is utilized as an alternative method. We compare the our obtained effective Hamiltonian to that obtained from canonical transformation method. We determine the extra piece in second-order time-dependent perturbation theory which causes loss or gain of total probability.

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

I. INTRODUCTION

The effective Hamiltonian is one of the most widely used methods in physics and computational chemistry. In the effective Hamiltonian formalism, instead of treating the whole Hamiltonian completely, a more compact effective Hamiltonian in a lower-dimensional subspace is studied. There are several ways to obtain an effective Hamiltonian for the Raman scattering process, and as we show, each provides a somewhat different result. For instance, some methods give a non-Hermitian effective Hamiltonian. The most common method for obtaining an effective Hamiltonian is the time-dependent perturbation method [1, 2], where a two-photon resonant effective Raman Hamiltonian can be obtained under the assumption of adiabatic elimination. The adiabatic elimination is only valid when one photon detunings are sufficiently larger than the corresponding coupling constant, which implies almost no population in any intermediate level during the Raman scattering. This allows one to focus on the two lowest-lying states.

More detailed semiclassical derivations can be found in the papers by Chelkowski *et al.* [3] and Kien *et al.* [4]. Moreover, a graphical technique is also developed and applied for the Stark-induced adiabatic Raman passage [5, 6]. These two methods give the same effective Raman Hamiltonian and their only drawback is that the obtained effective Raman Hamiltonian is non-Hermitian if the system is out of two-photon resonance. Besides, several authors have already considered the adiabatic elimination in the Heisenberg picture [7–9].

On the other hand, an elegant and clever way of attaining an effective Raman Hamiltonian is the canonical transformation method developed by

Alexanian and Bose [10]. They claim that one can obtain an effective Raman Hamiltonian using a properly-chosen canonical transformation in the operator form, and using successive perturbations up to second order, they obtain a similar effective Raman Hamiltonian for large one-photon detuning. Later, Wu showed that it is possible to find exact transformed effective Raman Hamiltonian valid for any magnitude of the one-photon detunings via canonical transformation method without any perturbations [11].

We show three distinct methods to obtain the effective Raman Hamiltonian. These methods are the time-dependent perturbation method, the canonical transformation method, and the Magnus expansion method which we propose as an alternative method. In the last method, the solution of the Schrödinger equation in terms of a Magnus expansion is truncated up to second order and compared with the solution truncated up to first order. The obtained effective Raman Hamiltonian exactly matches the result of the canonical transformation method. Note that the validity of the obtained Hamiltonian is in the range of large one-photon detuning compared with the corresponding coupling constant.

The structure of this paper is as follows. In Sec. II, we introduce the model of the Raman system and consider three methods, namely, the time-dependent perturbation method, the Magnus expansion method, and the canonical transformation method. In Sec. III, we compare the resulting effective Raman Hamiltonians and present our conclusions.

Our main result, the effective Raman Hamiltonian obtained via Magnus expansion could be found in Eq. (36) (to be completed by Eq. (12) and (14)), and the extra piece in second-order time-dependent perturbation theory is written in Eq. (28).

*tuguldurb@num.edu.mn

II. EFFECTIVE RAMAN HAMILTONIAN IN THREE DIFFERENT WAYS

In this section, we show how to obtain an effective Raman Hamiltonian by three different methods, using the time-dependent perturbation theory, the Magnus expansion method, and the canonical transformation method. In order to model the Raman system, we introduce a Λ -type scheme for the molecule interacting with pump and Stokes laser fields denoted by indexes p and s respectively. The Hamiltonian of the model in the Schrödinger picture is given by [12]

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}_0, \quad (1)$$

where

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 = & \hbar\omega_b|b\rangle\langle b| + \hbar\omega_c|c\rangle\langle c| \\ & + \sum_{a_i} \hbar\omega_{a_i}|a_i\rangle\langle a_i| + \sum_{\ell=p,s} \hbar\nu_\ell \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell \end{aligned} \quad (2)$$

and

$$\hat{V}_0 = \hbar \sum_j \sum_{j'} \sum_{\ell=p,s} g_{j,j'} |j\rangle\langle j'| (\hat{a}_\ell^\dagger + \hat{a}_\ell). \quad (3)$$

Here, j and j' stand for the molecular vibrational levels b , c , and the set of vibrational levels a_i (see Fig. 1). The annihilation and creation operators for the pump and Stokes fields are denoted by $\hat{a}_\ell$ and $\hat{a}_\ell^\dagger$, $\ell = p, s$ respectively. Because of the Λ configuration, coupling constants $g_{j',j}$ which govern the amplitude of transition from level j to level j' due to the ℓ th electric field is non-zero only if it couples level b or c to the levels a_i . The molecular and field frequencies are ω_b , ω_c , ω_{a_i} , and ν_ℓ , respectively. In the interaction picture, the Hamiltonian has the form

$$\begin{aligned} \hat{V}(t) = & \hbar \sum_j \sum_{j'} \sum_{\ell=p,s} g_{j,j',\ell} |j\rangle\langle j'| e^{i(\omega_j - \omega_{j'})t} \left(\hat{a}_\ell^\dagger e^{i\nu_\ell t} + \hat{a}_\ell e^{-i\nu_\ell t} \right). \end{aligned} \quad (4)$$

Here, our goal is to eliminate the intermediate levels a_i and get the effective Hamiltonian in the two dimensional subspace with two orthonormal bases b and c .

Since the Raman process is a two-photon process, the square of the Hamiltonian $\hat{V}\hat{V}$ plays a key role yielding 256 terms (because $\hat{V}$ has 16 terms overall). Fortunately, we can eliminate most of the 256 terms. The terms related to the transition paths illustrated in the Fig. 1 are considered in the current paper.

A. Time-dependent perturbation method

In time-dependent perturbation theory, the time evolution operator of the system $\hat{U}(t)$ at time t can

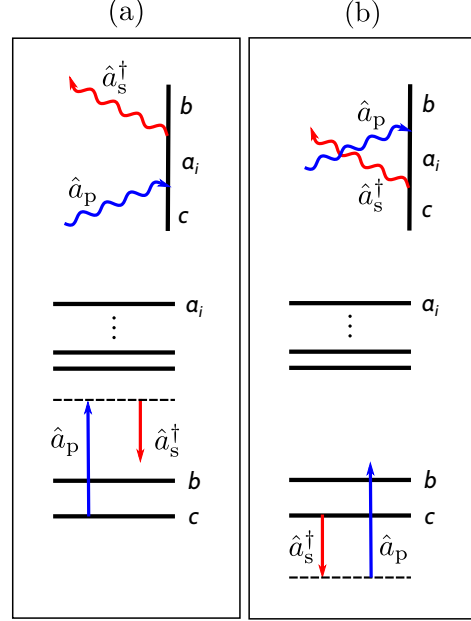


Figure 1: The transition paths involved in the Raman process and their corresponding Feynman diagrams. The doubly-co-rotating transition path, where absorption is followed by emission is drawn in (a); and the doubly-counter-rotating transition path, where emission precedes absorption is drawn in (b). Levels c and b are the molecular vibrational ground and excited energy levels, respectively, and a_i stands for the (multiple) vibrational levels belonging to the excited electronic state. The annihilation (creation) operators of the pump and Stokes pulses are $\hat{a}_p$ ($\hat{a}_p^\dagger$) and $\hat{a}_s$ ($\hat{a}_s^\dagger$) respectively. Time goes from bottom to top in the Feynman diagrams.

be written as [13]

$$\begin{aligned} \hat{U}(t) = & \hat{1} + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \hat{V}(t') dt' \\ & + \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \hat{V}(t') \hat{V}(t'') + \dots \end{aligned} \quad (5)$$

The matrix elements of this evolution operator in the two dimensional subspace with orthonormal bases $|b\rangle$, $|c\rangle$ are

$$\begin{aligned} \langle i|\hat{U}(t)|i'\rangle \cong & \langle i|i'\rangle \\ & + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' \left(\frac{1}{i\hbar} \int_0^{t'} dt'' \langle i|\hat{V}(t') \hat{V}(t'')|i'\rangle \right), \end{aligned} \quad (6)$$

where $|i\rangle$ and $|i'\rangle$ are any of $\{|b\rangle, |c\rangle\}$. By comparing Eq. (6) with the effective time evolution operator, $\hat{U}_{\text{eff}}(t)$, truncated up to the first order

$$\langle i|\hat{U}_{\text{eff}}(t)|i'\rangle \cong \langle i|i'\rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' \langle i|\hat{H}_{\text{eff}}(t')|i'\rangle, \quad (7)$$

where $\hat{H}_{\text{eff}}$ is an effective two-level Hamiltonian in the interaction picture. We can obtain the matrix

elements of the effective Raman Hamiltonian

$$\langle i | \hat{H}_{\text{eff}}(t') | i' \rangle = \frac{1}{i\hbar} \int_0^{t'} dt'' \langle i | \hat{V}(t') \hat{V}(t'') | i' \rangle. \quad (8)$$

This equation gives the connection between the full and effective Hamiltonians. Note that since we use the second-order perturbation method, Eq. (8) is obtained under the assumption that the one-photon detunings must be much larger than the coupling constants $g_{i,c}$ and $g_{i,b}$, i.e. the perturbing field strength should be weak enough for safe use of the second-order perturbation expansion. This assumption is called adiabatic elimination, and it implies a negligibly small population in the excited intermediate levels $\{a_i\}$ at any time during system evolution.

We emphasize that Eq. (8) requires only a single integral and not two. Indeed, two integrals are needed in order to calculate the probability amplitude of the process, since we use the second order perturbation theory. However, the equation (8) provides us with a shortcut since we are not interested in the probability amplitude, but rather in the effective Hamiltonian H_{eff} . The probability amplitude can then be obtained from H_{eff} by first-order time-dependent perturbation theory.

An interesting feature of the Hamiltonian in Eq. (8) is that it is non-Hermitian [1], in general. Indeed, this can be seen from the following consideration

$$\begin{aligned} \left(\langle i | \hat{H}_{\text{eff}}(t') | i' \rangle \right)^\dagger &= -\frac{1}{i\hbar} \int_0^{t'} dt'' \langle i' | \hat{V}(t'') \hat{V}(t') | i \rangle \\ &\neq \langle i' | \hat{H}_{\text{eff}}(t') | i \rangle. \end{aligned} \quad (9)$$

This non-Hermitian property of the effective Hamiltonian is closely related to loss of probability due to the elimination of the probability in the excited intermediate levels $\{a_i\}$ [1].

The explicit expression for the effective Raman Hamiltonian is obtained from Eq. (8). The off-diagonal element is

$$\langle b | \hat{H}_{\text{eff}}(t') | c \rangle = \frac{1}{i\hbar} \int_0^{t'} dt'' \sum_{a_i} \langle b | \hat{V}(t') | a_i \rangle \langle a_i | \hat{V}(t'') | c \rangle. \quad (10)$$

Note that only times t'' which are earlier than t' are involved in the integration. Consequently, we can make two observations about the matrix element $\langle b | \hat{H}_{\text{eff}}(t') | c \rangle$ in Eq. (10). First, only the frequencies of the levels c and a_i appear in the denominator because the integration time t'' appears only in the expression for $\langle i | \hat{V}(t'') | c \rangle$ in Eq. (10). Secondly, for the transition in Fig. 1(a), only the $\hat{a}_p$ operator contribute to the integration because it comes from the Hamiltonian $\hat{V}(t'')$ at time t'' . Similarly, only $\hat{a}_s^\dagger$ contribute to the transition term in Fig. 1(b). Thus,

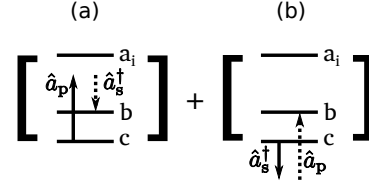


Figure 2: A graphical representation of the effective coupling constant, $\hat{G}_{b,c}$, obtained via second order perturbation theory, Eq. (13). The two terms enclosed within square brackets in Eq. (13) correspond to the two transitions in the brackets in the figure. We use the notation (a) and (b) to refer to the same transition paths depicted in Fig. 1. In transition (a), only annihilation of a pump photon $\hat{a}_p$ is involved in the integration over t'' , despite Raman being a two-photon process, i.e., $\hat{a}_s^\dagger \hat{a}_p$. On the other hand, for (b), the integration involves an $\hat{a}_s^\dagger$ term, but not an $\hat{a}_p$.

Eq. (10) becomes

$$\begin{aligned} \langle b | \hat{H}_{\text{eff}}(t') | c \rangle &= -\hbar e^{-i(\nu_p - \nu_s)t'} e^{i(\omega_b - \omega_c)t'} \sum_{a_i} g_{b,i} g_{i,c} \\ &\times \left(\frac{\hat{a}_s^\dagger \hat{a}_p}{(\omega_i - \omega_c) - \nu_p} + \frac{\hat{a}_p \hat{a}_s^\dagger}{(\omega_i - \omega_c) + \nu_s} \right). \end{aligned} \quad (11)$$

The last expression corresponds to Fig. 2. The first term represents the transition in Fig. 2(a), whereas the second term represents the transition Fig. 2(b). As a result, the effective Raman Hamiltonian is found to be

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{eff}} &= \hbar(\delta_{c,p} \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_p + \delta_{c,s} \hat{a}_s^\dagger \hat{a}_s) |c\rangle \langle c| \\ &+ \hbar(\delta_{b,p} \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_p + \delta_{b,s} \hat{a}_s^\dagger \hat{a}_s) |b\rangle \langle b| \\ &+ \hbar G_{b,c} e^{i[(\omega_b - \omega_c) - (\nu_p - \nu_s)]t'} \hat{a}_s^\dagger \hat{a}_p |b\rangle \langle c| \\ &+ \hbar G_{c,b} e^{-i[(\omega_b - \omega_c) - (\nu_p - \nu_s)]t'} \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_s |c\rangle \langle b|, \end{aligned} \quad (12)$$

where the effective coupling constants are

$$\begin{aligned} G_{b,c} &= -\sum_{a_i} \\ &\times \left(\left[\frac{g_{b,i} g_{i,c}}{(\omega_i - \omega_c) - \nu_p} \right] + \left[\frac{g_{b,i} g_{i,c}}{(\omega_i - \omega_c) + \nu_s} \right] \right), \end{aligned} \quad (13)$$

and $G_{c,b}$ is obtained by replacing the labels $c \leftrightarrow b$ and $p \leftrightarrow s$. The $\delta_{b,p}$ term in the effective Hamiltonian is

$$\delta_{b,p} = -\sum_{a_i} \left[\frac{|g_{b,i}|^2}{(\omega_i - \omega_b) - \nu_p} + \frac{|g_{b,i}|^2}{(\omega_i - \omega_b) + \nu_s} \right]. \quad (14)$$

The terms $\delta_{b,s}$, $\delta_{c,p}$, and $\delta_{c,s}$ can be found by replacing the labels $c \leftrightarrow b$ and $p \leftrightarrow s$ in Eq. (14). These terms are interpreted as dynamic Stark shifts or Rayleigh scattering terms [14].

In the effective Hamiltonian, we neglected the terms which will give a probability amplitude for the Raman process which goes as the inverse of the single photon detuning squared,

$$\frac{1}{(\omega_i - \omega_c) - \nu_p} \frac{1}{(\omega_i - \omega_b) + \nu_s}. \quad (15)$$

The neglected term also goes as the probability of populating the excited molecular states. This term was neglected because we are assuming a regime where it is much smaller than the two-photon detuning term, $1/\Delta$, which we would also get

$$\Delta = (\omega_b - \omega_c) - (\nu_p - \nu_s), \quad (16)$$

for the probability amplitude of the Raman process.

As we mentioned above, the effective Hamiltonian in Eqs. (12)–(14), obtained by way of second-order TDPT, is not Hermitian in this case; it can be seen that $(G_{b,c})^* \neq G_{c,b}$. However, the Hamiltonian becomes Hermitian when the system is on two-photon resonance, i.e., if $\omega_b - \omega_c = \nu_p - \nu_s$. In the long time limit, the issue of probability conservation is resolved. This is because, in this limit, two-photon resonance is enforced, as we shown below.

In order to conserve the total probability, consider the transition probability $P_{C \rightarrow B}$ between the states $|C\rangle = |c, n_p, n_s\rangle$ and $|B\rangle = |b, n_p - 1, n_s + 1\rangle$ of the molecule-field system

$$\begin{aligned} P_{C \rightarrow B} &= |\langle B | \hat{U}(t) | C \rangle|^2 \\ &\cong \left| \sum_{a_i} \left(\frac{g_{b,i} g_{i,c}}{(\omega_i - \omega_c) - \nu_p} + \frac{g_{b,i} g_{i,c}}{(\omega_i - \omega_c) + \nu_s} \right) \right. \\ &\quad \times \left. \frac{e^{i(\omega_b - \omega_c)t - i(\nu_p - \nu_s)t} - 1}{(\omega_b - \omega_c) - (\nu_p - \nu_s)} \sqrt{n_p(n_s + 1)} \right|^2, \end{aligned} \quad (17)$$

and we can rewrite it in the form

$$\begin{aligned} P_{C \rightarrow B} &\cong \left| \sum_{a_i} \left(\frac{g_{b,i} g_{i,c}}{(\omega_i - \omega_c) - \nu_p} + \frac{g_{b,i} g_{i,c}}{(\omega_i - \omega_c) + \nu_s} \right) \right. \\ &\quad \times \left. \frac{\sin(i\Delta t/2)}{\Delta/2} \right|^2 n_p(n_s + 1), \end{aligned} \quad (18)$$

where $\Delta = (\omega_b - \omega_c) - (\nu_p - \nu_s)$ is the two-photon detuning. If we notice that the function

$$\frac{t \sin^2(\Delta t/2)}{2\pi (\Delta t/2)^2} \quad (19)$$

becomes a Dirac delta function $\delta(\Delta)$ in the limit of sufficiently large time, $t \rightarrow \infty$, then the transition rate $W(t) = P_{C \rightarrow B}(t)/t$ is given by

$$\begin{aligned} W(t) &= 2\pi \left| \sum_{a_i} \left(\frac{g_{b,i} g_{i,c}}{(\omega_i - \omega_c) - \nu_p} + \frac{g_{b,i} g_{i,c}}{(\omega_i - \omega_c) + \nu_s} \right) \right|^2 \\ &\quad \times \delta(\Delta) n_p(n_s + 1). \end{aligned} \quad (20)$$

Comparing the transition rate Eq. (20) with that obtained from Fermi's golden rule,

$$W_{\text{eff}}(t) = 2\pi |\langle B | \hat{H}_{\text{eff}} | C \rangle|^2 \delta(\Delta), \quad (21)$$

we obtain the magnitude of the effective coupling constant $G_{b,c}$ as

$$|G_{b,c}| = \left| \sum_{a_i} \left(\frac{g_{b,i} g_{i,c}}{(\omega_i - \omega_c) - \nu_p} + \frac{g_{b,i} g_{i,c}}{(\omega_i - \omega_c) + \nu_s} \right) \right|. \quad (22)$$

Because of the Dirac delta function $\delta(\Delta)$ in the derivation, Expression (22) as well as (13) are valid only when the system is on two-photon resonance, i.e., it conserves energy as well as total probability.

B. Magnus expansion method

One of our main results is that the approximate time evolution operator, as obtained by way of the Magnus expansion, leads to a similar, yet Hermitian effective Raman Hamiltonian to Eq. (12). This Hermitian effective Hamiltonian is much more convenient especially when considering the dynamics of the Raman adiabatic passage where a non-resonant two-photon Raman process is concerned with taking dynamic Stark shift into account. Using the Magnus expansion, we are also able to find the extra part in second-order perturbation theory, which we present in Eq. (30)

The Magnus expansion, formulated by Wilhelm Magnus is an exponential type of solution for a set of first-order, homogeneous, linear differential equations [15–17]. The Magnus expression for time evolution operator is

$$\hat{U}(t) = \exp \left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(i\hbar)^n} \hat{S}_n \right) \quad (23)$$

where the first two Magnus terms $\hat{S}_1$ and $\hat{S}_2$ are given by

$$\begin{aligned} \hat{S}_1 &= \int_0^t dt' \hat{V}(t'), \\ \hat{S}_2 &= \frac{1}{2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' [\hat{V}(t'), \hat{V}(t'')]. \end{aligned} \quad (24)$$

Here, we emphasize that the Magnus expansion solution possesses a crucial property that it conserves symmetries of the linear differential equation. In our case, the unitarity of the time evolution operator is guaranteed to any order of truncation of the Magnus expansion. Thus, the time evolution operator Eq. (23) always keeps the total probability to be 1 no matter to which order in n it is truncated.

Before utilizing the Magnus expansion, we discuss some issues of unitarity and the difference between

the Magnus and time-dependent perturbation theory methods in this regard. This detour will also further introduce the details of the Magnus expansion on a deeper level. Using the power series representation of exponentials to express the time evolution operator in Eq. (23),

$$\hat{U}(t) \simeq \hat{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(i\hbar)^n} \hat{S}_n + \frac{1}{2} \left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(i\hbar)^n} \hat{S}_n \right)^2 + \dots \quad (25)$$

If we truncate this series for the time evolution operator up to second-order in $1/\hbar$, we would have

$$\hat{U}(t) \simeq \hat{1} + \frac{1}{i\hbar} \hat{S}_1 + \frac{1}{(i\hbar)^2} \hat{S}_2 + \frac{1}{2} \frac{1}{(i\hbar)^2} \hat{S}_1^2, \quad (26)$$

which is no longer unitary. We can see that the time evolution operator in Eq. (26) is exactly the same as that which is obtained by second-order perturbation theory, since

$$\hat{S}_2 + \frac{1}{2} \hat{S}_1^2 = \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \hat{V}(t') \hat{V}(t''). \quad (27)$$

This implies that truncating Eq. (25) up to second order in $1/\hbar$ is identical to the second-order time-dependent perturbation method. This observation allows us to isolate the issue of non-unitarity in the time-dependent perturbation method. Since Eq. (26) includes¹ only the

$$\frac{1}{2} \left(\frac{\hat{S}_1}{i\hbar} \right)^2 \quad (\text{extra term in } 2^{nd}\text{-order TDPT}) \quad (28)$$

from the third term of Eq. (25), rather than keeping the entire third term $\frac{1}{2} \left(\frac{\hat{S}_1}{i\hbar} + \frac{\hat{S}_2}{(i\hbar)^2} \right)^2$, the approximate time evolution operator in Eq. (26) cannot be expressed as a truncated power series representation of the exponential function of $\hat{S}_1 + \hat{S}_2$. By this, we mean that the unitary operator expression should be constructed in such a way that it be a truncated series representation of the exponential function of some argument $\hat{F}(\hat{S}_1 + \hat{S}_2 + \dots + \hat{S}_N)$, where N is integer number. According to this statement, the time evolution operator must have the form

$$\hat{U}(t) \simeq \hat{1} + \hat{F} + \frac{\hat{F}^2}{2!} + \dots \quad (29)$$

To make the evolution unitary (conserving total probability), we should either neglect the extra term,

Eq. (28), in $\hat{U}(t)$ as obtained via time-dependent perturbation method Eq. (26) which is

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \frac{1}{(i\hbar)^2} \hat{S}_1^2 \\ &= \frac{1}{2} \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \left(\hat{V}(t') \hat{V}(t'') + \hat{V}(t'') \hat{V}(t') \right), \end{aligned} \quad (30)$$

or, add the missing

$$\frac{1}{2} \left\{ 2 \frac{\hat{S}_1 \hat{S}_2}{(i\hbar)^3} + \frac{(\hat{S}_2)^2}{(i\hbar)^4} \right\} \quad (31)$$

term. Therefore, for simplicity, we take only first two terms in Eq. (29) and write the time evolution operator as

$$\hat{U}(t) \simeq \hat{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(i\hbar)^n} \hat{S}_n \simeq \hat{1} + \frac{1}{i\hbar} \hat{S}_1 + \frac{1}{(i\hbar)^2} \hat{S}_2 \quad (32)$$

where we choose $\hat{F} = \frac{1}{i\hbar} \hat{S}_1 + \frac{1}{(i\hbar)^2} \hat{S}_2$. This time evolution operator, as we desired, is a truncated power series representation of the exponential of $\hat{F}$. Moreover, the second-order time evolution operator obtained by the Magnus expansion is

$$\begin{aligned} \hat{U}(t) &\simeq \hat{1} + \frac{1}{i\hbar} \hat{S}_1 + \frac{1}{(i\hbar)^2} \hat{S}_2 = \hat{1} + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' \hat{V}(t') \\ &+ \frac{1}{2} \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' [\hat{V}(t'), \hat{V}(t'')]. \end{aligned} \quad (33)$$

The only difference between this time-evolution operator and that of Eq. (5) – obtained via time-dependent perturbation theory – is the commutator $[\hat{V}(t'), \hat{V}(t'')]$ and the factor of $1/2$. Consequently, the derivation of the effective Hamiltonian follows the same procedure as in the previous subsection. The matrix elements of the effective Hamiltonian as

$$\langle i | \hat{H}_{\text{eff}}(t') | i' \rangle = \frac{1}{2} \frac{1}{i\hbar} \int_0^{t'} dt'' \langle i | [\hat{V}(t'), \hat{V}(t'')] | i' \rangle, \quad (34)$$

which is the Magnus expansion analog of Eq. (8). We must remark here that the Hamiltonian in Eq. (34) is obtained under the adiabatic elimination condition $g_{i,c} \ll (\omega_i - \omega_c) - \nu_p$ and $g_{i,b} \ll (\omega_i - \omega_b) - \nu_s$, just as in the perturbation method. Moreover, the Hamiltonian we obtain is Hermitian. This can be seen from

$$\begin{aligned} \left(\langle i | \hat{H}_{\text{eff}}(t') | i' \rangle \right)^\dagger &= -\frac{1}{2} \frac{1}{i\hbar} \int_0^{t'} dt'' \langle i' | [\hat{V}(t''), \hat{V}(t')] | i \rangle \\ &= \langle i' | \hat{H}_{\text{eff}}(t') | i \rangle. \end{aligned} \quad (35)$$

In the following, we derive an explicit form of the effective Raman Hamiltonian. Plugging the explicit form of the interaction Hamiltonian, Eq. (4), into

¹ Alternatively, we can think of second-order TDPT as lacking the $\frac{1}{2} \left\{ 2 \frac{\hat{S}_1 \hat{S}_2}{(i\hbar)^3} + \frac{(\hat{S}_2)^2}{(i\hbar)^4} \right\}$ -term.

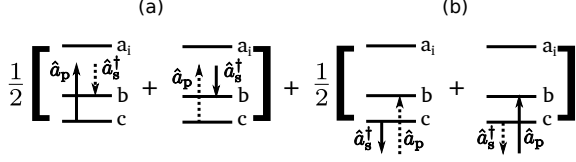


Figure 3: Graphical representation of the coupling constant $\hat{G}_{b,c}$ obtained by the Magnus expansion method, Eq. (36). The first term represents the transition from level c to level a_i followed by one-photon absorption at frequency ν_p . This has a factor of $1/(\omega_i - \omega_c - \nu_p)$. Next, term $1/(\omega_b - \omega_i + \nu_s)$ can be read as transition from level a_i to level b , followed by emission at the frequency ν_s . These first two terms are depicted in the plot (a) and also these correspond to transition (a) in Fig. 1. The explanation of the last two terms follows by the same procedure we used for the first two terms.

The utility of this diagrams is in that, used correctly, they give the answer without calculation. One graphically ‘enumerates’ all processes, which correspond to terms in the effective coupling constant $G_{b,c}$. Upward and downward arrows correspond to absorption and emission, respectively. The denominator of a process corresponds to the energy difference between the actual atomic level to which the atom is transitioning and the ‘virtual’ level (energy) at which the arrows terminate.

Eq. (34), we obtain the explicit form of the effective coupling constants $G_{b,c}$ and $G_{c,b}$ as

$$G_{b,c} = -\frac{1}{2} \sum_{a_i} \left(\left[\frac{g_{b,i}g_{i,c}}{(\omega_i - \omega_c) - \nu_p} + \frac{g_{b,i}g_{i,c}}{(\omega_i - \omega_b) - \nu_s} \right] + \left[\frac{g_{b,i}g_{i,c}}{(\omega_i - \omega_c) + \nu_s} + \frac{g_{b,i}g_{i,c}}{(\omega_i - \omega_b) + \nu_p} \right] \right), \quad (36)$$

and

$$G_{c,b} = (G_{b,c})^*, \quad (37)$$

where

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{eff}} = & \hbar(\delta_{c,p}\hat{a}_p^\dagger\hat{a}_p + \delta_{c,s}\hat{a}_s^\dagger\hat{a}_s)|c\rangle\langle c| \\ & + \hbar(\delta_{b,p}\hat{a}_p^\dagger\hat{a}_p + \delta_{b,s}\hat{a}_s^\dagger\hat{a}_s)|b\rangle\langle b| \\ & + \hbar G_{b,c}e^{i[(\omega_b - \omega_c) - (\nu_p - \nu_s)]t'}\hat{a}_s^\dagger\hat{a}_p|b\rangle\langle c| \\ & + \hbar G_{c,b}e^{-i[(\omega_b - \omega_c) - (\nu_p - \nu_s)]t'}\hat{a}_p^\dagger\hat{a}_s|c\rangle\langle b|, \end{aligned} \quad (38)$$

and the dynamic Stark shifts are the same as those in Eq. (14)

$$\delta_{b,p} = -\sum_{a_i} \left[\frac{|g_{b,i}|^2}{(\omega_i - \omega_b) - \nu_p} + \frac{|g_{b,i}|^2}{(\omega_i - \omega_b) + \nu_p} \right]. \quad (39)$$

The terms in the first square brackets in Eq. (36) are associated with the transition path in Fig. 1a, while the second term with the transition path in

Fig. 1b. Again, each term in Eq. (36) corresponds to a graphical representation, illustrated in Fig. 3.

Here too, as in the TDPT case (and along the same reasoning), we neglect the terms which lead to a probability amplitude of the Raman process that goes as the inverse of the single-photon detuning, squared.

We can obtain the probability amplitude of the Raman process by using the first-order Magnus expansion with $\hat{F} = \hat{S}_1/i\hbar$, where now $\hat{S}_1$ makes use of the effective Hamiltonian rather than $\hat{V}$ in Eq. (24). We then get the critical overall two-photon resonance term $[(\omega_b - \omega_c) - (\nu_p - \nu_s)]^{-1}$ for the probability amplitude at large times. The same two-photon resonance term is obtained from the effective Hamiltonian in the second-order time-dependent perturbation theory case. There, the effective Hamiltonian is employed in a first-order time-dependent perturbation theory calculation of the transition amplitude, where there too, the effective Hamiltonian is utilized in place of $\hat{V}$. Interestingly, first-order time-dependent perturbation theory is identical to the first-order Magnus expansion with $\hat{F} = \hat{S}_1/i\hbar$.

There is a crucial point that must be emphasized here. There is a striking difference between the effective Hamiltonians obtained via the Magnus method and the time-dependent perturbation theory method. As long as two fields, namely, pump and Stokes, are involved in the Raman process, one-photon resonance of either the pump or Stokes fields should be included in the effective coupling constants. Furthermore, transition path 1(a) has two resonance conditions – one for the pump and another for the Stokes field. But in Eq. (13), obtained via time-dependent perturbation theory, the term which corresponds the transition path 1(a) has only the pump field resonance condition $\omega_i - \omega_c = \nu_p$. This means that Eq. (13) cannot predict any effect due to one photon Stokes field resonance $\omega_i - \omega_b = \nu_s$. In stark contrast to this, Eq. (36) which we obtained via the Magnus method, captures both single-photon resonance conditions, $\omega_i - \omega_c = \nu_p$ and $\omega_i - \omega_b = \nu_s$ (corresponding to pump and Stokes, respectively), in transition path 1(a). We will see that the canonical transform method also predicts an effect due to the a single Stokes photon in path 1(a). It is also important that on two-photon resonance, that is, when $(\omega_b - \omega_c) = (\nu_p - \nu_s)$, second order perturbation theory gives the same effective Hamiltonian as the Magnus expansion method. This happens automatically at the long-time limit, because at that limit, two-photon resonance is enforced.

Comparing Eqs. (13) and (36) for the effective coupling constant $G_{b,c}$, we notice that the number of terms is doubled in the case of the Magnus expansion, but also scaled by a factor of $1/2$. Consequently, the total magnitude of the effective coupling constants are approximately equal for the

different methods.

C. Canonical transformation method

Next we show how an effective Raman Hamiltonian can be obtained by the canonical transformation method. Defining the operator² $\hat{S}$ we transform $\hat{H}$ into the Hamiltonian $\hat{H}_{\text{eff}}$ as follows

$$\begin{aligned}\hat{H}_{\text{eff}} &= e^{\hat{S}} \hat{H} e^{-\hat{S}} \\ &= \hat{H}_0 + \hat{V}_0 + [\hat{S}, \hat{H}_0] + [\hat{S}, \hat{V}_0] + \frac{1}{2}[\hat{S}, [\hat{S}, \hat{H}_0]] + \dots\end{aligned}\quad (40)$$

We choose the operator $\hat{S}$ so that the second and third terms in Eq. (40) cancel each other, i.e.

$$[\hat{S}, \hat{H}_0] = -\hat{V}_0. \quad (41)$$

Since $\hat{H}_0$ and $\hat{V}_0$ are of order zero and one in coupling constant, respectively, we find that $\hat{S}$, as defined in³ Eq. (41), is also first-order in the coupling constant. Thus, the effective Hamiltonian truncated up to second order in coupling constant is

$$\begin{aligned}\hat{H}_{\text{eff}} &\simeq \hat{H}_0 + [\hat{S}, \hat{V}_0] + \frac{1}{2}[\hat{S}, [\hat{S}, \hat{H}_0]] \\ &= \hat{H}_0 + \frac{1}{2}[\hat{S}, \hat{V}_0].\end{aligned}\quad (42)$$

Remarkably, the effective Hamiltonian in Eq. (42) is Hermitian, provided that the operator $\hat{S}$ is anti-Hermitian, $\hat{S}^\dagger = -\hat{S}$.

	(a)	(b)
	$\hat{a}_s^\dagger \hat{a}_p b\rangle \langle c $	$\hat{a}_p \hat{a}_s^\dagger b\rangle \langle c $
$ C\rangle$	$ c, n_p, n_s\rangle$	$ c, n_p, n_s\rangle$
$ I\rangle$	$ a_i, n_p - 1, n_s\rangle$	$ a_i, n_p, n_s + 1\rangle$
$ B\rangle$	$ b, n_p - 1, n_s + 1\rangle$	$ b, n_p - 1, n_s + 1\rangle$

Table I: The explicit form of the states B , C , and I for the two transition paths of the Raman process. We use these for calculating the amplitude $\langle B | \hat{H}_{\text{eff}} | C \rangle$, see Eq. (45). Transition path (a), as shown diagrammatically in Fig. 1, involves two successive transitions, particularly, the transition from level c to level a_i coupled by pump photons, and the transition from level a_i to level b coupled by Stokes photons. For transition path (b), the two successive transitions are the transition from level c to level a_i coupled by Stokes photons, and the transition from level a_i to level b coupled by pump photons. See Fig. 1.

One can show that in the original $\hat{H}_0$ basis the matrix elements of the effective Hamiltonian are

$$\begin{aligned}\langle B | \hat{H}_{\text{eff}} | C \rangle &= \langle B | \hat{H}_0 | C \rangle \\ &+ \frac{1}{2} \sum_I \left(\langle B | \hat{S} | I \rangle \langle I | \hat{V}_0 | C \rangle - \langle B | \hat{V}_0 | I \rangle \langle I | \hat{S} | C \rangle \right),\end{aligned}\quad (43)$$

where states $|B\rangle$, $|C\rangle$, and $|I\rangle$ are states of the whole system (molecule plus fields), as illustrated in Tab. I. Using Eq.(41), the matrix elements of $\hat{S}$ are

$$\langle B | \hat{S} | I \rangle = \frac{\langle B | \hat{V}_0 | I \rangle}{(E_B - E_I)}, \quad \langle I | \hat{S} | C \rangle = -\frac{\langle I | \hat{V}_0 | C \rangle}{(E_C - E_I)}, \quad (44)$$

where E_B , E_C , and E_I are the energy of states B , C , and I , respectively. Ultimately, plugging Eq. (44) into Eq. (43), we obtain the matrix elements of the effective Hamiltonian,

$$\begin{aligned}\langle B | \hat{H}_{\text{eff}} | C \rangle &= \langle B | \hat{H}_0 | C \rangle \\ &+ \frac{1}{2} \sum_I \left(\frac{\langle B | \hat{V}_0 | I \rangle \langle I | \hat{V}_0 | C \rangle}{E_B - E_I} + \frac{\langle B | \hat{V}_0 | I \rangle \langle I | \hat{V}_0 | C \rangle}{E_C - E_I} \right).\end{aligned}\quad (45)$$

The effective Hamiltonian itself in the Schrödinger picture is

$$\begin{aligned}\hat{H}_{\text{eff}} &= \hat{H}_0 + \hbar(\delta_{c,p} \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_p + \delta_{c,s} \hat{a}_s^\dagger \hat{a}_s) |c\rangle \langle c| \\ &+ \hbar(\delta_{b,p} \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_p + \delta_{b,s} \hat{a}_s^\dagger \hat{a}_s) |b\rangle \langle b| \\ &+ \hbar G_{b,c} \hat{a}_s^\dagger \hat{a}_p |b\rangle \langle c| \\ &+ \hbar G_{c,b} \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_s |c\rangle \langle b|,\end{aligned}\quad (46)$$

where we ignore the matrix elements for excited states a_i in the free Hamiltonian $\hat{H}_0$, i.e.

$$\hat{H}_0 = \hbar\omega_b |b\rangle \langle b| + \hbar\omega_c |c\rangle \langle c| + \sum_{\ell=p,s} \hbar\nu_\ell \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell. \quad (47)$$

When we transform the Hamiltonian (46) from the Schrödinger picture into the interaction picture, we obtain exactly the same *form* of the effective Hamiltonian as in Eq. (12), except that $G_{b,c}$ and $G_{c,b}$ are different from the time-dependent perturbation theory case.

In this framework, along with the Hamiltonian, the state vectors must also be transformed $|\psi\rangle \rightarrow e^{\hat{S}} |\psi\rangle$. That is, the operator $\hat{H}_{\text{eff}}$ is only a Hamiltonian in the sense that

$$\hat{H}_{\text{eff}} e^{\hat{S}} |\psi\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} e^{\hat{S}} |\psi\rangle. \quad (48)$$

However, for large single-photon detunings, the state $|C\rangle$ transforms approximately to itself

$$|C\rangle \rightarrow e^{\hat{S}} |C\rangle \simeq |C\rangle, \quad (49)$$

² This operator is not to be confused with the Magnus expansion terms $\hat{S}_n$

³ We also choose $\hat{S}$ to be zero on the diagonals.

and similarly for the state $|B\rangle$. Thus, in the case of large single-photon detunings, we see that all three methods considered in this and in previous subsections give similar effective Hamiltonians.

For the transition paths (a) and (b) in Tab. I, we are able to calculate the explicit form of the effective coupling constant for the Raman process.

$$G_{b,c} = -\frac{1}{2} \sum_{a_i} \left\{ \left[\frac{g_{b,i}g_{i,c}}{(\omega_i - \omega_c) - \nu_p} + \frac{g_{b,i}g_{i,c}}{(\omega_i - \omega_b) - \nu_s} \right] + \left[\frac{g_{b,i}g_{i,c}}{(\omega_i - \omega_c) + \nu_s} + \frac{g_{b,i}g_{i,c}}{(\omega_i - \omega_b) + \nu_p} \right] \right\}, \quad (50)$$

and

$$G_{c,b} = (G_{b,c})^*. \quad (51)$$

Again, the dynamic Stark shifts are the same as in Eq. (14). It is worth mentioning that in the last expression, the effective coupling constant exactly matches that of Eq. (36), which we obtained using the Magnus expansion method.

III. CONCLUSIONS

In the previous section we calculated the effective Raman Hamiltonian using three distinct method. Two of them, namely, the Magnus expansion method, and the canonical transformation method yield the same effective Hamiltonian, whereas time-dependent perturbation method gives a different effective Hamiltonian. However, the difference is only in the effective coupling constant $\hat{G}_{b,c}$ and there is no difference in the dynamic Stark shifts.

We would like to make here several remarks. First, the Hermiticity of the effective Hamiltonian is a major concern because it is deeply connected to the conservation of total probability. For the time-dependent perturbation method, in general, we have shown that the effective Hamiltonian is not Hermitian. Fortunately, the effective Hamiltonian arising from the Magnus expansion and canonical transformation methods is Hermitian.

Second, the effective Hamiltonian obtained via the Magnus expansion method features the one-photon resonance terms that one might expect from physical considerations, whereas that obtained via second order perturbation theory can only describe pump single-photon resonance effects.

Third, the observation tells us that the number of terms is doubled in the case of the Magnus expansion and the canonical transformation methods, scaled by a factor of $1/2$. Consequently, the total magnitude of the effective coupling constants are approximately equal for the three different methods.

Fourth, on two-photon resonance (assuming $\nu_p \neq \nu_s$), both the Magnus expansion and second order perturbation theory give the same effective Hamiltonian for the Raman process.

Acknowledgments

This research work has received funding from the National University of Mongolia under grant agreement P2020-3967. The author is supported by the Herman F. Heep and Minnie Belle Heep Texas A&M University Endowed Fund held/administered by the Texas A&M Foundation.

-
- [1] B. W. Shore, *The theory of coherent atomic excitation* (John Wiley & Sons, Ltd, 1990), vol. 1, pp. 902–928.
 - [2] S. E. Harris, *Opt. Lett.* **19**, 2018 (1994).
 - [3] S. Chelkowski and A. D. Bandrauk, *Journal of Raman Spectroscopy* **28**, 459 (1997).
 - [4] F. L. Kien, K. Hakuta, and A. V. Sokolov, *Phys. Rev. A* **66**, 023813 (2002).
 - [5] N. Mukherjee, *J. Opt. Soc. Am. B* **23**, 1635 (2006).
 - [6] N. Mukherjee and R. N. Zare, *J. Chem. Phys.* **135**, 024201 (2011).
 - [7] C. C. Gerry and J. H. Eberly, *Phys. Rev. A* **42**, 6805 (1990).
 - [8] J. Steinbach, J. Twamley, and P. L. Knight, *Phys. Rev. A* **56**, 4815 (1997).
 - [9] D. A. Cardimona, V. Kovanis, M. P. Sharma, and A. Gavrielides, *Phys. Rev. A* **43**, 3710 (1991).
 - [10] M. Alexanian and S. K. Bose, *Phys. Rev. A* **52**, 2218 (1995).
 - [11] Y. Wu, *Phys. Rev. A* **54**, 1586 (1996).
 - [12] M. O. Scully and M. S. Zubairy, *Quantum Optics* (Cambridge University Press, 1997).
 - [13] E. Merzbacher, *Quantum Mechanics* (John Wiley & Sons, INC, 1998), pp. 338–339, 3rd ed.
 - [14] D. A. Long, *Survey of Light-scattering Phenomena* (John Wiley & Sons, Ltd, 2002), pp. 3–18.
 - [15] W. Magnus, *Commun. Pure Appl. Math.* **7**, 649 (1954).
 - [16] S. Blanes, F. Casas, J. Oteo, and J. Ros, *Physics Reports* **470**, 151 (2009).
 - [17] T. Begzjav, J. S. Ben-Jamin, H. Eleuch, R. Nessler, Y. Rostovtsev, and G. Shchedrin, *J. Mod. Opt.* **64**, 2255 (2017).

$\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ /Графены нийлмэл нэгдлийн электрон бүтцийн онолын судалгаа

А. Мөнхбаатар^{1,2}, Л. Сарантуяа¹, Н. Цогбадрах^{2*}, Э. Уранбайгал¹, Г. Сэвжидсүрэн¹

¹ ШУА –ийн Физик, Технологийн хүрээлэн, Материал судлалын салбар

² Монгол улсын их сургууль, Шинжлэх ухааны сургууль, Физикийн тэнхим

Энэхүү судалгааны ажилд литийн ионы батарейн анодын материалд ашиглах шпинел $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ (LTO) /Графены нийлмэл нэгдлийн электрон бүтцийг *ab initio* квант механикийн аргаар нягтын функционалийн онол (НФО)-д суурилсан QUANTUM ESPRESSO багц програм ашиглан судаллаа. Бид шпинел $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ нэгдлийн [100], [010] болон [001] гадаргуунуудыг графены дан үеэр бүрэхэд үүсэх LTO/Графены нийлмэл нэгдлийн электрон бүтцийн онолын судалгааг хийлээ. Тооцоонд тухайн байрлал дахь Ti - 3d орбитын электронуудын хувьд Кулоны түлхэлцлийн нөлөөг тооцон GGA+U ойролцоололд PAW аргаар электрон бүтцийн төлөвийн нягтыг тооцож, хориотой бүсийн өргөнийг онолоор тодорхойлов.

Түлхүүр үгс: LTO, графен, бүрэх (coating) эффект, тусгаарлагч-металлын шилжилт, НФО, PAW, GGA+U

I. Оршил

Орчин үед литийн ионы батарейн хэрэглээ эрчимтэй өсч технологийн болон онолын судалгааны хөгжүүлэлтийн ажил хурдацтай явагдаж байна. Литийн ионы батарей нь анод, катод, электролит болон тусгаарлагч гэсэн дөрвөн үндсэн хэсгээс тогтоно. Сүүлийн жилүүдэд литийн ионы батарейн анодын хэвийн, найдвартай ажиллагааг хангах үүднээс анодын материал нь судлаачдын анхаарлыг ихээхэн татах болсон юм. Учир нь одоо ашиглаж байгаа ихэнх батарейн анод материалд нүүрстөрөгчид суурилсан литийн нэгдэл (LiC_6) байдаг. Ийм анодын хувьд багтаамжийн алдагдал өндөр, бүтцийн хувьд тогтворгүй зэрэг дутагдалтай талууд байдаг тул багтаамж өндөртэй, ажиллах хугацаа урт, тогтвортой бүтэцтэй анодын шинэ материал гарган авах судалгааны ажлууд хийгдэж байна. Шпинел $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ нэгдэл нь бусад анодын материалтай харьцуулахад хүчдэл өндөр, тогтвортой бүтэцтэй, ажиллах хугацаа урт, байгаль орчинд үзүүлэх хор нөлөө багатай зэрэг олон давуу талуудтай бол хувийн гадаргуугийн талбай бага, цахилгаан дамжуулал харьцангуй муу байдаг. Эдгээр шинж чанарыг сайжруулахын тулд металлын ионоор хольцлох, дамжуулагч материалаар гадаргууг нь бүрэх эсвэл хольцолсон материал болгох гэсэн аргууд багтана [1-3]. Бид өмнөх судалгааны ажилдаа гидротермийн аргаар $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ нэгдлийг графенаар хольцлон $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ /Графенаар

хольцолсон нийлмэл нэгдлийг гарган авч, бүтэц шинж чанарыг нь судлан тогтоосон болно [4].

Энэхүү *ab initio* квант механикийн аргаар шпинел $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ нэгдлийн гадаргуунуудыг графены дан үеэр бүрсэн LTO/Графены нийлмэл нэгдлийн электрон бүтцийн онолыг тооцооны үр дүнг танилцуулна.

II. Онолын загварчлал

Шпинел $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ нь эгэл үүрэндээ 56 атомтай Fd-3m (#227) огторгуйн группд харьяалагддаг куб бүтэцтэй нэгдэл юм. Бид өмнөх ажилдаа LTO нэгдлийн кристалл бүтцийг туршилтын утгатай харьцуулан үр дүнг харуулсан [4]. LTO болон графены гадаргуугийн харилцан үйлчлэлийн шинж чанарыг тодорхойлохын тулд энэхүү судалгаанд LTO нэгдлийн [100], [010], [001] кристаллографийн индекстэй гадаргууг үүсгэн графены дан үеэр бүрж LTO/Графены нийлмэл нэгдлийг үүсгэлээ. Бүрэлтийг хийхдээ LTO-ийн гадаргаас дээш дундажаар 12 Å-ийн зузаантай вакууман хоосон зай үүсгэн графены дан үеийг орууллаа. Дээрх гадаргуунуудад тохирох дан үет графены атомын бүтцийг байгуулахдаа торын параметрийг 9.82 x 8.50 Å байхаар сонгон авав. Дан үет графены нүүрстөрөгчийн атом нь LTO нэгдэл дэх Ti эсвэл O атомтай холбогдох боломжтой. Учир нь цэнэглэгдэх болон цэнэгээ алдах процессын үед шпинел $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ фазаас $\text{Li}_7\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ гэсэн фаз руу шилжилт хийдэг. Энэ үед интеркаляц буюу Li^+ ионууд нэвчих, сугарах процесс явагддаг тул

* Electronic address: Tsogbadrakh@num.edu.mn

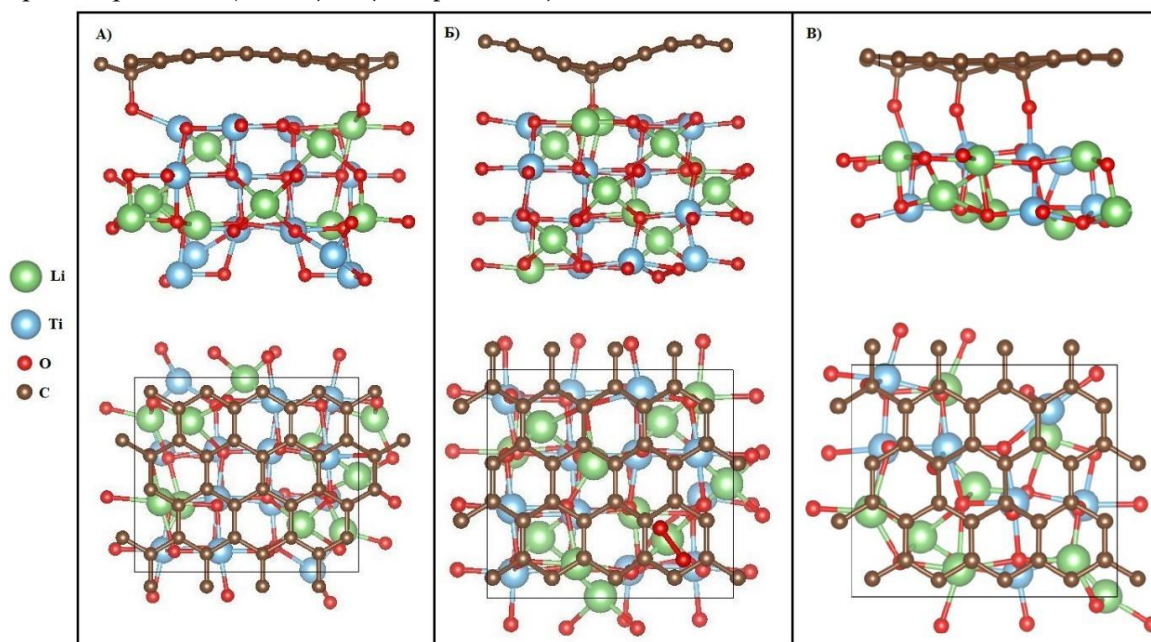
графены нүүрстөрөгчийн атом нь LTO нэгдэл дэх Ti эсвэл O-ийн атомын таслагдсан холбоосуудтай химийн холбоо үүсгэдэг. Онолын загварчлалд ашигласан LTO(100)/Графен, LTO(010)/Графен, LTO(001)/Графены нийлмэл нэгдлүүдийн торын параметрууд нь ижил бөгөөд 1-р хүснэгтэд үзүүлэв.

Хүснэгт 1. LTO (100), LTO(010), LTO(001), Графен болон LTO (100)/Графен, LTO(010)/Графен болон LTO(001)/Графен композит нэгдлүүдийн торын параметр.

	a(Å)	b(Å)	Г
LTO (100), LTO(010), LTO(001)	8.69	8.69	90°
Графен	9.82	8.50	90°
LTO (100)/Графен			
LTO (010)/Графен	9.82	8.50	90°
LTO (001)/Графен			

LTO(100), LTO(010), LTO(001) гадаргуу болон графены дан үеийн кристалл бүтцийг байгуулахад эдгээр 2 бүтцийн торын параметрт үүсэх нийт зөрүү нь 0.94 Å (~9.4%) байв. Нийлмэл нэгдлүүдийн кристалл бүтэц нь LTO -ийн бүтцийг дагаад тэгш өнцөгт бүтэцтэй байх тул атомын байрлалыг релаксаци хийх нь тохиромжтой. LTO (001)/Графен нийлмэл нэгдлийн кристалл бүтцийг загварчлахдаа нийт зузаан нь ойролцоогоор 6 Å байв. Цэвэр $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ -ын онолын загварчлалд валентын электроны бүтцийг $\text{Li}(1s^2, 2s^1)$, $\text{Ti}(3s^2, 3p^6, 3d^2, 4s^1)$,

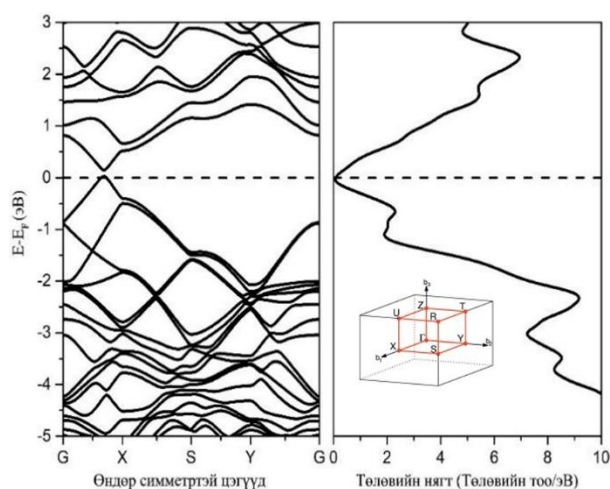
$\text{O}(2s^2, 2p^4)$ байхаар, графенаар бүрсэн үеийн бүтцийг загварчлахдаа валентын электроны бүтцийг $\text{C}(2s^2, 2p^2)$ байхаар сонгон авсан. PAW-ийн базис функцийн тайралтын энергийг 40 Ry, цэнэгийн нягтын тайралтыг 320 Ry байхаар сонгов. Тооцоонд LTO/Графены нийлмэл бүтэц үүсгэснээр кристаллографийн тухайн чиглэл дагуу чөлөөт гадарга үүсгэх тул Monkhorst-Pack-ийн схемийг $3 \times 2 \times 1$ байхаар сонгон авч тооцов [7]. Энэхүү тооцоог Нягтын Функционалийн Онол (НФО)-д тулгуурласан QUANTUM ESPRESSO пакет програмын [10, 11] PAW аргыг ашиглан параллель ажиллагаатай сервер компьютер ашиглан тооцоог гүйцэтгэв. Торын параметруудыг хөдөлгөөнгүй бэхэлж атомын байрлалуудыг релаксацид оруулсан. Электронуудын солилцол ба корреляцийн функционалийг тооцоолохдоо ерөнхий градиентын ойролцоолол (GGA) хэрэглэв. Тооцоонд бүх релаксацид орсон атомууд дээрх хүч нь 0.001 эВ/Å -аас бага болох үед зогсохоор тохируулав. Ti - 3d орбиталын Кулоны түлхэлцлийн хүчний нөлөөг тооцохдоо U-ийн [12] утгыг 8 эВ байхаар [5] сонгон авч бодолтыг явуулав. Гадаргуугийн харилцан үйлчлэлийг тооцож байгаа учир Ван дер Ваалсын (VdW) засварыг оруулж тооцоог хийв [8]. Харин өөртөө нийцсэн орны биш тооцоог тетраэдр аргаар гүйцэтгэв [9].



Зураг 1. А) LTO (100)/Графен, Б) LTO (010)/Графен, В) LTO (001)/Графены нийлмэл нэгдлийн релаксацид орсон байдал хажуу тал (дээд мөрөнд) болон дээд тал (доод мөрөнд) -аас нь харуулсан байдал.

III. Тооцооны үр дүн

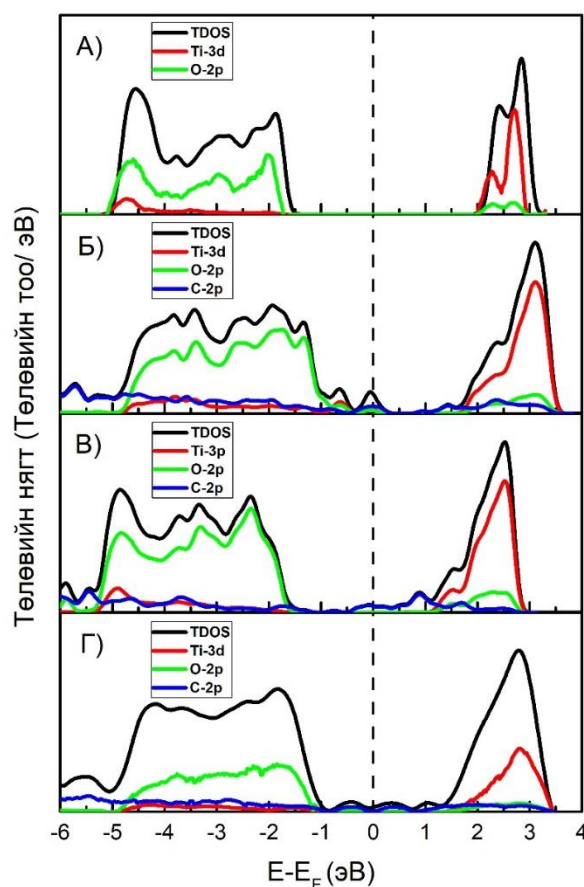
LTO(100)/Графен, LTO(010)/Графен болон LTO(001)/Графены нийлмэл нэгдлүүдийн атомын байрлалууд релаксацид оруулахад LTO-ийн гадаргын хүчилтөрөгийн атомын таслагдсан холбоос графены нүүрстөрөгчийн атомуудтай химийн холбоо (химосорбц) үүсгэж холбогдохдоо графены хотойлт үүссэн байгааг 1-р зурагт харуулав. Эндээс харахад хамгийн тогтвортой бүтэц буюу хотойлт бага үзүүлж байгаа нь LTO(001)/Графены нийлмэл нэгдэл байв (1 (В) - р зурагийг үз).



Зураг 2. Графены бүсийн бүтэц (зүүн) ба нийт төлөвийн нягт (баруун).

Үүний дараа графены электроны төлөвийн нягт болон бүсийн тооцоог хийж гүйцэтгэв (Зураг 2). LTO-ийн бүтцийг дагуулан графеныг орторомбо бүтэцтэй сонгон авсан учир Брюлейны бүсийн G, X, S, Y, G цэгүүдийг [13] сонгон авч тооцоог гүйцэтгэхэд бусад судлаачдын ажилтай тохирч байсан [14]. Бидний өмнөх ажилд цэвэр LTO-ийн электроний төлөвийн нягтыг онолоор тооцоход хориотой бүсийн өргөн 3.54 эВ гарсан байдаг [5, 6] (3 (А)-р зураг үз). LTO(100), LTO(010) болон LTO(001) нэгдлүүдийг графены нимгэн үеэр бүрсэний дараах нийлмэл нэгдлийн электрон бүтцийн төлөвийн нягтыг 3 (Б, В, Г) -р зурагт үзүүлээ. LTO-ийн [100], [010] болон [001] гадаргуунуудыг үүсгэхэд LTO-ийн O-2p орбиталтай графены нүүрстөрөгчийн атомын C-2p төлөв эрлийзжилтэнд орж хориотой бүсийг дайран өнгөрч Ферми түвшинг огтолж байгаа нь тусгаарлагч шинж чанааас металл шинж

чанартай болж цахилгаан дамжуулалыг сайжируулсан байна гэж үзлээ.



Зураг 3. А) цэвэр LTO кристалл, Б) LTO(100)/Графен, В) LTO(010)/Графен ба Г) LTO(001)/Графены нийлмэл нэгдлүүдийн нийт төлөвийн нягт ба Ti-3d, O-2p, C-2p орбитал дээр проекцолсон электрон төлөвийн нягт.

ДҮГНЭЛТ

Бид энэхүү тооцоогоор LTO нэгдлийн [100], [010] болон [001] гадаргуунуудыг сонгон авч графены дан үеэр бүрэхэд LTO [001] гадарга дээрх графены хувьд хамгийн бага хотойлт үзүүлж байгааг харууллаа. LTO-ийн гадаргын атомуудын тасарсан холбоосуудаас хүчилтөрөгчийн атомууд нь графены нүүрстөрөгчийн атомуудтай химийн холбоо (химосорбц) үүсгэн холбогдож байна. LTO-ийн O-2p орбиталтай эрлийзжилтэнд орсон графены C-2p-ийн төлөв хориотой бүсийг дайран өнгөрөхдөө Ферми түвшинг огтолж байгаа нь тусгаарлагчаас металл уруу шилжилт (insulator-metal transition) болсоноор цахилгаан дамжуулалыг сайжируулсан байна гэж үзлээ. Эдгээр үр дүнгээс LTO/Графены нийлмэл нэгдлүүдийн электрон бүтэц нь металл шинж

чанар үзүүлж байгаа нь бидний өмнөх туршилтын үр дүнтэй сайн тохирч байна.

ТАЛАРХАЛ

Энэхүү тооцоог хийх боломж олгосон ШУА – ийн Математик Тоон Технологийн Хүрээлэнгийн Параллель Тооцоолох Төвд талархал илэрхийлье.

АШИГЛАСАН МАТЕРИАЛ

- [1] Zhao, B., Ran, R., Liu, M., & Shao, Z. (2015). A comprehensive review of $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ -based electrodes for lithium-ion batteries: The latest advancements and future perspectives. *Materials Science and Engineering: R: Reports*, 98, 1–71.
- [2] Yan, H., Zhang, D., Qilu, Duo, X., & Sheng, X. (2020). A review of Spinel Lithium Titanate ($\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$) as Electrode Material for Advanced Energy Storage Devices. *Ceramics International*.
- [3] Yi, T.-F., Yang, S.-Y., & Xie, Y. (2015). Recent advances of $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ as a promising next generation anode material for high power lithium-ion batteries. *Journal of Materials Chemistry A*, 3(11), 5750–5777.
- [4] Л. Сарантуяа нар Графенаар хольцолсон шпинел $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ нэгдлийн судалгаа. *Физик, Технологийн хүрээлэн, Бүтээл №46*, 2019.
- [5] Sarantuya L et al., Structural and electronic properties of the spinel $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$, *Mong. J. Chem.*, 20(46), 2019, 7-12.
- [6] Sarantuya L et al., Carrier and Transition Metals (M = Nb, Cr and Fe) Doping Effects on Structure and Electronic Structure in Spinel $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ Compounds, *Solid State Phenomena* 310 (2020), 88.
- [7] Monkhorst .H. J , Pack .J. D, Special points for brillouin-zone integrations, *Physical Review B*, 13 (1976) 5188-5192.
- [8] Ukpog, A. M. (2015). First principles study of van der Waals heterobilayers. *Computational Condensed Matter*, 2, 1–10.
- [9] Blochl P.E., Jepsen O., Andersen O.K. (1994) Improved tetrahedron method for brillouin-zone integrations. *Phys. Rev. B*, 49, 16223-16233
- [10] Giannozzi, P. *et al.* QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for

quantum simulations of materials. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 21(39) (2009) 395502.

- [11] Giannozzi, P. et al Advanced capabilities for materials modelling with QUANTUM ESPRESSO *J. Phys.: Condens. Matter* 29 (2017) 465901.
- [12] Cococcioni, M. de Gironcoli, S. Linear response approach to the calculation of the effective interaction parameters in the LDA+U method, *Physical Review B* 71 (2005) 035105
- [13] Wahyu, S. *et al.* High-throughput electronic band structure calculations: challenges and tools. *Computational Materials Science* (2010)
- [14] Ould NE, M. L., El hachimi, A. G., Boujnah, M., Benyoussef, A., & El Kenz, A. (2018). Comparative study of electronic and optical properties of graphene and germanene: DFT study. *Optik*, 158, 693–696.

Органик нарны зайн идэвхт гадаргуун гэрлийн шингээлтийг сайжруулах судалгаа

А.Амарзаяа¹, Н.Төвжаргал^{1,*}, Алата², Нинжин², Ж.Даваасамбуу^{1,3}

¹Монгол Улсын Их Сургууль,

Шинжлэх ухааны сургуулийн Физикийн тэнхим,

Улаанбаатар хот 210646, Монгол улс

² Өвөр монголын багийн их сургуулийн Физик

электроник мэдээллийн технологийн сургууль,

Хөх хот, БНХАУ

³Шинжлэх Ухааны Академийн Физик Технологийн хүрээлэн,

Улаанбаатар хот, Монгол улс

Бид энэ ажлаар P3HT:PCBM (1-(3-methoxycarbonyl) propyl-1-phenyl-[6, 6]-methanofullerene: poly(3-hexylthiophene) холимог хагас дамжуулагч полимер материалд суурилсан органик нарны элементийн идэвхт гадаргууг тогтоож, хатаах горим, түүний гэрлийн шингээлтэд хэрхэн нөлөөлөхийг судлав. Эндээс DCB уурын орчин болон ердийн нөхцөлд тасалгааны температурт хатааж, тогтоох нь илүү үр дүнтэй болохыг үзүүлэв. Мөн дээжийн гэрлийн шингээлтийг сайжруулах зорилгоор ИТО шилэн суурь дээр алтны нано-бөөмийн болон хөнгөн цагааны нимгэн үе давхарга суулгах замаар органик полимер нарны элементийн идэвхт гадаргуун гэрлийн шингээлтийг нэмэгдүүлж болохыг тогтоолоо.

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

I. УДИРТГАЛ

Сүүлийн жилүүдэд органик хагас дамжуулагч полимер материалд суурилсан уян нарны элементийг гарган авах, түүнийг сайжруулах боломжийн судалгаа судлаачдын сонирхлыг ихээхэн татаж байгаа юм. Хэрэв хямд төсвөөр уян хатан, бат бөх, өндөр үр ашигтай нарны элемент хийж чадвал өдөр тутмын энгийн хэрэглээ болон нүүдэлчин ахуйд зохицсон тохиромжтой хэлбэрээр ашиглах боломжтой. Одоогоор олон төрлийн уян хатан органик нарны элемент гарган авч байгаа боловч түүний А.Ү.К бага байгаа учраас төдийлөн хэрэглээнд бүрэн гүйцэд нэвтрэхгүй байна. Органик полимер хагас дамжуулагч материалд суурилсан нарны элементүүдийн үр ашгийг нэмэгдүүлж, хэрэглээнд нэвтрүүлэх судалгаа эрчимтэй хийж байна. Ингэхдээ органик нарны зайн идэвхт гадаргуу болгон ашиглах материалын шинж чанарыг сайжруулах, гэрлийн шингээлтийг сайжруулах замаар үр ашгийг нэмэгдүүлэх нь илүү үр дүнтэй байдаг [1]. P3HT:PCBM холимог хагас дамжуулагч полимер материал нь органик нарны зайн идэвхт гадаргуу болгон ашигладаг онцгой материал юм. Энд PCBM (1-(3-methoxycarbonyl) propyl-1-phenyl-[6, 6]-methanofullerene) нь хориотой бүсийн өргөн 3.9 эВ акцепторын хольцтой хагас дамжуулагч материал бөгөөд органик нарны элемент, уян электрон төхөөрөмжүүдэд P3HT болон бусад донор полимер материалуудтай хослуулан ашиглаж байна [2]. P3HT (poly(3-hexylthiophene))

полимер хагас дамжуулагчийн цэнэг зөөгчийн хөдлөх чадвар сайн болон хориотой бүсийн өргөн 1.9 – 2 эВ байдаг нь нарны элементээр ашиглах хагас дамжуулагчийн шинж чанарыг үзүүлдэг[3]. Органик нарны элементийн идэвхт давхарга хийхэд P3HT-ийг донор, PCBM-ийг акцептор хольц болгон ашигласан нарны зайн цахилгаан орчныг өөрчлөх, P3HT:PCBM -ийн хольцын концентрацийн харьцааг өөрчлөх болон дулаан боловсруулалт хийсний дүнд одоогоор А.Ү.К-ийг 3.5%-д хүргээд байна[4].

Олон төрлийн хийц хэлбэр бүхий органик нарны элементүүд байдаг ба үүнд нэгэн төрлийн болон холимог давхарга бүтэцтэй нарны элементүүд багтдаг[5]. Бидний судлах нарны элементийн идэвхт гадарга хоорондоо фазын ялгаа бүхий холимог P3HT/PCBM донор, акцептор идэвхт гадаргуу, нүхэн дамжуулалтыг дэмжих PEDOT:PSS (poly(3,4 ethylenedioxythiophene):poly(styrene sulfonate) полимер давхаргатай, Индиум цагаан тугалганы исэл (ИТО) бүхий шилэн катод бүхий олон үет (multilayer) бүтэцтэй байна. Уян нарны зайг сайжруулах нэг арга нь гэрлийг түүний идэвхт гадаргуу дотор аль болох удаан барьж шингээлтийг нь ихэсгэх юм. Иймээс судлаачид гадаргуун плазмон үзэгдэлтэй нано-бөөмийн гэрлийн хугарал нь нимгэн хальсан нарны нарны зайн гэрлийн шингээлтийг ихэсгэх ирээдүйтэй арга гэж үзэж байна [6].

Иймээс энэ ажлаар P3HT:PCBM холимог хагас дамжуулагч полимер материалд суурилсан органик нарны элементийн гэрэл шингээгч оптик идэвхт гадаргууг тогтоож, хатаах горимоос түүний гэрлийн шингээлт хэрхэн хамаарахыг судлах, мөн ИТО шилэн суурь дээр алтны нано-бөөмийн

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

болон хөнгөн цагааны нимгэн үе давхарга суулгах замаар плазмон органик полимер нарны элемент үүсгэж, түүний идэвхт гадаргуун гэрлийн шингээлтийг сайжруулах боломжийг судлах зорилготой.

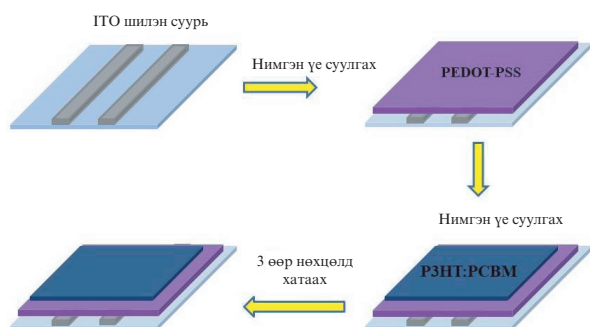
II. ТҮРШИЛТ

Туршилтад ашиглах бэлдэц болон уусмалуудыг тохирох урвалжуудаас гарган авах бөгөөд шаардагдах урвалж, бодисуудыг худалдан (Sigma-Aldrich, Shanghai Macklin and Shanghai Aladdin Bio-Chem Technology) авсан.

Гарган авсан дээжийн гэрлийн шингээлтийг тасалгааны температурт UV-VIS спектрометр (Perkin-Elmer Lambda 35), алтны нано-бөөм суулгасан дээжийн гадаргуун морфологийг атомын хүчний микроскоп ашиглан судлав. Энэхүү туршилтын ажлыг хоёр үе шаттайгаар гүйцэтгэсэн болно. Үүнд:

- РЗНТ:PCBM холимог хагас дамжуулагч органик полимер идэвхт гадаргууг тогтоож хатаах горим, гэрлийн шингээлтийн хамаарлыг судлах
- РЗНТ:PCBM идэвхт гадаргуун гэрлийн шингээлтийг сайжруулах зорилгоор түүний суурьд алт (Au)-ны нано-бөөм болон хөнгөн цагааны нимгэн үе суулгах замаар плазмон органик нарны элементийн идэвхт гадарга үүсгэж түүний гэрлийн шингээлтийг судлах

болно. 1-р зурагт РЗНТ:PCBM идэвхт гадаргуу бүхий олон үет нарны элемент бэлтгэх схемийг үзүүлэв.



Зураг 1: Олон үет нарны элементийн идэвхт гадаргуу РЗНТ:PCBM тогтоох дээж бэлтгэлийн схем

Үүнийг дараах дарааллын дагуу гүйцэтгэх болно.

- РЗНТ болон PCBM нунтаг бодисыг 1:1 жингийн харьцаатай хольж 2мл о-DCB(1, 2 Dichlorobenzene) уусгагчид хийн glove box-т 50°C температурт 1 цаг соронзон хутгуурт хутгаад, дараа нь орчны температур 24 цагийн турш нэгэн

төрөл болтол хутгаж РЗНТ:PCBM холимог уусмалыг бэлтгэв.

- ITO контакт бүхий суурь шилэн бэлдцээ цэвэрлэгч уусмалууд (нэрмэл ус, этанол, изопропилийн спирт, ацетон) ашиглан угааж, хатаах зуух, хэт авианы цэвэрлэгч болон озоны орчинд хэт ягаан туяагаар шарж цэвэрлэсэн.

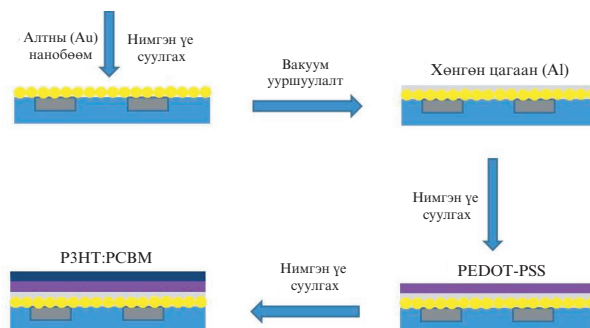
-Цэвэрлэж бэлдсэн шилэн бэлдэц дээр PEDOT:PSS нимгэн үеийг Spin coater (эргэлдэгч дискний тусламжтай нимгэн үе суулгах төхөөрөмж) ашиглан 2000 эрг/сек горимд ажиллуулан бүрэх ба нимгэн үеийг 120°C температурт 10 минут халааж тогтоов.

- РЗНТ:PCBM идэвхт гадаргуу тогтоох: Spin coater ашиглан PEDOT:PSS давхарга бүхий шилэн бэлдэц дээрээ урьдчилан бэлтгэсэн РЗНТ:PCBM нэгэн төрлийн уусмалаа жигд тарааж 100нм зузаан үе тогтоохоор тооцож 1000эрг/сек эргэлтийн хурдтайгаар жигд дусааж идэвхт гадаргуу тогтооно. Ингээд идэвхт давхарга тогтоосон дээжийн хатаалтын тохиромжтой нөхцөлийг тогтоохын тулд дараах нөхцөлүүдэд хатаасан. Үүнд:

1. Хатаах зууханд 60°C температурт 24 цаг хатаах
2. Тасалгааны температурт 24 цаг хатаах
3. DCB ($C_6H_4Cl_2$) бодисын уурын орчинд, тасалгааны температурт 24 цаг хатаах

-Гурван өөр горимоор хатаасан дээжүүдийн гэрлийн шингээлтийг UV-VIS спектрометр ашиглан хэмжинэ. Хэмжилтийн үр дүнд үндэслэн үзэгдэх гэрлийн мужид хамгийн сайн шингээлт өгч буй горимоор хатааж идэвхт давхарга тогтоосон дээжийг сонгож авсан.

-Дээжийн гэрлийн шингээлтийг дахин сайжруулахын тулд РЗНТ:PCBM идэвхт гадаргуу суурьд алтны нано-бөөмийн болон хөнгөн цагааны нимгэн үе давхарга суулгах замаар плазмон нарны элемент үүсгэх туршилтын схемийг 2-р зурагт үзүүлэв.



Зураг 2: Алтны нано-бөөмийн болон хөнгөн цагааны нимгэн үе давхарга суулгаж плазмон нарны элементийн идэвхт гадаргуу РЗНТ:PCBM тогтоох дээж бэлтгэлийн схем

Туршилтыг дараах дарааллын дагуу гүйцэтгэсэн болно.

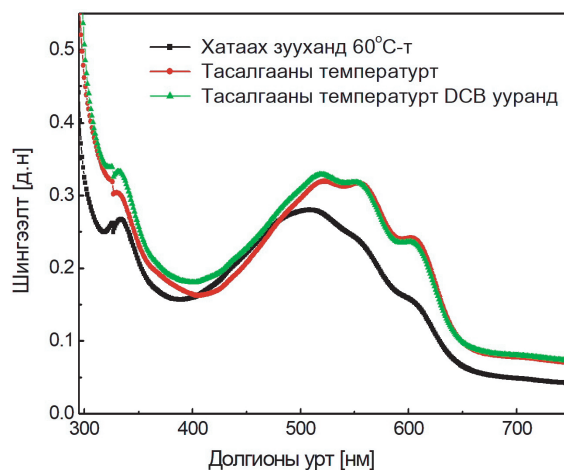
- Стандарт алтны нано-бөөмс агуулсан уусмалыг 30°C температурт 15 минут халааж бэлтгэнэ.
- Алт (Au)-ны нано-бөөмийг урьдчилан цэвэрлэж бэлдсэн ИТО шилэн ялтас дээр spincoater ашиглан нимгэн үе хэлбэрээр суулгана. Ингэхдээ бүрэх эргэлтийн хурд нь эхний 10 секундэд 200 удаа, дараагийн 120 секундэд 4000 удаа эргэж байхаар тохируулсан.
- Шилэн ялтасны гадаргуу дээр алтны нано-бөөмс жигд, дан давхарга байдлаар тархан суусан байх шаардлагатай бөгөөд түүний гадаргуун морфологийг атомын хүчний микроскоп ашиглан шалгана.
- Алтны нимгэн үе жигд суусан дээжийг сонгон авч, түүнтэй хамт гадаргуун плазмоны эффектийг үзүүлэхэд туслах хөнгөнцагаан (Al)-ы нимгэн үеийг 2-р зурагт үзүүлсэн схемийн дагуу вакуум ууршуулалтын аргаар суулгана.
- Үүний дараа 2-р зурагт үзүүлсэн схемийн дагуу эхний туршилтаар нарны элементийг бэлтгэж РЗНТ:PCBM идэвхт давхарга тогтоосон аргаар суулгаж, хатааж бэлтгэнэ.

Эцэст нь бэлэн болсон дээжийн гэрлийн шингээлтийг UV-VIS спектрометр ашиглан хэмжив.

III. ҮР ДҮН

Бид олон үе давхарга бүхий органик нарны элементийн идэвхт давхарга болох РЗНТ:PCBM-ийг ИТО шилэн гадаргуу дээр тогтоож, гурван өөр горимоор хатаах туршилтыг хийсэн дээжүүдийн гэрлийн шингээлтийн хэмжилтийн үр дүнг 3-р зурагт үзүүлэв.

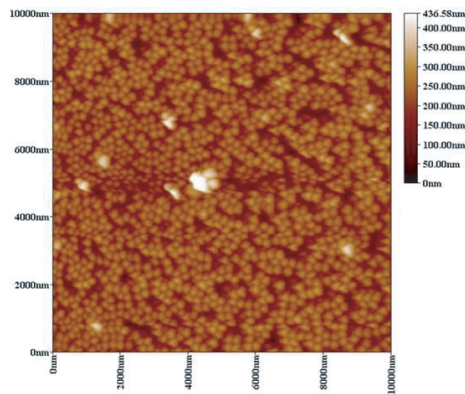
Ингэхдээ дээжийг хатаах зууханд 60°C температурт 24 цаг, тасалгааны температурт 24 цаг, DCB бодисын уурын орчинд, тасалгааны температурт 24 цаг хатааж РЗНТ:PCBM идэвхт гадаргууг тогтоосон. Нарны элемент нь гэрлийн фотоэффектийн үзэгдлийн дагуу энергийг цахилгаан энерги болгон хувиргах төхөөрөмж тул үзэгдэх гэрлийн мужид хамгийн сайн гэрэл шингээж байгаа нь өндөр үр ашигтай байх болно. 3-р зурагт үзүүлсэн гэрлийн шингээлтийн хэмжилтийн үр дүнгээс үзэхэд DCB бодисын уурын орчинд, тасалгааны температурт 24 цаг хатаасан дээж үзэгдэх гэрлийн мужид хамгийн сайн гэрлийн шингээлт өгч байгааг үзүүлэв. Мөн дээжийг тасалгааны температурт шууд хатаах нь үр дүнтэй болох нь эндээс харагдаж байна. Идэвхт гадаргуун



Зураг 3: Гурван өөр горимоор хатааж, тогтоосон РЗНТ:PCBM идэвхт гадаргуун үзэгдэх гэрлийн муж дахь гэрлийн шингээлтийн спектр

РЗНТ фазын хувьд 400-650nm үзэгдэх гэрлийн мужид гэрэл шингээлт өгдөг бол PCBM фазын хувьд 300-350nm хэт ягаан туяаны мужид гэрлийн шингээлт өгдөг. Энэ нь эдгээр материалуудын электрон бүтэцтэй холбоотой[7].

Плазмон нарны элемент үүсгэх замаар, идэвхт гадаргуун гэрлийн шингээлтийг сайжруулах зорилгоор алт (Au)-ны нано-бөөмийг урьдчилан цэвэрлэж бэлдсэн ИТО шилэн ялтас дээр Spin coater ашиглан нимгэн үе хэлбэрээр суулгасан дээжийн гадаргуун морфологийн зургийг атомын хүчний микроскопоор авсныг 4-р зурагт үзүүлэв.

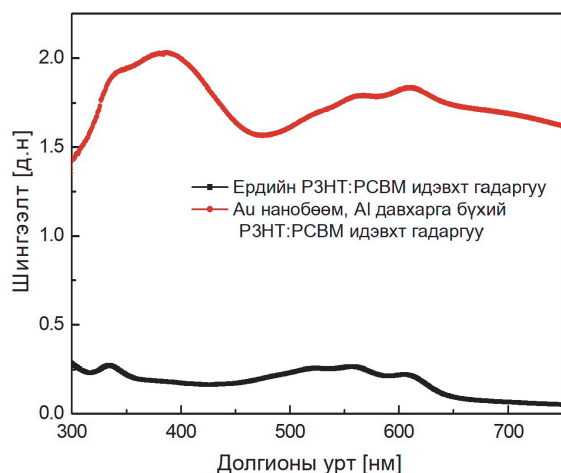


Зураг 4: ИТО шилэн ялтас дээр алтны нано-бөөмсийн үе давхрага суусан байдал.

Эндээс үзэхэд тухайн дээжийн хувьд шилэн гадаргуу дээр алтны нимгэн үе жигд тархан суусан болохыг харж болно. Туршилтыг олон дахин хийж алтны нано-бөөмс хамгийн сайн, жигд, нимгэн тархалт бүхий дээжийг сонгон авч вакуум ууршуулалтын аргаар хөнгөн цагааны нимгэн үе суулгаж, нарны элемент хийхэд ашигласан.

Металл нано-бөөмүүд нь бөөрөнхий хэлбэртэй учир тэд зэрэгцэн байрлахаараа хоорондоо зай

үүсгэдэг. Тэр үүссэн зайд металл хөнгөн цагаан шигтгэн өгснөөр гэрлийн хугарал үүсгэнэ. Нано-бөөм нь өөрөө гадаргуун плазмон резонансын нөлөөгөөр гэрлийг удаан барьж тогтоон тархалтыг ихэсгэнэ, мөн үүний дээр хөнгөн цагаанаас үүдсэн гэрлийн хугарал нэмэгдэж гэрэл шингээж, барих үйл явцыг улам дэмжиж өгөх үүрэгтэй [8].



Зураг 5: P3HT:PCBM идэвхт гадаргууд суурилсан алтны нано-бөөмийн болон хөнгөн цагааны нимгэн үе давхарга суулгаж плазмон нарны элемент болон ердийн органик нарны элементийн идэвхт гадаргуун гэрлийн шингээлт

Эцэст нь P3HT:PCBM идэвхт гадаргууд суурилсан алтны нано-бөөмийн болон хөнгөн цагааны нимгэн үе давхарга суулгаж плазмон нарны элемент болон ердийн органик нарны элементийн идэвхт гадаргуу гэрлийн шингээлтийг тус тусд нь хэмжиж харьцуулан үзүүлсэн үр дүнг 5-р зурагт үзүүлэв.

Эндээс үзэхэд алтны нано-бөөмийн болон хөнгөн цагааны нимгэн үе давхарга суулгаж өгсөн нарны элементийн гэрлийн шингээлт ердийн органик полимер нарны элементтэй харьцуулахад 6 дахин ихэссэн нь харагдаж байна. Идэвхт га-

даргууд шингээгдэх гэрлийн хэмжээ нэмэгдэх нь төдий чинээ гэрлийн энергийг цахилгаан энерги болгон хувиргах хэмжээ нэмэгдэнэ гэсэн үг юм[1]. Үүний үр дүнд нарны элементийн ашигт үйлийн коэффициент нэмэгдэх боломжтой болно.

IV. ДҮГНЭЛТ

Энэ ажилд P3HT:PCBM холимог хагас дамжуулагч полимер материалд суурилсан органик нарны элементийн идэвхт гадаргуу тогтоон хатаах горимоос түүний гэрлийн шингээлт хэрхэн хамаарахыг судлав. Гэрлийн шингээлтийн хэмжилтийн үр дүнгээс DSC уурын орчин болон ердийн нөхцөлд тасалгааны температурт хатаах нь илүү үр дүнтэй болохыг тогтоов. Энэ нь гэрэл шингээгч идэвхт гадаргуун кристаллжилттай холбоотой.

Мөн дээжийн гэрлийн шингээлтийг сайжруулах зорилгоор ИТО шилэн суурь дээр алтны нано-бөөмийн болон хөнгөн цагааны нимгэн үе давхарга суулгахад нарны элементийн идэвхт гадаргуун гэрлийн шингээлт зургаа дахин нэмэгдэж байна.

Органик нарны элементийн идэвхт гадаргуун гэрлийн шингээлтийг нэмэгдүүлснээр түүний ашигт үйлийн коэффициент мөн адил нэмэгдэж, ирээдүйд хямд төсөр, үр ашиг өндөртэй уян хатан шинж чанар бүхий нарны зайн эх үүсвэрийг ашиглах боломж бүрдэх юм.

Талархал

Энэхүү ажлыг гүйцэтгэхэд дэмжлэг үзүүлж суурь судалгааны төслийг санхүүжүүлсэн ШУТС болон БСШУЯ, туршилт боловсруулалтыг хийх материал, багаж төхөөрөмжөөр хангаж, үнэтэй зөвлөгөө өгч хамтран ажилласан БНХАУ-ын ӨМӨЗО-ны Багшийн их сургуулийн Функционал материалын физик, химийн лабораторийн хамт олонд гүн талархал илэрхийлье.

- [1] Kim, H. et al., "Organic solar cells based on conjugated polymers: history and recent advances" Korean J. Chem. Eng. 31, (2014) 1095-1104
- [2] Jan C.; Knight, Brian W.; Lepeq, F.; Wudl, Fred; Yao, Jie; Wilkins, Charles L., "Preparation and Characterization of Fulleroid and Methanofullerene Derivatives". J. Org. Chem., 60, 3, (1995) 532-538
- [3] Vishal Shrotriya, Jianyong Ouyang, Ricky J. Tseng, Gang Li, Yang Yang., "Absorption spectra modification in poly(3-hexylthiophene):methanofullerene blend thin films" Chemical Physics Letters 411 (2005), 138-143
- [4] F.Padinger, R.S.Rittberger, N.S.Sariciftci., "Effects of Postproduction Treatment on Plastic Solar Cells" Adv. Funct. Mater. 13, (2003) 85-88
- [5] Harald Hoppe and Niyazi Serdar Sariciftci "Organic solar cells: An overview" Journal of Materials Research, 19, (2004) 1924-1945
- [6] K.R. Catchpole and A. Polman, "Plasmonic solar cells" Optics Express Vol. 16, Issue 26, (2008) 21793-21800
- [7] Tao Xu, Luping Yu, "How to design low bandgap polymers for highly efficient organic solar cells" Materials Today, Volume 17, Issue 1, (2014) 11-15,
- [8] E.Stratakis,E.Kymakis., "Nanoparticle-based plasmonic organic photovoltaic devices" Materials Today. Volume 16, Issue 4, (2013) 133-146

Печинигийн аргаар гарган авсан Fe-Co/Al₂O₃ биметалл катализаторын судалгаа

С.Энхтөр¹, Ц.Цог-Очир², Б.Номин-Эрдэнэ³, Р.Галбадрах¹, Д.Рэнцэнмядаг³,
Г.Эрдэнэ-Очир^{1,*}

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

²Материал судлалын салбар, Физик Технологийн хүрээлэн, Шинжлэх Ухааны Академи

³Химийн тэнхим, Байгалийн Ухааны Салбар, Шинжлэх Ухааны Сургууль, Монгол Улсын Их Сургууль

Энэхүү судалгааны ажлаар хөнгөн цагаан суурьтай биметалл (Fe-Co/Al₂O₃) катализаторыг Печини аргаар гарган авсан. Катализаторын морфологи бүтэц, элементийн агуулгыг SEM-EDX хэмжилтээр тодорхойлсон. Туршилтын үр дүн катализаторт хөнгөн цагаан 7.5%, төмөр 41.7%, кобальт 50.7%-тай агуулагдаж байгааг тогтоосон. Fe-Co/Al₂O₃ катализатор нь CVD аргаар нүүрстөрөгчийн нанохоолой гарган авахад тохиромжтой бөгөөд үр ашигтай болох нь туршилтаар батлагдсан.

Түлхүүр үгс: Fe-Co/Al₂O₃ катализатор, Печини арга, нүүрстөрөгчийн нанохоолой

ОРШИЛ

1991 онд анх нээгдсэнээс хойш нүүрстөрөгчийн нанохоолой (НТНХ)-н физик, химийн гайхалтай шинж чанарууд судлаачдын анхаарлыг татсаар ирлээ. Цахилгаан, дулааныг дамжуулах чадвар өндөр, оптик идэвхтэй, уян хатан, бат бөх хэрнээ хөнгөн, гадаргын идэвхт талбай ихтэй зэрэг шинж чанарууд нь энэхүү материалыг нанотехнологи, материал судлал, электроник, эрчим хүч, нарны зай, биотехнологи, анагаах ухаан зэрэг олон салбарт төрөл бүрийн хэрэглээтэй болгосоор байна [1-5].

Орчин үед НТНХ-г гарган авахад электролиз, нуман ниргэлэг, соно-хими, лазерын абляци, химийн уураас суулгах (CVD-Chemical Vapor Deposition) зэрэг аргуудыг өргөн хэрэглэж байна. Эдгээрээс CVD арга нь хэрэглэхэд хялбар, бүтээгдэхүүний цэвэршилт өндөр, шууд үйлдвэрлэлд нэвтрүүлэх боломжтой, бусад аргуудтай харьцуулахад бага температурт явагддаг (550-1000°C), өртөг бага зэрэг давуу талтай. Мөн урвалын явцад НТНХ-н урт, ургах чиглэл, бүтэц, морфологийг хянах боломжийг олгодог [6-8]. Гэвч энэ аргаар НТНХ-г гарган авахад катализатор зайлшгүй шаардлагатай. CVD аргад катализатор болгон кобальт, төмөр, никель, алт, мөнгө, зэс, хром, магни зэрэг металлуудын дан болон биметалл, оксид нанопартикулуудыг өргөн ашигладаг [9-14]. Гэхдээ эдгээр металлуудын ихэнхийг хүчилтөрөгчөөр идэвхжүүлэх шаардлага гардаг

[15, 16]. Мөн Д. Такаги нар SiC, Ge, Si хагас дамжуулагч нанопартикулууд ашиглан дан болон олон ханат НТНХ-г гарган авч болохыг харуулсан [17].

Эдгээрээс гадна металлын оксид (Al₂O₃, MgO, SiO₄, TiO₂ гэх мэт) сууриар идэвхжүүлсэн моно болон биметалл нано, микро хэмжээт катализаторууд нь дан, давхар, олон ханат НТНХ-г гарган авахад үр дүнтэй байгааг сүүлийн үеийн судалгаанууд харуулсаар байна [18-22]. Бүтээгдэхүүний чанарыг сайжруулахын зэрэгцээ гарцыг нэмэгдүүлэхийн тулд туршилтын тухайн арга, тухайн нөхцөлд тохирсон катализатор материалыг гаргах авах нь чухал байдаг.

Энэхүү судалгааны ажлын зорилго CVD аргаар НТНХ-г синтезлэхэд тохиромжтой, бүтээгдэхүүний гарц ихтэй, металлын оксид суурьтай, биметалл катализатор гарган авахад чиглэнэ.

ТУРШИЛТЫН ХЭСЭГ

Катализаторыг гарган авах. Туршилтанд өндөр цэвэршилттэй төмрийн нитрат (Fe(NO₃)₃*9H₂O), кобальтийн нитрат (Co(NO₃)₃*6H₂O), хөнгөнцагааны нитрат (Al(NO₃)₃*9H₂O), этилен гликол (C₂H₆O₂), нимбэгийн хүчил ашигласан. Катализаторыг бэлтгэхэд Печинигийн [23] буюу полимер комплексийн аргыг ашигласан ба ингэхдээ суурь катализаторийг хөнгөнцагааны исэл байхаар сонгон авч, түүн дээр төмөр, кобальт

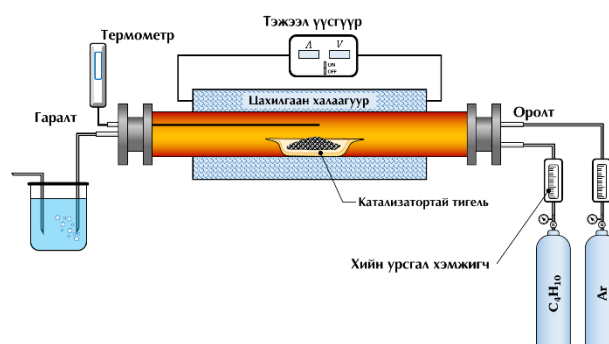
* Electronic address: erdeneochir_g@num.edu.mn

элементүүдийг суулган гарган авсан. Полиметр матриц гарган авахад нимбэгийн хүчил болон этилен гликолыг ашигласан. Катализаторыг гарган авах туршилт нь үндсэн хоёр үе шаттай. 1-р үе шат. 250 мл нэрмэл усыг соронзон хутгуур дээр (400 эрг/мин) тавьж 60°C хүртэл халаана. Үүн дээр нимбэгийн хүчил (57.78 ммоль) ба этилен гликол (250 ммоль)-ыг 1:4 молийн харьцаатай хольж нэмнэ. Нимбэгийн хүчил болон этилен гликолийг нэмэх үед уусмалд өнгөний өөрчлөлт гараагүй. Дараа нь уусмалыг 80-90°C хүртэл халааж, металлын идэвхтэй компонент төмрийн нитрат (12.10 ммоль), кобальтийн нитрат (12.20 ммоль) болон суурь элемент хөнгөнцагааны нитрат (11.46 ммоль)-ыг нэмнэ. Бүх металлын нитратуудын нийлбэр молийн харьцаа нь нимбэгний хүчилтэй 1:1, этилен гликольтай 1:4 харьцаатай байна. Уусмалд хөнгөнцагааны нитратыг түрүүлж хийсэн ба энэ үед уусмалын өнгө өөрчлөгдөөгүй. Металлын идэвхтэй компонент болох төмөр (III)-ийн болон кобальтын нитратуудыг нэмэхэд уусмалын өнгө улаан хүрэн болж өөрчлөгдсөн. Уусмалыг тогтмол 400 эрг/мин хурдтайгаар хутгаж, 95°C температурт усыг ууршуулсан. 60 минутын дараа ус бүрэн ууршиж, зуурамтгай шинж чанар бүхий хөөс үүссэн.

2-р үе шат. Уусмал дахь ус бүрэн ууршиж, хөөс үүсэж дуусмагч халаагчийг унтрааж, соронзон хутгуурыг авна. Дараа нь дээжийг шатаах зууханд 500-550°C температурт, 1-1.5 цагийн турш шатаана.

НТНХ гарган авах. Туршилтанд өөрсдийн гар аргаар бүтээсэн CVD төхөөрөгийг ашигласан ба ерөнхий бүдүүвчийг зураг 1 дээр үзүүлээ. CVD төхөөрөгийн гол хэсэг нь 21 см дотоод диаметртай, 50 см урт хэвтээ байрласан кварц хоолой ба түүнийг гадна талаар нь ороосон цахилгаан халаагуур байна. Кварц хоолойн оролтын хэсэгт хийн урсгалын хурд хэмжигч бүхий аргон болон бутан хийг холбосон. Гаралт хэсэг дэх хийн хоолойг устай саванд дүрсэн ба энэ нь туршилтын явцад гаралтын хэсгээр кварц хоолой руу агаарын хүчилтөрөгч орохоос хамгаалах, шаталтаас үүссэн органик нэгдлийг агаарт дэгдэхээс сэргийлэх үндсэн үүрэгтэй. Мөн гаралтын хэсэгт урвалын температурыг хэмжих термометр байх ба түүний термохосийн

төгсгөл тигельтэй катализаторын эгц дээр байхаар тараауулсан.



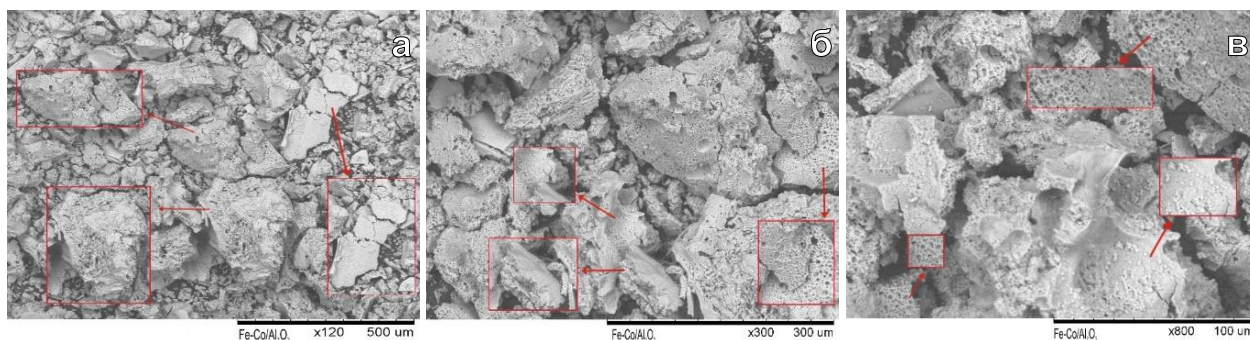
Зураг 1. CVD төхөөрөгийн бүдүүвч.

Электрон микроскопийн хэмжилт. ШУТИС-ийн Геологи, Уул уурхайн лабораторийн HITACHI TM-1000 загварын SEM-EDX багажаар гарган авсан катализаторын SEM зургийг авч, элементийн агуулгыг тодорхойлсон. Ингэхдээ рентген туяаны энергийн дисперсийн анализын тусламжтайгаар 0-14 КэВ энергийн мужид гэрлийн эрчмийг хэмжсэн.

Рентген дифрактометр. ШУА, Физик Технологийн Хүрээлэн, Багажит Аналитикийн Төвийн XRD-700 маркийн Cu K-α анодтай рентген туяаны дифрактометрийг ашиглан 40 кВ хүчдэл, 30 мА гүйдэлд рентген туяаг үүсгэж 10-80° өнцгийн мужид минутанд 2° өнцөг хурдтайгаар хэмжилтийг хийсэн.

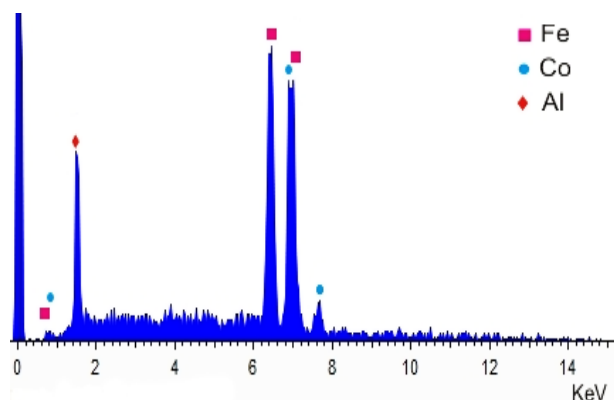
ҮР ДҮН БА ХЭЛЭЛЦҮҮЛЭГ

Катализаторын гадаргуугийн морфологи бүтэц ба элементийн агуулгыг тодорхойлохын тулд эхлээд SEM-EDX хэмжилтийг хийсэн. SEM зургаас гадаргуун бүтцийг ажиглахад сүвэрхэг бүтэц бүхий 10 мкм-ээс жижиг хэсгүүдээс тогтсон ерөнхий бүтэц ажиглагдаж байна (Зураг 2). Энэ нь дээжийг шатаах үед полимер матриц элементийг бүрдүүлэгч нүүрсустөрөгчит нэгдлүүд бүхий этилен гликол болон нимбэгийн хүчил задарч сүвэрхэг бүтэц бүхий хэсгүүдийг үүсгэсэн байх магадлалтай. Үүнээс гадна цул хавтгай хэсэг дээр өчүүхэн бага хэмжээтэй өөр хоорондоо зэрэгцэн байрласан, жижиг бөмбөлөг хэлбэртэй хэсгүүд байгаа нь ажиглагдаж байна. Энэ нь төмөр, кобальт болон хөнгөнцагаан зэрэг металлын мөхлөгүүд гэж таамаглаж байна.



Зураг 2. Fe-Co/Al₂O₃ биметалл катализаторын SEM зураг. Өсгөлтийн хэмжээ (а) 120 дахин, (б) 300 дахин, (в) 800 дахин.

Катализаторын элементийн агуулгыг EDX спектрометр ашиглан тодорхойлсон үр дүнг зураг 3 ба хүснэгт 1-д үзүүлээ. Хэмжилтийн үр дүнгээс харахад хөнгөн цагаан 7.5%, төмөр 41.7%, кобальт 50.7%-г эзэлж байна.

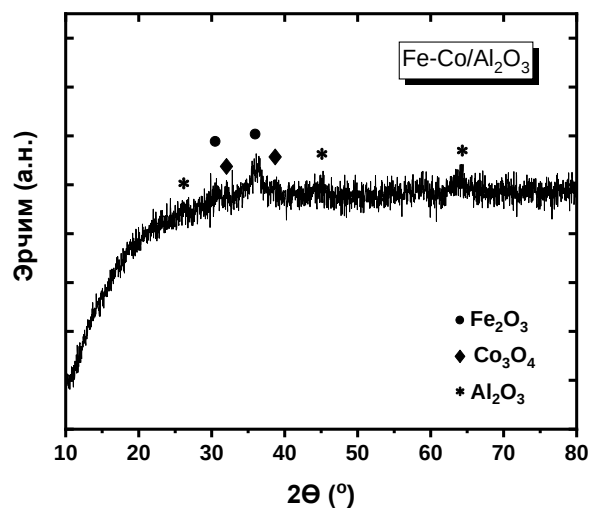


Зураг 3. Fe-Co/Al₂O₃ катализаторын EDX спектр.

Хүснэгт 1. Катализатор дахь элементийн агуулга.

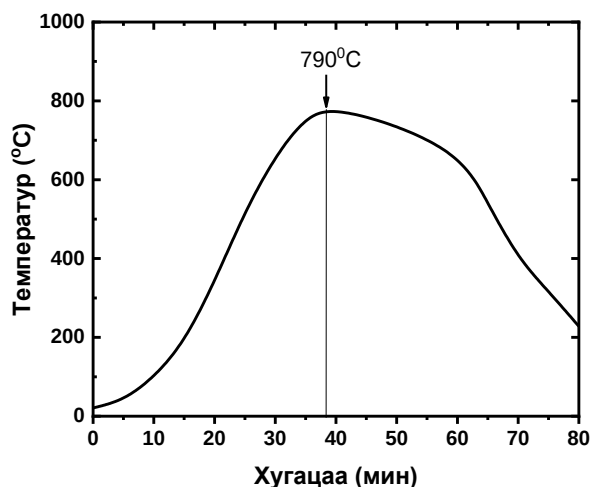
Элемент	Эзлэх хувь, (%)
Хөнгөнцагаан (Al)	7.5
Төмөр (Fe)	41.7
Кобальт (Co)	50.7

Катализаторын бүтцийг рентген дифрактометрээр шалгасан үр дүнг зураг 4-т үзүүлэв. Хэдийгээр пикүүд сул эрчимтэй бүртгэгдсэн боловч зарим характеристик пикүүдэд анализ хийх боломжтой байсан. 30.7°, 36.2° өнцгийн утгуудад харгалзах пикүүд нь γ-Fe₂O₃-н (220), (311) хавтгайнуудад харгалзана (JCPDS No. 00-39-1356). Мөн шпинель Co₃O₄-н (220), (311) сарнилын хавтгайн пикүүд 32.3°, 38.8° өнцгүүд дээр бүртгэгдсэн (JCPDS No. 00-42-1467). 26.1°, 44.6°, 64.1° өнцгүүд дээрх пикүүд Al₂O₃-н (012), (113), (214) хавтгайнуудад харгалзана (JCPDS No. 00-71-1123). Туршилтын үр дүн бусад судлаачдын ажил болон стандарт спектртэй бүрэн таарч байна [24-26].



Зураг 4. Fe-Co/Al₂O₃ катализаторын рентген дифрактограм.

Гарган авсан Fe-Co/Al₂O₃ катализаторын каталитик идэвхийг шалгахын тулд CVD аргаар НТНХ гарган авах туршилтанд ашигласан. Туршилтыг гүйцэтгэхдээ катализатораас 50 мг жинлэн авч шаазан тигельд хийн, CVD төхөөрөгийн 50 см урт кварцан хоолойн дунд хэсэгт байрлуулна.



Зураг 5. Хугацаа ба температурын хамаарал. Халаах дундаж хурд 19.75 °C/мин, хөрөх дундаж хурд 22.85 °C/мин. Температурыг 5 минутын алхамтайгаар хэмжэсэн.

Төхөөргийг аргон хийн орчинд 750°C хүртэл халаасаны дараа аргон болон бутаны хийн холимог (Ar:C₄H₁₀=2:1) урсгалыг 750-790°C температурт 5 минутын турш явуулна. CVD төхөөргийн ажиллах хугацаа ба температурын хамаарлыг зураг 5 дээр үзүүллээ.

Зураг 6 дээр шаазан тигель доторх катализатор ба түүн дээр явагдсан пиролиз урвалын үр дүнд үүссэн бүтээгдэхүүнийг харуулав. Зургаас харвал энэхүү бүтээгдэхүүн нь шаазан тигелийг бүрэн дүүргэсэн сэвсгэр хар нунтаг хэлбэртэй болно.

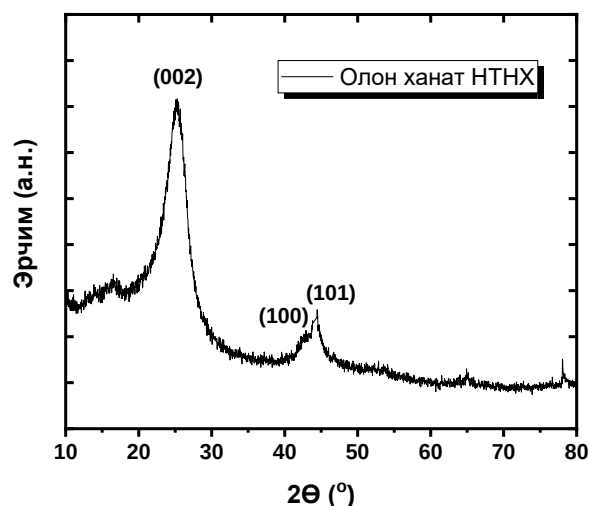


Зураг 6. (а) Шаазан тигельд Fe-Co/Al₂O₃ катализаторыг хийсэн байдал. (б) Урвалын бүтээгдэхүүн. Туршилтаар 0.5 г орчим НТНХ гарган авсан.

Бүтээгдэхүүний гарцын хэмжээг (1) томъёог ашиглан тооцсон. Бид туршилтанд 50 мг катализатор ашигласан ба эцсийн бүтээгдэхүүний хэмжээ ойролцоогоор 0,5 г байсан. (1) томъёогоор хийсэн тооцооллоор эцсийн бүтээгдэхүүний хэмжээ ашигласан катализаторын хэмжээнээс массын хувьд 9 дахин их байна.

$$\text{НТНХ}_{\text{гарц}} = \frac{m_{\text{гарган авсан НТНХ}} - m_{\text{катализатор}}}{m_{\text{катализатор}}} \quad (1)$$

Туршилтаар гарган авсан НТНХ-н рентген дифрактограмыг зураг 7 дээр үзүүллээ. Спектр дэх өнцгийн 25.3°, 42.9°, 44.3° утгууд дээрх пикүүд нь графитийн (002), (100), (101) сарнилын хавтгайд харгалзана (JCPDS No. 01-0646) [27]. Мөн (002) пикийн өндөр эрчим, шовх хэлбэр нь гарган авсан дээж олон ханат НТНХ болохыг илтгэж байна [28]. Эдгээр үр дүн Fe-Co/Al₂O₃ биметалл катализатор нь CVD аргаар олон ханат НТНХ-г гарган авахад тохиромжтой болохыг харуулж байна.



Зураг 7. Олон ханат НТНХ-н рентген дифрактограм.

Бид (002) пикийн өгөгдлөөр Шеррерийн тэгшитгэл (2)-ийг ашиглан НТНХ-н кристаллын хэмжээг тодорхойлсон.

$$D = \frac{k\lambda}{\beta \cos \theta} \quad (2)$$

Энд, β -пикийн хагас өндрийн өргөн, θ -дифракцын өнцөг, λ -рентген туяаны долгионы урт, k -Шеррерийн тогтмол бөгөөд НТНХ-н хувьд 0.91-тэй тэнцүү гэж авсан [29].

Хүснэгт 2. НТНХ-н кристаллын хэмжээг Шеррерийн тэгшитгэл ашиглан тооцсон үр дүн.

(hkl)	2 θ (°)	β (рад)	D, нм
(002)	25.2795	0.05624	2.8

Шеррерийн тэгшитгэлээр гарган авсан НТНХ-н кристаллын хэмжээ 2.8 нм гэж гарсан нь бусад судлаачдын үр дүнтэй эрэмбийн хувьд тохирч байна [30].

ДҮГНЭЛТ

Fe-Co/Al₂O₃ биметалл катализаторыг Печинигийн аргыг ашиглан гарган авав. SEM-EDX туршилтын үр дүнгээс харахад уг катализатор сүвэрхэг бүтэц бүхий гадаргуутай бөгөөд найрлагын хувьд хөнгөнцагаан 7.5%, төмөр 41.7%, кобальт 50.7% эзэлж байна. CVD аргаар гарган авсан бүтээгдэхүүний хэмжээ (0.5 г) ашигласан катализаторын хэмжээнээс (50 мг) массын хувьд 9 дахин их байгаа нь Fe-Co/Al₂O₃ биметалл катализатор НТНХ синтезлэхэд үр дүнтэй болох нь харагдаж байна. НТНХ-н рентген дифрактограм дахь (002) пикийн өндөр

эрчим, шовх хэлбэр бидний гарган авсан дээж олон ханат НТНХ болохыг илтгэж байна.

Цаашид катализаторын бүтэц, найрлага, мөн CVD реактор дахь урвалын температур, хийн холимгийн харьцаа, урсгалын хурд бүтээгдэхүүний чанар, гарц, морфологи бүтцэд хэрхэн нөлөөлж буйг судлах шаардлагатай.

ТАЛАРХАЛ

Тус судалгааны ажил нь Азийн Судалгааны Төвийн P2019-3719 дугаартай “Металл оксид болон металл карбид нанокатализатор ашиглан CVD аргаар нүүрстөрөгчит нанохоолой гарган авах судалгаа” сэдэвт төслөөр санхүүжигдсэн болно.

АШИГЛАСАН МАТЕРИАЛ

- [1] Milton W Cole, Vincent H Crespi, Mildred S Dresselhaus, Gene Dresselhaus, John E Fischer, Humberto R Gutierrez, K Kojima, Gerald D Mahan, Apparao M Rao, Jorge O Sofo, M Tachibana, K Wako and Qihua Xiong, Structural, electronic, optical and vibrational properties of nanoscale carbons and nanowires: a colloquial review, *J. Phys.: Condens. Matter*, 22 (2010) 334201.
- [2] Biyao Cheng, Shuming Yang, Yonas Tesfaye Woldu, Shareen Shafique and Fei Wang, A study on the mechanical properties of a carbon nanotube probe with a high aspect ratio, *Nanotechnology*, 31 (2020), 145707.
- [3] Gabriele Centi and Siglinda Perathoner, Carbon nanotubes for sustainable energy applications, *Chem. Sus. Chem.*, 4 (2011), 913-925.
- [4] Kyu-Tae Lee, Dong Hyuk Park, Hyoung Won Baac, and Seungyong Han, Graphene- and carbon-nanotube-based transparent electrodes for semitransparent solar cells, *Materials*, 11 (2018), 1503.
- [5] Astha Jain, Aida Homayoun, Christopher W. Bannister, Kyungsuk Yum, Single-walled carbon nanotubes as near-infrared optical biosensors for life sciences and biomedicine, *Biotech. J.*, 10 (2015), 447-459.
- [6] Awasthi Kalpana, Srivastava Anchal, Srivastava, O. N., Synthesis of Carbon Nanotubes, *J. Nanosci. Nanotech.*, 5 (2005), 1616-1636.
- [7] Mukul Kumar and Yoshinori Ando, Chemical Vapor Deposition of Carbon Nanotubes: A Review on Growth Mechanism and Mass Production, *J. Nanosci. Nanotech.*, 10 (2010), 3739–3758.
- [8] Yehia M. Manawi, Ihsanullah, Ayman Samara, Tareq Al-Ansari and Muataz A. Atieh, A Review of Carbon Nanomaterials' Synthesis via the Chemical Vapor Deposition (CVD) Method, *Materials*, 11 (2018), 822.
- [9] Yang Wang, Lu Qiu, Lili Zhang, Dai-Ming Tang, Ruixue Ma, Yongzhao Wang, Bingsen Zhang, Feng Ding, Chang Liu, and Hui-Ming Cheng, Precise Identification of the Active Phase of Cobalt Catalyst for Carbon Nanotube Growth by *In Situ* Transmission Electron Microscopy, *ACS Nano*, 14 (2020), 16823–16831.
- [10] Maoshuai He, Hua Jiang, Bilu Liu, Pavel V. Fedotov, Alexander I. Chernov, Elena D. Obraztsova, Filippo Cavalca, Jakob B. Wagner, Thomas W. Hansen, Ilya V. Anoshkin, Ekaterina A. Obraztsova, Alexey V. Belkin, Emma Sairanen, Albert G. Nasibulin, Juha Lehtonen & Esko I. Kauppinen, Chiral-Selective Growth of Single-Walled Carbon Nanotubes on Lattice-Mismatched Epitaxial Cobalt Nanoparticles, *Scientific Reports*, 3 (2013), 1460.
- [11] Stig Helveg, Carlos López-Cartes, Jens Sehested, Poul L. Hansen, Bjerne S. Clausen, Jens R. Rostrup-Nielsen, Frank Abild-Pedersen & Jens K. Nørskov, Atomic-scale imaging of carbon nanofibre growth, *Nature*, 427 (2004), 426-429.
- [12] Christoph T. Wirth, Bernhard C. Bayer, Andrew D. Gamalski, Santiago Esconjauregui, Robert S. Weatherup, Caterina Ducati, Carsten Baehtz, John Robertson and Stephan Hofmann, The Phase of Iron Catalyst Nanoparticles during Carbon Nanotube Growth, *Chem. Mater.*, 24 (2012), 4633–4640.
- [13] Stefano Mazzucco, Ying Wang, Mihaela Tanase, Matthieu Picher, Kai Li, Zhijian Wu, Stephan Irle, Renu Sharma, Direct evidence of active and inactive phases of Fe catalyst nanoparticles for carbon nanotube formation, *J. Catal.*, 319 (2014), 54-60.

- [14] Mariya A. Kazakova, Validimir L. Kuznetsov, Sofia N. Bokova-Sirosh, Dmitry V. Krasnikov, Georgy V. Colubstov, Anatoliy, I. Romanenko, Igor P. Prosvirin, Arcadiy V. Ishchenko, Andrey S. Orekhov, Andrey L. Chuvilin, and Elena D. Obraztsova, Fe-Mo and Co-Mo Catalysts with Varying Composition for Multi-Walled Carbon Nanotube Growth, *Phys. Status Solidi B*, 255 (2017), 1700260.
- [15] Daisuke Takagi, Yoshikazu Homma, Hiroki Hibino, Satoru Suzuki, and Yoshihiro Kobayashi, Single-Walled Carbon Nanotube Growth from Highly Activated Metal Nanoparticles, *Nano Lett.*, 6 (2006), 2642-2645.
- [16] Mark H. Rümmeli, Ewa Borowiak-Palen, Thomas Gemming, Thomas Pichler, Martin Knupfer, Martin Kalbác, Lothar Dunsch, Oliver Jost, S. Ravi P. Silva, Wolfgang Pompe, and Bernd Büchner, Novel Catalysts, Room Temperature, and the Importance of Oxygen for the Synthesis of Single-Walled Carbon Nanotubes, *Nano Lett.*, 5 (2005), 1209-1215.
- [17] Daisuke Takagi, Hiroki Hibino, Satoru Suzuki, Yoshihiro Kobayashi, and Yoshikazu Homma, Carbon Nanotube Growth from Semiconductor Nanoparticles, *Nano Lett.*, 7 (2007), 2272-2275.
- [18] I. Willems, Z. Kónya, A. Fonseca, J. B. Nagy, Heterogeneous catalytic production and mechanical resistance of nanotubes prepared on magnesium oxide supported Co-based catalysts, *Appl. Catal. A: General*, 229 (2002), 229-233.
- [19] M. Endo, H. Muramatsu, T. Hayashi, Y. A. Kim, M. Terrones and M. S. Dresselhaus, 'Buckypaper' from coaxial nanotubes, *Nature*, 433 (2005), 476.
- [20] Mark H. Rümmeli, Franziska Schaffel, Alicja Bachmatiuk, David Adebimpe, Geoff Trotter, Felix Bornert, Andrew Scott, Emica Coric, Maria Sparing, Bernd Rellinghaus, Paul G. McCormick, Gianaurelio Cuniberti, Martin Knupfer, Ludwig Schultz, and Bernd Büchner, Investigating the Outskirts of Fe and Co Catalyst Particles in Alumina-Supported Catalytic CVD Carbon Nanotube Growth, *ACS Nano*, 4 (2010), 1146-1152.
- [21] Anna Jedrzejewska, Alicja Bachmatiuk, Imad Ibrahim, Hana Šreková, Collins Nganou, Frank Schüchner, Ewa Borowiak-Palen, Thomas Gemming, Gianaurelio Cuniberti, Bernd Büchner, Mark H. Rümmeli. A Systematic and Comparative Study of Binary Metal Catalysts for Carbon Nanotube Fabrication Using CVD and Laser Evaporation. *Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures*, 21 (2013), 273-285.
- [22] Venkata D. B. C. Dasireddy, Blaž Likozar, Activation and Decomposition of Methane over Cobalt-, Copper-, and Iron-Based Heterogeneous Catalysts for CO_x-Free Hydrogen and Multiwalled Carbon Nanotube Production, *Ener. Tech.*, 5 (2017), 1344-1355.
- [23] Pechini M. P. US Patent 3,3306,97. 1967.
- [24] Xin Zhang, Yongnan Niu, Xiangdong Meng, Yao Li and Jiupeng Zhao, Structural evolution and characteristics of the phase transformations between α -Fe₂O₃, Fe₃O₄ and γ -Fe₂O₃ nanoparticles under reducing and oxidizing atmospheres, *CrystEngComm.*, 15 (2013), 8166-8172.
- [25] Kwan Su Kim and Yong Joon Park, Catalytic properties of Co₃O₄ nanoparticles for rechargeable Li/air batteries, *Nanoscal. Res. Lett.*, 7 (2012), 47.
- [26] Sandeep Kumar, Ram Prakash and Vinay Kumar, A novel yellowish white Dy³⁺ activated α -Al₂O₃ phosphor: Photoluminescence and optical studies, *Func. Mater. Lett.*, 8 (2015), 1550061.
- [27] Nour T. Abdel-Ghani, Ghadir A. El-Chaghaby, Farag S. Helal, Individual and competitive adsorption of phenol and nickel onto multiwalled carbon nanotubes, *J. Advan. Res.*, 6 (2015), 405-415.
- [28] Sethupathi Velmurugan, Selvakumar Palanisamy, Thomas C-K Yang, Munkhjargal Gochoo, Shih-Wen Chen, Ultrasonic assisted functionalization of MWCNT and synergistic electrocatalytic effect of nano-hydroxyapatite incorporated MWCNT chitosan scaffolds for sensing of nitrofurantoin, *Ultrason. Sonochem.*, 62 (2020), 104863.
- [29] Hassan Soleimani, Mirza Khurram Baig, Noorhana Yahya, Leila Khodapanah, Maziyar Sabet, Birol M.R. Demiral, Marek Burda,

Impact of carbon nanotubes based nanofluid on oil recovery efficiency using core flooding, *Res. Phys.*, 9 (2018), 39-48.

- [30] Mattias Flygare, Krister Svensson, Quantifying crystallinity in carbon nanotubes and its influence on mechanical behaviour, *Mater. Tod. Commun.*, 18 (2019), 39-45.

Гелийн атомын фотоэлектроны голограф

Ч.Алдармаа*, Г.Зоригт, Л.Хэнмэдэх

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

Гелийн атомыг лазерын богино хүчтэй пульсээр иончлох процессыг Кулоны долгион функций дискрет хувьсагчийн арга (CWDVR) ашиглан хувьсах эффектив цэнэгтэйгээр хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлийг тоон аргаар бодлоо. Шугаман туйлшралтай лазерын богино хүчтэй пульсээр гелийн атомыг үйлчлэхэд сугаран гарч буй фотоэлектроны импульсын түгэлт буюу голографын дүрслэлийг гарган авсан.

PACS numbers: 42.55-f, 32.80.-t, 31.15E-,

ОРШИЛ

Атом молекулын олон фотоны болон өндөр эрэмбийн шугаман бус оптик процессын судалгаа нь шинжлэх ухаан, технологийн өнөөгийн сонирхолтой сэдвүүдийн нэг юм. Атом молекулд явагдах процесс нь фемтосекундээс аттосекундын хугацаанд үргэлжилдэг. Иймд атомыг лазерын богино хүчтэй пульсээр үйлчилж фотоэлектрон нь ямар чиглэлд, ямар магадлалтай гарч буйг тодорхойлох нь энэ төрлийн судалгаанд чухал ач хобогдолтой юм. Орчин үед атом молекулд лазерын богино хүчтэй пульсээр үйлчлэх процессыг хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлийг тоон аргаар тооцоолох ажил олон хийгдэж байна. Устөрөгчийн атомын фотоэлектроны импульсын түгэлтийг (PMD) тооцоолох онолын олон аргууд байдагаас хөндөх онолоор [1], хүчтэй орны ойролцооллоор [2,3], хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэл [4,5] гэх мэт тодорхой дөхөлтийн хүрээнд тооцоолсон бол олон электронтой атомын хувьд нэг идэвхитэй электроны ойролцооллоор (SAE)[6-8], нягтын функционалын онолоор [9]-д тус тус тооцоолсон байна. Эдгээрээс гелийн атомыг шугаман туйлширсан лазерын пульсээр иончлох процессыг хугацаанаас хамаарсан нягтын функционалын онолоор [10], Хе атомыг лазерын богино пульсын фотоэлектроны импульсын түгэлт буюу голографыг туршилгаар хэмжиж онолын тооцоололтой харьцуулжээ [11]. Бид өмнө нь гелийн атомын хоёр электроныг хоёулаа $1s$ төлөвт байна гэж үзээд Кон-Шамын тэгшитгэлийг хугацаанаас хамаарсан нягтын

функционалын аргаар бодсон [12]. Энэхүү ажилдаа гелийн атомыг шугаман туйлширсан лазерын пульсээр үйлчилж нэг идэвхитэй электронтой нөгөө электрон нь хувьсах эффектив цэнэгийн орон үүсгэнэ гэж үзээд хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлийг Кулоны долгион функций дискрет хувьсагчийн аргыг ашиглан тоон аргаар тооцоолсон үр дүнг танилцуулж байна. Энэ ажилд атом нэгжийн системийг ашигласан болно.

ОНОЛ

Хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлээр гелийн атомыг лазерын богино хүчтэй пульсээр үйлчлэх үед нэг идэвхитэй электрон нь хувьсах эффектив цэнэгтэй цөмийн оронд байна гээд Гамильтанионыг бичвэл [13]:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2} + V_{\text{эфф}}(r) + \vec{r} \cdot \vec{E}(t) \quad (1)$$

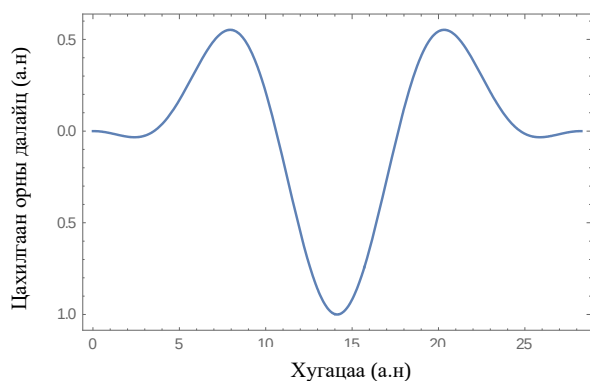
Энд: $\frac{\hat{p}^2}{2}$ –кинетик энергийн оператор, $V_{\text{эфф}}$ – электрон ба үлдэгдэл ионы хоорондох харилцан үйлчлэл, $\vec{r} \cdot \vec{E}(t)$ – уртын тохируулгатай диполын ойролцоолол дахь гадны орны харилцан үйлчлэлийн потенциал.

Лазерын цахилгаан орон:

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

E_0 –лазерын цахилгаан орны далайц, z -ийн дагуу шугаман туйлширсан, τ –пульсын урт, ω – давтамж, $\phi_0 = -\frac{\omega\tau}{2} - \frac{\pi}{2}$.

* Electronic address: aldaraa2004@yahoo.com



Зураг 1. Лазерын цахилгаан орны хугацааны хамаарал ($I = 3.51 \cdot 10^{16} \text{ Вт/см}^2$, $N = 2$ циклтэй, $\omega = 0.4445 \text{ а.н}$).

Эффектив потенциал:

$$V_{\text{эфф}}(r) = -\frac{Z_c + a_1 e^{a_2 r} + a_3 r e^{a_4 r} + a_5 e^{a_6 r}}{r} \quad (3)$$

гелийн атомын хувьд параметруудийг $Z_c = 1$, $a_1 = 1.231$, $a_2 = 0.662$, $a_3 = -1.325$, $a_4 = 1.236$, $a_5 = -0.231$, $a_6 = 0.480$ байхаар сонгож авлаа [14]. Шредингерийн тэгшитгэлээс хугацааны t эгшинээ $t + \Delta t$ эгшин дэх долгион функцыг олбол [15]:

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

Энэхүү итерацийн алхмуудаар долгион функцын хугацааны хамаарал тодорхойлогдоно. Электроны долгион функцыг бөмбөлөг координатын системд бөмбөлөг гармоник функцээр задлан радиал функцийг хугацаанаас хамааруулан тооцоолов. Радиал координатыг Кулоны долгион функцын язгууруудаар радиал координатыг дискретчилэн устөрөгчийн атомын псевдо спектрал баазуудыг байгуулсан [16]. Фотоэлектроны импульсын түгэлтийг тодорхойлохын тулд хугацаанаас хамаарсан долгион функцыг эффектив цэнэгтэй Кулоны континуумын долгион функц дээр проекцлолоо. Үүнд

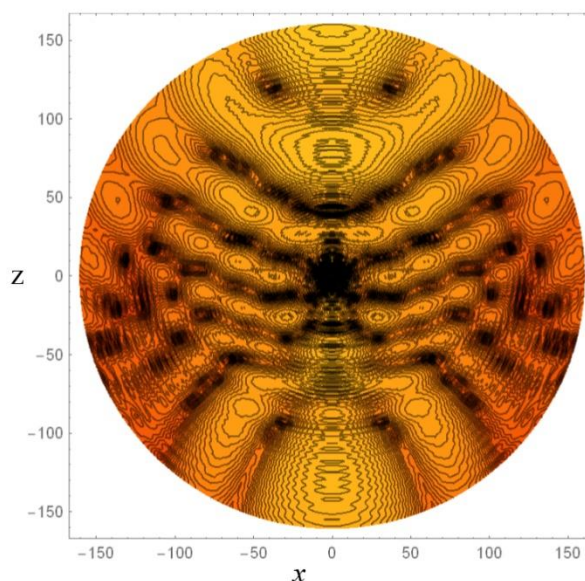
$$\frac{dP}{d\epsilon d\Omega_k} = \lim_{t \rightarrow \infty} |\langle \Phi_k^-(\mathbf{r}) | \Psi(\mathbf{r}, t) \rangle|^2 \quad (5)$$

Устөрөгчийн атомын континуумын долгион функц $\Phi_k^-(\mathbf{r})$ -ийн аналитик илэрхийлэлийг ашиглав.

ҮР ДҮН

Гелийн атомыг шугаман туйлширсан $3.51 \cdot 10^{16} \text{ Вт/см}^2$ эрчимтэй 2 циклтэй, $\omega = 0.4445$ давтамжтай лазерын пульсээр үйлчилж

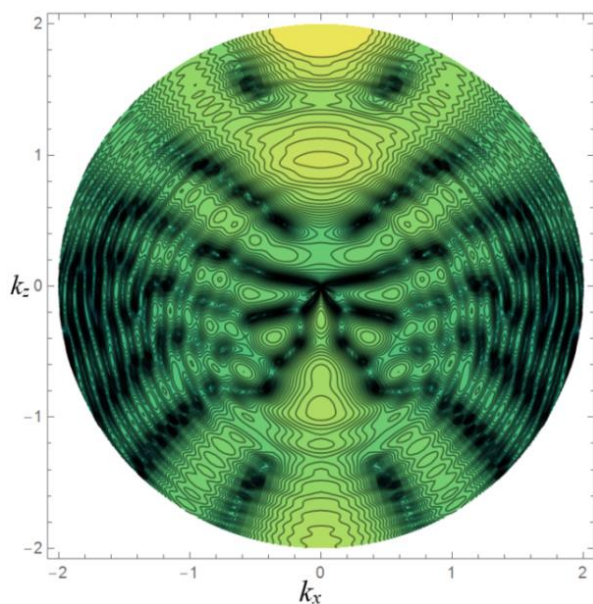
хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлийг Кулоны долгион функцын дискрет хувьсагчийн аргыг ашиглан долгион функцыг тоон аргаар тооцоолж гаргав. Лазерын пульсын урт 28.27, хугацааны итерацыг $\Delta t = 0.1$ алхамтайгаар шилжүүлэн орбитын квант тооны хамгийн их утгыг 40-өөр авч тооцооллыг хийв. z тэнхлэгийн дагуу лазерийн цахилгаан орон хэлбэлзэх үед долгион функцын модулын квадратын логарифм утгыг (z , x) хавтгай дээр зураг 2-д дүрслэн харууллаа.



Зураг 2. Электроны магадлалын нягтын түгэлт.

Зураг 2-д үзүүлсэн электроны магадлалын нягтын түгэлт нь гелийн атомын идэвхитэй электрон лазерын цахилгаан орны үйлчлэлээр шууд иончлогдох пульс, буцаж цөмтэйгээ харилцан үйлчилж гарах пульсүүдийн интерференцийн зураглал буюу голограф юм. Энэ нь лазерын пульс атомтай харилцан үйлчилж дуусах эгшинд харгалзах электрон үүлний голограф болно. Голограф нь шууд туршлагаар ажиглагдахгүй боловч импульсын түгэлтийг туршилгаар хэмжих боломжтой. Импульсын түгэлтийг долгион функцыг континуумын долгион функцэд проекцлох замаар тодорхойлсныг Зураг 3-т үзүүлэв. Фотоэлектроны импульсын түгэлт (Зураг 3) нь электроны магадлалын нягтын түгэлт (Зураг 2) -той хэлбэрийн хувьд төсөөтэй болох нь харагдаж байна. Бидний гарган авсан фотоэлектроны импульсын түгэлт нь бусад онолын судалгааны [13,17] ажлуудын үр дүнтэй тохирч байна. Цаашид энэ аргаар инертийн хийн

атомуудын хувьд фотоэлектроны импульсын түгэлтийг тооцоолох боломж бүрдэж байна.



Зураг 3. Фотоэлектроны импульсын түгэлт.

ДҮГНЭЛТ

Шугаман туйлширсан лазерын пульс нь электрон үүлийг z тэнхлэгийн дагуу хүчтэй савлуулсны үр дүнд шууд иончлогдох электроны пульс болон буцаж цөмтэй харилцан үйлчилсний дүнд иончлогдох пульсүүд фазын хувьд зөрснөөр интерференц үүсгэж байна. Туршлагаар импульсын түгэлтийг тодорхойлсноор электроны магадлалын нягтын түгэлтийг гарган авах боломжтой буюу голографын зураг авсантай адилхан үр дүнд хүрч байна.

АШИГЛАСАН МАТЕРИАЛ

- [1] Alexei N.Grüm- Grzhimailo, and E.V. Gryzlova, Phys.Rev. A 89, 043424 (2014)
- [2] A. K. Kazansky, I. P. Sazhina, and N.M. Kabachnik, Phys. Rev.A82, 033420 (2010).
- [3] M. Klaiber, K. Z. Hatsagortsyan, and C. H. Keitel, Phys. Rev.Lett. 114, 083001 (2015).
- [4] K. J. Schafer, B.Yang, L. F. DiMauro, and K. C.Kulander, Phys.Rev. Lett. 70, 1599 (1993).
- [5] X.M.Tong, K.Hino, and N.Toshima, Phys. Rev. A 74,031405(R) (2006).
- [6] Y.Huismans, A.Rouzee, A.Gijsberten, P.S. W.M. Logman, F. Lepine, C.Cauchy et al., Phys.Rev. A87, 033413 (2013)

- [7] M.Schuricke, G.Zhu, J.Steinmann, K. Simeonidis A.N. Grüm-Grzhimailo Phys.Rev A83, 023413 (2011)
- [8] Z.Chen, T.Morishita, A.T. Le, M.Wickenhauser, X.M.Tong and C.D. Lin Phys. Rev A74, 053405 (2006)
- [9] U.De Giovannini, D.Varsano, M.A.L, Marques, H.Appel, E.K. Gross and Rubio, Phys.Rev. A85, 062515 (2012)
- [10] Mitsuko Murakami, Shih I Chu Phys.Rev A95, 053419 (2017)
- [11] Y. Huismans et al. Science 331, 61 (2011)
- [12] Ч.Алдармаа, Г.Зоригт, Л.Хэнмэдэх, ШУТИС-ийн эрдэм шинжилгээний бичиг №(XX/XXX) 2021 хэвлэлтэнд.
- [13] S.Borbely, A.Toth, D.G. Arbo, k.Tokesi and L.Nagy, Phys.Rev A99, 013416 (2019)
- [14] X. M. Tong and C. D. Lin, J. Phys. B 38, 2593 (2005).
- [15] Xiao-Min Tong, Shih I Chu, The journal of chemical physics 217 (1997) 119-130
- [16] Peng, Liang-You and Starace, Anthony F., The journal of chemical physics 125,154311. 2006.
- [17] Mitsuko Murakami, Oleg Korobkin and Guo-Ping Zhang Phys. Rev. A 101, 063413 (2020).

Даралтын нөлөөнд чулуулаг дээжний кристалл бүтцэд үүсэх үлдэгдэл хэв гажилт болон текстур бүтцийг нисэлтийн хугацааны нейтрон дифракцын аргаар судалсан үр дүн

А.Бадмаараг^{a,b,*}, К.Шеффцюк^{b,c}, Д.Сангаа^a, Б.Мюллер^c, Ф.Шиллинг^c, Л.Энхтөр^d

^a ШУА, Физик технологийн хүрээлэн, Улаанбаатар хот, Монгол Улс,

^b ЦШНИ, Нейтроны физикийн лаборатори, Дубна хот, ОХУ,

^c Карлсруэ-гийн технологийн хүрээлэн, Карлсруэ хот, ХБНГУ,

^d МУИС-ийн ШУС-ийн Физикийн тэнхим, Улаанбаатар хот, Монгол Улс

Газрын гүний байгууламжийн эргэн тойронд үүсч буй механик хүч, температур зэрэг байгалын хүчин зүйлсийн нөлөөнд орж, кристалл бүтцийн эгэл тордоо эвдрэл, хэв гажилт үүссэн поликристалл метаморф хувьрал бүхий чулуулаг дээжний бүтцийн текстур шинж чанар болон хэв гажилтын судалгааг нисэлтийн хугацааны (TOF) нейтрон дифракцын аргаар судалсан болно. Туршилтыг ОХУ-ын Дубна хот дахь ЦШНИ-ийн ИБР-2М импульст нейтроны үүсгүүрийн 7-р сувагт байрлах SKAT-EPSILON нейтрон дифрактометрүүд болон тэдгээрийн дагалдах нэмэлт төхөөрөмжүүдийг ашиглан гүйцэтгэв.

Эгэл торын хэв гажилтыг тодорхойлохын тулд нэг тэнхлэгийн дагуу 53 МПа хүртэл даралтын нөлөөлөл үүсгэн тухайн даралтын чиглэлийн дагуу 10 мм-ийн алхамтайгаар шилжүүлэн хэмжсэн хэмжилтийн үр дүнд поликристалл дээжний хамгийн өндөр хэв гажилтанд орж буй кварц фазын үлдэгдэл хэв гажилт нь суналтын мужид хамгийн багадаа $-1.6 \cdot 10^{-3}$ ба түүнд перпендикуляр чиглэл дэх шахалтын мужид хамгийн ихдээ $1.2 \cdot 10^{-3}$ байгааг тодорхойлов.

Түлхүүр үгс: метаторфик, нисэлтийн хугацааны нейтрон, дифракц, текстур анализ, хэв гажилт, Ритвелд анализ

I. Оршил

Судалгааны метаморф чулуулаг (физик болон механик шинж чанар нь хувьсан өөрчлөгдсөн чулуулаг) нь метаморфизмын үр дүнд, ө.х. дэлхийн царцдасын гүнд өндөр температур, өндөр даралтын нөлөөгөөр анхны хэлбэр, шинж чанар нь өөрчлөгдсөн чулуулаг юм. Метаморф чулуулгийн найрлага нь олон янз байдаг бөгөөд эдгээр нь кварц (кварцит) эсвэл кальцит (гантг) гэх мэт ганц эрдсээс болон бусад олон найрлагат силикатуудаас бүрддэг ба метаморф чулуулгийн үүсэх механизмыг уг эрдсийн кристалл бүтцийн болон текстур судалгаанд үндэслэн тогтоодог [1, 2].

Метаморф чулуулаг дээжин дэх хэв гажилтын төлөв байдлын талаархи ойлголт нь геодинамикийн процессыг тайлбарлах, уулуурхай, газрын гүний үйл ажиллагаа явуулах зэрэг геотехникийн хэрэглээнд чухал ач холбогдолтой юм. Сүүлийн үед газрын гүний ус болон дулаан ашиглах, гүний уурхай, станцуудын үйл ажиллагаа нь газрын гүнд явагдаж буй процессуудтай (газар хөдлөл буюу механик хүч, температур г. м.) шууд

хамааралтай байна. Ердийн судалгааны лабораторид см-ээс м хүртэлх мужид макрокристалл бүтцийн хэв гажилтыг тодорхойлох боломжийг олгож байна. Иймээс судалгааны рентген болон нейтрон дифракцын аргыг ашиглан кристалл бүтцийн эгэл торын хэв гажилтыг микро хэмжээсээс нано хэмжээс хүртэл тодорхойлж болдог. Учир нь материал дахь металл болон эрдсүүд нь нейтроны шингээлт харьцангуй бага байдгаас олон фаз бүхий дээжнүүдийн эгэл тор дахь хэв гажилтыг тодорхойлоход үр дүнтэй байдаг [3, 4].

Олон фаз бүхий нарийн бүтэцтэй геологийн дээжийг судлахад нэвтрэх чадвар болон нарийвчлал өндөртэй ($\Delta d/d$) учир геологийн материалын кристалл бүтцийн хэв гажилт болон кристаллографийн давамгайлсан чиглэлийг Ритвелд текстур анализын аргыг хэрэглэн судлахад бөөмлөг болон долгиолог хосолсон шинж чанар бүхий нейтрон дифракц нь өндөр үр дүнтэйн дээр нарийвчлал өндөртэй байдаг [5, 6].

Судалгааны ажлын гол зорилго нь деформацид орсон чулуулаг материалын хэв гажилтын процессийг ойлгох, ялангуяа дэлхийн

* Electronic address: badmaarag@jinr.ru

гүний царцдасын нөлөөний дараагаар үүссэн уян харимхай шинж чанарыг судлах явдал юм.

II. Арга зүй ба судалгааны дээж

Рентген, нейтрон гэх мэт дифракцын аргыг хэрэглэх нь кристаллографын хавтгай хоорондын зайнаас хамааруулан кристаллын эгэл торын хэв гажилтыг тодорхойлох боломжийг олгодог. Цаашилбал, эдгээр аргууд нь дээжинд агуулагдаж буй эрдэс минералуудын фаз тус бүрийн эгэл торын хэв гажилтыг тодорхойлох боломжтой. Дифракцын арга зүй нь Брэггийн хуулинд захирагддаг.

$$2d_{hkl}\sin\theta = n\lambda \quad (1)$$

Энд: d_{hkl} - эгэл торын хавтгай хоорондын зай (м), θ – Брэггийн өнцөг ($^{\circ}$), λ – долгионы урт (м) ба $n \in N\{0\}$.

Импульст нейтроны үүсгүүрийн нисэлтийн хугацааны нейтрон дифракцын арга нь эгэл торын хавтгай хоорондын зайг судлах боломжийг олгодог

$$d_{hkl} = \frac{h}{2m_n L \sin\theta} \cdot t \quad (2)$$

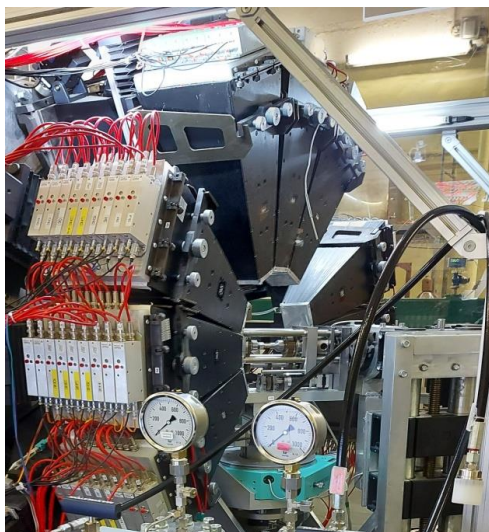
Энд: h – Планкын тогтмол, m_n – нейтроны масс (кг), L – нейтроны нисэлтийн нийт зай (м), t – нисэлтийн хугацаа (сек).

Эгэл торын хэв гажилтыг дараах томъёоны тусламжтайгаар тооцоолдог:

$$\langle \varepsilon_{hkl} \rangle = \frac{\langle d_{hkl} \rangle - d_{hkl}^0}{d_{hkl}^0} \quad (3)$$

Энд: ε_{hkl} – дээжний $[hkl]$ чиглэл дэх хэв гажилт, d_{hkl} - хэв гажилтанд орсон эгэл торын хавтгай хоорондын зай (м), d_{hkl}^0 – хэв гажилтанд ороогүй эгэл торын хавтгай хоорондын зай (м).

Нисэлтийн хугацааны ЭПСИЛОН/СКАТ нейтрон дифрактометрүүд нь нэг тэнхлэгийн дагуу 100 кН хүртэл хүчээр даралтын нөлөөнд оруулах чадамж бүхий даралтын төхөөрөмж, $0,01^{\circ}$ - ийн өнцөг алхамтайгаар эргүүлэх гониометрээр тоноглогдсон бөгөөд нунтаг болон янз бүрийн хэмжээтэй шинэ материал, геологийн дээжний фаз тус бүрийн хувьд кристалл бүтцийн макро болон микро хэв гажилт, текстур бүтцийн судалгаанд зориулан загварчилсан. Уг дифрактометрүүд нь 103 – аас 107 метр орчим урт нейтроны нисэлтийн зайтай тул энэ нь өндөр нарийвчлалтай хэмжилтийн үр дүн, олон фаз бүхий материалыг судлах, бага тэгш хэмтэй фазуудыг судлах боломжийг олгодог. Учир нь өргөн долгионы уртын муж нь ($\lambda = 7.8 \text{ \AA}$) эгэл торын хавтгай хоорондын зай $d = 5.3 \text{ \AA}$ хүртэлх хэмжээтэйг судлах боломжийг өгдөг байна. ЭПСИЛОН ба СКАТ дифрактометрүүдийг зураг 1 – т үзүүлэв[7, 8].



а)



б)

Зураг 1. Нисэлтийн хугацааны нейтрон дифрактометрүүд. а) Кристалл бүтэц бүхий дээжний эгэл торын хэв гажилтын судалгааны ЭПСИЛОН дифрактометр нь 9 багц детектортой бөгөөд сарнилын өнцөг нь $2\theta = 90^{\circ}$, б) Материалын текстур бүтцийн судалгааны СКАТ дифрактометр нь 19 детектортой бөгөөд тэдгээр нь тодорхой координатын дагуу байрласан байдаг.

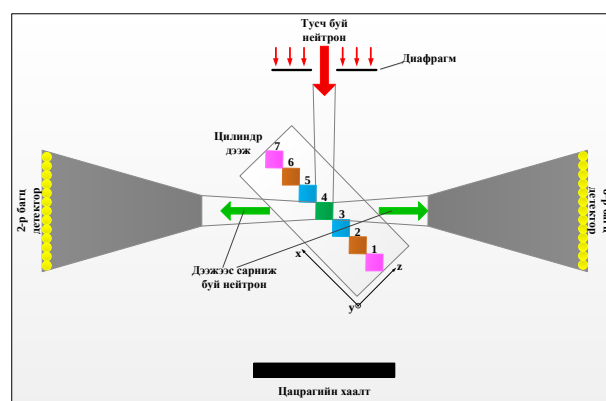
III. Хэмжилтийн үйл явц ба үр дүн

3.1. Кристалл бүтцийн судалгаа

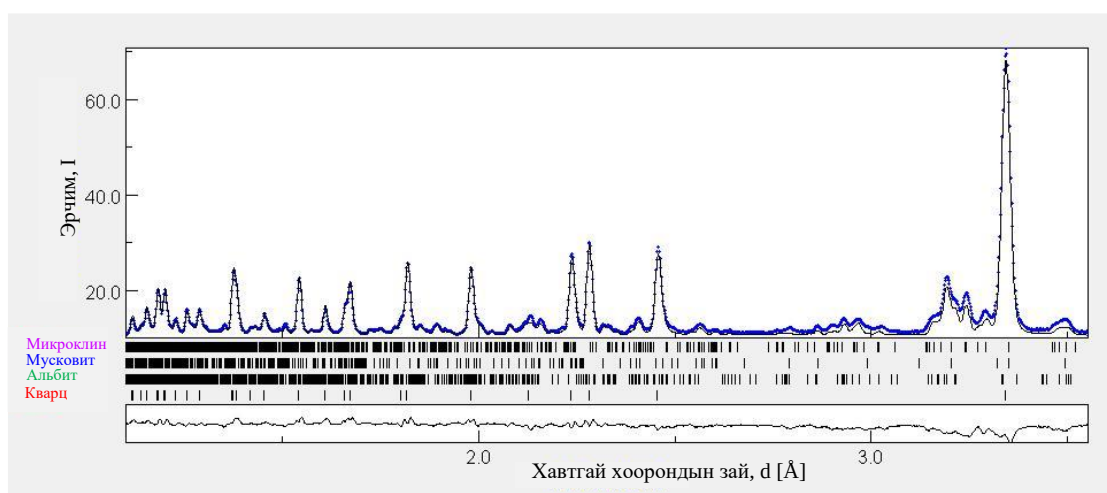
Кристалл бүтцийн эгэл торын хэв гажилтын хэмжилтийг ЭПСИЛОН дифрактометрийн гониометрийн [z] тэнхлэг, тусч буй цацрагийн хоорондох өнцөг 45° байхаар сонгов. Тиймээс дифрактометрийн [z] – тэнхлэг нь 8-р багц детекторуудтай параллель, 2-р багц детекторуудтай перпендикуляр байрлалд дээжний хэв гажилтанд орсон эгэл тороос сарниж буй нейтронуудыг бүртгэдэг (Зураг 2).

Текстур анализын хэмжилтийг 5° - ын өнцөг алхамтайгаар өндөр нарийвчлал бүхий SKAT нейтрон дифрактометрийн тусламжтайгаар гүйцэтгэж (Зураг 3) [9], хэмжилтийн үр дүнг

MAUD программын тусламжтайгаар тооцоолон гаргасан.



Зураг 2. Энд дээжний хэв гажилтыг сканердан хэмжсэн хэмжилтийн 10мм алхамтай, 2см^2 эзэлхүүн бүхий схем.



Зураг 3. G01, G02 дээжнүүдийн нормчилсон нейтрон дифракцын зураг. Энд Ритвельдийн анализийн үр дүн ($R=5.02$, $\chi=1.82$) болон фазуудыг харуулав. Ритвельд текстур анализыг d – зайн 1.1 – ээс 3.55 Å хүртэлх зайд гүйцэтгэв.

Ритвельдийн анализын үр дүнгээс үзэхэд 1-р дээжид кварц – 56%, альбит – 20%, микроклин – 13%, мусковит – 10% ба бусад нь 1% агуулагдаж байна.

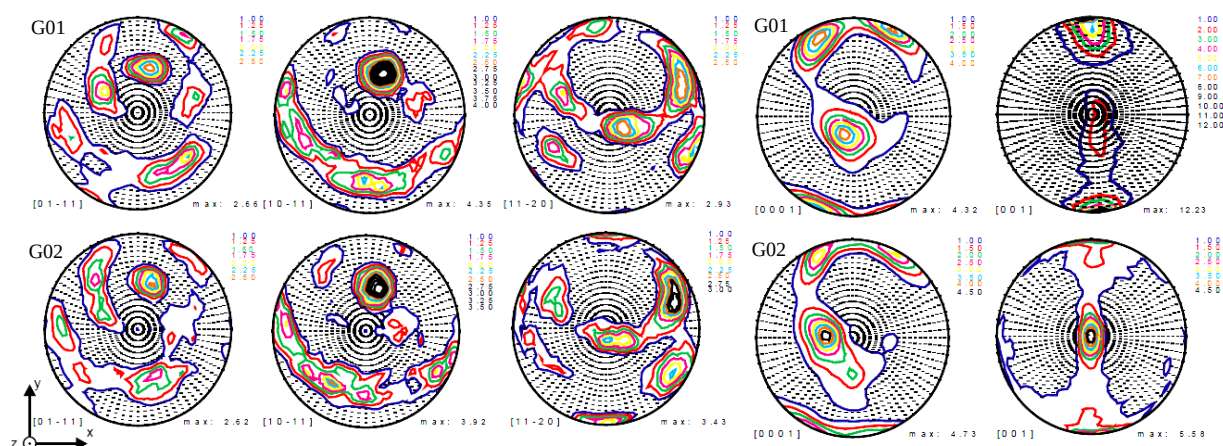
Хүснэгт 1. Чулуулаг дээжний фаз тус бүрийн эзлэх хувийг [%] Ритвельд текстур анализ болон нисэлтийн хугацааны нейтрон дифракцын хэмжилтээс тодорхойлсон. F2 нь текстур шинж чанар буюу фазын түгэлтийг илэрхийлсэн индекс юм.

	Кварц	Альбит	Мусковит	Микроклин
Go1: фазуудын эзлэх хувь	65,4	18,9	5,8	9,9
Go2: фазуудын эзлэх хувь	42,4	15,1	8,0	34,5
G1:F2(текстур параметр)	2,87	1,06	2,23	1,20
G2:F2(текстур параметр)	2,70	1,04	1,35	1,32

3.2. Текстур анализ

Кварц фаз нь SKAT дифрактометрийн 90° - ын өнцгийн байрлалд нэг цагирагийн координатад орших олон детектор системийн тусламжтайгаар [10] хэмжхэд хоёр дээжинд хамгийн ихээр агуулагдах бөгөөд тодорхой давамгайлсан чиглэлийг харуулж байгаа ба энэ нь 2.87 (G01) ба 2.70 (G02) – ийн F2 индексийг илтгэж байна. Кинематик ач холбогдол бүхий (0001) түгэлт нь G01 ба G02 дээжинд эрчмийн түгэлтийн хувьд гурвалсан хамгийн их түгэлтийг харуулж байна.

Мусковитийн (001) хавтгай нь тодорхой давамгайлсан чиглэлийг (G01: F2 = 2.23, G02: F2 = 1.35) харуулж байгаа боловч эрчмийн түгэлтийн хувьд ялгаатай байна (Зураг 4).



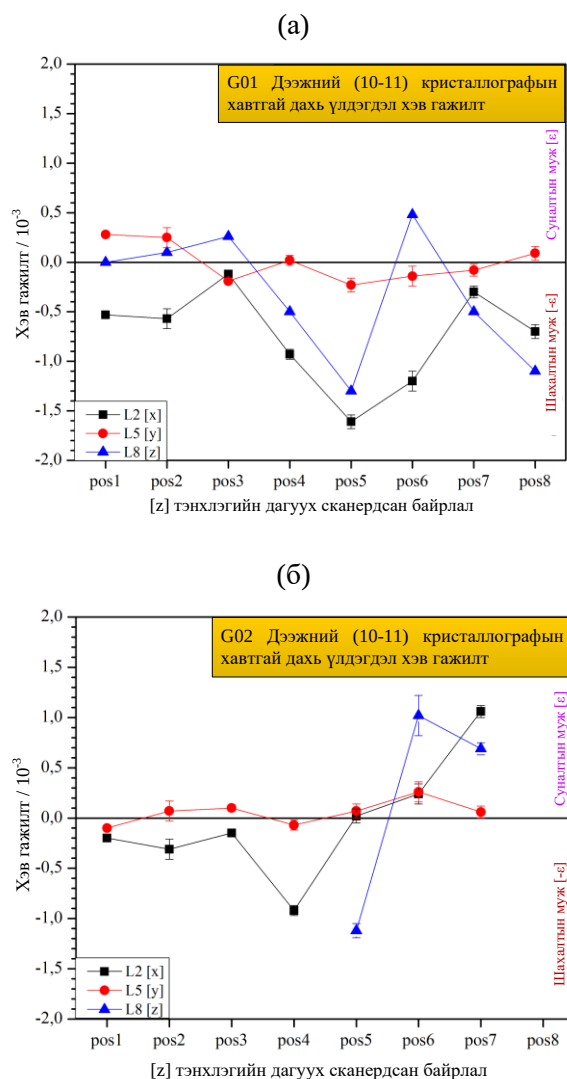
Зураг 4. G01, G02 дээжнүүдийн туйлын дүрсүүдийг кварц (01 $\bar{1}1$), (10 $\bar{1}1$), (11 $\bar{2}0$) болон мусковить (001) кристаллографын тэнцүү талбай бүхий хавтгайнуудын хувьд тооцоолов. Хамгийн өндөр эрчим бүхий хавтгайг баруун доод талд харуулав.

G01 дээжний хувьд хамгийн их түгэлт нь [y] тэнхлэгтэй параллель, хамгийн сул түгэлт нь [z] тэнхлэгтэй параллель байгаа бол G02 дээжний хувьд [z] тэнхлэгийн дагуух түгэлт нь нэмэгдсэн бол [y] тэнхлэгийн дагуух түгэлт нь сул байна. Мөн микроклиний эгэл торын чиглэлүүд нь ялгаатай эрчмүүдийг харуулж байна (G01: F2 = 1.2, G02: F2 = 1.32). Эсрэгээр нь альбит фазын үүсгэж байгаа кристаллографын давамгайлсан чиглэлүүд нь маш сул (G01: F2 = 1.06, G02: F2 = 1.04) байгаа бөгөөд үүнийг тайлбарлах боломжгүй юм.

3.3. Үлдэгдэл хэв гажилт

Кварц фаз давамгайлсан материал нь эзэлхүүний хувь өндөр ба дифракцын спектрийн сарнилын эрчим мөн өндөр байдаг (Зураг 3). Хоорондоо давхацхааргүй байрлал бүхий 7 кристаллографын хавтгайнуудын ((01 $\bar{1}1$)/(10 $\bar{1}1$), (11 $\bar{2}0$), (11 $\bar{2}1$), (01 $\bar{1}2$)/(10 $\bar{1}2$), (02 $\bar{2}1$)/(20 $\bar{2}1$), (11 $\bar{2}2$) болон (12 $\bar{3}1$)/(21 $\bar{3}1$)) хувьд эгэл торын хэв гажилтыг томъёо (3) – ын тусламжтайгаар тодорхойлсон бөгөөд (10 $\bar{1}1$) хавтгайн хувьд бусад хавтгайнуудтай төсөөтэй түгэлт үүсгэж байгааг тодорхойлов (Зураг 5). Үлдэгдэл хэв гажилтыг сканердахад хэв гажилтын түгэлт нь [z] тэнхлэгийн дагуу нэгэн төрлийн бус байна. G01 дээжний хэв гажилтын хэмжээ нь [x] тэнхлэгийн дагуух чиглэлд (01 $\bar{1}1$)/(10 $\bar{1}1$) хавтгайн хувьд $\varepsilon = -1.7 \cdot 10^{-3}$, (11 $\bar{2}1$) хавтгайн хувьд $\varepsilon = 1.2 \cdot 10^{-3}$. Мөн (01 $\bar{1}1$)/(10 $\bar{1}1$) хавтгайнуудын хувьд хэв гажилтын төсөөтэй байдлыг илтгэж байгаа боловч [z] тэнхлэгийн дагуух чиглэл дэх хэв

гажилт нь $\varepsilon = 0.5 \cdot 10^{-3}$ хэмжээтэйгээр шахалтын хэв гажилтыг харуулж байна [11].

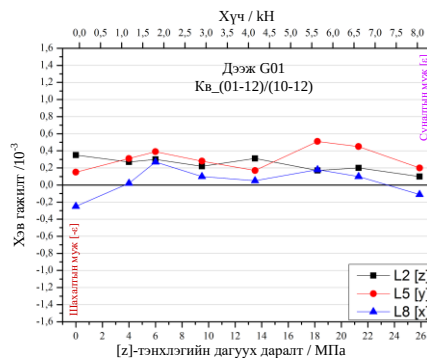
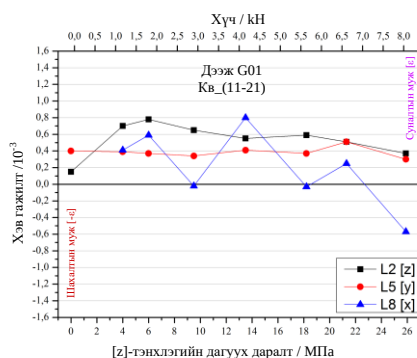
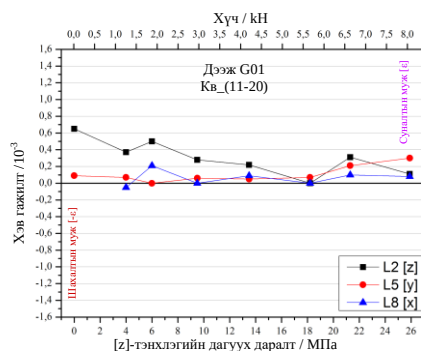
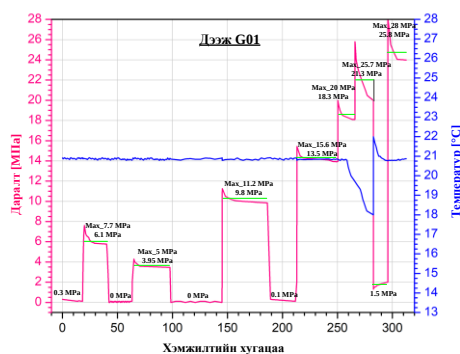


Зураг 5. Үлдэгдэл хэв гажилтыг тооцоолсон үр дүн. а) G01, б) G02. Уг графикт L2 нь [x] тэнхлэгийн дагуу, L5 нь [y] тэнхлэгийн дагуу харин L8 нь [z] тэнхлэгийн дагуу шилжилтийг тооцоолсон үр дүнг үзүүлэв.

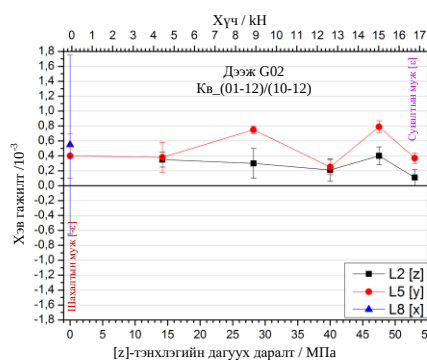
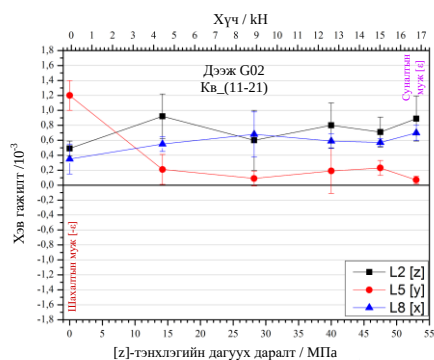
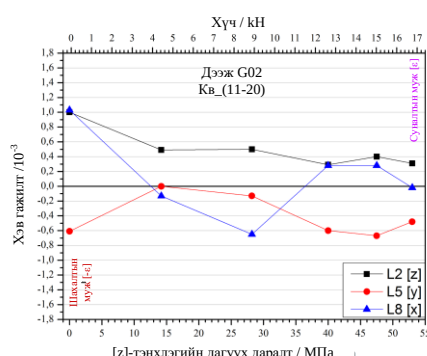
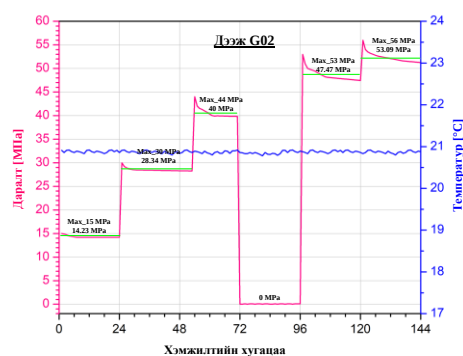
Үүнтэй төсөөтэй хэв гажилт (011̄2)/(101̄2) ба (111̄1) хавтгайнуудад ч мөн үүссэн байна. G02 дээжний хэв гажилтын хэмжээ нь (01-11)/(10-11) хавтгайн хувьд $\varepsilon = -1.1 \cdot 10^{-3}$, [z] тэнхлэгийн дагуух чиглэлд (112̄1) хавтгайн хувьд $\varepsilon = 1.7 \cdot$

10^{-3} . Мөн уг дээжний хамгийн их хэмжээтэйгээр хэв гажилтанд орж буй кварц фазын үлдэгдэл хэв гажилт нь суналтын мужид хамгийн багадаа $-1.6 \cdot 10^{-3}$ ба шахалтын мужид хамгийн ихдээ $1.2 \cdot 10^{-3}$ байна.

G01 дээж:



G02 дээж:



Зураг 6. Нэмэлтээр даралт учруулахад үүссэн хэв гажилтыг тооцоолсон үр дү. Энд дээжнүүдийн кристалл бүтцэд учруулсан даралтын муруй болон кварц фазын сонгосон кристаллографын хавтгайнуудын хэв гажилтын муруйнуудыг харуулав.

3.4. Даралтын нөлөөн дэх хэв гажилт

Нэмэлтээр G01 дээжийг долоон өөр (6.1; 3.8; 9.6; 13.5; 18.3; 21.3 болон 25.8 МПа), харин G02 дээжийг таван өөр (14.2; 28.3; 40.0; 47.5 болон 53.1 МПа) даралтын нөлөөнд оруулан эгэл торд үүсч буй хэв гажилтыг хэмжихдээ орчны температурыг $\sim 21^\circ\text{C}$ – д тогтворжуулан дээжний эгэл торын дулаан тэлэлтээс зайлсхийсэн. G01 дээжний эгэл торын $(11\bar{2}1)$ хавтгай нь агших хэв гажилтанд орж байгаа бол бусад $(11\bar{2}0)$ ба $(01\bar{1}2)/(10\bar{1}2)$ хавтгайнууд нь даралтын нөлөөнд орохгүй байна. Харин G02 дээжний хувьд $[x]$ тэнхлэгийн дагуух чиглэлд $(11\bar{2}1)$ хавтгайд 28.3 МПа хүртэл агшилт үүссэн бөгөөд өндөр даралтын нөлөөнд сунаж эхэлсэн. Харин $[z]$ тэнхлэгийн дагуух чиглэлд бага зэрэгийн агшилт үүссэн бол эгэл торын бусад чиглэлүүдэд нь хэв гажилт маш багаар үүссэн байна (Зураг 6).

IV. Дүгнэлт болон хэлэлцүүлэг

Текстурын хэмжилтийн үр дүнгээс үзэхэд эдгээр хоёр дээжийн кристаллографын давамгайлсан чиглэл нь $[z]$ тэнхлэгт перпедикуляр, өөрөөр хэлбэл $[x]$, $[y]$ тэнхлэгтэй параллель чиглэлтэй үелсэн байна. Кристаллын фазуудын давамгайлсан чиглэлүүдийг тодорхойлсоноор мусковит фазын (001) хавтгайн үүсгэж буй туйлын дүрс нь эдгээр метаморф чулуулагт байгаа бүх үелсэн давхрагуудыг илэрхийлж байгааг тодорхойлов. Тиймээс мусковитийн (001) хавтгайн туйлын дүрс нь дээрх өөр өөр эрчим бүхий фазуудын тархалттай чулуулгуудын давхаргын хэлбэлзлийг илэрхийлж байна.

Үлдэгдэл хэв гажилтын судалгаанаас нэгэн төрлийн бус хэв гажилтын түгэлт байгааг тодорхойлов. Mohr – ын (Mohr's circle) тойргийн тооцооллын тусламжтайгаар сонгосон нэмэлтээр учруулсан даралт нь эгэл торыг хэв гажилтанд оруулахгүй, өөрөө хэлбэл кварц фазын хэв гажилт нь даралт ихсэх тусам уян харимхай шинж чанар агуулж байна.

Мөн үелсэн давхрагууд нь тодорхой хэмжээний механик даралтыг даах чадвартай байдаг. Тиймээс олон фаз бүхий чулуулаг материалын хэв гажилтын түгэлтийн судалгаа нь нарийн төвөгтэй байдаг ба нарийвчлан системчилсэн бидний судалгаанаас харагдаж байна. Ялангуяа

олон фаз бүхий геологийн дээжнүүдийн хэв гажилтын түгэлт, бичил эвдрэлийн судалгааг оптик ба электрон микроскоп, нейтрон ба рентген дифракц, хэмжилтийн үед акустик дууны долгионыг бүртгэх нь хэв гажилт үүсэх болон тухайн үеийн процессыг улам бүр сайн ойлгоход чухал хувь нэмэр оруулах болно.

АШИГЛАСАН МАТЕРИАЛ

- [1] Mueller B. "EPSILON @ JINR: reducing the risk of subsidence and induced seismicity through gas production" Proceedings of the International Conference "Condensed Matter Research at the IBR-2", Dubna, Russia.
- [2] H.-R. Wenk, L. Lutterotti & S. Vogel (2010): Rietveld texture analysis from TOF neutron diffraction data. Powder Diffraction 25 (3), 283-296. [doi: 10.1154/1.3479004]
- [3] Song Shuguang, and Cao Yi. (2021) Textures and Structures of Metamorphic Rocks. In: Alderton, David; Elias, Scott A. (eds.) Encyclopedia of Geology, 2nd edition. vol. 2, pp. 375-388.
- [4] Håkon Austrheim, Kristina G. Dunkel, Oliver Plümper, Benoit Ildefonse, Yang Liu and Bjørn Jamtveit, Fragmentation of wall rock garnets during deep crustal earthquakes, *Science Advances*, 2017: Vol. 3, no. 2, e1602067, DOI: 10.1126/sciadv.1602067
- [5] H.M. Rietveld (1969): A profile refinement method for nuclear and magnetic structures. J. Appl. Cryst. 2, 65-71.
- [6] S. Matthies, L. Lutterotti & H.-R. Wenk (1997): Advances in Texture Analysis from Diffraction Spectra. J. Appl. Cryst. 30, 31-42.
- [7] Christian Scheffzük, Birgit I.R. Müller, Simon Breuer, Badmaarag Altangerel, Frank R. Schilling "Applied Strain Investigation on a Sandstone Sample using Neutron Time-of-Flight Diffraction at the Strain Diffractometer EPSILON, IBR-2M Dubna", *Mongolian Journal of Physics*.
- [8] K. Walther, C. Scheffzük & A. Frischbutter (2000): Neutron time-of-flight diffractometer epsilon for strain measurements: layout and first results. Physica B, Condensed Matter 276-278, 130-131.
- [9] L. Lutterotti, S. Matthies, H.-R. Wenk, A.J. Schultz & J.W. Richardson (1997): Combined texture and structure analysis of deformed limestone from time-of-flight neutron diffraction spectra. J. Appl. Physics 81, 594-600.
- [10] K. Ullemeyer, P. Spalthoff, J. Heinitz, N.N. Isakov, A.N. Nikitin & K. Weber (1998):

TheSKAT texture diffractometer at the pulsed reactor IBR-2 at Dubna: Experimental layout and first measurements. Nucl. Instr. & Meth. Phys. Res. A 412 (1), 80-88.

- [11] Ch. Scheffzük, K. Walther & A. Frischbutter (2001): Applied and residual strain/stress measurements on a dolomite rock sample using neutron time-of-flight diffraction. *J. NeutronRes.* 9 (2-4), 187-192.

Физические и физико-химические свойства металл-фуллереновых пленок, полученных вакуумными технологиями

П. Тувшинтур^{1*}, Д. Улам-Оргих¹, Э.М. Шпилевский², С.А. Филатов², Г. Шилагарди¹

¹ Национальный университет Монголии, Улан-Батор, Монголия

² Институт тепло- и массообмена им. А.А. Лыкова НАН Беларуси, Минск, Беларусь

Показано, что введение в пленки фуллеренов даже в небольших долях (до 1.0 мас.%) существенно (в некоторых случаях в разы) изменяет их физические и физико-химические свойства. Особо сильную зависимость испытывают трибологические, электрические и термоэлектрические свойства.

ВВЕДЕНИЕ

Фуллерены являются уникальными углеродными наночастицами. С их открытием в конце прошлого века материаловеды получили принципиально новые инструменты для конструирования и управления свойствами материалов и структур [1-3].

Из всего семейства фуллеренов молекула C_{60} обладает наиболее высокой симметрией и наибольшей температурной устойчивостью. Атомы углерода в молекуле C_{60} размещаются на сферической поверхности в вершинах 20 неправильных гексагонов и 12 правильных пентагонов и связаны между собой ковалентной связью. Эта связь осуществляется обобществлением валентных электронов атомов. Валентные электроны каждого атома находятся в sp^2 -гибридизованных состояниях, сходных с состояниями электронов в графите. Длина связи C-C в пентагоне составляет 1.43 Å, такая же длина стороны гексагона, являющейся общей для обеих фигур, но сторона, общая для двух гексагонов, имеет длину около 1.39 Å. Радиус молекулы C_{60} составляет 0.357 нм. [3].

Ранее [4], было установлено, что введение фуллеренов в металлическую матрицу приводит к ее структурированию и значительному повышению прочности материала, изменению других ее свойств. В настоящей работе исследовались физические и физико-химические свойства пленок разной толщины систем Al- C_{60} , Cu- C_{60} и Ti- C_{60} .

Особенности формирования металл-фуллереновых пленок разного состава

Пленки получали в вакууме на установке «ВУП-4» конденсацией совмещенных атомно-молекулярных потоков при давлении остаточных паров воздуха $1 \cdot 10^{-4}$ Па. В качестве исходных материалов использовались особо чистые металлы (медь, алюминий, титан) и фуллеритовый порошок C_{60} чистоты 99.9 %, изготовленный по технологии, описанной в работе [5]. Поскольку фуллерены начинают сублимировать при температурах менее 700 К, а температура испарения металлов значительно выше, то для получения металл-фуллереновых плёнок использовались два испарителя (отдельно для металла и фуллеренов). Разогрев испарителей обеспечивался пропусканием электрического тока. В качестве испарителей для металлов использовались молибденовые лодочки, для C_{60} — танталовые. Подложками служили оксидированный кремний и ситал.

Получение пленок с различным содержанием фуллеренов обеспечивалось варьированием плотностями атомно-кластерных потоков компонентов, что в свою очередь достигалось регулированием температуры испарителей и изменением их расположения относительно подложки. Необходимая концентрация фуллеренов в плёнке обеспечивалась поддержанием определенного соотношения скоростей поступления фуллерена и металла.

Плотности потока молекул фуллерена и атомов металлов определялись с помощью экспериментально построенных номограмм температурной зависимости скоростей испарения металлов и фуллеренов. Реальная концентрация фуллеренов в металл -

* Electronic address: tuvshintur@num.edu.mn

фуллереновых пленках определялась методом рентгеновского микроанализа по интенсивности характеристического рентгеновского излучения атомов металлов в пленках заданной толщины. Фазовый состав пленок контролировался на рентгеновском дифрактометре «ДРОН-3.0» в медном K_{α} -излучении. Структура пленок исследовалась с помощью атомного силового микроскопа и растрового электронного микроскопа LEO 1420VP. Измерение электрических и термоэлектрических характеристик производилось четырехзондовым методом. Износ при трении рассчитывался по глубине канавки трения, измеренной интерферометрическим методом (интерферометр Линники МИИ-4).

На структуру конденсированных в вакууме на подложке из совмещенного атомно-молекулярного потока металл-фуллереновых пленок влияют как концентрация компонентов, так и технологические параметры (температура подложки, плотность потоков и энергия поступающих на подложку атомов и молекул). Размер и форма зерен пленочных сплавов зависят от типа металла, концентрации компонентов и температуры подложки и толщины пленок. На рисунке 1. показаны зависимости размера зерен композиционных пленок Al- C_{60} и Cu- C_{60} .

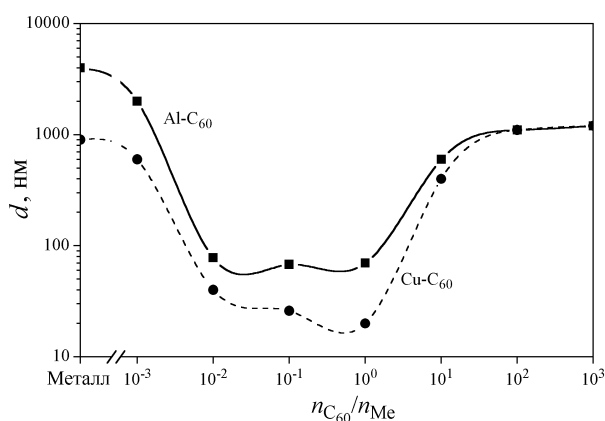


Рис.1. Зависимость среднего размера зёрен металл-фуллереновых плёнок от количества молекул фуллерена, приходящихся на 1 атом металла (толщина 100 нм.)

Для системы Al- C_{60} зерна преимущественно имеют вид пирамид, для системы Cu- C_{60} – вытянутых куполов, а для системы Ti- C_{60} – полусфер. Их линейные размеры составляют 30...3000 нм.

Выявленная зависимость среднего размера зёрен металл-фуллереновых плёнок от состава компонентов (количества молекул фуллерена, приходящихся на 1 атом металла) объясняется следующим: имея меньшую подвижность на поверхности подложки фуллерены ограничивают длину диффузионных прыжков, тем самым выступая центрами кристаллизации для металлических атомов, кроме того, в совмещённом потоке атомы металла и молекулы C_{60} могут создавать устойчивые образования в пространстве на подлёте к подложке.

Трибологические свойства металл-фуллереновых пленок

Экспериментально установлено, что коэффициент трения и износостойкость металл-фуллереновых пленок от типа металла, концентрации компонентов и температуры подложки и толщины пленок. Однако наиболее сильное изменение придает наличие молекул фуллеренов. При этом наибольший эффект достигается небольших долях (до 1.0 мас.% C_{60}). Рисунок 2 иллюстрирует зависимости коэффициента трения от продолжительности испытаний трибопары (от пути трения) пленка Ti- C_{60} -титан.

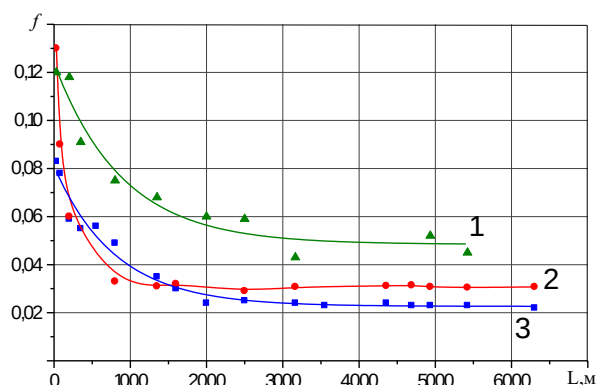


Рис. 2. Зависимость коэффициента трения пары пленка Ti- C_{60} -титан от пути трения: 1 – Ti: C_{60} =20; 2 – Ti: C_{60} =120; 3 – Ti: C_{60} =260.

Анализ данных показывает, что для значений износостойкости композиционных пленок имеют аналогичные зависимости.

Электрические и термоэлектрические свойства металл-фуллереновых пленок

Установлено, что удельное электрическое сопротивление и термоэдс плёнок Me- C_{60} изменяется в широких пределах в зависимости

от долевого состава компонентов и толщины слоев. Показано, что для металл-фуллереновых пленок характерно с возрастанием толщины удельное электросопротивление уменьшается, а термоэдс возрастает. Изменение удельного сопротивления и термоэдс от толщины для $Ti/C_{60}=120$, показано на рис.3

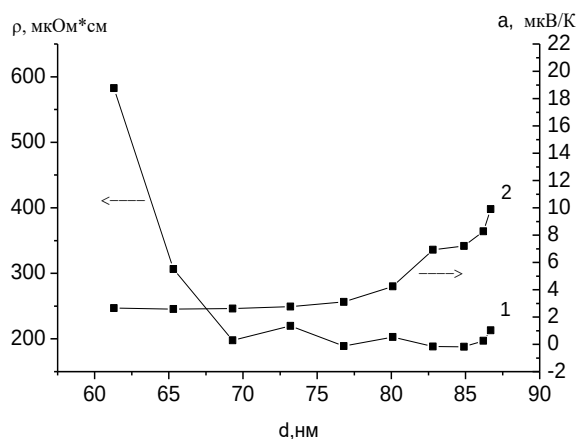


Рис. 3. Зависимость удельного сопротивления (1) и термоэдс (2) от толщины для плёнок с долевым составом $C_{60}:Ti=120$.

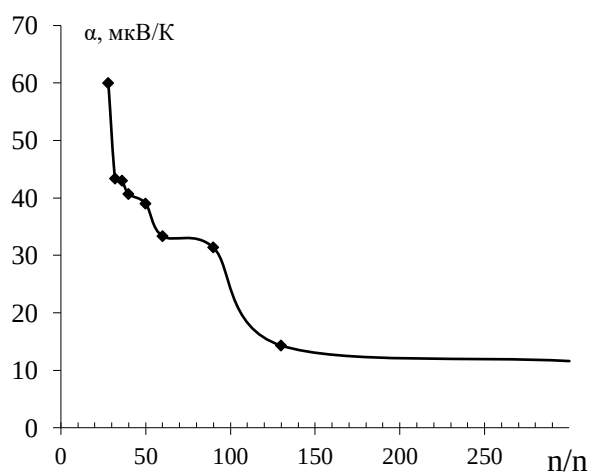
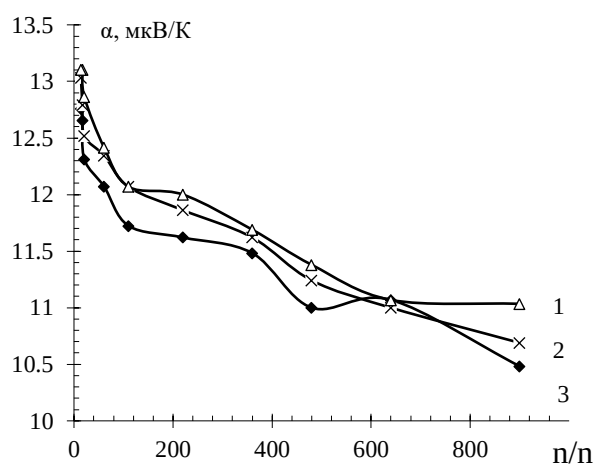


Рис. 4. Зависимость термоэдс от долевого отношения Ti/C_{60} с различным толщинами 1) $d=150$ нм., 2). $d=110$ нм., 3). $d=86$ нм., 4) $d=50$ нм.

Толщинные зависимости удельного электросопротивления и термоэдс проявляются для малых (до 70-80 нм. для удельного электросопротивления и 100-150 нм для термоэдс) толщин. Однако наиболее сильное изменение как удельного электросопротивления так и термоэдс обеспечивается наличием молекул и кластеров фуллерена. Удельное электросопротивление металл-фуллереновых пленок от концентрации фуллеренов изменяется на 14-15 порядков (от 10^{-6} до 10^{+9}).

Зависимость термоэдс от долевого соотношения n/n для плёнок Ti/C_{60} приведены на рис. 4.

Зависимость термоэлектрической эффективности от долевого соотношения атомов металла и молекул фуллерена C_{60} в пленках системы $Ti-C_{60}$ приведена на рис 5.

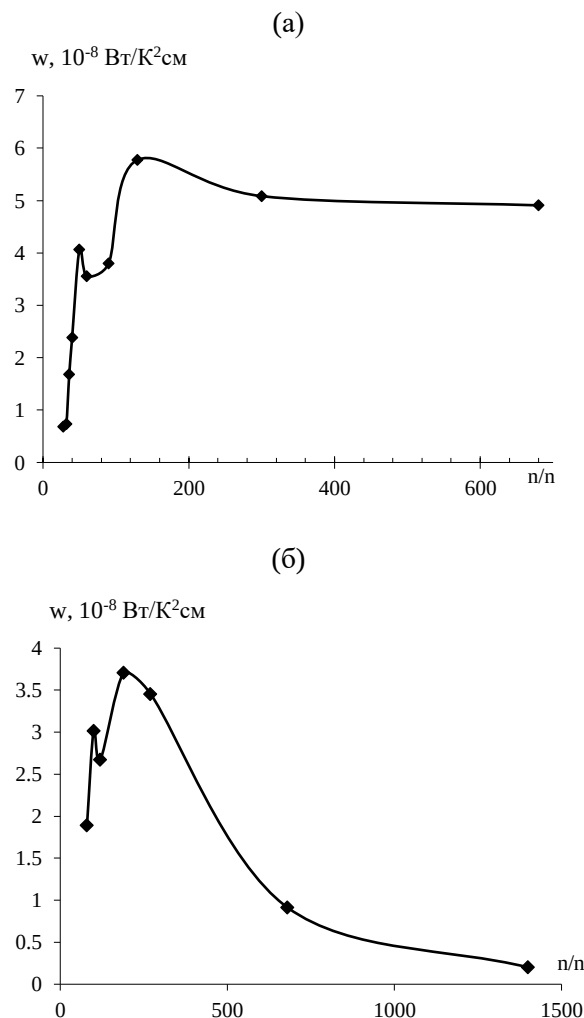


Рис.5. Зависимость термоэлектрической эффективности плёнок $Ti-C_{60}$ от долевого состава компонентов (толщины: а) $d_{cp} = 50$ нм, $d_{cp} = 110$ нм.)

При совместной конденсации металлов и фуллеренов образуются гетерогенные

структуры, состоящие из фаз: металлической, фуллеритовой, твёрдых растворов атомов металла в фуллерите и молекул фуллерена в кристаллическом или аморфном состояниях.

Обладая широким спектром значений удельного электрического сопротивления сплавы Me-C_{60} интересны как электротехнические материалы.

Для металлов имеется соответствие между удельным сопротивлением ρ и термоэдс α равное $\rho/\alpha = \text{const}$. Полученные зависимости показывают, что это соотношение для плёнок Me-C_{60} не выполняется, а имеет сложный характер.

С увеличением доли металла наблюдается рост термоэдс в несколько раз (в 5 раз для плёнок Ti-C_{60}). Значение термоэдс плёнок Ti-C_{60} может достигать 60 мкВ/К. Однако использование этого эффекта затруднено из-за малой термоэлектрической эффективности $w = \alpha^2/\rho$. Для зависимостей термоэлектрической эффективности от долевого состава имеется максимум соответствующий долевному отношению $\text{Me-C}_{60} \text{ } n_{\text{Me}}/n_{\text{C}_{60}} \approx 120$.

Уникальные свойства углеродных наночастиц и материалов их содержащие указывают на перспективы использования этих материалов в качестве покрытий в машиностроении, оптоэлектронике, биомедицине, авиастроении, в других областях хозяйственной деятельности [6].

Заключение

Добавление молекул C_{60} в металлические пленки существенно уменьшает размер структурных элементов до нанометровых, что может быть использовано для получения наноструктурных материалов.

Показано, что введение фуллеренов даже в небольших долях (до 1.0 мас.%) существенно (в некоторых случаях в разы) изменяют их физические и физико-химические свойства. Особо сильную зависимость испытывают трибологические, электрические и термоэлектрические свойства.

Литература

[1] Шпилевский М.Э., Шпилевский Э.М., Стельмах В.Ф. Фуллерены и

фуллерено-подобные структуры – основа перспективных материалов. ИФЖ. 2001. № 6. С. 106–112.

[2] Витязь П.А., Свидинович Н.А. Основы нанотехнологий и наноматериалов. Мн.: Выш.шк., 2010.- 302 с.

[3] Сидоров Л.Н., Юровская М.А. Фуллерены. М.: МГУ 2004. – 688 с.

[4] 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: SpringerScience, 2011. P. 23-39.

[5] Патент РБ, МПК 6 В 01J 19/00. Устройство для получения фуллеренов. С. В. Адашкевич, А. С. Дрозд, Э. М. Шпилевский и др.

[6] Витязь, П.А. Фуллерены в матрицах различных веществ. Витязь П.А., Шпилевский Э.М. ИФЖ. -2012.-Т.85, №4. С. 718-724.

Тогтмол гүйдлийн соронзон орны 3 хэмжээст компьютер загвар бүтээх нь

Б.Алтанхүү*, О.Лхагва

МУИС, ШУС, БУС, Физикийн Тэнхим

Ковид-19 цар тахлын үед зайны, цахим сургалтын хэрэгцээ үлэмж нэмэгдэж, нөхцөл байдалд тохирсон сургалтын шинэ хэрэглэгдэхүүн хөгжүүлэх хэрэгцээ шаардлага эрс нэмэгдсэн. Энэ өгүүлэлд бид, сургалтын зорилгоор тогтмол гүйдлийн соронзон орны 3 хэмжээст (3D) компьютер загварыг бүтээх үйл явц, бүтээсэн загварыг физикийн сургалтын хэрэглэгдэхүүн болгон ашиглах боломжийн талаар дурдав. Тогтмол гүйдлийн соронзон орныг тооцоолохдоо, ерөнхий тохиолдолд аналитик шийдгүй Био-Саварын хуулийн интеграл томъёог тоон аргаар ойролцоолж бодуулдаг. Бид тооцоог геометрийн тэгш хэмтэй шулуун, тойрог хэлбэрийн дамжуулагчийн гүйдэл тус бүрийн хувьд хийж соронзон орны 3 хэмжээст дүрслэл (хүчний шугам) үйлдсэн. Түүнчлэн, хавтгай дээрх дурын хэлбэртэй дамжуулагчийн гүйдлийн соронзон орныг тооцоолж 3 хэмжээст дүрслэл үйлдэх програм боловсруулав. Тооцоог Python хэл дээр, 3D график дүрслэлийг OpenGL/WebGL технологи, слайд-функц ашиглан хийв. Тооцоо, загварчлал үйлдэхэд ашигласан процессор: Intel i7 Quad Core, 2.3 GHz, 16 Gb RAM.

Түлхүүр үгс: сургалтын технологи, сургалтын хэрэглэгдэхүүн, физикийн сургалт, компьютерын загварчлал, байгалийн ухаан, мэдээллийн технологи, тооцоот туршилт

УДИРТГАЛ

Компьютер загварчлал (симуляци) бол, өгөгдсөн систем эсвэл юмс үзэгдлийн математик загварыг програмын аргаар компьютер дээр байгуулж, тухайн загвартайгаа ажиллах байдлаар эх системийн төлөв байдал, дүр төрхийг судлах үйл ажиллагаа юм [1]. Тухайн тохиолдол нь физикийн загварчлал бөгөөд, “физикийн систем, үзэгдэл, процессын компьютер загвар бүтээх” хэмээн тодорхойлж болно. Шинжлэх ухааны судалгаанд физикийн компьютер загварчлал нь нэг талаас шинжилгээний “багаж”-ийн үүрэг гүйцэтгэж, нөгөө талаас салбар дундын (математик, компьютерын ухаан, мэдээллийн технологи, компьютер график) судалгааны объект - судлагдахуун болж байдаг. Харин боловсролын салбарт компьютер загварчлалыг сургалтын зорилгоор хэрэглэнэ. Энэ тохиолдолд загварчлал нь сургалтын хэрэглэгдэхүүн бүтээх үйл ажиллагаа бөгөөд тооцоолол, дүрслэлийн тодорхой асуудлуудыг шат дараалан шийдэж байж, үр дүнг гаргаж авна. Ийм сургалтын хэрэглэгдэхүүний үлгэр жишээ болгож, Колорадогийн Булдерын Их Сургуулийн хөгжүүлсэн PhET интерактив загварчлалын төслийг дурдаж болно [2]. Төслийн хүрээнд физик, хими, биологи, математик болон бусад шинжлэх ухааны чиглэлийн 806 сая орчим

симуляци, загвар програмуудыг сургалтын зориулалтаар бүтээсэн нь өнөөдөр дэлхий даяар боловсролын орчинд ашиглагдаж байгаа. Түүнчлэн, Python болон Javascript хэлэнд суурилсан, 3 хэмжээст симуляци дүрслэл үйлдэх зориулалттай VPython/Glowscript загварчлалын хэлүүд хөгжиж [3], тэдгээрт түшиглэсэн дунд болон дээд сургуулийн түвшний ерөнхий физикийн курс хичээлүүд тавигддаг болжээ [4] (боловсролын цахим технологийн хөгжлийн дээд үзүүр нь эдүгээ virtual reality (VR), augmented reality (AR) түвшинд хүрсэн гэдгийг тэмдэглэх хэрэгтэй [5]). Манай орны хувьд, гадны ийм дэвшилтэт сургалтын технологиос авч хэрэглэхийн сацуу, эх хэл дээрх ижил төрлийн материалыг өөрсдийн боломжоор үүсгэн хөгжүүлж, бүрдүүлж, баяжуулж байх нь зүйтэй болов уу.

ТОГТМОЛ ГҮЙДЛИЙН СОРОНЗОН ОРОН

Тогтвортой цахилгаан цэнэг нь статик цахилгаан орон үүсгэдгийн адилаар тогтмол гүйдэл нь статик соронзон орон үүсгэдэг. Энэ соронзон оронг загварчлах нь физикийн компьютер загварчлалын классик бодлогуудын нэг юм [7, 8]. Ийм загвар (сургалтын хэрэглэгдэхүүн) нь шулуун, цагираг болон ороомог дамжуулагчийн гүйдлийн үүсгэх соронзон орны шинж чанартай танилцах боломжийг олгоно.

* Electronic address: altankhuu@num.edu.mn

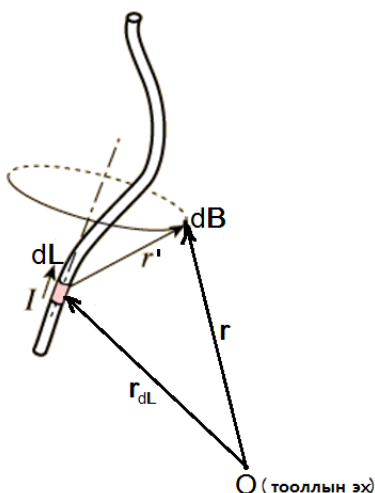
Дурын хэлбэртэй дамжуулагчийн гүйдлийн соронзон орныг Био-Саварын хуулиар тодорхойлдог [6]. Энэ хуулийн интеграл хэлбэр:

$$\vec{B}(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_L \frac{I d\vec{L} \times \vec{r}'}{|\vec{r}'|^3} \quad (1)$$

Энд, $\vec{B}$ - соронзон орны индукцийн вектор, $\vec{r}$ - орныг тодорхойлж буй цэгийн радиус вектор, $d\vec{L}$ - гүйдлийн (дамжуулагчийн) элемент-вектор, $\vec{r}' = \vec{r} - \vec{r}_{dL}$ - гүйдлийн элементээс орныг тодорхойлж буй цэг хүртэлх шилжилтийн вектор, I - дамжуулагчийн гүйдэл (ампераар), $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7}$ Тл·м/А - соронзон тогтмол (зураг 1).

Дифференциал хэлбэр нь:

$$d\vec{B}(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{I d\vec{L} \times \vec{r}'}{|\vec{r}'|^3} \quad (2)$$



Зураг 1. Гүйдэлтэй дамжуулагчийн хэсэг.

(1) интеграл нь тооллын эхээс $\vec{r}$ зайд байрлах ямар ч цэг дээрх нийлбэр соронзон оронг олоход хэрэглэгдэх боломжтой. Ерөнхий тохиолдолд уг интегралыг аналитик бодох боломжгүй учир дифференциал элементүүдийг хангалттай бага төгсгөлөг ялгаврын элементүүдээр сольж ($dL \rightarrow \Delta L$, $dB \rightarrow \Delta B$, $\int \rightarrow \sum$), тоон аргаар ойролцоолж бодно [7,8,9].

(1) томъёонд буй $d\vec{L} \times \vec{r}'$ вектор үржвэрийг олохын тулд дамжуулагчийн $d\vec{L}$ элемент бүрийн радиус вектор $\vec{r}_{dL}$ -ийг тодорхойлох хэрэгтэй. Практикт (сурах бичгийн хүрээнд), тооцоог хялбарчлах үүднээс дамжуулагчийн хэлбэр дүрсийг шулуун, тойрог ба ороомог гэх мэт геометрийн тэгш хэмтэй тохиолдлуудад авч үзэх нь түгээмэл байдаг.

ЗАГВАРЧЛАХ АЛХМУУД БА ШИЙДЛҮҮД

Үндсэн тооцооноос гадна технологийн чанартай дараах асуудлуудыг шийдвэрлэх шаардлагатай болдог:

А. Объектуудыг (гүйдлийн элемент, хэлхээний элементүүд, батарей гэх мэт) дүрслэх.

Б. Дамжуулагч утас зурах.

В. Параллель дамжуулагчуудын харилцан үйлчлэлийг (таталцал/түлхэлцэл) тооцоолж дүрслэх.

Г. Хүчний шугам зурах (соронзон орны дүрслэл).

А. Объектуудыг дүрслэх

Энд бид дээд түвшний Python програмчлалын хэл, түүн дээр суурилсан Visual Python (VPython) 3D график модулийг [3] ашигласан. Ингэснээр, OpenGL/WebGL API функцуудыг гараар дуудах, график контекстийн тохиргоо хийж бэлдэх; 3 хэмжээст огторгуйд нэгэн төрлийн координатууд дээр хийх геометр хувиргалтууд, эргүүлэлтийн болон проекцын матрицуудтай тулж ажиллах, компьютер графикийн бусад стандарт алгоритмуудыг биечлэн дуудах гэх мэт нүсэр хөдөлмөрөөс ангижирч, график дүрслэлийг хялбар хурдан үйлдэх боломжтой болсон.

Python хэл өөрөө cross-platform учир загвар програм маань Windows, Mac, Unix/Linux үйлдлийн системд ч ажиллах боломжтой.

Б. Дамжуулагч утсыг дүрслэх

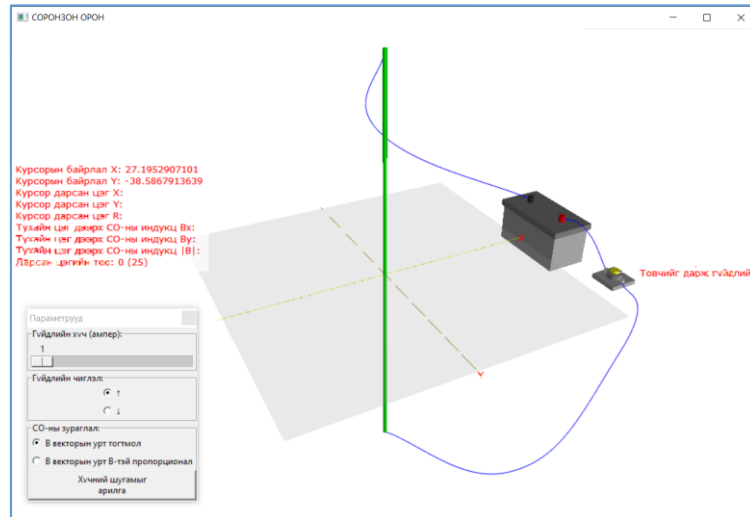
Загвар програмыг сургалтын хэрэглэгдэхүүн болгож ашиглахын тулд үндсэн физик параметруудын тооцоог үнэн зөв хийхээс гадна график дүрслэлийн хувьд бодит байдалтай ойр харагдах нь чухал. Хэрэв лабораторийн хичээлд виртуал хэлбэрээр ашиглах бол, загвар систем маань гүйцэд угсарсан цахилгаан хэлхээ байдалтай оюутанд харагдаж байх ёстой (хэлхээнд залгаагүй дамжуулагчаар гүйдэл гүйхгүй шүү дээ!). Үүний тулд жишээ нь батарей, түлхүүр, шулуун дамжуулагчийг өөр хооронд нь холбож буй цахилгаан утсыг утас шиг л харагдуулах ёстой. Зураг 2-т, нэг шулуун дамжуулагч бүхий хялбар хэлхээг хэрхэн загварчилж дүрсэлснийг харуулав. Энд цахилгаан утсыг бид куб-сплайн интерполяцын аргаар дүрсэлсэн [11]:

$$P(u) = p_{k-1}CAR_0(u) + p_kCAR_1(u) + p_{k+1}CAR_2(u) + p_{k+2}CAR_3(u) \quad (3)$$

гэсэн олон гишүүнт функцыг $\{p_{k-1}, p_k, p_{k+1}, p_{k+2}\}$ хяналтын (залгаас) цэгүүдээр тохируулж, $CAR_k(u) =$

$$\begin{cases} -su^3 + 2su^2 - su, k = 0 \\ (2-s)u^3 + (s-3)u^2 + 1, k = 1 \\ (s-2)u^3 + (3-2s)u^2 + su, k = 2 \\ su^3 - su^2, k = 3 \end{cases} \quad (4)$$

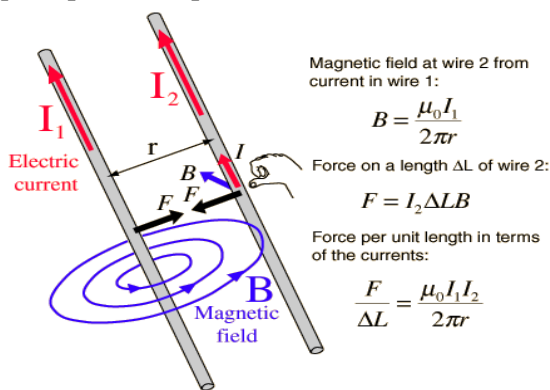
гэсэн холбогч функцуудээр интерполяци хийж болно. Энд $s = 0.5 - 0.5t$, $t = -0.5$ – муруйн параметр.



Зураг 2. Нэг шулуун дамжуулагчийн гүйдлийн соронзон орны загвар програм.

В. Соронзон харилцан үйлчлэлийг загварчлах

Хоёр параллель дамжуулагчаар гүйдэл гүйхэд хоорондоо соронзон харилцан үйлчлэлд ордог (зураг 3). Гүйдлүүд харилцан эсрэг эсвэл нэг зүгт чиглэсэн эсэхээс шалтгаалан дамжуулагчууд таталцана эсвэл түлхэлцэнэ. Энэ харилцан үйлчлэлийн хүч нь дамжуулагчийн уртын дагуу жигд үйлчлэлтэй байна, ө.х. нэгж уртад үйлчлэх хүч тогтмол байна [6, 12].



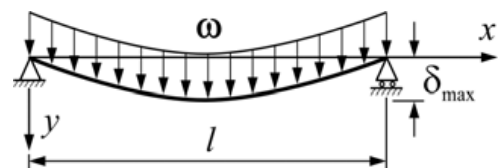
HyperPhysics ©C.R. Nave, 2012

Зураг 3. Гүйдэлтэй параллель дамжуулагчуудын соронзон харилцан үйлчлэл.

Загварчлал “бодит” байхын тулд компьютер загвар дээрх дамжуулагчууд мөн

таталцаж/түлхэлцэж харагдах ёстой. Таталцаж буй дамжуулагчууд дотогш махийх ёстой. Түлхэлцэж буй дамжуулагчууд гадагш махийх ёстой. Үүнийг хэрхэн шийдэх вэ?

Цэвэр дүрслэлийн асуудал учраас, нэгж уртдаа жигд ачаалал авч буй, хоёр үзүүрээсээ бэхлэгдсэн урт саваа гэж төсөөлбөл, бид механик инженерчлэлийн бодлого (савааны махийлтын) бодох хэрэгтэй болно. Бодлогын нөхцөлийг зураг 4-т үзүүлэв.



Зураг 4. Хоёр үзүүртээ бэхлэгдсэн савааны махийлт.

Аль нэг үзүүрээс х зайд орших цэг дээрх хазайлт δ_x -ийг дараах (5) томъёогоор олно [13]:

$$\delta_x = \frac{wx}{24EI} (L^3 - 2Lx^2 + x^3) \quad (5)$$

Энд $w = \frac{F}{\Delta L} = \frac{\mu_0 I_1 I_2}{2\pi r}$ – нэгж уртад үйлчлэх соронзон хүч, E – уян харимхайн модуль (зэсийнх 117 Гпа), I – талбайн инерцийн момент ($I = \frac{\pi \cdot \text{radius}^4}{4}$).

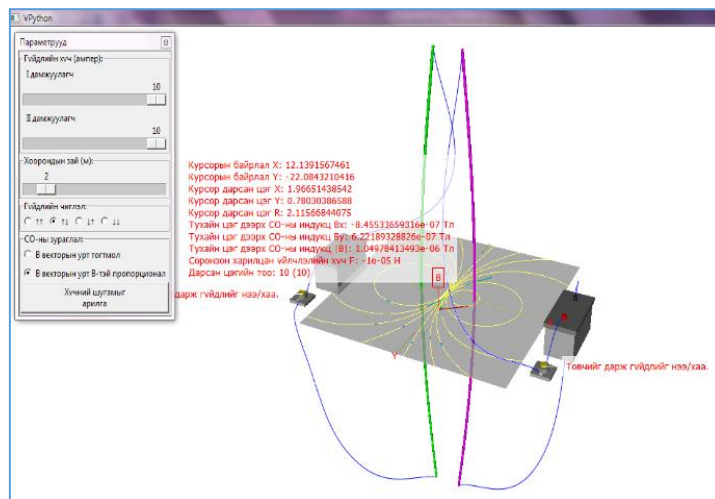
Зураг 5-д, хоёр шулуун дамжуулагчаар харилцан эсрэг чиглэлд гүйдэл гүйхэд соронзон харилцан үйлчлэлийн улмаас дамжуулагчууд хэрхэн түлхэлцэж буйг харуулав.

Г. Соронзон орны хүчний шугамыг дүрслэх

Соронзон орон бол вектор орон. Вектор орны хүчний шугамыг 3D огторгуйд байгуулахдаа, шугамын цэг бүр дээрх соронзон орны $\vec{B}$

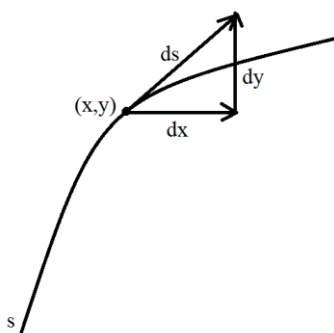
векторын чиглэлийг илэрхийлсэн 1-р эрэмбийн 3 дифференциал тэгшитгэлийг бодуулдаг [8, 9]:

$$\begin{cases} \frac{dx}{ds} = \frac{B_x}{B} \\ \frac{dy}{ds} = \frac{B_y}{B} \\ \frac{dz}{ds} = \frac{B_z}{B} \end{cases}$$



Зураг 5. Параллель шулуун дамжуулагчуудын гүйдлийн соронзон орны харилцан үйлчлэлийг загварчилж байгаа нь.

Энд (x, y, z) – бодолт хийх цэг, ds – хүчний шугамын дагуу явах дифференциал алхам (бодох алхам), B_x, B_y, B_z – тухайн цэг дээрх соронзон орны векторын байгуулагчууд, B – соронзон орны векторын модуль (зураг 6).



Зураг 6. Тухайн цэг дээрх $\vec{B}$ -ийн чиглэл нь $d\vec{s}$ -ийн чиглэлтэй давхцана.

Бид тогтмол алхамт 4-р эрэмбийн Рунге-Куттын аргыг сонгож бодолтыг гүйцэтгэсэн [10].

Хэдийгээр тооцоог компьютер дээр өрнүүлж буй боловч олон цэг дээр бодолт хийхэд үйлдэл ихтэй, хугацаа их зарцуулах учир бодолтын алхмын тоог цөөлөх хэрэгтэй. Үүний тулд:

1. Соронзон орны хүчний шугам битүү байдаг гэдгээс, шугамын эхлэл цэгээс хоёр тийш эсрэг чиглэлд бодолтыг хийнэ. Зурах мужаас (эсвэл дэлгэцийн харах мужаас) гарч явсан

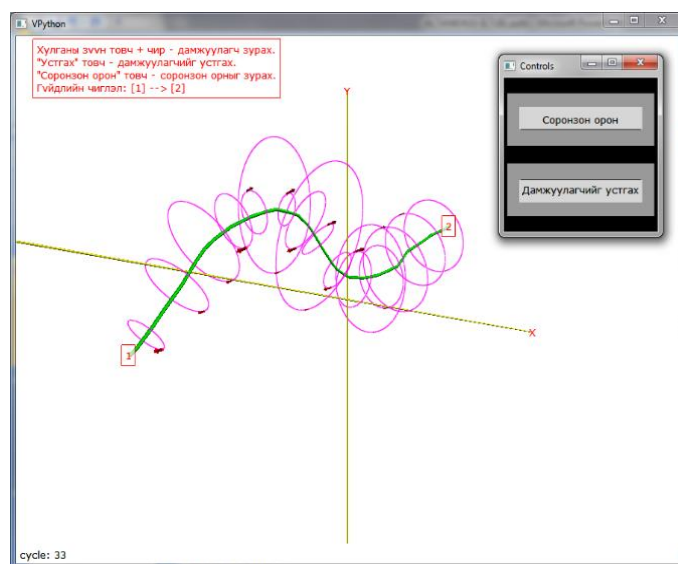
шугамыг бодохоо болино. Хоёр талаас ирж буй нэг шугамын хоёр үзүүр заасан нарийвчлал дотор орж ирмэгц, шугам битүүрсэн гэж үзээд бодолтыг зогсооно.

2. Соронзон орон аль нэг координатын (жишээ нь ХҮ-) хавтгайтай харьцангуй тэгш хэмтэй гэвэл, тооцоог тухайн хавтгайн нэг талд бодоод нөгөө тал руу шууд бодолтгүйгээр буулгана (толин ойлт хийнэ).

Бодолт хийгдэж эхлэх цэгийг хэрэглэгч өөрөө хулганаар сонгож дарна эсвэл програм дотор урьдчилан бэлдсэн координатууд зааж өгнө. Өмнөх зураг 5-д параллель шулуун дамжуулагчуудын гүйдлийн нийлбэр соронзон орны хүчний шугамыг програм хэрхэн дүрсэлж буйг үзүүлсэн байгаа.

ДУРЫН ХЭЛБЭРТЭЙ ДАМЖУУЛАГЧИЙН ГҮЙДЛИЙН СОРОНЗОН ОРОН

Түүнчлэн бид ажлынхаа хүрээнд, хавтгай дээрх дурын хэлбэртэй дамжуулагчийн хувьд гүйдлийн соронзон орныг тооцоолж 3D дүрслэл үйлдэх програм боловсруулсан (зураг 7). Тооцоог компьютерын хүчин чадалд “дулдуйдан” гүйцэтгэж, Био-Саварын хуулийг шууд интегралчилж байгаа.



Зураг 7. Хавтгай дээрх дурын хэлбэртэй дамжуулагчийн хэсгийн үүсгэх соронзон орны дүрслэл.

Интерфейсийн хувьд, хэрэглэгч өөрөө хулганын тусламжтайгаар цэг сонгож, хүчний шугамын дүрслэлийг эхлүүлнэ. Зөвхөн шулуун, тойрог гэхгүй дурын тахир, гурвалжин, дөрвөлжин, спираль гэх мэт хэлбэртэй дамжуулагчаар гүйх гүйдлийн соронзон орныг дүрслэх боломжтой.

СУРГАЛТЫН ХЭРЭГЛЭГДЭХҮҮН

Бэлэн болсон 3D загвар програмуудтай, лекцийн хичээл дээр үзүүлэн-демонстраци, семинарын хичээл дээр дасгал, лабораторийн хичээл дээр бол виртуал туршилт байдлаар ажиллаж:

- Статик соронзон орон, түүнийг үүсгэж буй гүйдэл хоорондын хамаарал, уялдаа холбоог судлах (тоон утга ба чиглэл);
- Зэрэгцэн орших гүйдэлтэй дамжуулагч хоорондын соронзон харилцан үйлчлэлийг судлах;
- Соронзон тогтмолыг (μ_0) туршлагаар тодорхойлж гаргаж ирэх;
- Янз бүрийн геометр хэлбэртэй дамжуулагчийн гүйдлийн соронзон орны бүтэцтэй танилцах;
- Соронзон орны дүрслэл, хүчний шугамын талаар ойлголт авах

гэх мэт болон бусад дасгал, даалгавруудыг гүйцэтгэх боломжтой.

Нөгөө талаас, компьютер загвар бүтээх процесс нь өөрөө тооцон бодох физик, тооцон бодох математик, физик загварчлал, програмчлал гэх мэт хичээлийг өрнүүлэх, сургалтын агуулгыг баяжуулах шинэлэг арга хэлбэр байх болов уу.

ДҮГНЭЛТ

Физикийн сургалтад компьютер загварчлал ашиглах нь мэдээллийн технологийн ололтыг сургалтад хэрэглэж буй дэвшилтэт нэгэн хэлбэр. Тогтмол гүйдлийн соронзон орны компьютер загвар бүтээх ажил нь өөрөө физик, мэдээллийн технологи, математик гэх мэт олон салбарын асуудлыг явцын дунд шийдвэрлэн байж зорилгодоо хүрдэг олон үе шаттай, эрэл хайгуул ихтэй цогц ажиллагаа байна.

Загварчлалын технологи ашиглан бүтээсэн сургалтын хэрэглэгдэхүүн нь:

- Сургалтын эвристик арга зүйг (туршиж үйлдэнгээ өөрөө өөрийгөө сургах) хэрэгжүүлэх;
- Материаллаг бааз хомс орчинд сургалтыг хямд төсрөөр явуулах;
- Зайны болон онлайн сургалт явуулах зэрэг давуу тал, шинэлэг нөхцөл байдлыг бий болгоно гэж үзэж байна.

АШИГЛАСАН МАТЕРИАЛ

- [1] Computer Simulations in Science, <http://plato.stanford.edu/entries/simulations-science/>
- [2] Interactive Simulations for Science and Math, <https://phet.colorado.edu/>
- [3] GlowScript VPython and VPython 7, <https://glowscrip.org/docs/VPythonDocs/index.html>
- [4] Matter and Interactions, 4th Ed., <https://matterandinteractions.org/>

- [5] Bringing virtual and augmented reality to the classroom,
<https://edu.google.com/products/vr-ar/>
- [6] D.Halliday, R.Resnick, J.Walker, Fundamentals of Physics, 11th Ed., Wiley, 2018.
- [7] Х.Гулд, Я.Тобочник, Компьютерное моделирование в физике, т. 1, М., 1990.
- [8] Nicholas J. Giordano, Computational Physics. Prentice Hall, 1997.
- [9] L.Kirkup, Magnetic field line simulation using a microcomputer, Phys. Educ. 21, 1986.
- [10] William H. Press, Brian Flannery, Numerical Recipes. Cambridge Univ. Press, 1986.
- [11] D.Hearn, M.P.Beker, Computer Graphics: C Version, 2nd Ed., Pearson, 1997.
- [12] Biot-Savart Law, <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/magnetic/biosav.html>
- [13] Engineering ToolBox, (2009). Beams - Supported at Both Ends - Continuous and Point Loads. [online] Available at: https://www.engineeringtoolbox.com/beam-stress-deflection-d_1312.html.

Цагаан тугалга (Sn) болон нүүрстөрөгчийн нано мяндсаар (CNF) хольцолсон шпинел $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ -ийн бүтэц, шинж чанарын судалгаа

Э.Уранбайгал¹, А.Мөнхбаатар^{1,2}, Л.Сарантуяа^{1,*}, Н.Цогбадрах^{2,**}, Г.Сэвжидсүрэн¹

¹ ШУА -ийн Физик Технологийн Хүрээлэн, Материал судлалын салбар

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

Энэхүү ажилд литийн ионы батарейн анодын материал болох шпинел $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ нэгдлийг цагаан тугалга (Sn) болон нүүрстөрөгчийн нано мяндас (carbon nanofiber) - аар хольцолж $\text{Li}_{3.9}\text{Sn}_{0.1}\text{Ti}_5\text{O}_{12}$, $\text{Li}_{3.9}\text{Sn}_{0.1}\text{Ti}_5\text{O}_{12}/\text{CNF}$ нэгдлүүдийг золь гелийн аргаар гарган авч, дээжүүдийн бүтэц, шинж чанарыг онол болон туршлагын аргуудаар судалсан үр дүнг харуулав. Дээжийн кристалл бүтцийн шинж чанарыг судлахад рентген дифракцийн арга (XRD), нил улаан туяаны спектроскоп (FTIR)-ийн аргуудыг ашиглав. Онолын загварчлалын QUANTUM ESPRESSO багц програмаар Нягтын функционалийн онол дээр суурилсан ab initio квант механикийн аргыг ашиглан кристалл бүтэц ба электрон бүтцийн тооцооллыг гүйцэтгэлээ. $\text{Li}_{3.9}\text{Sn}_{0.1}\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ -ийн төлөвийн нягтыг тооцоолоход хориотой бүсийн өргөн цэвэр $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ -тай харьцуулахад харьцангуй бага буюу $E_g=1.35$ эВ байгааг харууллаа.

Түлхүүр үгс: LTO, CNF, золь гелийн арга, НФО, PAW, GGA

ОРШИЛ

Шпинел $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ нь литийн ионы батарейн анодын материалаар ашиглахад нэн тохиромжтой нэгдэл бөгөөд сүүлийн жилүүдэд хамгийн эрчимтэй судлагдаж буй электродын материалуудын нэг юм. Өнөө үед зөөврийн цахилгаан хэрэгслүүд болон цахилгаан автомашины хэрэглээ ихэссэнтэй зэрэгцэн тэдгээрт ашиглагдах литийн ионы батарейн шинж чанарыг сайжруулах, энергийн багтаамжийг нь ихэсгэх шаардлага улам бүр нэмэгдэж байна. Анодын материалаар хамгийн өргөн хэрэглэгдэж буй графит (LiC_6) нь литийн интеркаляц явагдах үед 10%-ийн эзлэхүүний тэлэлт үзүүлдэг, мөн металл литийн атомууд үүсч электролит болон электродын хооронд үе үүссэнээр батарейн дотоод эсэргүүцэл ихэсгэдэг зэрэг сул талуудтай. Харин шпинел $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ нэгдлийн хувьд Li/Li^+ процессын 1.55В хүчдэл үүсгэдэг бөгөөд онолын багтаамж 175 мАц/г байдаг. Мөн литийн интеркаляц явагдах үед ердөө 0.1% -ийн кристалл торын эзлэхүүний тэлэлт үзүүлдэг [1]. Үүнээс гадна $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ нь термодинамикийн хувьд өндөр тогтвортой [2], батарейн системийн эсэргүүцлийг нэмэгдүүлж, цахилгаан цэнэгийн нягтралыг бууруулдаг электрод болон электролит хоорондын үе

үүсгэдэггүй давуу талуудтай. Харин $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ нь цахилгаан дамжууллын коэффициент багатай (10^{-8} - 10^{-13} См см⁻¹)[†], литийн ионы диффузийн коэффициент бага ($\sim 10^{-12}$ см² См⁻¹)[†] тул батарейн гаралтын чадал бага байдаг [3]. Эдгээр дутагдалтай талуудыг сайжруулахын тулд олон тооны туршилт болон онолын судалгаагаар $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ -ийг шилжилтийн металлуудаар хольцлох, дамжуулагч материалаар хольцлон нийлмэл нэгдэл гарган авах, бөөмийн хэмжээг багасгах зэрэг аргуудыг ашигласан байдаг [1]. Нүүрстөрөгчийн аллотропууд болох графен 10^8 См[†]/м, нүүрстөрөгчийн нано хоолой (CNT) 10^3 - 10^4 См/м [4] нүүрстөрөгчийн нано мяндас (CNF) 10^6 - 10^7 См/м [5] утга бүхий өндөр цахилгаан дамжуулалтай байдаг. Эдгээр нүүрстөрөгч агуулсан $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ -ийн нийлмэл нэгдлүүдэд нүүрстөрөгчид нь $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ -ийн кластеруудыг хооронд нь холбох гүүр болж, электрон шилжих замыг үүсгэснээр гаралтын чадал болон бүтцийн тогтвортой байдал нэмэгддэг [6]. Туршилтын аргаар $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ -ийг Cr^{3+} , Mn^{3+} , Ni^{3+} , Al^{3+} , Ga^{3+} зэрэг шилжилтийн металлуудаар хольцлосноор [7,8] цахилгаан дамжууллын чадварыг нэмэгдүүлсэн байдаг. Мөн Нягтын функционалийн онолыг ашиглан $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ -ийг Cr, Mg [9], Gd [10], W^{6+} , Br [11] зэрэг элементүүдээр хольцлон онолын тооцоо хийхэд

* Electronic address: saraa.ipt@gmail.com

** Tsogbadrakh@num.edu.mn

[†] См- Цахилгаан дамжууллын нэгж Сименс

цахилгаан дамжуулах шинж чанар сайжирч байсан үр дүн Liu, Zhang нарын ажлуудад хэвлэгдсэн байна. Бид энэхүү ажилд $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ -ийн цахилгаан дамжууллыг сайжруулах зорилгоор уг нэгдлийг цагаан тугалга (Sn) болон CNF-ээр хольцлон гарган авсан болно.

СУДАЛГААНЫ АРГА ЗҮЙ

Химийн синтезийн золь гелийн аргаар $\text{Li}_{3.9}\text{Sn}_{0.1}\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ болон $\text{Li}_{3.9}\text{Sn}_{0.1}\text{Ti}_5\text{O}_{12}/\text{CNF}$ нэгдлүүдийг гарган авч физик, химийн шинж шинж чанарыг багажит анализийн арга ашиглан судлан, мөн онолын загварчлал ашиглан уг нэгдлүүдийн электрон бүтцийн тооцооллыг гүйцэтгэлээ.

I. Туршилтын хэсэг:

$\text{Li}_{3.9}\text{Sn}_{0.1}\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ нэгдлийг гарган авах химийн синтез.

Литийн ацетат дигидрат ($\text{LiCH}_3\text{COO} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) -аас 0.831 гр, цагаан тугалгын хлорид дигидрат ($\text{SnCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) -ыг 0.055 гр авч, 50 мл этанолд уусган нэгэн төрлийн болтол соронзон хутгуураар хутгаад, уусмал дээр 3 мл титаны изопропоксид ($\text{Ti}(\text{OCH}(\text{CH}_3)_2)_4$)-ыг дусал дуслаар нэмж 10 минутын турш соронзон хутгуураар хутгана. Соронзон хутгуурын үйлчлэл дор уусмалыг 80°C хүртэл халаан, гель үүсгэнэ. Үүссэн гелийг хатаах зууханд 60°C -т 24 цагийн турш хатаана. Хатаасан дээжийг шаазан тигельд нунтагласны дараа шатаах зууханд 800°C -т азотын хийн орчинд 12 цаг шатааж, $\text{Li}_{3.9}\text{Sn}_{0.1}\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ нэгдлийг гарган авлаа [12].

$\text{Li}_{3.9}\text{Sn}_{0.1}\text{Ti}_5\text{O}_{12}/\text{CNF}$ нэгдлийг гарган авах химийн синтез

$\text{Li}_{3.9}\text{Sn}_{0.1}\text{Ti}_5\text{O}_{12}/\text{CNF}$ нийлмэл нэгдлийг гарган авах синтез нь $\text{Li}_{3.9}\text{Sn}_{0.1}\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ нэгдлийг гарган авсан дээрх синтезтэй ижил бөгөөд CNF-аар хольцолсон. Үүнд: 0.831 гр литийн ацетат дигидрат ($\text{LiCH}_3\text{COO} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) болон 0.055 гр цагаан тугалгын хлорид дигидрат ($\text{SnCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$)-ыг 50 мл этанолд уусган бэлтгэнэ. Дараа нь 10 мл этанолд 0.089 гр нунтаг нүүрстөрөгчийн нано мяндас (CNF)-ыг нэмэн хэт авиагаар 1 цаг үйлчлүүлэн, уусмалыг нэгэн төрөл болгоно. Уг уусмалд 3 мл титаны изопропоксид ($\text{Ti}(\text{OCH}(\text{CH}_3)_2)_4$) -ыг дусал дуслаар нэмнэ. Бэлтгэсэн уусмалуудыг хольж, 10 мин соронзон хутгуураар хутган, температурыг 80°C -д барьж гель үүсгэл хутгана. Үүссэн гелийг хатаах

зууханд 60°C -т 24 цагийн турш хатаав. Дээжийг нунтаглан, шатаах зууханд 800°C -т азотын хийн орчинд 12 цаг шатаана [13].

Гарган авсан дээжүүдийн бүтэц, шинж чанарын судалгаа

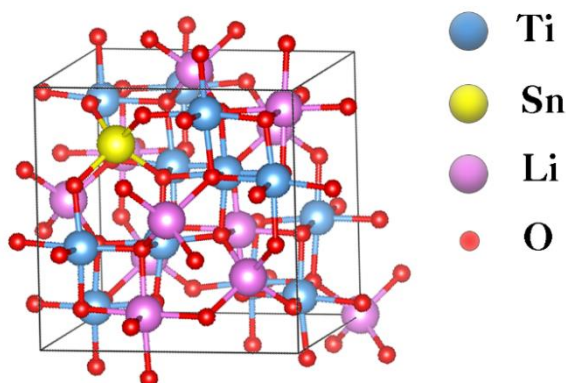
Бид гарган авсан дээжийн кристалл бүтцийн анализыг рентген дифракцийн аргаар $\text{CuK}\alpha$ ($\lambda=1.542 \text{ \AA}$) анод бүхий Shimadzu Maxima 7000 дифрактометр ашиглан 0.02° алхамаар $10^\circ - 90^\circ$ өнцгийн хязгаарт гүйцэтгэсэн. Дээжийн кристаллитын дундаж хэмжээг Шеррерийн тэгшитгэлээр тооцоолов. Shimadzu IR-Prestige21 фурье хувиргалттай хэт улаан туяаны спектрометр (FTIR)-ийг ашиглан гарган авсан дээжид агуулагдах функциональ бүлгүүдийг хэмжилтийн $400 - 4000 \text{ cm}^{-1}$ долгионы уртын завсарт тодорхойлов.

II. Онолын загварчлал

Нягтын функционалын онолд (НФО) тулгуурласан [14,15] QUANTUM ESPRESSO багц програм [16-18]-ын тусламжтай Projector Augmented Wave (PAW) ойролцооллыг ашиглан цагаан тугалга (Sn)-аар хольцолсон шпинел $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ -ын электрон бүтцийн тооцооллыг явуулав. Шпинел $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ нэгдэл нь [Li] 8a [$\text{Li}_{1/3}\text{Ti}_{5/3}$] 16d [O₄] 32e бүтэцтэй эгэл үүрэндээ нийт 56 атомыг агуулах бөгөөд Fd-3m огторгуйн бүлэгт харьяалагдана. Онолын загварыг боловсруулахдаа $\text{Li}_{3.9}\text{Sn}_{0.1}\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ -ийн стехиометрийн харьцааг хадгалсан бүтцийг байгуулахын тулд эгэл үүрийг 3 дахин авсан 168 атом бүхий супер торыг байгуулж тооцооллыг явуулах шаардлага гарсан. 168 атом агуулсан супер тор бүхий системийг бодоход хэт их цаг хугацаа шаардагдах учир бид $\text{Li}_{12}\text{Ti}_{12}\text{O}_{32}$ ($\text{Li}_{4.5}\text{Ti}_{4.5}\text{O}_{12}$) стехиометрийн харьцаа бүхий 56 атомтой эгэл торыг сонгосон юм.

Бидний ашигласан туршлагын арга болох Zhang., [13] нарын судалгааны ажилд Sn атомууд нь Li-ийн атомын байршил дээр суусаныг харуулсан бөгөөд энэ нь орлуулах төрлийн хольцлол юм. 1-р зурагт онолын тооцоонд ашигласан кристалл бүтцийг харуулсан бөгөөд энд 8a байршил дахь нэг Li атомыг Sn-ийн атомоор орлуулан $\text{Li}_{11}\text{Sn}_1\text{Ti}_{12}\text{O}_{32}$ бүтцийг загварчиллаа. Тооцоог гүйцэтгэхэдээ эхний алхамд туршлагын утгууд дээр бэхлэгдсэн торын параметруудийг ашиглаж тогтвортой төлөвийн тооцооллоор системийн үндсэн

төлөвийн энергийг бодуулж, дараачийн алхамд төлөвийн нягт, хориотой бүсийн өргөнийг тооцоолов.



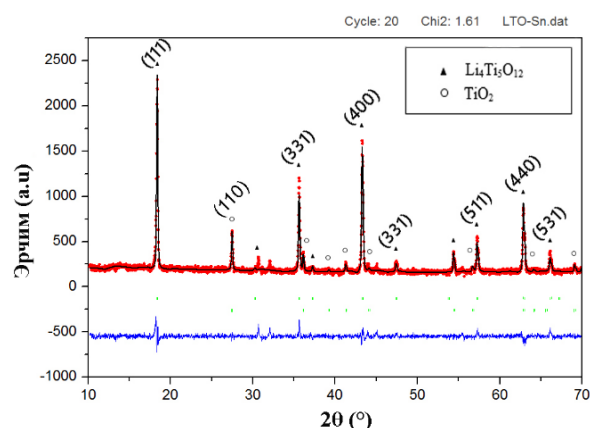
Зураг 1. Sn-аар хольцолсон шпинел $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ нэгдлийн эгэл үүрийн бүтэц.

Суурь материал $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ болон хольцлогч атом Sn-ийн $\text{Li}(1s^2 2s^1)$, $\text{Ti}(3s^2 3p^6 3d^2 4s^1)$, $\text{O}(2s^2 2p^4)$, $\text{Sn}(4d^{10} 5s^2 5p^2)$ валентын электронуудыг псевдопотенциалаар сонгон авч кристалл бүтцийн торын тогтмол болон атомуудын байршлыг зааж өгсөн. Тайралтын энергийг 40 Ry ба Monkhorst-Pack схемийг 56 атомтой системд $5 \times 5 \times 5$ байхаар сонгож авав [19]. Нягтын матрицийн нийлэлтийг тооцооллыг энергийн алдааны утга 10^{-6} -аас бага болоход зогсоохоор тохируулсан болно [20, 21].

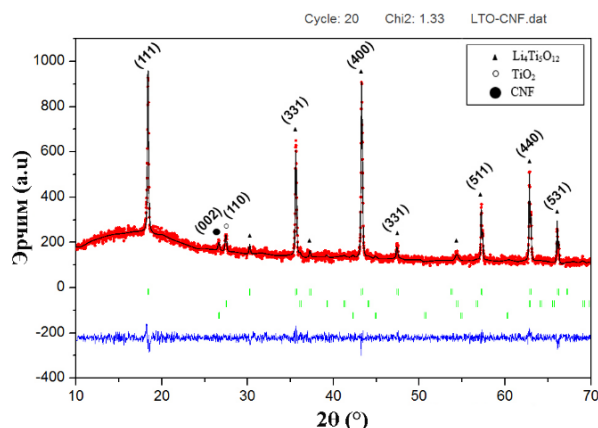
ҮР ДҮН БА ХЭЛЭЛЦҮҮЛЭГ

Гарган авсан дээжүүдийн кристалл бүтцийг рентген дифракцийн арга ашиглан тодорхойлоход $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ -96.7%, TiO_2 -3.27% тус тус агуулагдаж байв. Рентген дифракцийн анализийг бид FullProf Suite програм ашиглан Ритвельдийн аргаар боловсруулалт хийв. Энд гарган авсан хоёр дээж нь CNF агуулсан эсэхээс үл хамааран кристалл бүтцийн хувьд өөрчлөлт гараагүй. Тэдгээр нь Fd-3m огторгуйн бүлэгт харьяалагдах, куб хэлбэрийн кристалл тор бүхий, торын параметр $\text{Li}_{3.9}\text{Sn}_{0.1}\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ -ийн хувьд $a=b=c=8.357\text{\AA}$, $\text{Li}_{3.9}\text{Sn}_{0.1}\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ /CNF $a=b=c=8.358\text{\AA}$ гарсан нь бусад судалгааны үр дүнгүүдтэй тохирч байв [22]. 2-р зураг болон 3-р зургаас харахад бидний гарган авсан дээжүүдийн рентген диффрактограммд $2\theta = 18.4^\circ, 35.6^\circ, 43.3^\circ, 47.4^\circ, 57.2^\circ, 62.8^\circ, 66.1^\circ$ өнцгийн утгууд дээр өндөр цэвэршилт бүхий $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ -ийн пик илэрсэн байна. Мөн CNF агуулсан дээжийн хувьд $2\theta = 27^\circ$ утгад илэрсэн

нүүрстөрөгчийн пийк нь CNF нэгдэл агуулж байгааг илтгэж байна.



Зураг 2. $\text{Li}_{3.9}\text{Sn}_{0.1}\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ дээжийн рентген дифракцийн хэмжилтийн спектрийн Ритвельд боловсруулалт.



Зураг 3. $\text{Li}_{3.9}\text{Sn}_{0.1}\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ /CNF дээжийн рентген дифракцийн хэмжилтийн спектрийн Ритвельд боловсруулалт.

Гарган авсан $\text{Li}_{3.9}\text{Sn}_{0.1}\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ - ийн торын параметр $8.357\text{\AA}$ бөгөөд цэвэр $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ -ийн $8.352\text{\AA}$ [23] торын параметрийн утгаас их байна. Энэ нь цагаан тугалгын (Sn) атомын радиус нь лити (Li)-ийн атомын радиусаас их ($R_{\text{Sn}}=141\text{pm}$, $R_{\text{Li}}=134\text{pm}$) бөгөөд цагаан тугалгын (Sn) атом нь $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ нэгдэл дэх Li -ийн атомын байршилд суусантай холбоотойгоор торын параметр ихсэж байна гэж үзлээ.

Хүснэгт 1. Цэвэр $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ болон гарган авсан $\text{Li}_{3.9}\text{Sn}_{0.1}\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ $\text{Li}_{3.9}\text{Sn}_{0.1}\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ /CNF нэгдлүүдийн торын параметрийн харьцуулалт.

Торын параметр а (Å)	
Стандарт утга ($\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$)	8.352 [21]
$\text{Li}_{3.9}\text{Sn}_{0.1}\text{Ti}_5\text{O}_{12}$	8.357
$\text{Li}_{3.9}\text{Sn}_{0.1}\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ /CNF	8.358

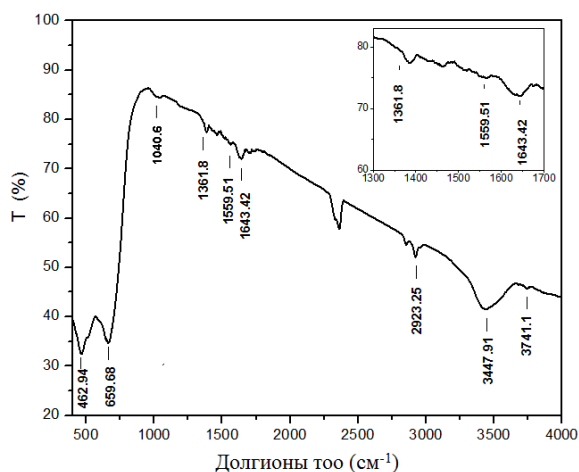
Рентген дифракцийн хэмжилтээс кристаллитын дундаж хэмжээг Шеррерийн тэгшитгэл ашиглан тооцоолоход $\text{Li}_{3.9}\text{Sn}_{0.1}\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ /CNF агуулсан дээжийн кристаллитын хэмжээ 39.97 nm буюу

CNF агуулаагүй дээжээс 1.37 нм-ээр их хэмжээтэй байсан нь (Хүснэгт 3) нарийн мяндас хэлбэр бүхий CNF агуулсантай холбоотой.

Хүснэгт 3. Гарган авсан дээж тус бүрийн кристаллитын хэмжээ.

Дээж	Кристаллитын хэмжээ D (nm)
$\text{Li}_{3.9}\text{Sn}_{0.1}\text{Ti}_5\text{O}_{12}$	38.604
$\text{Li}_{3.9}\text{Sn}_{0.1}\text{Ti}_5\text{O}_{12}/\text{CNF}$	39.972

$\text{Li}_{3.9}\text{Sn}_{0.1}\text{Ti}_5\text{O}_{12}/\text{CNF}$ дээжийн FTIR спектрт 659.68 cm^{-1} , 462.94 cm^{-1} шингээлтийн завсаруудад илэрсэн пикүүд нь $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ нэгдлийн бүтэц дэх TiO_6 октаэдрүүдийн тэгш болон тэгш бус хэмыг харуулах бөгөөд шпинел $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ үүссэнийг харуулна [24]. 2926.25 cm^{-1} дээрх пик нь TiO_2 фазад харгалзана [25]. 1643.42 cm^{-1} нь хүчтэй C=C холбоог, 1559.51 cm^{-1} нь C-C холбоонд харгалзана [26]. Мөн 1040.6 cm^{-1} утга дахь пик нь $\text{Li}_{3.9}\text{Sn}_{0.1}\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ нэгдэл дахь Sn-O холбоонд харгалзана [27]. 4-р зурагт харуулсан нил улаан туяаны шингээлтийн спектрийн 1643.42 cm^{-1} , 1559.51 cm^{-1} , 1361.8 cm^{-1} утгууд нь CNF-д харгалзах пикүүд болно. Эндээс гарган авсан дээж нь шпинел $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$, TiO_2 титаны оксид болон CNF нэгдлүүд агуулж байгааг харуулж байна.

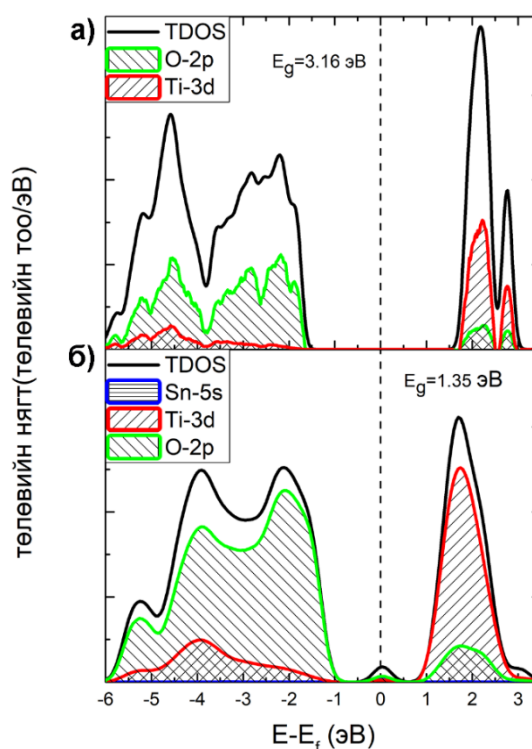


Зураг 4. $\text{Li}_{3.9}\text{Sn}_{0.1}\text{Ti}_5\text{O}_{12}/\text{CNF}$ дээжийн FTIR хэмжилтийн спектр.

Онолын загварчлалын үр дүн

Sn-ээр хольцлосон $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ -ийн төлөвийн нягт ба хориотой бүсийн өргөнийг ерөнхий градиент ойролцооллын (GGA) аргаар тооцоолоход хориотой бүсийн өргөн $E_g=1.35$ эВ гарсан (зураг 5Б). Энэ нь цэвэр $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ -ийн хориотой бүсийн утга ($E_g=3.16$ эВ)-аас [28] багассан

байгаа нь Sn хольцын нөлөөгөөр цахилгаан дамжуулал сайжирч байгааг илтгэж байна. Хориотой бүс нь электроноор дүүргэгдээгүй Ti-3d орбитал болон дүүргэгдсэн O-2p орбиталд харгалзах энергийн утгуудын завсар үүсч байна. Sn-ээр хольцлосон $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ -ийн болон $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ -ийн төлөвийн нягтын энергээс хамаарах хамаарлыг зураг 5-д үзүүлэв. Төлөвийн нягтын графикаас харахад Ферми энергийн түвшинг дайран хольцын шинэ түвшин (impurity level) үүссэн нь Sn-ийн пик гэж үзэж байна. Учир нь энэ түвшин нь Sn-ий 5s орбиталын төлөв дээр проекцолсон төлөвийн нягттай таарч байв (Зураг 5Б).



Зураг 5. А) Цэвэр LTO-ийн нийт төлвийн нягт [20] болон Б) Sn-аар хольцлосон LTO-ийн төлөвийн нягтыг энергиэс хамааруулсан графикуудыг тус тус харуулав. Үүнд нийт төлвийн нягтыг хар өнгөөр, Ti-3d орбиталыг ногоон өнгөөр, O-2p орбиталыг улаан өнгөөр, Sn-5s орбиталыг цэнхэр өнгөөр дүрслэв. Ферми түвшинг тасархай зураасаар харуулав.

ДҮГНЭЛТ

Литийн ионы батареин анодын материал болох шпинел $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ -ийг цагаан тугалга (Sn)-аар болон нүүрстөрөгчийн нано мяндас (CNF)-ээр хольцлон нийлмэл материал хэлбэрээр гарган авч бүтэц болон шинж чанарыг судаллаа. Рентген дифракц болон нил улаан туяаны шингээлтийн анализын үр дүнгээс харахад цэвэршилт сайн байв. Мөн НФО-г ашиглан

электрон бүтцийн тооцоог гүйцэтгэхэд $\text{Li}_{3.9}\text{Sn}_{0.1}\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ бүтцийн хориотой бүсийн өргөн 1.35 эВ буюу цэвэр $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ -ийн бүсийн өргөнөөс 1.81 эВ-ээр бага утгатай гарсан нь шпинел $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ -ийг Sn-аар хольцолсоноор уг материалын цахилгаан дамжуулах чадварыг ихэсгэх боломжтойг харуулж байна.

ТАЛАРХАЛ

Уг тооцоог гүйцэтгэхэд боломж олгосон ШУА – ийн Математик, Тоон Технологийн хүрээлэнгийн Параллель тооцооллын төвд талархал илэрхийлье.

АШИГЛАСАН МАТЕРИАЛ

- [1] Nasara, R.N., Lin, Sk. Recent Developments in Using Computational Materials Design for High-Performance $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ Anode Material for Lithium-Ion Batteries. *Multiscale Sci. Eng.* 1, 87–107 (2019).
- [2] TF Yi, Y Xie, YR Zhu, RS Zhu, H Shen. Structural and thermodynamic stability of $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ anode material for lithium-ion battery. *Journal of Power Sources*, (2013).
- [3] Zhao, Bote., Ran, Ran., Liu, Meilin., Shao, Zongping. A comprehensive review of $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ -based electrodes for lithium-ion batteries: The latest advancements and future perspectives. *Materials Science and Engineering R* 98, (2015).
- [4] Wang, Y., & Weng, G. J. Electrical Conductivity of Carbon Nanotube- and Graphene-Based Nanocomposites. *Micromechanics and Nanomechanics of Composite Solids*, (2017).
- [5] Sharma, Chandra S., Katepalli, Hari., Sharma, Ashutosh., Madou, Marc. Fabrication and electrical conductivity of suspended carbon nanofiber arrays, (2011).
- [6] Choi, JH., Ryu, WH., Park, K. et al. Multi-layer electrode with nano- $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ aggregates sandwiched between carbon nanotube and graphene networks for high power Li-ion batteries. *Sci Rep* 4, 7334 (2014).
- [7] Hao, YJ., Lai, QY., Lu, JZ. et al. Effects of dopant on the electrochemical properties of $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ anode materials. *Ionics* 13, 369–373 (2007).
- [8] S. Huang, Z. Wen, X. Zhu, Z. Lin, Effects of dopant on the electrochemical performance of $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ as electrode material for lithium-ion batteries. *J. Power Sources* 165, 408–412 (2007).
- [9] D. Liu, C. Ouyang, J. Shu, J. Jiang, Z. Wang, L. Chen, Theoretical study of cation doping effect on the electronic conductivity of $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$. *Phys. Status Solidi b* 243, 1835–1841 (2006).
- [10] Q. Zhang, M.G. Verde, J.K. Seo, X. Li, Y.S. Meng, Structural and electrochemical properties of Gd-doped $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ as anode material with improved rate capability for lithium-ion batteries. *J. Power Sources* 280, 355–362 (2015).
- [11] Q. Zhang, H. Lu, H. Zhong, X. Yan, C. Ouyang, L. Zhang, W^{6+} & Br^- codoped $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ anode with super rate performance for Li-ion batteries. *J. Mater. Chem. A* 3, 13706–13716 (2015).
- [12] Zhang, Biao., Huang, Zhen-Dong., Sei Woon, Oh., Jang-Kyo Kim. Improved rate capability of carbon coated $\text{Li}_{3.9}\text{Sn}_{0.1}\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ porous electrodes for Li-ion batteries. *Journal of Power Sources*, (2011).
- [13] Zhang, Biao., Liu, Yusi., Huang, Zhendong., Oh, Seiwoon., Yu, Yang., Mai, Yiu-Wing., Kim, Jang-Kyo. Urchin-like $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ -carbon nanofiber composites for high rate performance anodes in Li-ion batteries. *J. Mater. Chem.*, (2012).
- [14] W. Kohn, L. J. Sham. Self-Consistent equations including exchange and correlation effects, *Physical Review* 140 (1965) A1133-1138.
- [15] P. Hohenberg, W. Kohn, Inhomogeneous Electron Gas, *Physical Review* 136 (1964) B864-871.
- [16] P. Gianmazzi, S. Baroni, N. Bonini, M. Calandra, R. Car, C. Cavazzoni, D. Ceresoli, G. L. Chiarotti, M. Cococcioni, I. Dabo, A. D. Corso, S. de Gironcoli, S. Fabris, G. Fratesi, R. Gebauer, U. Gerstmann, C. Gougoussis, A. Kokalj, M. Lazzeri, L. Martin-Samos, N. Marzari, F. Mauri, R. Mazzarello, S. Paolini, A. Pasquarello, L. Paulatto, C. Sbraccia, S. Scandolo, G. Sclauzero, A. P. Seitsonen, A. Smogunov, P. Umari R. M. Wentzcovich,

- QUANTUM ESPRESSO: A modular and open-source software project for quantum simulations of materials, *J. Phys.: Condens. Matter.* 21 (2009) 395502.
- [17] P. Giannozzi, O. Andreussi, T. Brumme, O. Bunau, M. Buongiorno Nardelli, M. Calandra, R. Car, C. Cavazzoni, D. Ceresoli, M. Cococcioni, N. Colonna, I. Carnimeo, A. D. Corso, S. de Gironcoli, P. Delugas, R. A. DiStasio Jr, A. Ferretti, A. Floris, G. Fratesi, G. Fugallo, R. Gebauer, U. Gerstmann, F. Giustino, T. Gorni, J. Jia, M. Kawamura, H. -Y. Ko, A. Kokalj, E. Kucukbenli, M. Lazzeri, M. Marsili, N. Marzari, F. Mauri, N. L. Nguyen, H. -V. Nguyen, A. Otero-de-la-Roza, L. Paulatto, S. Ponce, D. Rocca, R. Sabatini, B. Santra, M. Schlipf, A. P. Seitsonen, A. Smogunov, I. Timrov, T. Thonhauser, P. Umari, N. Vast, X. Wu, S. Baroni, *Advanced Capabilities for Materials Modelling with QUANTUM ESPRESSO*, *J. Phys.: Condens. Matter.* 29 (2017) 465901.
- [18] P. Giannozzi, O. Baseggio, P. Bonfa, D. Brunato, R. Car, I. Carnimeo, C. Cavazzoni, S. de Gironcoli, P. Delugas, F. F. Ruffino, A. Ferretti, N. Marzari, I. Timrov, A. Urru, S. Baron, *QUANTUM ESPRESSO toward the exascale*, *J. Chem. Phys.* 152 (2020) 154105.
- [19] H. J. Monkhorst, J. D. Pack, Special points for brillouin-zone integrations, *Physical Review B* 13 (1976) 5188-5192.
- [20] P. Giannozzi et al. *Journal of Physics: Condensed matter.* (2009)
- [21] P. Giannozzi et al. *J. Chem. Phys.* **152**, 154105 (2020)
- [22] Mahmoud, Abdelfattah., Amarilla, José Manuel., Lasri, Karima., Saadoun, Ismael. Influence of the synthesis method on the electrochemical properties of the $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ spinel in Li-half and Li-ion full-cells. A systematic comparison. *Electrochimica Acta*, (2013).
- [23] Y. Takahashi, K. Kataoka, K. Ohshima, N. Kijima, J. Awaka, K. Kawaguchi, J. Akimoto. *J. Solid State Chem*, (2007).
- [24] Zhou, Jin Hong. Characterization of surface oxygen complexes on carbon nanofibers by TPD, XPS and FT-IR. *Carbon*, (2007).
- [25] Erdem, Bedri., Hunsicker, Robert., Simmons, Gary., Sudol, David., Dimonie, Victoria., El-Aasser, Mohamed. XPS and FTIR Surface Characterization of TiO_2 Particles Used in Polymer Encapsulation *Langmuir*, (2001).
- [26] Li, Juan. Microwave solid-state synthesis of spinel $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ nanocrystallites as anode material for lithium-ion batteries. *Solid State Ionics*, (2007).
- [27] Ritu, Malik., Tomer, Vijay., Duhan, Surender., Nehra, S.P., Rana, Pawan. One-pot hydrothermal synthesis of porous SnO_2 nanostructures for Photocatalytic degradation of organic pollutants. *American Scientific Publishers*, (2015)
- [28] Sarantuya Lkhagvajav, Namsrai Tsogbadrakh, Enkhjargal Enkhbayar, Sevjidsuren Galsan, Pagvajav Altantsog. Structural and electronic properties of the spinel $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$. *Mong. J. Chem*, (2019).

Альфа-протон системийн фазын шилжилтийг комплекс хувиргалтын арга ашиглан тодорхойлсон нь

А.Золбаяр^{1*}, Г.Хүүхэнхүү¹, С.Даваа¹, А. Сарсембаева³, Н. Амангелди⁴, М. Одсүрэн^{1,2}

¹ Цөмийн Физик Судалгааны төв, МУИС, Улаанбаатар, Монгол Улс

² Хэрэглээний Шинжлэх Ухаан Инженерчлэлийн Их сургууль, МУИС, Улаанбаатар, Монгол Улс

³ Аль-Фарабийн нэрэмжит Казахстанын Үндэсний Их Сургууль, Алмата, Казахстан Улс

⁴ Гумилёвийн нэрэмжит Евро-Азийн Үндэсний Их Сургууль, Астана, Казахстан Улс

⁵Li цөмийг $\alpha + p$ хоёр кластераас тогтсон систем гэж загварчлан, комплекс хувиргалтын аргаар бага өдөөгдсөн $J^\pi = 1/2^-$ ба $3/2^-$ үндсэн төлөвүүдийн сарнилын фазын шилжилтийг тодорхойлов.

ОРШИЛ

Энэхүү судалгаагаар ⁵Li цөмийг $\alpha + p$ хоёр кластераас тогтсон систем [1] гэж загварчлан, өмнөх ажлын хүрээнд хийсэн $J^\pi = 3/2^-$ үндсэн төлөв ба бага өдөөгдсөн $J^\pi = 1/2^-$ төлөвүүдийн резонанс энерги болон түүнд харгалзах түвшний өргөнийг тооцоолон гарган авсан үр дүнг [2] ашиглан сарнилын фазын шилжилтийг тодорхойлов. ⁵Li системийн сарнилын фазын шилжилтийн аналитик томъёог гарган, уг томъёогоор онолын тооцоолол хийх кодыг фортран программчлалын хэл ашиглан бичин тооцооллыг гүйцэтгэв. Бидний гарган авсан аналитик томъёо нь резонанс энергийн утга болон тасралтгүй төлөвийн утгуудыг тус тусад нь тооцоолох боломж олгоно. Ингэснээр резонанс болон тасралтгүй төлөвүүдийн фазын шилжилтэд өгөх нөлөөллийг тогтооно.

Мөн онолоор тооцоолсон үр дүнг бусад эрдэмтдийн туршлагаар хэмжсэн утгуудтай харьцуулж, нэг энергийн төлөвт олдож байгаа резонанс энерги нь ойр орших бусад төлөврүү сарниж байгаа эсэх талаар судалж, тасралтгүй төлөвүүдийн сарнилын физик хэмжигдэхүүнүүдэд үзүүлэх хувь нэмрийг ⁵Li цөмийн үндсэн болон бага өдөөгдсөн төлөвүүдэд тооцоолов.

АЛЬФА-ПРОТОН КЛАСТЕРИЙН СИСТЕМ БА КОМПЛЕКС ХУВИРГАЛТЫН АРГА

Судалгаанд хэрэглэгдэх үндсэн арга нь комплекс хувиргалтын арга (КХА) юм. Энэ аргыг 1971 онд Ж.Агулиар, Ж.Комбес, Э.Балслев [3,4] нар анх санааг гаргаж математикт оруулж ирсэн ба тус аргыг Б.Симон

өргөжүүлж цөмийн физикийн судалгаанд ашигласан [5]. КХА-аар Шредингерийн тэгшитгэлд хувиргалт хийвэл:

$$H^\theta \Psi^\theta = E^\theta \Psi^\theta \quad (1)$$

болно.

Хоёр кластераас тогтсон системийн хувьд Гамильтонианыг дараах хэлбэртэй бичье:

$$\hat{H} = T + V_{\alpha p}^{Nucl} + V_{\alpha p}^{Coul}. \quad (2)$$

Харин системийн долгион функц (Ψ)-ийг

$$\Psi = \sum_{n=1} c_n u_n, \quad (3)$$

байх ба энд u_n суурь функцээр Гауссын суурь функцийг сонгон авсан:

$$u_i = r^l e^{-\frac{1}{2b_i^2} r^2} \quad (4)$$

ФАЗЫН ШИЛЖИЛТ

Тасралтгүй төлөвийн нягтыг:

$$\Delta(E) = \rho(E) - \rho_0(E), \quad (5)$$

гэж илэрхийлэх ба Грийний функцийг ашиглавал:

$$\Delta(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}\{\text{Tr}[G(E) - G_0(E)]\} \quad (6)$$

болно.

Тасралтгүй төлөвийн нягтыг фазын шилжилтээр илэрхийлбэл:

$$\Delta(E) = \frac{1}{\pi} \frac{d\delta(E)}{dE} \quad (7)$$

болно.

(6) илэрхийллийг дэлгэрэнгүй байдлаар бичвэл:

* Electronic address: zolo.011263@gmail.com

$$\Delta(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left\{ \text{Tr} \left[\frac{1}{E-H} - \frac{1}{E-H^0} \right] \right\} \quad (8)$$

H -цөмийн харилцан үйлчлэлийг тооцсон системийн Гамильтониан харин H^0 -харилцан үйлчлэлгүй системийн Гамильтониан ба системийн чөлөөт Гамильтониан гэж нэрлэгддэг. (8) илэрхийллийг тооцоологдсон хувийн утгуудаар илэрхийлэн (7)-д орлуулан бичвэл

$$\delta(E) = -\text{Im} \int \left| \frac{1}{E-E_r+i\Gamma_r/2} + \frac{1}{E-E_c+iE_c} - \frac{1}{E-E_k^0+iE_k^0} \right| dE, \quad (9)$$

болох ба илэрхийллийн интегралыг авбал [6]

$$\delta(E) = \tan^{-1} \left(\frac{E-E_r}{\Gamma_r/2} \right) - \tan^{-1} \left(\frac{E-E_c}{E_c} \right) + \tan^{-1} \left(\frac{E-E_k^0}{E_k^0} \right) \quad (10)$$

болно. Фазын шилжилтийн илэрхийлэл дэх r , c болон k индексүүд харгалзан резонансын энерги, тасралтгүй төлөвүүд болон чөлөөт Гамильтонианы сарнилын фазын шилжилтийн өгөх нөлөөллийг харуулах ба тус бүр дараах хэлбэртэй

$$\tan \delta_r = \frac{E-E_r}{\Gamma_r/2},$$

$$\tan \delta_c = \frac{E-E_c}{E_c},$$

$$\tan \delta_k = \frac{E-E_k^0}{E_k^0},$$

бичигдэнэ.

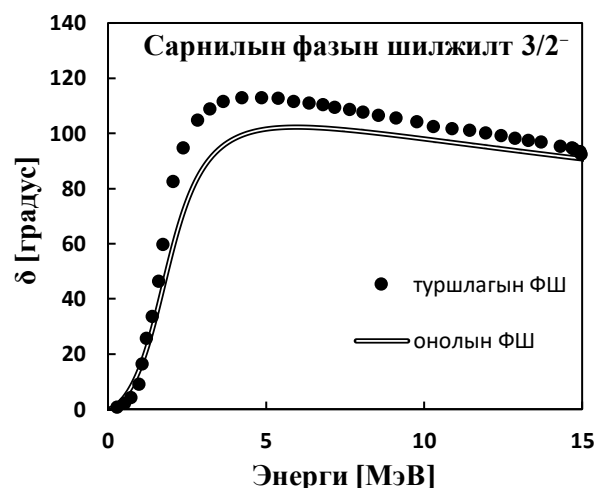
ҮР ДҮН

^5Li цөмийн үндсэн $3/2^-$ төлөвийн резонанс энерги $E_r = 0.74$ МэВ түүнд харгалзах түвшний өргөн $\Gamma_r = 0.59$ МэВ, бага өдөөгдсөн $1/2^-$ төлөвийн резонанс энерги $E_r = 2.12$ МэВ түүнд харгалзах түвшний өргөн $\Gamma_r = 5.82$ МэВ гэж бидний өмнөх ажилд [2] олдсон. Өмнөх судалгаагаар гарган авсан үр дүнгийн тусламжтайгаар (10) томъёог ашиглан фазын шилжилтийг онолоор бодож, туршлагаар хэмжигдсэн утгуудтай харьцуулан анализ хийв. Судалгааны үр дүнд гарган авсан резонанс энерги нь фазын шилжилтэд хамгийн их нөлөө үзүүлдэг болох нь 2 болон 7-р зургаас харагдаж байна. Сарнилын фазын шилжилтийг тооцоолоход тасралтгүй төлөвүүдийн хувь нэмрийг орхигдуулж болохгүй бөгөөд

тэдгээрийн нөлөөллийг тодруулахын тулд резонанс энергитэй ойр болон хол орших төлөвүүд сарнилын фазын шилжилтэд хэрхэн нөлөөлж байгааг 3-5 болон 8-11-р зургуудад үзүүлэв. Резонанс энергийн ойр орших тасралтгүй төлөвүүдээс сарнилын фазын шилжилтэд өгөх хувь өндөр байгаа бөгөөд эндээс резонанс энергийн төлөв ойр орших төлөвүүд рүүгээ сарнидаг болох нь тогтоогдож байна. Сарнилын фазын шилжилтэд өгөх резонанс энерги болон тасралтгүй төлөвүүдийн хувь нэмрийг нэг бүрчлэн нарийн тооцоолж чадаж байгаа нь бидний боловсруулсан аналитик томъёоны давуу талыг харуулав.

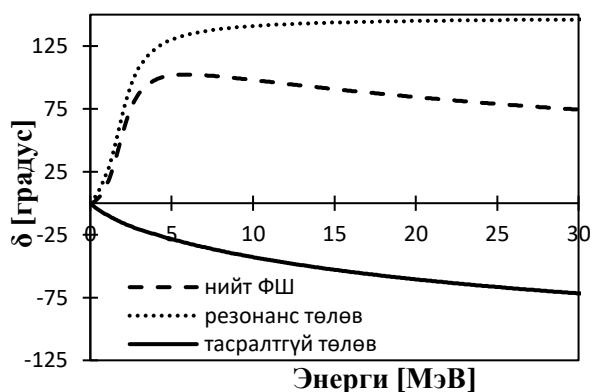
$J^\pi = 3/2^-$ төлөвийн фазын шилжилт

^5Li цөмийн үндсэн $3/2^-$ төлөвийн сарнилын фазын шилжилтийг (10) томъёог ашиглан тооцоолно. Онолоор тооцоологдсон сарнилын фазын шилжилтийг хар муруйгаар, туршлагаар хэмжигдсэн утгуудыг хар цэгүүдээр дүрслэн Зураг 1-т үзүүлэв. Онолоор тооцоолсон болон туршлагаар хэмжигдсэн сарнилын фазын шилжилтийн утгууд 4-6 МэВ энергийн мужид ялимгүй зөрж байна. Харин бага болоод өндөр энергийн мужид онол болоод туршлагаар хэмжигдсэн утгуудын тохироо сайн байна. Энэ нь бидний сонгосон онолын тооцооллын аргазүй энэ талын судалгаанд тохиромжтойг харуулж байна.



Зураг 1. $J^\pi = 3/2^-$ үндсэн төлөвийн сарнилын фазын шилжилтийн онолоор тооцоолсон үр дүн, туршлагаар [7,8] хэмжигдсэн утгуудын харьцуулалт. Бөөрөнхий хар цэгүүдээр туршлагаар хэмжигдсэн утгуудыг дүрсэлсэн бол тасралтгүй муруйгаар онолоор тооцоологдсон сарнилын фазын шилжилтийг харуулав.

Зураг 2-т резонансын энерги болон тасралтгүй төлөвүүдийн сарнилын фазын шилжилтэд өгөх нөлөөллийг тус тусад нь тооцоолж харуулав.

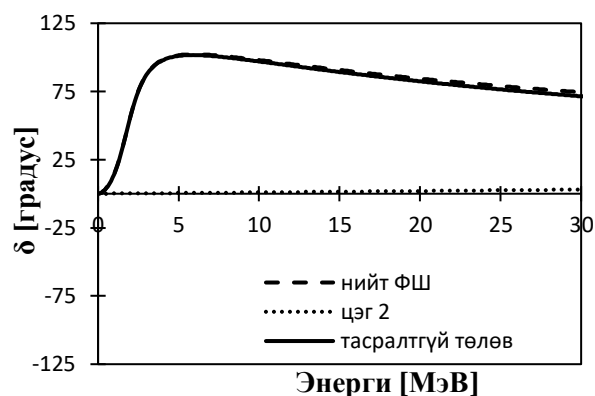


Зураг 2. $3/2^-$ төлөвийн сарнилын фазын шилжилтэд резонанс болон тасралтгүй төлөвүүдийн өгөх нөлөөлөл. Цэгэн муруйгаар резонанс энергиэр тооцоологдсон резонанс энергийн (11-р төлөв) сарнилын фазын шилжилтэд өгөх нөлөөллийг, тасралтгүй хар зураасаар тасралтгүй төлөвүүдийн сарнилын фазын шилжилтэд өгөх нөлөөллийг дүрслэв.

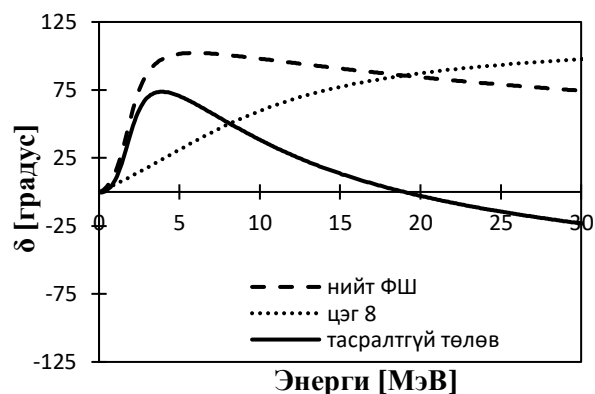
Зураг 2-г сарнилын фазын шилжилтийг тасралттай зураасаар (Зураг 1 дэх онолын муруй), цэгэн муруйгаар ^5Li цөмийн $3/2^-$ төлөвт олдсон резонанс энергиэр ($E_r = 0.74$ МэВ энерги түүнд харгалзах түвшний өргөн $\Gamma_r = 0.59$ МэВ) тооцоологдсон резонанс энергийн сарнилын фазын шилжилтэд өгөх нөлөөллийг, үргэлжилсэн хар зураасаар тасралтгүй төлөвүүдийн сарнилын фазын шилжилтэд өгөх нөлөөллийг дүрслэв. Зураг 2-оос харахад, нэг талаас, цэгэн муруйгаар дүрслэгдсэн резонанс энергиэр илэрхийлэгдэх резонансийн фазын шилжилт өндөр далайцтай, 180 градус хүрч сарнилын фазын шилжилтэд зонхилох нөлөөллийг үзүүлдэг болох нь харагдаж байна. Нөгөө талаас, тасралтгүй төлөвүүдийн сарнилын фазын шилжилтэд өгөх нөлөөллийг хэт бага гээд тооцохгүй орхиж болохгүй нь харагдаж байна. Зураг 3-5-д харуулсан үр дүнд анализ хийхэд резонанс төлөвөөс хол орших төлөвийн хувьд сарнилын фазын шилжилтэд өгөх нөлөөлөл маш бага (Зураг 3 дахь цэгэн муруй) харин резонанс төлөвтэй ойр эсхүл дэргэд байрлах төлөвийн сарнилын фазын шилжилтэд өгөх нөлөөлөл их байгаа нь харагдаж байна.

Ялангуяа Зураг 4-с харахад цэгэн муруйгаар дүрслэгдсэн резонанс төлөвийн өмнө нь байрлах түүнтэй ойр орших 8-р төлөвөөс бага энергийн буюу 10 МэВ хүртэлх энергийн мужид сарнилын фазын шилжилтэд өгөх нөлөөлөл аажмаар өсч

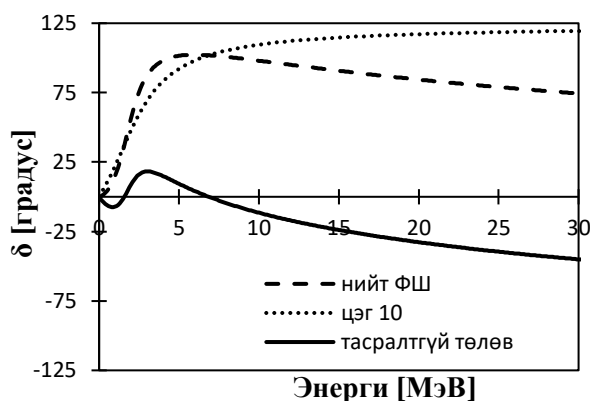
байгаад өндөр энергийн мужид тогтворжиж, харьцангуй өндөр нөлөөлөлтэй байгаа нь тогтоогдов. Мөн Зураг 5-д анализ хийвэл цэгэн муруйгаар дүрслэгдсэн резонанс төлөвийн зэргэлдээ буюу хамгийн ойр байрлах 10-р төлөвөөс сарнилын фазын шилжилтэд өгөх нөлөөлөл бага энергийн мужид огцом өсч, харьцангуй өндөр байгаа нь тогтоогдов. Резонанс төлөвийн ойр болон хажууд байрлах 8 ба 10-р төлөвөөс сарнилын фазын шилжилтэд өгөх нөлөөллийг их байгааг тогтоосон ч тэдгээрийн үзүүлэх нөлөөлөл (фазын шилжилтийн далайц) резонанс төлөвийн сарнилын фазын шилжилтэд өгөх нөлөөлөлтэй харьцуулшгүй болно.



Зураг 3. Тасралтгүй төлөвүүдийн фазын шилжилтэд өгөх нөлөөллийг резонанс төлөвөөс хол орших тасралтгүй төлөвийн нэг цэгээр төлөөлөл болгон авч тооцоолсон үр дүн. Тасралттай зураасан муруйгаар сарнилын фазын шилжилт, тасралтгүй муруйгаар резонанс болон бусад төлөвүүдийн фазын шилжилтэд өгөх нөлөөллийг харуулав. Цэгэн муруйгаар резонанс төлөвөөс хол байрлах 2-р төлөвөөс сарнилын фазын шилжилтэд өгөх нөлөөллийг дүрслэв.



Зураг 4. Тасралтгүй төлөвүүдийн фазын шилжилтэд өгөх нөлөөллийг резонанс төлөвийн өмнө орших нэг цэгээр төлөөлөл болгон авч тооцоолсон үр дүн. Тасралттай муруйгаар сарнилын, тасралтгүй муруйгаар резонансийн төлөвийг оруулан тооцсон бусад төлөвүүдийн фазын шилжилтэд өгөх нөлөөллийг тус тус дүрслэв. Цэгэн муруйгаар резонанс төлөвийн өмнө байрлах түүнтэй ойр орших 8-р төлөвөөс сарнилын фазын шилжилтэд өгөх нөлөөллийг тооцоолов.

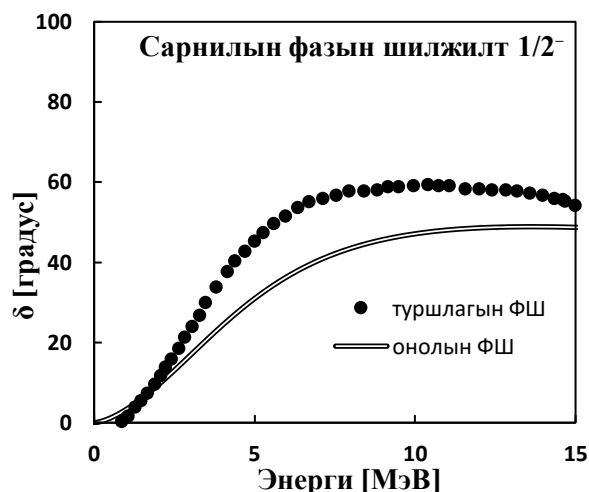


Зураг 5. Тасралтгүй төлөвүүдийн фазын шилжилтэд өгөх нөлөөллийг резонанс төлөвийн хажууд орших тасралтгүй төлөвийн нэг цэгээр төлөөлөл болгон авч тооцоолсон үр дүн. Тасралттай муруйгаар сарнилын, тасралтгүй муруйгаар резонансийн төлөвийг оруулан тооцсон бусад төлөвүүдийн фазын шилжилтэд өгөх нөлөөллийг тус тус дүрслэв. Цэгэн муруйгаар резонанс төлөвийн өмнө буюу дэргэд орших 10-р төлөвөөс сарнилын фазын шилжилтэд өгөх нөлөөллийг тооцоолов.

Резонанс төлөвийн дэргэд болон ойр орших төлөвүүдийн сарнилын фазын шилжилтэд өгөх нөлөөлөл өндөр байгааг тогтоосноор резонанс төлөв ойр болон зэргэлдээ орших төлөвүүд рүүгээ сарнидаг болох нь харагдаж байна. Харин резонанс төлөвөөс хол орших төлөвүүдийн сарнилын фазын шилжилтэд өгөх нөлөөлөл маш бага хэдий ч тэдгээрийн нөлөөг тооцохгүй орхигдуулж болохгүй.

$J^\pi = 1/2^-$ төлөв

^5Li цөмийн бага өгөөгдсөн $1/2^-$ төлөвийн сарнилын фазын шилжилтийг (10) томъёог ашиглан тооцоолно.

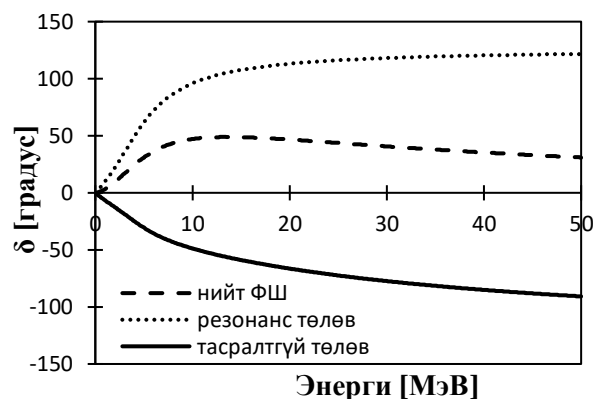


Зураг 6. $J^\pi = 1/2^-$ төлөвийн онолоор тооцоолсон сарнилын фазын шилжилт, туршлагын [7,8] утгуудын харьцуулалт. Бөөрөнхий хар цэгүүдээр туршлагаар хэмжигдсэн утгуудыг дүрсэлсэн бол муруйгаар онолоор тооцоологдсон сарнилын фазын шилжилтийг харуулав.

Онолоор тооцоологдсон үр дүнг хар муруйгаар, туршлагын утгуудыг хар цэгүүдээр дүрслэн

Зураг 6-д үзүүлэв. Онолоор тооцоолсон болон туршлагаар хэмжигдсэн сарнилын фазын шилжилтийн утгууд 4 МэВ хүртэлх бага энергийн мужид таарч байгаад их энергийн мужид зөрүүтэй болж байна.

Зураг 7-т резонансын энерги болон тасралтгүй төлөвүүдийн сарнилын фазын шилжилтэд өгөх нөлөөллийг тус тусад нь тооцоолж харуулав.

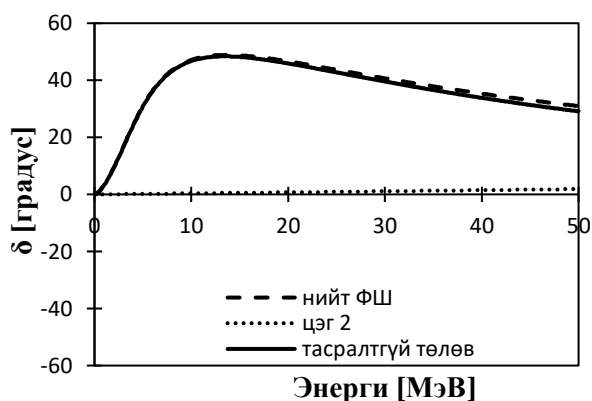


Зураг 7. $1/2^-$ төлөвийн сарнилын фазын шилжилтэд резонанс болон тасралтгүй төлөвүүдийн өгөх нөлөөлөл. Цэгэн муруйгаар резонанс энергиэр тооцоологдсон резонанс энергийн (15-р төлөв) сарнилын фазын шилжилтэд өгөх нөлөөллийг, тасралтгүй хар зураасаар тасралтгүй төлөвүүдийн сарнилын фазын шилжилтэд өгөх нөлөөллийг дүрслэв.

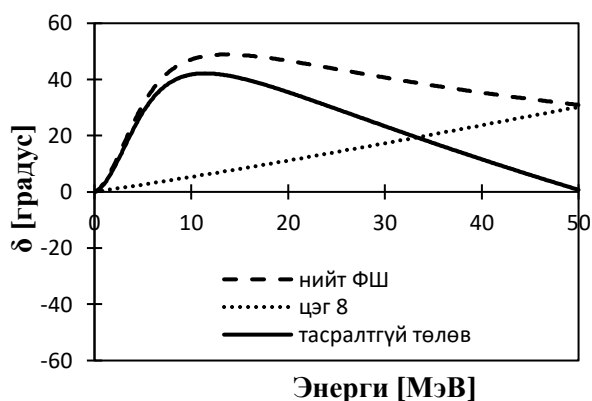
Зураг 7-д сарнилын фазын шилжилтийг тасралттай зураасаар (Зураг 6 дахь онолын муруй), цэгэн муруйгаар ^5Li цөмийн $1/2^-$ төлөвт олдсон резонанс ($E_r = 2.12$ МэВ, $\Gamma_r = 5.82$ МэВ) энергиэр тооцоологдсон резонанс энергийн сарнилын фазын шилжилтэд өгөх нөлөөллийг, үргэлжилсэн муруйгаар тасралтгүй төлөвүүдийн сарнилын фазын шилжилтэд өгөх нөлөөллийг дүрслэв.

Зураг 7-с харахад $3/2^-$ төлөвт ажиглагдсан (Зураг 2) үр дүн ижил гарч байна. Энэ үр дүн нь тухайн төлөвт олдох резонанс энерги сарнилын фазын шилжилтэд зонхилох нөлөөллийг үзүүлдэг болохыг бататгаад тасралтгүй төлөвүүдийн сарнилын фазын шилжилтэд өгөх нөлөөллийг маш бага гээд тооцохгүй орхиж болохгүй гэдгийг харуулж байна.

Зураг 8-д резонанс төлөв (цэгэн муруй)-өөс хол орших төлөвийн сарнилын фазын шилжилтэд өгөх нөлөөлөл маш бага болох нь дахин батлагдаж байна. Харин резонанс төлөв рүү ойртох тутамд тухайн төлөв (цэгэн муруй)-ийн сарнилын фазын шилжилтэд өгөх нөлөөлөл аажмаар өсч байгааг Зураг 9-с харж болно.



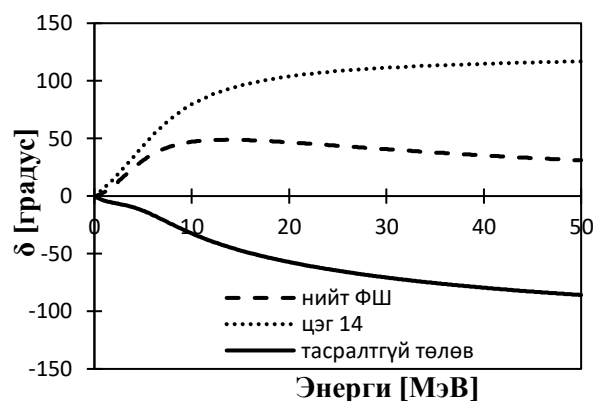
Зураг 8. Тасралтгүй төлөвүүдийн фазын шилжилтэд өгөх нөлөөллийг резонанс төлөвөөс хол орших тасралтгүй төлөвийн нэг цэгээр төлөөлөл болгон авч тооцоолсон үр дүн. Тасралттай муруйгаар сарнилын фазын шилжилт, тасралтгүй муруйгаар резонанс болон бусад төлөвүүдийн фазын шилжилтэд өгөх нөлөөллийг харуулав. Цэгэн муруйгаар резонанс төлөвөөс хол байрлах 2-р төлөвөөс сарнилын фазын шилжилтэд өгөх нөлөөллийг дүрслэв.



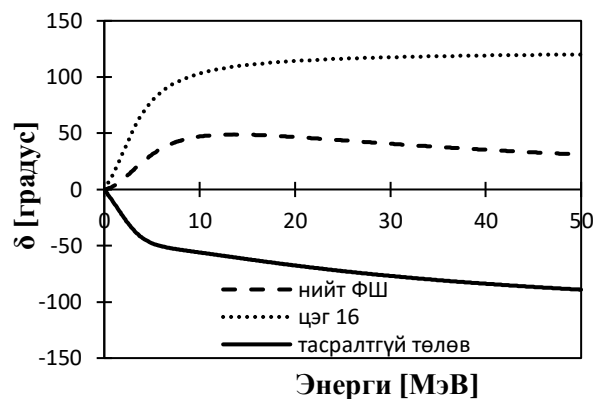
Зураг 9. Зураг 8-д үзүүлсэнтэй адил үр дүн. Энд 8-р төлөвийг авч үзсэн. Цэгэн муруйгаар резонанс төлөвөөс хол байрлах 8-р төлөвөөс сарнилын фазын шилжилтэд өгөх нөлөөллийг дүрслэв.

$J^\pi = 3/2^-$ төлөвийн хувьд сарнилын фазын шилжилтэд тасралтгүй төлөвүүдийн үзүүлэх нөлөөллийг резонанс төлөвөөс хол орших эсхүл дэргэд байрлах төлөвүүдийн хувьд авч үзсэн бол $1/2^-$ төлөвийн хувьд резонанс төлөвийн өмнө болон хойно байрлах зэрэгцээ төлөвүүдийн нөлөөллийг авч үзсэнээрээ онцлогтой юм.

Зураг 10-11-т резонанс төлөвийн өмнө болон хойно байрлах зэрэгцээ төлөвүүдийн сарнилын фазын шилжилтэд өгөх нөлөөллийг цэгэн муруйгаар дүрсэлсэн ба эдгээр нь резонансийн фазын шилжилт шиг өндөр нөлөөллийг үзүүлж байна. Эндээс үзэхэд сарнилын фазын шилжилтийг тооцоолохдоо тасралтгүй төлөвүүдийн өгөх нөлөөллийг орхигдуулж болохгүй гэдгийг дахин харуулж байна.



Зураг 10. Зураг 8-д үзүүлсэнтэй адил үр дүн. Энд 14-р төлөвийг авч үзсэн. Цэгэн муруйгаар резонанс төлөвийн дэргэд буюу өмнө нь орших 14-р төлөвөөс сарнилын фазын шилжилтэд өгөх нөлөөллийг дүрслэв.



Зураг 11. Зураг 8-д үзүүлсэнтэй адил үр дүн. Энд 16-р төлөвийг авч үзсэн. Цэгэн муруйгаар резонанс төлөвийн дэргэд буюу хойно нь орших 16-р төлөвөөс сарнилын фазын шилжилтэд өгөх нөлөөллийг дүрслэв.

ДҮГНЭЛТ

1. Онолын аналитик томъёогоор тооцоолсон сарнилын фазын шилжилтийг туршлагаар хэмжигдсэн утгуудтай харьцуулахад сайн тохироо муугүй байв.
2. Онолоор тооцоолсон сарнилын фазын шилжилт туршлагын утгаас ялимгүй зөрүүтэй байгаа нь бидний тооцооллын нарийвчлалтай холбоотой гэж үзэж байна. Үүнийг цаашид нарийвчлан судлах шаардлагатай.
3. ${}^5\text{Li}$ цөмийн $3/2^-$ ба $1/2^-$ төлөвүүдийн сарнилын фазын шилжилтэд резонанс төлөвийн өмнө болон хойно байрлах төлөвүүдийн өгөх нөлөөллийг судалж, резонанс төлөв нь өөрт ойр орших төлөвүүд рүүгээ сарнидаг болохыг тогтоов.

АШИГЛАСАН МАТЕРИАЛ

- [1] L. R. Hafstad, and E. Teller, The Alpha-Particle Model of the Nucleus. Phys. Rev. v.54, (1938), p.681

- [2] А.Золбаяр, Г.Хүүхэнхүү, А. Сарсембаева, М. Одсүрэн, МУИС Физик сэтгүүл, 527, (2020), pp.74-77
- [3] J. Aguilar, J. M. Combes, Commun. Math. Phys. v.22, (1971), pp.269-279
- [4] E. Balslev, J. M. Combes Commun. Math. Phys. v.22, (1971), pp.280-294
- [5] B. Simon, Commun. Math. Phys. v.27, (1972), pp.1-9
- [6] M.Odsuren, Y.Kikuchi, T.Myo, G.Khuukhenkhuu, H.Masui, K.Katō, Phys. Rev. C 95, (2017), 064305.
- [7] J. E. Bond and F. W. K. Firk, Nucl. Phys. A287, (1977), 317.
- [8] P. Schwandt, T. B. Clegg, and W. Haeberli, Nucl. Phys. A163, (1971), 432.

Улаанбаатар хотын аэрозолийн оптик үзүүлэлтүүдийн судалгаа (2013-2021)

Ц.Баатарчулуун^{1*}, Б.Түвшинжаргал^{1,2}, Т.Нарангарав¹, Б.Даариймаа¹, Б.Жавзандолгор¹,
Г.Батсүх¹

¹ МУИС, ШУС, Геологи, Геофизикийн тэнхим

² ШУА, Одон Орон Геофизикийн Хүрээлэн

Агаар мандлын оптикийн хэмжилтийн Улаанбаатар станцад 2013 оны 9 дүгээр сараас 2021 оны 3 дугаар сарын хооронд олон улсын SKYNET сүлжээний Скайрадиометр багаж ашиглан хийсэн хэмжилтийн үр дүнгээр аэрозолийн спектраль оптик зузаан ($\tau_{a,\lambda}$) болон Ангстромын экспонент (α) –ийн утгыг тодорхойлж, тэдгээрийн жилийн явцыг судлаж, өөрчлөлт хувьслын зүй тогтлыг байгаль, цаг уур, нийгмийн хүчин зүйлстэй холбон тайлбарлах оролдлого хийлээ.

PACS number: 92.60.Mt

Түлхүүр үг: Агаарын бохирдол, Аэрозол, Оптик зузаан, Ангстромын экспонент

I. ОРШИЛ

Агаар мандалд орших аэрозол нь дэлхийн цацрагийн балансад нөлөөлөх замаар уур амьсгалын өөрчлөлтөнд голлох нөлөө үзүүлдэг [1-3]. Дэлхийн уур амьсгалын өөрчлөлт, дулаарал ажиглагдан цөлжилт хүрээгээ тэлж байгаа өнөө үед агаар мандлын үе давхрагуудад явагдах физик үзэгдлийн зүй тогтол, шинж чанарт гарч буй өөрчлөлт хувьслыг тухайн бүс нутгуудад судлан тогтоох нь онцгой ач холбогдолтой юм. Хүн амын хэт суурьшил, үйлдвэржилтээс болж үүссэн антропоген гаралтай аэрозол нь агаарын бохирдлын тэргүүлэх шалтгааны нэг бөгөөд хүн амын эрүүл мэндэд сөрөг нөлөө үзүүлсээр байна.

Улаанбаатар хот нь дэлхийн агаарын бохирдолт ихтэй хотуудын нэг юм. Ялангуяа хүйтэн, сэрүүний улиралд гэр хорооллын айл өрхүүд биомасс (түүхий нүүрс, мод г.м) шатаасны улмаас үүссэн агаарын бохирдол болон дулааны цахилгаан станц, тээврийн хэрэгсэл, уурын зуух, бусад үйлдвэрлэлээс үүдсэн агаарын бохирдлын хэмжээ ихээр нэмэгддэг. Улаанбаатар хотын агаарын бохирдлыг үнэлэх, бохирдлыг илэрхийлэгч оптик параметруудийн өөрчлөлт хувьслын зүй тогтлыг тодорхойлох зорилготой судалгааны ажил МУИС-ийн геофизикийн салбарт олон жилийн турш хийгдэж байна [4-7]. Энэхүү судалгааны ажлын хүрээнд 2013 оны 9 дүгээр сараас 2021 оны 3 дугаар сарын хооронд Монгол Улсын Их Сургуульд байрлах агаар

мандлын оптикийн хэмжилтийн Улаанбаатар станцад ($\varphi=47.923N$, $\lambda=106.921E$, $h=1334.0m$) скайрадиометр РОМ-01 багаж ашиглан 10 минут тутамд хийсэн нарны шулуун цацрагийн болон альмункантратын хэмжилтийн өгөгдлөөр агаарын бохирдлыг илэрхийлэгч гол оптик параметрууд болох аэрозолийн спектраль оптик зузаан $\tau_{a,\lambda}$ болон Ангстромын илтгэгч α – ийн утгыг тодорхойлж, тэдгээрийн хугацааны өөрчлөлт хувьслын зүй тогтлыг байгаль, цаг уур, нийгмийн хүчин зүйлстэй холбон тайлбарлах зорилт тавин ажиллав.

II. СУДАЛГААНЫ АРГА ЗҮЙ

Судалгааны ажилд Голланд улсын Kipp&Zonen фирмд үйлдвэрлэсэн РОМ-1 скайрадиометр багажийг ашигласан ба уг багаж нь нарны шулуун цацрагийг $\lambda=315$ нм, 400 нм, 500 нм, 675 нм, 870 нм, 940 нм, 1020 нм гэсэн долгионы уртын утгуудад хэмжих боломжтой юм. Мөн тэнгэрийн мандлаас сарнисан гэрлийн эрчмийг сонгож авсан сарнилын өнцгийн утгуудад хэмжиж (альмункантратын хэмжилт) сарнилын индикатрисийг тодорхойлсноор агаар мандал дахь аэрозолийн оптик үзүүлэлтүүд болох Ангстромын экспонент, аэрозолийн хугарлын илтгэгч (m_i – im_i) нэг сарнилын алbedo (ω), аэрозолийн эзэлхүүний түгэлт (VSD), ассимметрийн параметр (g) зэргийг үнэлэх боломжийг олгодог [8, 9].

* Electronic address: baataarchuluun@num.edu.mn

Энэхүү судалгааны ажлын хүрээнд авч үзсэн агаарын бохирдлыг илэрхийлэгч гол үзүүлэлтүүд болох аэрозолын оптик зузаан (АОЗ) болон Ангстромын экспонентийн талаарх товч ойлголтыг дараах дэд бүлгүүдэд авч үзлээ.

II.(a). Аэрозолын оптик зузаан

Дэлхийн агаар мандлыг нэвтрэн ирж буй нарны шулуун цацрагийн эрчим агаар мандал дахь аэрозолын улмаас сулрах хэмжээг аэрозолын оптик зузаан илэрхийлнэ. АОЗ нь гэрлийн долгионы уртаас хамаарах ба спектрийн тухайн мужид тодорхойлсон утгыг аэрозолын спектрал оптик зузаан хэмээн нэрлэдэг. АОЗ-ы утга нь орон зай болон цаг хугацааны хувьд өөрчлөгдөн хувьсаж байдаг хэмжигдэхүүн бөгөөд агаар мандал дахь байгалийн болон хүний үйл ажиллагааны гаралтай аэрозолын хэмжээг үнэлэх гол параметр юм.

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

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

Энд: $I_{\lambda 0}$ - спектрийн тухайн мужид агаар мандлын гадна хил дээр ирж байгаа нарны шулуун цацрагийн эрчмийн утга

I_{λ} - спектрийн тухайн муж дахь нарны шулуун цацрагийн эрчмийн газрын гадаргууд хэмжигдсэн утга

$m(\theta)$ - агаар мандлын оптик масс

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

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

Үүнд, $\tau_a(\lambda)$ -аэрозолын, $\tau_R(\lambda)$ -релейн сарнилын, $\tau_{O_3}(\lambda)$ -озоны, $\tau_{mg}(\lambda)$ -холимог хийн, $\tau_{PW}(\lambda)$ - усны уурын оптик зузаан тус тус болно. (1) болон (2) томъёоноос аэрозолын оптик зузааныг тодорхойлбол дараах хэлбэртэй олдоно [2, 3].

$$\tau_a(\lambda) = \frac{1}{m(\theta)} \left(\ln I_{\lambda 0} - \ln I_{\lambda} \right) - \left(\tau_R(\lambda) + \tau_{O_3}(\lambda) + \tau_{mg}(\lambda) + \tau_{PW}(\lambda) \right) \quad (3)$$

Туршилтанд ашигласан POM-01 скайрадиометр багаж нь нарны шулуун цацрагийн эрчмийг $\lambda=400$ нм, 500 нм, 675 нм, 870 нм, 1020 нм гэсэн долгионы уртын утгуудад, 1 минут тутамд хэмжих ба (3) томъёог ашиглан АОЗ-ы утгыг тодорхойлдог.

II.(b) Ангстромын экспонент

Ангстромын экспонент нь Аэрозолын оптик зузааны утга гэрлийн долгионы уртаас хамаарах хамаарлыг илтгэдэг параметр юм. Энэхүү параметр нь тухайн ажиглалт, судалгаа хийж буй бүс нутгийн агаар мандалд агуулагдаж буй аэрозолын шугаман хэмжээстэй хамааралтай бөгөөд ангстромын экспонентийн их утга нь тухайн агаар мандал дахь аэрозолын хэмжээс харьцангуй жижиг байгааг, харин бага утга нь тухайн агаар мандалд харьцангуй том хэмжээст аэрозол голчлон түгж буйг тус тус илтгэдэг. Жишээлбэл, $\alpha \leq 1$ үед агаар мандалд том ширхэгтэй буюу эффектив радиус нь 0.5 μm -аас их байх аэрозол давамгайлна хэмээн үнэлж болно. Харин, $\alpha \geq 1$ үед агаар мандалд жижиг ширхэгтэй буюу 0.5 μm -аас бага эффектив радиустай буюу биомасс шатааснаас үүссэн юмуу хотын агаарын бохирдолтой холбоотой аэрозол давамгайлж байна хэмээн үзэж болно. Ангстромын экспонентийг спектрийн тухайн муж дахь аэрозолын оптик зузаан болон долгионы уртын харьцаагаар тодорхойлдог [10].

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

Ангстромын экспонент α – г тодорхойлбол:

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

болно.

III. ХЭМЖИЛТИЙН ҮР ДҮН, ХЭЛЭЛЦҮҮЛЭГ

Судалгааны ажлын хүрээнд Улаанбаатар станцад 2013 оны 9 дүгээр сараас 2021 оны 3 дугаар сарын хооронд хийгдсэн хэмжилтийн үр дүнгээр аэрозолын спектраль оптик зузаан болон Ангстромын экспонентийн утгыг тодорхойлж, эдгээр үзүүлэлтийн өөрчлөлт, хувьслын зүй тогтлыг үнэлэх, тодорхойлох оролдлого хийлээ.

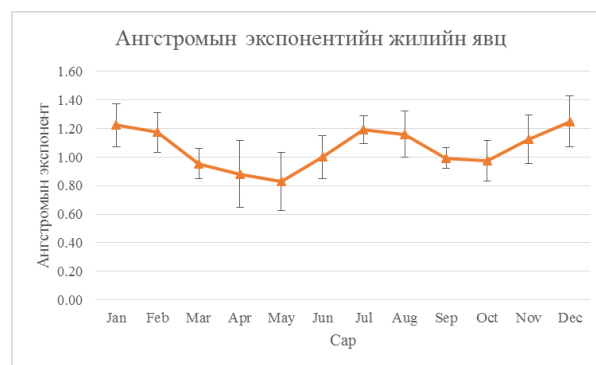
Судалгааны ажилд ашигласан РОМ-1 скайрадиометр багаж нь АОЗ-ы утгыг $\lambda=400$ нм, 500 нм, 675 нм, 870 нм, 940 нм, 1020 нм гэсэн долгионы уртын утгуудад тодорхойлох боломжтой. Практикт 500 нм долгионы уртад харгалзах АОЗ $\tau_{a,500}$ –г ихэвчлэн ашигладаг. Ажиглалт хийсэн нийт хугацааны хэмжилтийг ашиглан аэрозолын оптик зузаан $\tau_{a,500}$ -ын сар бүрийн дундаж утгыг тодорхойлж, уг хэмжигдэхүүний жилийн явцыг Зураг 1-д үзүүллээ. Улаанбаатар хот орчмын АОЗ-ы олон жилийн дундаж утга $\tau_{a,500} = 0.188$ байна.



Зураг 1. 500 нм-ийн долгионы уртад харгалзах аэрозолын оптик зузааны жилийн явц (2013-2021 оны дундажаар)

АОЗ -ы хамгийн бага утга жилийн IX ба X саруудад (0.158, 0.151) харгалзаж байв. Мөн III, V-VII саруудад АОЗ-ы утга харьцангуй бага утгатай байна. Хаврын улирал буюу IV сард АОЗ-ы утга (0.222) харьцангуй өндөр утгатай тодорхойлогдож байгаа нь агаарын хуурайшлаас үүдсэн шороон шуурганы гаралтай тоос, тоосонцорын хувь хэмжээ агаар мандалд ихэссэнээр тайлбарлагдах боломжтой. Агаар мандал дахь усны уурын хэмжээ хамгийн их байдаг VIII сард АОЗ-ы хэмжээ (0.228) өндөр утгатай тодорхойлогдож байна. 2016 оны VIII сарын эхээр ОХУ-ын нутаг дэвсгэр Сибирь орчимд болсон их хэмжээний ойн түймрийн улмаас үүссэн утааны улмаас Улаанбаатар хот орчимд АОЗ-ы хэт өндөр утгууд хэмжигдсэн ба энэхүү гаж утгууд нь тухайн сарын дундаж утга өндөр гарахад нөлөөлсөн болно (Хүснэгт 1). XI сараас эхлэн АОЗ-ы утга аажмаар ихсэх ба өвлийн сарууд болох XII, I, II саруудад харьцангуй өндөр утгатай (харгалзан 0.208, 0.216, 0.233) тодорхойлогдож байгаа нь халаалтын зорилгоор биомасс шатаасны улмаас үүсэх утаа буюу антропоген гаралтай аэрозол агаар мандалд ихээр дэгдсэнтэй холбогдоно.

Агаар мандал дахь аэрозолын геометр хэмжээг үнэлэх гол параметр болох Ангстромын экспонентийн жилийн явцыг Зураг 2-д харуулав. Хавар, намрын улиралд Ангстромын экспонент харьцангуй бага утгатай тодорхойлогдож байгаа нь том ширхэгтэй буюу байгалийн гаралтай тоос, тоосонцор (ойролцоогоор PM10) ихэсдэгтэй холбоотой хэмээн үзэж байна. Өвлийн улиралд Ангстромын экспонент харьцангуй өндөр утгатай хэмжигдсэн ба энэ нь биомасс шатаасны улмаас үүсэх утаа буюу харьцангуй бага геометр хэмжээтэй (ойролцоогоор PM2.5) аэрозолын хэмжээ ихэссэнээр тайлбарлагдаж байна. Харин зуны улирал буюу VII, VIII саруудад Ангстромын экспонент өндөр утгатай байгаа нь усны уур болон ургамлын гаралтай аэрозол ихэссэнээр тайлбарлагдах боломжтой.



Зураг 2. Ангстромын экспонентийн жилийн явц (2013-2021 оны дундажаар)

Улаанбаатар станцад 2013 оны 9 дүгээр сараас 2021 оны 3 дугаар сарын хооронд хийгдсэн хэмжилтийн үр дүнгээр тодорхойлсон 500 нм долгионы уртад харгалзах аэрозолын оптик зузаан $\tau_{a,500}$ болон Ангстромын экспонентийн сарын дундаж утгуудыг Хүснэгт 1 ба 2-д үзүүллээ. Зарим саруудад хийгдсэн хэмжилтийн тоо харьцангуйгаар цөөн байсан нь тухайн оптик үзүүлэлтийн утга хэт өндөр юмуу нам байхад нөлөөлсөн байх боломжтой.

Монгол улсын Засгийн газраас Улаанбаатар хотын агаарын бохирдлыг бууруулах талаар тодорхой арга хэмжээнүүдийг авч байна. Жишээлбэл, 2019 оноос эхлэн Улаанбаатар хотын айл өрхүүд халаалтын зорилгоор түүхий нүүрс хэрэглэхийг хориглосон Засгийн газрын шийдвэр гарсан нь Улаанбаатар хотын агаарын чанарт тодорхой хэмжээгээр эерэгээр нөлөөлж байна. Антропоген гаралтай агаарын бохирдол

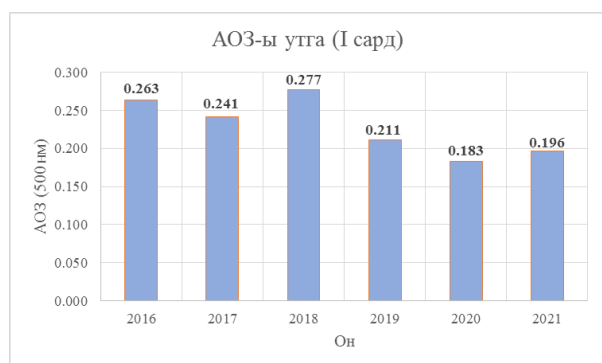
хамгийн ихтэй байдаг өвлийн улирлын I сарыг туршид хэрхэн өөрчлөгдөж байгааг Зураг 3-д сонгож АОЗ-ы сарын дундаж утга хугацааны үзүүлэв.

Хүснэгт 1. 500 нм долгионы уртад харгалзах Аэрозолийн оптик зузаан $\tau_{a,500}$ -ын сарын дундаж утга (Улаанбаатар станц)

	JAN	FEB	MAR	APR	MAY	JUN	JUL	AUG	SEP	OCT	NOV	DEC
2013									0.088	0.129	0.162	0.201
2014	0.192	0.199	0.153	0.287	0.113	0.113	0.130	0.144	0.145	0.165		
2015	0.164	0.210	0.128	0.178						0.075	0.177	0.197
2016	0.263	0.242	0.165	0.147	0.159	0.317	0.284	0.417	0.339	0.257	0.219	0.220
2017	0.241	0.317	0.370	0.314	0.287	0.187	0.151	0.146	0.103	0.173	0.184	0.234
2018	0.277	0.272	0.196	0.222	0.177	0.142	0.159	0.203	0.112	0.126	0.156	0.225
2019	0.211	0.212	0.169	0.184	0.169	0.101	0.223	0.301	0.175	0.149	0.172	0.207
2020	0.183	0.220	0.162	0.221	0.175	0.191	0.169	0.158	0.144	0.137	0.163	0.169
2021	0.196	0.195	0.179									

Хүснэгт 2. Ангстромын экспонентийн сарын дундаж утга (Улаанбаатар станц)

	JAN	FEB	MAR	APR	MAY	JUN	JUL	AUG	SEP	OCT	NOV	DEC
2013									0.945	0.967	1.176	1.273
2014	1.306	1.281	1.020	0.548	0.958	0.759	1.140	1.127	0.904	0.953		
2015	1.139	1.075	0.952	1.161						1.278	1.256	1.232
2016	1.548	1.440	1.123	1.067	1.044	1.147	1.088	0.957	1.049	0.949	1.320	1.593
2017	1.218	1.205	0.950	1.005	0.720	0.909	1.295	1.428	1.104	1.072	1.229	1.321
2018	1.248	1.200	0.754	0.584	0.478	1.156	1.266	1.177	0.960	0.811	0.876	1.166
2019	1.089	1.058	0.987	0.919	0.910	1.052	1.269	1.225	0.956	0.875	0.911	1.077
2020	1.144	1.017	0.962	0.872	0.861	0.977	1.093	1.052	1.034	0.890	1.109	1.086
2021	1.093	1.102	0.876									



Зураг 3. Аэрозолийн оптик зузааны явц (2016-2021 оны I саруудад)

2016 – 2018 оны I саруудад харьцангуй өндөр буюу дунджаар 0.260 байсан АОЗ-ы утга 2019 оноос эхлэн огцом буурч 2020 оны I сард 0.183 хүрч ойролцоогоор 31% багассан байна. Энэ нь Улаанбаатар хотын АОЗ-ы олон жилийн дундаж утга 0.188 –тай ойролцоо байгааг онцлох нь зүйтэй юм.

IV. ДҮГНЭЛТ

Судалгааны ажлын хүрээнд 2013 оны 9 дүгээр сараас 2021 оны 3 дугаар сарын хооронд Улаанбаатар станцад хийгдсэн агаар мандлын оптик хэмжилтийн үр дүнг боловсруулж, агаарын бохирдлын гол илтгэгчид болох

аэрозолийн спектрал оптик зузаан болон Ангстромын экспонентийн сарын дундаж утгуудыг тодорхойлж, өөрчлөлт хувьслын зүй тогтлыг үнэлсний дүнд дараахь дүгнэлтүүдийг хийж байна. Үүнд:

- Олон жилийн дунджаар тодорхойлсон аэрозолийн оптик зузааны жилийн явц нь Улаанбаатар хот орчмын агаар мандлын оптик ерөнхий зүй тогтлыг маш сайн илэрхийлж байна. АОЗ-ы харьцангуй өндөр болон нам утгууд нь байгалийн болон нийгмийн гаралтай тодорхой хүчин зүйлсээр нөхцөлдөж байна.
- Агаар мандал дахь аэрозолийн шугаман хэмжээг илэрхийлэгч Ангстромын экспонентийн утгын олон жилийн дунджаар тодорхойлсон жилийн явцаас харахад Улаанбаатар хот орчмын агаар мандалд хавар, намрын улиралд том ширхэгтэй буюу байгалийн гаралтай аэрозол огцом нэмэгдэх ба энэ нь Монгол орны байгаль, цаг уурын онцлог байдалтай нягт уялдаж байна. Харин өвөл, зуны улиралд харьцангуй жижиг хэмжээтэй буюу утаа, ургамлын гаралтай аэрозол зонхилж байна.

- Сүүлийн жилүүдийн өвлийн улирлын I сарын АОЗ-ы дундаж утгын явцаас харахад 2019 оноос эхлэн агаарын бохирдлын хэмжээ ойролцоогоор 30 орчим хувиар буурсан байна.

ТАЛАРХАЛ

Судалгааны ажил нь МУИС-ийн Агаар мандлын оптикийн хэмжилтийн лабораторид 2015-2017 онд ШУТСангийн санхүүжилтэй хэрэгжсэн “Улаанбаатар хотын агаар мандал дахь аэрозолийн оптик үзүүлэлтийн судалгаа” сэдэвт, SSI_012/2015 дугаартай суурь судалгааны төслийн хүрээнд хийгдсэн болно.

АШИГЛАСАН МАТЕРИАЛ

- [1] R.M.Goody, Y.L.Yung, Atmospheric Radiation, 2nd ed., Oxford Univ. Press, 1989
- [2] John M.Wallace, Peter V.Hobbs, Atmospheric science, 2nd ed., Elsevier, 2006
- [3] Deepak, A. Atmospheric Aerosols, Spectrum Press, Hampton, 1982
- [4] Б.Ганбат, Ц.Баатарчулуун, Т.Нарангарав, Б.Даариймаа, Улаанбаатар хот орчмын агаар мандлын бохирдлын оптик параметруудийг өвлийн улиралд болон түймрийн утаатай байх хугацаанд харьцуулан судалсан дүн, Физик сэтгүүл 24 (468), 2017
- [5] “Агаар мандалд явагдах оптик үзэгдлийн судалгаа” суурь судалгааны төслийн тайлан, 2015
- [6] Л.Бадрах, Б.Даариймаа, Ц.Баатарчулуун “Улаанбаатар хот орчмын агаар мандлын зарим оптик параметруудийг тодорхойлсон дүн” Физик сэтгүүл 19 (425), 2015
- [7] Ц.Баатарчулуун, Г.Батсүх, Б.Даариймаа, Б.Жавзандолгор, Т.Нарангарав, Н.Түгжсүрэн, Улаанбаатар хотын агаарын бохирдлыг илэрхийлэгч зарим оптик параметруудийн жилийн явцын судалгаа (2015-2018), Физик сэтгүүл 28 (510), 2019
- [8] T.Takamura, P.Khatri, B.J.Sohn, N.Tugjsuren, B.Thana, M.Campanelli and G.Padithurai, “Aerosol optical properties and aerosol direct effect over typical sites of SKYNET network”, ICCASR, 2013
- [9] T.Takamura, P.Khatri, B.J.Sohn, N.Tugjsuren, B.Thana, M.Campanelli and G.Padithurai, “Aerosol optical properties and aerosol direct effect over typical sites of SKYNET network”, ICCASR, 2013
- [10] Gregory L.Schuster, Oleg Dubovik and Brent N.Holben “Angstrom exponent and bimodal aerosol size”, J. Geoph. Res., vol.111, D07207, 200.

Тосон-Уулын ордын XIX талбайн газрын тосны давхаргын усны цацраг идэвхийн судалгаа

М.Эрдэнэтуяа^{1*}, Н. Норов², В.Алимаа¹, Ш.Жаргалсүрэн³

¹ Монгол улсын шинжлэх ухаан технологийн их сургууль, ХШУС

² Монгол улсын их сургууль, Цөмийн физикийн судалгааны төв

³ Монгол улсын боловсролын их сургууль, МБУС

Энэхүү өгүүлэлд Тамсагийн газрын тосны сав газрын Тосон-Уул ордын газрын тосны давхаргын усанд агуулагдах байгалийн цацраг идэвхт изотопууд (^{238}U , ^{232}Th , ^{226}Ra , ^{40}K)-ын эзлэхүүнт идэвхийн хэмжээг судлав. Бидний судалгаагаар Тосон-Уулын ордын газрын тосны давхаргын ус ^{226}Ra -аар баяжсан байдгийг тогтоосон юм. Иймээс газрын тос олборлох явцад хүрээлэн буй орчны хөрс ^{226}Ra болон газрын тос олборлох төхөөрөмж цацраг идэвхт изотопуудаар бохирдох магадлал ихтэй болно. Газрын тос олборлох үед гадаад орчны цацрагийн хяналт, мониторинг хийхэд суурь өгөгдөл болох газрын тосны давхаргын усан дахь цацраг идэвхт изотопуудын агуулалт чухал ач холбогдолтой.

Түлхүүр үг: Газрын тос, газрын тосны давхаргын ус, цацраг идэвхт изотоп, уран, радийн хэмжээ

УДИРТГАЛ

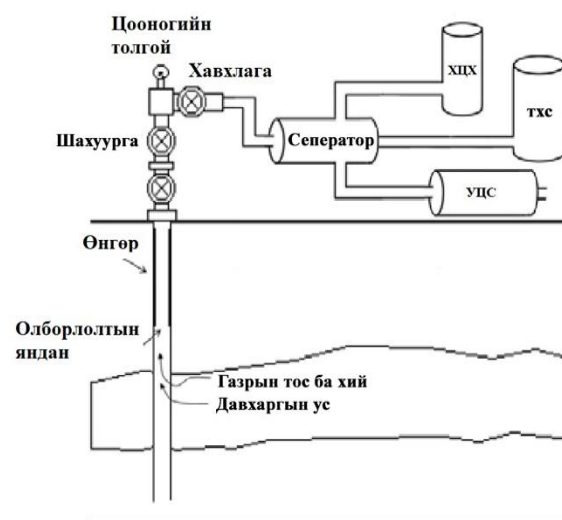
Тамсагийн газрын тосны сав газрын Тосон-Уулын ордын XIX талбайд газар доорх ус болох газрын тосны давхаргын ус, худгийн болон газрын тос олборлох байгууламжийн технологийн усны дээжинд ^{214}Pb , ^{214}Bi , ^{222}Rn , ^{226}Ra -ийн эзлэхүүнт идэвхийг тодорхойлсон ба Геологийн төв лабораторийн индукцийн холбоост плазмын масс-спектрометрийн шинжилгээний аргаар ураны агуулалтыг тодорхойлуулсан болно.

ҮНДСЭН ХЭСЭГ

Газрын тос олборлох ерөнхий бүдүүвч. Тамсагийн газрын тосны сав газрын XIX талбайн Тосон-Уулын ордын газрын тос, газрын тосны давхаргын ус (дагалдах ус), ус шахалтад зориулан олборлогдож буй худгуудын ус, хэрэглээний ус зэрэг газар доорх усанд агуулагдах байгалийн цацраг идэвхт элементүүдийн хэмжээг гамма-спектрометрийн аргаар судлаж, тэдгээрийн орчин хоорондох шилжилтийн зүй тогтлыг тогтоох зорилго тавив. Тосон-Уулын ордын XIX талбайн газрын тосны давхаргын усыг ашиглан газрын тос олборлох бүдүүвчийг I-р зурагт харуулав.

Ради болон II бүлгийн элементүүдийн ионууд газрын тосны давхаргын усанд байдаг бөгөөд даралт, температур буурахын хирээр тэдгээрийн

сульфат болон карбонатууд нь ихэсдэг. Энэ нь олборлолтын яндангууд, цооногийн толгой, хавхлага, шахуурга, сеператор, ус цэвэршүүлэх сав, хий цэвэршүүлэгч хатаагч, тос хадгалах савны дотор ханануудад сульфат болон карбонат хэлбэрээр тунадас үүсгэн өнгөр тогтоодог.



Зураг 1. Газрын тос олборлолтын үед сав, тоног төхөөрөмжүүд (цооногийн толгой, хавхлага, шахуурга, сеператор)-д цацраг идэвхтэй хаг тунадас үүсэх байдал. УЦС-ус цэвэршүүлэх сав, ХЦХ-хий цэвэршүүлэгч хатаагч, ТХС-тос хадгалах сав.

Цацраг идэвхт изотопуудын хуримтлал нь хуйларсан урсгалаар төвд тэмүүлэх хүч үйлчилж байхад хуримтлал үүсэх боломжтой газарт үүсдэг. Хураагуураас газрын тостой хамт олборлогдож буй шавар эсвэл элсний жижиг хэсгүүд нь өнгөр хуримтлуулах гадарга болон

* Electronic address: Jewelry.erdenetuya@must.edu.mn

катионуудыг шингээж цацраг идэвхт хаягдал үүсгэнэ[1, 2].

Газрын тосны давхаргын усан дахь радийн хуримтлал. Газрын тос ба түүний дагалдах давхаргын усны цацраг идэвхийн онцлог нь дараах байдалтай байна. Цацраг идэвхт изотопууд ^{238}U , ^{232}Th газрын тос, түүнийг агуулагч чулуулагт агуулагдана. ^{238}U , ^{232}Th изотопуудын цацраг идэвхт задрал болон газрын тос агуулагч чулуулгийн эрдсээс уусгах процессын үр дүнд газрын тосонд радийн цацраг идэвхт изотопууд байнга үүснэ. Тогтонги төлөв байдалд газрын тос байгалийн зангад оршин байх бөгөөд газрын тос, түүнийг тулах усны хооронд радийн солилцоо бараг байхгүй. Үүний үр дүнд газрын тосонд радийн илүүдэл болно. Зөвхөн ус, газрын тос хоорондоо шүргэж хүрэлцэх хэсэгт л энэ солилцоо явагдах болно. Иймээс газрын тосны ордыг боловсруулах процессын үед давхаргын болон шахаж байгаа ус газрын тосны давхаргад эрчимтэй орж газрын тос ба усны хоорондоо хүрэлцэх талбай огцом ихсэж газрын тосноос усанд ради шилждэг байна. Усгүй газрын тосонд радийн агуулалт $\sim 2.8 \cdot 10^2$ Бк/м³ байх үед усан дахь түүний агуулалт 10^6 Бк/м³ хүрдэг байна. Усанд уусах сульфат ионы агуулалт ихсэх үед ради, бари Ва(Ra)SO₄-радибаритын хэлбэртэй тунаж хоолой, арматур, нөөцлүүрийн гадарга дээр тунаж үлдэнэ. Харин гадарга дээр ирж байгаа газрын тос, усны холимог дахь ^{226}Ra ба ^{228}Ra изотопуудын эзлэхүүнт идэвх харгалзан ~ 10 Бк/л, 14 Бк/л байна. Газрын тосны давхаргын ус нь уран, торийг бага агуулдаг бөгөөд, харин эдгээр цацраг идэвхт изотопуудын бүлийн нийлбэр эзлэхүүнт идэвх ~ 37 Бк/л байдаг байна. Давхаргын элсэн чулуу нь энгийн тунамал чулуулгуудынхтай адил хэмжээний ураныг агуулдаг. Эдгээр нь анхдагч ^{238}U (түүнчлэн ^{235}U), ^{232}Th -ийн задралын бүтээгдэхүүн байх бөгөөд эх цөмүүд нь байдаггүй. Эдгээр элементүүд нь газрын тос, хий болон давхаргын ус агуулсан хураагуурын чулуулгаас шилждэггүй (зөөгддөггүй). Давхаргын ус нь хураагуурын чулуулгаас ууссан ради, бари, стронци, кальцийн катионуудыг агуулж байдаг. Ингэснээр давхаргын ус нь ^{238}U -ийн бүлийн ^{226}Ra , ^{232}Th -ийн ^{228}Ra ба ^{224}Ra радигийн изотопуудыг агуулдаг. Ради-226 ба түүний

задралын бүтээгдэхүүнүүд маш их хортой цацраг идэвхт изотопуудын бүлэгт хамаарах бөгөөд хүний эрүүл мэндэд аюул учруулах тул хүрээлэн буй орчны бохирдолтыг энэ изотопоор үнэлэх нь зайлшгүй шаардлагатай болдог. Газрын тосны олборлолтын үед урт настай эх цөмүүд болох ^{238}U , ^{232}Th болон ^{235}U нь хуримтлуулагч чулуулагт үлддэг бөгөөд радон (^{222}Rn) газрын тос болон усаар зөөгддөг байна. Мөн ^{226}Ra изотоп устай цуг зөөгддөг байна. Тэгэхээр радигийн эдгээр гурван изотопууд газрын тос эсвэл хийтэй хамт олборлогдсон усанд илэрдэг. Гэхдээ тэдгээрийн эх цөмүүд нь биш юм. Тэдгээрийн урт настай эх цөмүүд болох ^{238}U , ^{232}Th болон ^{235}U нь хуримтлуулагч чулуулагт үлддэг тул тэдгээр нь усанд шилжиж зөөгдөхгүй [1, 3].

ХЭМЖИЛТИЙН АРГА ЗҮЙ, ХЭМЖИЛТ

Усанд агуулагдах цацраг идэвхт изотопуудын эзлэхүүнт идэвхийн хэмжээг тодорхойлоход HP-Ge гамма спектрометр ашиглана. Дээж дэх цацраг идэвхт изотопуудын эзлэхүүнт идэвхийг тодорхойлохдоо i дүгээр изотопын эзлэхүүнт идэвхийг дээж дэх цацраг идэвхт изотопуудын балансын тэгшитгэлээс дараах илэрхийллээр тооцно.

$$A_i = A_x \cdot \frac{\lambda_i^2 \cdot t_{x\text{эм}} \cdot t_{ab} \cdot \exp(\lambda \cdot t_{x\text{үл}})}{(1 - \exp[\lambda_i \cdot t_{x\text{эм}}])(1 - \exp[\lambda \cdot t_{ab}])} \quad (1)$$

Энд: $A_x = [S(E_i)/t_{x\text{эм}}]/[\varepsilon(E_i) \cdot n_i \cdot m_i]$
 $S(E_i)$ - E_i энергитэй гамма квантын бүрэн шингээлтийн шугамын талбай (имп); $t_{x\text{эм}}$ - хэмжих хугацаа, с; $\varepsilon(E_i) = k\varepsilon_o(E_i)$ - детекторын үнэмлэхүй бүртгэх чадвар; $\varepsilon(E_i)$ - Маринеллийн саванд стандарт ус хэмжиж олсон детекторын бүртгэх чадвар; k - детектор, дээжийн геометр хэмжээ, тэдгээрийн харилцан байрлал, судлаж байгаа дээжид болон усанд γ -квантын сулралт зэргээс хамаарах коэффициент; n_i - гамма квантын гаралт; m - дээжийн жин (кг); λ_i - i дүгээр изотопын задралын тогтмол; $t_{x\text{үл}}$ - дээж авснаас хэмжих хүртэл хүлээх хугацаа (с); t_{ab} - дээж авахад зарцуулагдах хугацаа (с); A_i нь Бк/кг;

Ийнхүү усан дахь радоны эзлэхүүнт идэвхийг дараах томъёогоор тооцно.

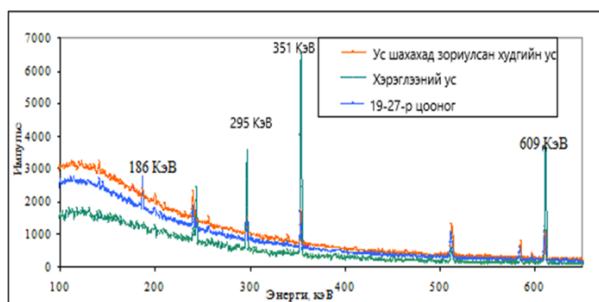
$$A = \frac{S(E_i) - S_{\Phi}(E_i)}{k\varepsilon_o(E) \cdot k_{\gamma} \cdot V \cdot t_{x\text{үл}}} \quad (2)$$

Энд: A -эзлэхүүнт идэвх, Бк/л; $S(E_i)$ -бүрэн шингээлтийн пикийн талбай, импульс; $S_{\phi}(E_i)$ -тухайн нөхцөл дэх гамма спектрометрийн фон; V -усны эзлэхүүн (л); $k = e^{-\lambda \cdot t}$, $\lambda = 2.098 \cdot 10^{-6} \text{ с}^{-1}$ - ^{226}Rn -ийн задралын тогтмол, $t_{\text{хүл}}$ - дээж авснаас хэмжих хүртэл хүлээсэн хугацаа, с; $\varepsilon_o(E)$ -усны хувьд детекторын үнэмлэхүй бүртгэх чадвар; $t_{\text{хэм}}$ - хэмжих хугацаа, с.

Тамсагийн газрын тосны сав газар, Тосон-Уулын ордын газар доорх усны цацраг идэвхийн судалгааг XIX талбайд хийсэн үр дүнг харуулна.

ҮР ДҮН

Тосон-Уулын XIX талбайн 19-27, 19-31, 19-13-2-р цооногууд газрын тосны давхаргын усны дээжийг хагас дамжуулагч цэвэр германий детектороор 3600 секунд хэмжсэн спектрийг 2-р зурагт үзүүлэв.



Зураг 2. Усны дээжийн гамма спектр.

Хүснэгт 1. XIX талбайн хаягдал усанд ^{222}Rn , ^{226}Ra -ийн эзлэхүүнт идэвх.

Дээжийн нэр	Изотопын эзлэхүүнт идэвх, Бк/л				
	^{214}Pb	^{214}Bi	^{222}Rn	^{226}Ra	^{238}U
19-27-р цооног цооногийн дагалдах ус	35	41	38	52.6	<0.4
19-31-р цооног цооногийн дагалдах ус	995	1347	1171	11.0	<0.4
19-13-2-р цооногийн дагалдах ус	1820	2344	2082	<0.4	<0.4
Илрүүлэх доод хязгаар (1 л эзлэхүүнтэй, 1 цаг хэмжих үед)	0.3	0.5	0.4	0.4	0.4
Ундны ус. Эрүүл ахуйн шаардлага, чанар, аюулгүй байдлын үнэлгээ (MNS 0900:2018)	-	-	100	0.5	0.37 (0.03 мг/л)

^{222}Rn -ын байгалийн цацраг идэвхт задралын богино настай изотопуудаас үүсэх гамма шугамуудаас хамгийн их эрчимтэй 295.21 кэВ;

351.92 кэВ; 609.31 кэВ энергитэй гамма шугамуудаар радоны эзлэхүүнт идэвхийг нарийвчлал сайтай тодорхойлно. Усны дээж дэх ^{226}Ra -ийн эзлэхүүнт идэвхийг түүний өөрийнх 186.2 КэВ энергитэй гамма шугамаар тодорхойлох аргыг Цөмийн физикийн судалгааны төвд боловсруулсан [4, 5] бөгөөд бидний судалгааны үр дүнг 1-р хүснэгтэд харуулав.

Тосон-Уулын XIX талбайн 31, 13-2-р цооногоос гарч байгаа газрын тосны дагалдах усны дээжид радоны эзлэхүүнт идэвх харгалзан 1171 Бк/л, 2082 Бк/л, мөн 27 ба 31-р цооногоос гарч байгаа газрын тосны давхаргын усны дээжид радийн эзлэхүүнт идэвх харгалзан 52.6 Бк/л ба 11.0 Бк/л байгаа нь давхаргын усан дахь ^{226}Ra нь ^{222}Rn -ын үүсгүүр болж байгааг харуулж байна. Давхаргын усны ^{226}Ra нь цооног өрөм дэх төхөөрөмж болон цооногийн эргэн тойрны хөрсний гадаргыг бохирдуулах нөхцөл болж байна. Газрын тосыг усаар шахаж цуглуулсны үр дүнд ус ба газрын тосны хооронд радийн тархалтын тэнцвэр тогтоно. Энэ үед давхаргын усан дахь радийн эзлэхүүнт идэвх:

$$C_{\text{Ra, ус}} = \frac{C_{\text{Ra, г.т}}}{K_{\text{тэнц}}} \quad (3)$$

Үүнд: $C_{\text{Ra, ус}}$ - давхаргын усан дахь радийн эзлэхүүнт идэвх (52.6 Бк/л = 52600 Бк/м³); $K_{\text{тэнц}}$ –газрын тос ба усны хооронд радийн түгэлтийн тэнцвэрийн коэффициент ($K_{\text{тэнц}} = 2.9 \cdot 10^{-4}$) [6].

Хүснэгт 2. Тосон-Уулын XIX талбайн 19-31, 19-34-р цооногийн газрын тосонд агуулагдах цацраг идэвхт изотопуудын хэмжээ.

Дээжийн нэр	Изотопын эзлэхүүнт идэвх, Бк/л				
	^{214}Pb	^{214}Bi	^{222}Rn	^{226}Ra	^{238}U
Газрын тос (19-31 цооног)	19	26	22	<0.4	<0.4
Газрын тос (19-34 цооног)	18	27	23	<0.4	<0.4
Илрүүлэх доод хязгаар (1 л эзлэхүүнтэй, 1 цаг хэмжих үед)	0.3	0.5	0.4	0.4	0.4
Ундны ус. Эрүүл ахуйн шаардлага, чанар, аюулгүй байдлын үнэлгээ (MNS 0900:2018)	-	-	100	0.5	0.37 (0.03 мг/л)

Энэ харьцаанаас түүхий (усгүй) газрын тосон дахь радийн эзлэхүүнт идэвх $\sim 152.5 \text{ Бк/м}^3 = 0.15 \text{ Бк/л}$ болно. Бидний ашиглаж байгаа гамма-спектрометрийн ^{226}Ra изотопын эзлэхүүнт

идэвхийг илрүүлэх хамгийн бага хувийн идэвх 0.4 Бк/л юм.

Тосон-Уулын 19-314, 19-34-р цооногоос авсан газрын тосны дээжид байгалийн цацраг идэвхт изотопуудын хэмжээг тодорхойлсон дүнг 2-р хүснэгтэд харуулав. Тосон-Уулын XIX талбайн цооногуудын газрын тосны дээжид агуулагдах ^{226}Ra -ийн хэмжээ бага байгаа нь 2-р хүснэгтээс харагдаж байна.

Хүснэгт 3. Тосон-Уулын XIX талбайн усны дээж дэх цацраг идэвхт изотопуудын эзлэхүүнт идэвх, ураны агуулалт.

Дээжийн нэр	Изотопын эзлэхүүний идэвх, Бк/л					ICP-124 U* мг/л
	^{214}Pb	^{214}Bi	^{222}Rn	^{226}Ra	^{238}U	
Тосон-Уулын XIX талбайн ахуйн хэрэглээний ус	25.7	35.7	30.7	<0.4	<0.4	0.070
Тосон-Уулын XIX талбайн ТА-1 байгууламжид цэвэршүүлэхээс өмнөх ус	16.9	29.7	23.3	<0.4	<0.4	0.15
(5-23) Ус шахалтад зориулан олборлож буй худгийн ус	13.3	19.7	16.5	<0.4	<0.4	0.15
Тосон-Уулын XIX, ТА-1 байгууламж, цэвэршүүлсэн ус	13.4	17.2	15.3	<0.4	<0.4	0.15
1-9 дахин дамжуулах хуваарилах байгууламжаас шахаж буй ус	12.1	13.6	12.9	<0.4	<0.4	0.17
Газрын тосноос ялгасан ус	19.3	20.7	20.0	<0.4	<0.4	0.18
Тосон-Уулын 19-р талбайн 1-4 насосоос гарч буй ус	14.2	32.9	23.6	<0.4	<0.4	0.15
Илрүүлэх доод хязгаар (1 л эзлэхүүнтэй, 1 цаг хэмжих үед)	0.3	0.5	0.4	0.4	0.4	
Ундны усанд зөвшөөрөгдөх хэмжээ (MNS 0900:2018)			100	0.5	0.37	0.03
MNS 4983:2011 стандарт, үйлдвэрлэлийн болоод саармагжуулсан хаягдал ус						0.100

U* - Геологийн төв лабораторийн индукцийн холбоост плазмын спектрометр (ICP-24)-ийн

аргаар ураны агуулалтыг тодорхойлсон дүнг харуулав.

Тосон-Уулын XIX талбайн газар доорх усны дээжид агуулагдах байгалийн цацраг идэвхт изотопуудын эзлэхүүнт идэвхийг гамма спектрометрээр болон ураны хэмжээг индукцийн холбоост плазмын спектрометр (ICP-24)-ээр тодорхойлсон дүнг 3-р хүснэгтэд харуулав.

Тосон-Уулын XIX талбайгаас 2016 оны 7 сард авсан усны дээжид цацраг идэвхт ^{222}Rn изотопын эзлэхүүнт идэвх 12.5 - 30.7 Бк/л байна. ^{226}Ra ба ^{238}U изотопуудын эзлэхүүнт идэвх гамма спектрометрээр илрүүлэх хязгаараас <0.4 Бк/л бага байна.

Хүснэгт 4. Тосон-Уулын XIX талбайн усны дээж дэх цацраг идэвхт изотопуудын эзлэхүүнт идэвх, ураны агуулалт.

Дээжийн нэр	Изотопын эзлэхүүний идэвх, Бк/л					ICP-124 U, мг/л
	^{214}Pb	^{214}Bi	^{222}Rn	^{226}Ra	^{238}U	
(5-22) Ус шахалтад зориулан олборлож буй худгийн ус	11.6	10.3	10.9	<0.4	<0.4	< 0.05
Тосон-Уулын XIX талбайн ахуйн хэрэглээний ус	6.7	9.2	7.9	<0.4	<0.4	< 0.05
(5-23) Ус шахалтад зориулан олборлож буй худгийн ус	3.7	7.6	5.6	<0.4	<0.4	< 0.05
Тосон-Уулын XIX талбайн ТА-1 байгууламжид цэвэршүүлэхээс өмнөх ус	792	1485	1139	<0.4	<0.4	< 0.05
Тосон-Уулын XIX талбайн ТА-1 байгууламжид цэвэршүүлсэн ус	156	249	203	<0.4	<0.4	< 0.05
(5-21) Ус шахалтад зориулан олборлож буй худгийн ус	11.1	25.0	18.1	<0.4	<0.4	< 0.05
Тосон-Уулын XIX талбайн 1-4 насосоос гарч байгаа ус	2.5	0.6	1.5	<0.4	<0.4	< 0.05
(1-11) дахин дамжуулах хуваарилах байгууламжаас шахаж буй ус	3.8	0.6	2.2	<0.4	3	< 0.05

Илрүүлэх доод хязгаар (1 л эзлэхүүнтэй, 1 цаг хэмжих үед)	0.3	0.5	0.4	0.4	0.4	
Ундны усанд зөвшөөрөгдөх хэмжээ (MNS 0900:2018)			100	0.5	0.37	0.03
MNS 4983:2011 стандарт, үйлдвэрлэлийн болоод саармагжуулсан хаягдал ус						0.100

XIX талбайн уст цэгүүдээс 2016 онд авсан дээжид ^{222}Rn изотопын эзлэхүүнт идэвх 1.5-1139 Бк/л байна. Геологийн төв лабораторийн индукцийн холбоост плазмын спектрометр (ICP-24)-ээр усны шинжилгээ хийсэн эдгээр дээжид ураны агуулалт 0.100 мг/л (MNS 4983:2011 стандарт) заасан хэмжээнээс бага байна.

ДҮГНЭЛТ

1. Тамсагийн сав газрын XIX талбайн Тосон-Уулын ордын газрын тос, газрын тосны дагалдах ус, ус шахалтад зориулан олборлогдож буй худгуудын ус, хэрэглээний ус зэрэг газар доорх усанд агуулагдах байгалийн цацраг идэвхт элементүүдийн агуулгыг гамма-спектрометрийн аргаар судласан дүнгээс тус ордын газрын тосны давхаргын усанд ^{226}Ra цацраг идэвхт изотоп агуулагдаж байгаа нь тогтоогдсон.
2. Тус ордын газрын тосыг усаар түрж цуглуулах үед тос ба усны фазын нийлэх гадаргын талбай эрс өсөж, газрын тосноос ^{226}Ra изотоп давхаргын усанд шилжиж байна. ^{226}Ra -ийн үйлдвэрийн төхөөрөмжид хуримтлал бий болж үйлдвэрийн ажилчид цацрагийн нэмэлт тун авах, хүрээлэн буй орчин хаягдал усаар бохирдох, тоног төхөөрөмжид цацраг идэвхт давс хаг үүсгэх, газрын тосны өрөмдлөгийн үед цацраг идэвхт хаягдал үүсэх нөхцөл бүрдэж байна.
3. Газрын тосны давхаргын усны цацрагийн мониторинг хийх, ^{226}Ra изотопыг хлорт барийн давсанд шингээн хатуу нэгдэл үүсгэн хам тунадасжуулах, байгалийн цеолититоор цэвэрлэн идэвхгүйжүүлэх технологийг боловсруулах шаардлагатай байна.

АШИГЛАСАН МАТЕРИАЛ

- [1] IAEA, Radiation Protection and the Management of Radioactive Waste in the Oil

and Gas Industry, Training Course Series No. 40, Vienna, 2010.

- [2] Myagmar Erdenethya, Vanganjil Alimaa, Jamba Tseweenjav, Lidiya I. Svarovskaya, Lyubov K. Altunina, Nanzad Norov. “Radioactive isotopes of Toson-Ula basin of Mongolia” International Conference on the Advanced Materials with Hierarchical Structure for New Technologies and Reliable Structures, Tomsk, AIP Conference Proceeding. – V. 2051. – P. 020075. (2018). <https://doi.org/10.1063/1.5083318>
- [3] Титаев Н.А. Ядерная геохимия: Учебник. - 2-е изд. М.:Изд-во МГУ, 2000.-336 с.
- [4] Н. Норов, Ц. Оюунчимэг, Г. Хүүхэнхүү, Монгол орны усан дахь радоны судалгаа, (2016), Мөнхийн үсэг хэвлэх үйлдвэр. 12.6 х.х.
- [5] Г.Цэмбэлмаа, Н.Норов, Н.Энхбат. Ураны орд орчмын усны цацраг идэвхийн судалгаа. ШУА,Физик технологийн хүрээлэнгийн бүтээл №38,2011, 115-119-р тал.
- [6] Г. Г. Глухов, Е. С. Доняева, В. В. Закау, Ю.В.Нестерова, И.В.Чикова. “Радиоэкологическая оценка воздействия нефтегазодобывающих предприятий на окружающую среду” Радиоактивность и радиоактивные элементы в среде обитания человека: материалы IV Международной конференции, 2013, стр. 144–147.

Усан доторхи плазмт ниргэлэг

Ш.Мөнхжаргал*

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

Усан доторхи плазмт нуман, очит болон усны дуслын гадаргуу дээрх титэмт саадын ниргэлэгийн судалгааны зарим үр дүнг танилцуулж байна.

Түлхүүр үгс: Усан доторхи плазмт ниргэлэг, усны дуслын гадаргуу дээрх титэмт ниргэлэг, усан доторхи нанобүтцийн синтез, усыг плазмт ниргэлгээр цэвэрлэх, халдваргүйжүүлэх арга, химийн хүчтэй исэлдүүлэгч

ОРШИЛ

Сүүлийн 20 гаруй жилд плазм ба усны харилцан үйлчлэлийн судалгаа эрчимтэй хөгжиж байгаа билээ. Тухайлбал, усан доторхи плазмт ниргэлгийг нано материал синтезлэх, ус цэвэрлэх, ариутгах туршилт судалгаанд эрчимтэй ашиглаж байна.

Хүн амын төвлөрсөн суурьшил хотжилтын нөхцөлд ахуйн ба үйлдвэрлэлийн хаягдал усыг цэвэрлэх, ариутгах, халдваргүйжүүлэх, улмаар энерги-мэдээллийн түвшинд боловсруулахад орчин үеийн технологийн туршилт судалгааны үр дүнг ашиглах, хөгжүүлэх хэрэгцээ шаардлага нэмэгдсээр байна.

Манайд энэ чиглэлийн зарим нэг туршилт судалгааны ажил бакалавр, магистрантын түвшинд хийгдэж эхэлж байлаа. Үүнд, усан доторхи нуман ниргэлэг дэх катодын депозитийн судалгаа, усан доторхи очит ниргэлэг, плазмт ниргэлгээр үйлчилсэн усан уусмалын нил улаан туяа ба хэт ягаан туяаны спектр, мөн уусмал дахь жижиг хэсгийн нанохэмжээ, ус ба уугих ниргэлгийн харилцан үйлчлэлээр үүсэх цацаргалтын параметрыг тодорхойлох зэрэг судалгааны сэдэв чиглэлээр бакалавр, магистрант оюутнууд ажилласан билээ.

Энэ чиглэлийн судалгааны практик ач холбогдлыг үндэслэн, судалгааг үргэлжлүүлэх зорилгоор өмнөх ажлуудыг тоймлон танилцуулж байна.

ТАНИЛЦУУЛГА

Плазмт ниргэлэг

Сүүлийн үед хийн ниргэлгийг өргөн утгаар нь хий дундуур дамжих гүйдэл төдийгүй цахилгаан орны нөлөөгөөр үүсэх хийн иончлолыг хамтад нь плазмын буюу плазмт ниргэлэг гэж нэрлэх болжээ. Усан дотор ба түүний гадаргуу дээр нам температурын тэнцвэрт бус плазмт ниргэлгийг экологи, анагаах ухаан, технологийн олон салбарт ашиглах боломж бүрдэж байна. Дулааны тэнцвэрт плазмд электроны температур нь хийн температураас их болоход плазм тэнцвэрт бус төлөвт шилжинэ. Нам температурын тэнцвэрт бус плазмыг хүчдлийн импульсийн ниргэлгээр үүсгэнэ. Хүчдлийн импульсийн үргэлжлэх хугацааг микросекундээс наносекундын хооронд үргэлжлэх боломжтой[1]. Хүчдлийн импульсээр үүсэх ниргэлэг нь энергийн бага хэрэглээтэй, өндөр урвалт плазмыг үүсгэдгээрээ давуу талтай юм. Энэ энерги нь үндсэндээ хийг халаах ба радикал, ион, өдөөгдсөн бөөмийг бий болгох плазмохимийн урвалд зарцуулагдах тул энергийн зарцуулалтын хувьд ашигтай болж байна [2]. Плазмт ниргэлгээр үүсэх электроны гүйдлийн нягт, нэвт цохиолтын хүчдэл, цахилгаан орны үйлчлэлээр явагдах иончлолын зэрэг ба плазмохимийн урвалын бүтээгдэхүүнүүд нь усан ба хийн орчинд ялгаатай байна.

Усан доторхи плазмт ниргэлэг

Нуман, очит, титэмт зэрэг плазмт ниргэлгийг усан орчинд асаах хүчдэл нь харилцан адилгүй байна. Нуман ниргэлэг гүйдлийн хүч их (10-100A) үед катодоос дулааны электроны эмиссийн гүйдлээр; очит ниргэлгийг мөн

* Electronic address: munkhjargal@num.edu.mn

агаарын даралтанд өндөр хүчдэлээр; уугих ниргэлэг бага даралтанд, өндөр хүчдэлээр; титэмт нь агаарын даралтанд хүчтэй нэгэн төрөл бус цахилгаан орноор үүсдэг. Энэ чиглэлийн туршилт судалгааны олон ажлууд гарсаар байна[3]. Усан доторхи ниргэлгээр плазмын хийн суваг үүсдэг. Хийн сувгийн температур ойролцоогоор 1000-3000K, электроны температур 1эВ орчим байна[3]. Өндөр хүчдэлээр үүсэх ниргэлгийн хувьд усан дотор хийн суваг маш хурдан усан орчин руу тархаж, хийн цэврүү үүсгэнэ. Өндөр гүйдлийн нягттай суваг харьцангуй бага температуртай (2000K) плазмын цэврүүгээр хязгаарлагдана. Цэврүүний цахилгаан дамжуулал электрон, ионуудаар тодорхойлогдох ба цэврүү томорход сувгийн температур буурч, цэнэгийн нягт, гүйдлийн утга буурна. Тухайн цэг дээр гүйдлийн утга ялимгүй нэмэгдэхэд Жоулын дулаан, температур өсч эхэлнэ. Температур хэдэн мянган градус (K) хүрэхэд усанд плазмын нарийхан суваг бий болно. Дамжууллын сувагт ялгарсан орчны температур дулаан дамжууллаар тарж чаддаггүй бөгөөд ниргэлгийн үед түүнээс хол орших усны эзлэхүүний дулаан дамжуулал бараг тогтмол байдаг. Электрод хоорондын Жоулын дулааны босго энергийн утгаас ихэсвэл тогтворгүйжилт болж, дулааны үзэгдлээр нэвт цохилт үүснэ[4]. Импульсийн нэвт цохилтын параметруудийг эсэргүүцэл ихтэй нэрсэн ба крантны усанд тодорхойлсон байна[5]. Усны эсэргүүцэл буурахад асаах хүчдэл ба нэвт цохилтын хүчдлийн хоорондох зөрүү титэмт ниргэлэгийн хувьд нэмэгдэж байжээ[6].

Усан доторхи плазмт ниргэлгээр үүсдэг иончлол, молекулын задрал, цахилгаан соронзон долгионы цацаргалт, цохих долгион, кавитаци, соронзон орон зэрэг нийлмэл үзэгдлийг сүүлийн үед эрчимтэй сонирхон судлах болов[7]. Ниргэлгийн процесст хүчтэй цахилгаан орон дахь цэнэгт бөөмс үүсэх ба хөдлөх нь дулааны энергийг эрчимтэй ялгаруулснаар усыг хэт критик төлөвт оруулж, өндөр даралт, температуртай хийн цэврүүг агшин зуур бий болно. Улмаар цохих долгион (түүний фронтод даралт 12МПа орчим байна[8]) үүсч тархан, хийн суваг үүсч, температур ба даралт буурна[2].

Усны дээжийн тухайд

Ус, усан уусмал дотор нуман, титэмт, очит, саадын г.м плазмт ниргэлгийг харилцан адилгүй хүчдлээр үүсгэдэг. Энэ нь ус, усан уусмалын ионы найрлага, түүний цахилгаан дамжуулалтай холбоотой. Усны хувьд нэрмэл, дахин нэрсэн, ионгүйжүүлсэн, цэвэр, эрдэс багатай байгалийн ус, төвлөрсөн хангамжийн крантны ус гэсэн ойлголтууд хамаатай бөгөөд цахилгаан дамжуулал харьцангуй багатай, диэлектрик бодис болно. Усан уусмал нь уусгагч ус ба гидрофиль чанартай нэг ба хэдэн бодисын ион буюу молекулыг агуулна. Жишээ нь, сул электролит уусмалд органик хүчил ба суурь (CH_3COOH , CH_3COONa ...), хүчтэй хүчлийн давс (NaHCO_3 , NaHSO_4 ...), сул шүлт (NH_4OH , $\text{Fe}(\text{OH})_2$...) хүчтэй шүлт (KOH , NaOH ...), сул хүчил (H_2CO_3 , H_2SO_3 ...) нь усанд хялбар уусч, электролит уусмал үүсгэнэ[9]. Рашааны хувьд нийлмэл усан уусмал бөгөөд түүнд ион, уусаагүй молекул, хий, коллоид хэсэгтэй ба цахилгаан дамжуулал харьцангуй өндөр тул усан уусмал гэх үндэстэй. Хаягдал усны хувьд ахуйн ба үйлдвэрлэлийн гэсэн ангилалтай байдаг. Ахуйн бохир усанд агуулагдах химийн нэгдлүүд гадаргуугийн идэвхит нийлэг бодис, аммони (NH_3), метан (CH_4), цууны хүчил ($\text{CH}_3\text{CO}_2\text{H}$), силикон диоксид (SiO_2) этонал ($\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$) зэрэг голлодог[19]. Үйлдвэрлэлийн хаягдал ус технологийн процессоос хамаараад харилцан адилгүй найрлага байх ч энэ хоёр ангиллын усанд уусаагүй жижиг хэсгүүд ч байдаг. Энд авч үзэж буй ажлуудад нэрсэн, крантны, машин угаалгын хаягдал усны ба рашааны дээжийг ус гэсэн ерөнхий нэрэнд хамааруулав.

Плазмт ниргэлгээр усан дотор үүсэх химийн идэвхит исэлдүүлэгчид

Усан доторхи плазмт ниргэлгийн нэвт цохилтоор катодоос гарах электроны урсгал ус, уусмалын атом, молекул, ионтой харилцан үйлчилж, иончлох процессоор өндөр исэлдүүлэгч чанартай устөрөгчийн хэт исэл (H_2O_2), атом хүчилтөрөгч (O^*), гидроксильн радикал (OH), гидропероксидийн радикал (HO_2^*), озон (O_3) г.м үүснэ. Плазмын ниргэлэгийн үед Н ба ОН-ийн нягт $8.5 \times 10^{24} \text{м}^{-3}$ болохыг тогтоожээ[3]. Эдгээр радикал, атом нь химийн хүчтэй исэлдүүлэгч болж, ихэнх нэгдлүүдтэй урвалд идэвхитэй ордог. ОН

радикал нь химийн өндөр идэвхтэй тул гадаргуугийн идэвхит бодис адил фенол, диоксиныг нүүрсхүчлийн хий, усны молекул ба бусад органик бус нэгдлүүдэд задална. Харин хүнд металлууд үл уусах нэгдлийн хэлбэрээр тунадасжина. ОН радикалын цацаргалтын эрчим нь ниргэлгийн энергитэй шууд хамааралтай ба усан уусмалд ОН радикал ойролцоогоор 1мс хугацаанд тогтвортой байна[10]. Усан доторхи ба түүний дуслын гадаргуу дээрх титэмт ба уугих ниргэлгийн үед ОН радикалын агуулга харьцангуй их бүртгэгдсэн байна[3]. Усан дотор плазмт ниргэлгээр үүсэх радикалуудын хоорондын үйлчлэл ба хэт ягаан, үзэгдэх гэрлийн импульсийн цацаргалтаар H_2O_2 үүснэ[11].

Плазмт ниргэлгээр органик бодисыг задлах

Ахуйн ба үйлдвэрлэлийн хаягдал усны органик уусгагч нь септик цэвэрлэгээний явцад задарч зайлуулагдах боломжгүй тул гадаргын усыг фосфор органик нэгдлээр бохирдуулах, ихэнх тохиолдолд хаягдал шингэн хөрсөнд орох тохиолдолд хөрс ба түүний доорхи усыг бохирдуулдаг. Ахуйн хаягдал усанд анионт гадаргуугийн идэвхит бодис сульфенол агуулагдана. Усан доторхи плазмт ниргэлгээр сульфенолын молекул дахь С-Н радикал, молекулын үнэрт хэсгийн диссоциаци болно. Энд ионуудын кинетик энерги 100 эв орчим тул түүний альфатик ба үнэрт хэсгийн холбоосыг эвдэж чадна. Мөн ниргэлгээр үүсэх хэт ягаан туяаны цацаргалтаар альфатик хэсэг фотолизэд орж, түүний задралыг нэмэгдүүлэх боломжтой. Усыг бохирдуулагч төрөл бүрийн органик бодисын бүрэн задрал нь плазмт ниргэлгийн энергийн хэмжээнээс хамаарахыг судалжээ[12].

Плазмт ниргэлгээр усыг халдваргүйжүүлэх

Плазмт ниргэлгээр усыг халдваргүйжүүлэхэд нөлөөлөх гол хүчин зүйл нь химийн идэвхит исэлдүүлэгчид ба цохих долгион болдог байна. Нам температурын плазмт ниргэлгээр усанд үүсэх химийн идэвхитэй исэлдүүлэгчид микроорганизмын солилцооны макромолекулуудтай урвалд орж, эсийн дотор нэвтрэнэ. Энд уураг ба амин хүчлийн исэлдэлт, нуклины хүчлийн дахин туйлшрал, бусад биологийн идэвхит бодисын задрал явагдана[13]. Усан доторхи импульсийн хүчтэй ниргэлгийн үед цохих долгион нь ниргэлгийн

тэнхлэгээс 3-5 мм зайд (энергийн ялгаралтын нягт ойролцоогоор 3 Кдж/см^2) үүсч явагдана. Даралтын уналт 50 МПа-аас их болоход цохих долгион микроорганизмыг механикаар бутлах үйлчлэл үзүүлэхийг тооцоолсон байна[14].

Усан доторхи плазмт ниргэлгээр нанобүтцэт материал гаргах

Усан доторхи графит электродууд бүхий плазмт ниргэлгийг материалын синтез ба физик-химийн судалгаанд өргөн хэрэглэж байна. Усан доторхи нуман ниргэлгээр нано графитын чанар гүйдлийн хүчнээс (Sano2001), (Hsin2001); нанобөөмийн гарц катализаторын тусламжтайгаар нэмэгдэхийг (Zhu2002); мөн электродын геометрээс (Li2002); нумын гүйдэл ихэсэхэд аморф нүүрстөрөгчийн хэмжээ нэмэгдэж, нано бөөмийн гарц электродын цэвэр эсэхээс хамаардаг болохыг (Bera2006, 2003) тус тус судлан тогтоосон байна[6]. Тухайлбал, сонгинолог хэлбэрийн нанобүтцэт нүүрстөрөгчийг полимер, тослох материал, электроны эммитерийн дамжууллыг нэмэгдүүлэх, ялангуяа өндөр чадлын микросуперконденсаторын электродын материал болгон ашигладаг байна[15]. Түүнчлэн, усан доторхи плазмт ниргэлэгт металл болон шингэн анод ба катод электродыг ашиглах болсон. Усан доторхи плазмт ниргэлгийг ашиглан наноматериалыг синтезлэхэд нэмэлт ангижруулагч шаардлагагүй, туршилтын төхөөрөмж хялбар, плазмын цацаргалт дундуур синтез тасралтгүй явагдах давуу талтай[16].

УСАН ДОТОРХИ ПЛАЗМТ НИРГЭЛЭГ: МАТЕРИАЛЫН НАНОБҮТЭЦ БА УСЫГ ЦЭВЭРЛЭХ, ХАЛДВАРГҮЙЖҮҮЛЭХ

Усан доторхи нуман ниргэлгийг нано материалын синтез болон ус, уусмалыг органик бодис, хүнд металл, бактерээс цэвэрлэхэд ашигладаг[7]. PGS-2 спектрографын цахилгаан генераторын нуман ниргэлгийн горимоор, графит электрод ашиглан усанд ниргэлэг явуулсан. Нэрсэн усан доторхи ниргэлгийн нумын гүйдэл 30-110А; катодын депозит үүсэх хурд 0.03-0.33 г/мин; анодын уурших хурд 0.26-1.64 г/мин; усны температур 45°C - 21°C ; ниргэлгийн хугацаа 5-1 мин байх үед ниргэлэг тогтворжиж, графитан катодын гадаргуу дээр

нүүрстөрөгчийн сонгинолог хэлбэрийн нано бүтэц үүсч байгааг илрүүлжээ[4]. Нүүрстөрөгчийн сонгинолог бүтцийг анх 1980 онд нээсэн бөгөөд энэ нь 10нм диаметртэй, нүүрстөрөгчийн атомын sp^2 гибрид атомуудаас тогтох бөөм юм[17]. Мөн Sato нар ионгүйжүүлсэн усанд (нэрсэн усыг бодвол хувийн эсэргүүцэл ихтэй) графит электродуудын хоорондох нуман ниргэлгээр нүүрстөрөгчийн сонгинолог бүтцийн гарц 3мг/мин болж байгааг туршжээ[18]. Үүнээс үзэхэд нүүрстөрөгчийн нанобүтцийг усан доторхи плазмт ниргэлгийн аргаар явуулахад усны хувийн эсэргүүцэл нөлөөтэй байна. Усан дотор графит электродоос гадна металл электродыг ашиглан, нано материалын синтезийг явуулдаг. Дээрх тэжээлийн үүсгүүрийг ашиглан 400мл-ийн хэмжээтэй шилэн саванд ус, усан уусмалын дээжинд нуман ниргэлгийг 40В хүчдэл, 6А гүйдлийн утганд 90сек-ээс 1 мин 30сек-ийн хугацаанд явуулсан байна. Электродыг графит, зэс, титанаар хийж, ниргэлгийн явцад электрод хоорондын зай 1мм байхаар автомат удирдлагаар тохируулсан.

Плазмт ниргэлгээр үйлчилсэн усны дээж дэх жижиг хэсгийн хэмжээг Nanophox (*ШУТИС-ийн Материал судлалын лабораторид*) багажаар тодорхойлов. Туршилтаар зэс ба графит электродынхтой харьцуулбал титан электродын хувьд усанд үүссэн жижиг хэсгийн хэмжээ харьцангуй олон бөгөөд том байгаа нь ажиглагджээ[19]. Титан электродтой ниргэлгээр үйлчилсэн нэрмэл усан дахь жижиг хэсгийн хэмжээ 212.0 нм, крантны усных 1489.6 нм, ахуйн бохир усны хувьд 407.5нм хэмжээс бүхий жижиг хэсгүүд голлож, титан электродтой ниргэлгээр уусмал доторхи жижиг хэсгийг х400 өсгөлттэй микроскопиор харахад жижиг хэсгийн тоо олон, хэмжээ харьцангуй том байсан нь [19] титаны нэгдэл бүхий аэрогель үүссэнийг үзүүлж байна. Энэ нь шингэн орчинд металл электрод ашиглан ниргэлгийг явуулахад түүн дээр тухайн металл исэлдэж [20], титан электрод катализатор болсоноор аэрогель үүсэхэд нөлөөлжээ. Тухайлбал $H_2[TiO(C_2O_4)_2]$, $TiO_2 \cdot nH_2O$ г.м нэгдлүүд үүсдэг [21] байна. Крантны усан дахь жижиг хэсгүүдийн хэмжээ харьцангуй том байгаа нь усны төвлөрсөн хангамжийн

системийн зарим шугамын хоолой дахь төмрийн зэвтэй холбоотой байх талтай.

Ахуйн хаягдал ус нь бичил биетэн, умбуур бодис, ууссан хүчилтөрөгчийн хэмжээ багассан, органик нэгдлүүд, уургийн нэгдлийн бохирдолтой байдаг[19]. Ахуйн хаягдал усны дээжинд очит ниргэлгийн гүйдлийн утга 1-2 А, хүчдлийн утга 600В, ниргэлэг үргэлжилсэн хугацаа 20-30 минут; нуман ниргэлгийн гүйдлийн утга 6-8А, хүчдэлийн утга 50В, хугацаа 2 минутын байхаар автомат удирдлагын тусламжтайгаар явуулсан[19]. PGS-2 спектрографын тэжээлийн нуман ниргэлгийн горимоор ахуйн хаягдал усны дээжинд явуулсан туршилтаар титан электродтой, зэс электрод баригчтай(усан дотор дүрэгдсэн) үед нийт нянгийн тоо 86,47%, титан электрод ба титан баригчтай тохиолдолд 95.22%-иар буурсан байна[19]. Титаны исэл нь өргөн бүсийн хагас дамжуулагч тул усан доторхи плазмт ниргэлгээр хэт ягаан туяаны өдөөлтөөр электрон-нүхний хос үүснэ. Нүх ба ионы харилцан үйлчлэлээр ОН радикал үүсэх урвал явагдана. Мөн озон үүсэх урвалд оролцох тул [12] титан электродын хувьд химийн идэвхит исэлдүүлэгчдийн хувь хэмжээ харьцангуй илүү байх үндэслэлтэй юм.

Очит ниргэлгээр үйлчилсэн ахуйн бохир усны дээжийн нил улаан туяаны шингээлтийн спектрт 2931.80см^{-1} ба 2854.65см^{-1} эрчимтэй шугамууд нэмэгдэж гарсан нь альфатик нүүрс-устөрөгчийн С-Н бүлгийн валентын хэлбэлзэл байдаг[12]. Молекулын шингээлтээр 1463см^{-1} шугам илэрсэн нь мөн альфатик хэсэг дэх үнэрт нэгдлийн бүтцийн С-Н бүлгийн деформацийг, 1165см^{-1} , 1097см^{-1} , 1035.77см^{-1} шугамууд нь сульфон ба сульфанилын хүчил, 1743.65см^{-1} С-Н ийн үнэрт нэгдэл байгааг үзүүлж байна. Иймд цаашид туршилтыг ниргэлгийн хүчдэл, плазмын энерги, ниргэлгийн үргэлжлэх хугацаанаас хамааруулан судлах хэрэгтэй юм.

Нэрсэн, цасны, голын, крантны, ахуйн ба машин угаасан хаягдал усны дээж дотор нуман ба очит ниргэлэг явуулахад[19, 23] рН-ийн утга багасах, цахилгаан дамжууллын утга нэмэгдэх хандлага ажиглагдаж байгаа нь судлаачдын дүгнэлттэй[22] тохирч байна. Машин угаасан хаягдал усны дээжинд очит ниргэлэг явуулж туршжээ[23]. Спектрографын очит ниргэлгийн горимийг ашиглан, титан электродоор оролтын

хүчдэл 600в, гүйдэл 10 А; ниргэлгийн үргэлжлэх хугацаа 10-20 минут; электрод хоорондын зай 2 мм байхаар автомат системээр[24] удирдаж байв. Машин угаасан усны найрлага дахь угаагч бодисууд ниргэлгийн нөхцөлд задарч, бактерийн хэмжээ буурч, ус тунгалаг болж байв[23]. *Peng Lu* нар усны гадаргыг очит ниргэлгээр үйлчлэхэд H_2O_2 ба NO_3^- ; уугих ниргэлгээр үйлчлэхэд NO_2^- ба NO_3^- ион агуулагдаж, урвалын нийт бүтээгдэхүүний агуулга нь очит ниргэлгийн үед харьцангуй өндөр байжээ[25]. Энэ нь очит ниргэлгээр химийн идэвхит радикалууд илүү үүсдэгийг харуулж байна. Ингэж плазмт ниргэлгээр үйлчилсэн ус нь биологи ба биохимийн идэвх өндөр, хүчилтөрөгч ба азотыг хольц, ямар нэг химийн хольцоос ангид, орчинд сөрөг нөлөөгүй, экологид ээлтэй, оролтын энерги бага бөгөөд үр ашигтайгаас гадна хэт ягаан туяа, озон, электролизийн исэлдэлтээр усыг боловсруулан хөдөө аж ахуй, анагаах ухаан, хүнсний салбарт эрчимтэй ашиглах боломжийг өгч байна[26]. Тухайлбал, титэмт саадын ниргэлгийг анагаах ухааны салбарт эмчилгээний оношлогоонд хэрэглэж байна. Тухайлбал, хийн ниргэлгийн зургийн аргыг дурьдаж болно. Хийн ниргэлгийн зургийн арга нь хий дэх титэмт саадын ниргэлэг дээр үндэслэсэн[27]. Судлах объект ба электродын хооронд 5-30 кВ потенциалын ялгавартай хүчдлийн импульс өгөхөд титэмт ниргэлэг үүсч, фотоэлектроны эмиссийн үзэгдэл явагдана. Улмаар диэлектрик саадын гадаргуу дээр цахилгааны орны тусламжтайгаар электроны “нуранги” үүсч, хийн молекулын иончлолоор цацаргалт болно. Энэ фотоны цацаргалт нь судлах дээжийн мэдээллийг агуулах ба дээжийн бүтэц найрлагаас хамаараад цацаргалтын гэрэлтэлтийн эрчим, талбай зэрэг хэмжигдэхүүн харилцан адилгүй мэдээлэл өгдөг байна. Усны дээжийн хувьд дуслын гадаргуу ба металл электродын хоорондох титэмт ниргэлэгт дуслын хэмжээг адил болгоход цацаргалтын гэрэлтэлтийн талбай ба гадаргуугийн фотоны цацаргалтын хамаарлыг тооцоолжээ[28]. Нэрмэл ус, Сэлбэ голын усны дээж, савласан цэвэр ус, төвлөрсөн хангамжийн хлоржуулсан крантны ус, мөн дээжийг буцалгаж, савласан ‘Оргил’ рашаан болон зарим орон нутгийн рашааны дээжийг хийн ниргэлгийн зургийн

аргаар (GDV Scientific Laboratory программ) судлан боловсруулалт хийжээ. ‘Оргил’ савласан рашаан, Ховдын Нэвтийн, Увсын Хар Тэрмисийн рашааны дээжинд плазмт ниргэлгийн сувгийн гэрэлтэлтийн талбайн дундаж утга 3100-3989 нягтаршилттай бөгөөд дундаж утгын хэлбэлзэл харьцангуй их байв[29]. Плазм ба усны дуслын харилцан үйлчлэлээр усны ионы идэвхи, хөдөлгөөнт чанар, иончлол, диссоциацийн зэрэг нь плазмт ниргэлгийн цацаргалтын гэрэлтэлтийн талбайд нөлөөлж байна. Усны ионы хувьд *D.D.Hinde*, *D.Birtwistle* нар [30] усны дуслыг титэмт ниргэлгээр үйлчилсэн туршилтаар O^{+++} ионы өндөр идэвхжлийг тогтоосон нь цаашид энэ аргыг усны найрлага, бүтцийн судалгаанд ашиглах боломжтойг үзүүлж байна.

ДҮГНЭЛТ

Нам температурын тэнцвэрт бус плазмын технологи, тухайлбал усан доторхи ба түүний гадаргуу дээрх плазмт ниргэлгийн арга нь наноматериал синтезлэх, усны экологи, технологийн асуудлыг шийдэхэд судалгааны ажлыг нарийвчлан явуулах нь чухал болж байна. Цаашид усан доторхи нуман ниргэлгийг нүүрстөрөгчийн катализын чиглэлд ашиглах, усан доторхи ба түүний гадаргуу дээрх плазмт ниргэлгийн цацаргалтыг атомын спектроскопийн аргаар судлах боломжтой юм. Мөн плазмт ниргэлгээр үйлчилсэн ахуйн ба үйлдвэрлэлийн хаягдал усны гадаргуугийн идэвхит нэгдлийн молекулын шингээлтийн спектрийг ниргэлгийн хүчдэл ба хугацаанаас хамааруулан судлана.

АШИГЛАСАН МАТЕРИАЛ

- [1] Ушаков.В.Я, Импульсный электрический пробой жидкостей. Томск. Изд-во ТГУ. 1975.
- [2] Петров С.В., Ольховиков О.В, Энергосберегающие технологии. Энерготехнологии и ресурсосбережение. 2016.№2.
- [3] P.J.Bruggeman et.al, Plasma liquid interactions: a review and roadmap, Plasma Sources Science Technology. 25. 053003(2016)
- [4] Б.Бат-Эрдэнэ нар, Усан дахь нуман ниргэлгээр катодын депозит үүсэх нөхцөл

- ба түүний морфологи бүтцийн судалгаа. Физик. 2011.355(16)
- [5] H.M.Jones, E.E.Kunhardt, The influence of Pressure and Conductivity on the Pulsed Breakdown of Water, IEEE Trans.DEL, Vol.1, No.6, pp.1016-1025. 1994
- [6] J.Nieto-Salazar, O. Lesaint, A.Dena, Transient current and light emission associated to the propagation of pre-breakdown phenomena in water, Proc.2003 Annual Report Conference on Electrical Insulation and Dielectric Phenomena, pp.542-545. 2003
- [7] Peter Bruggeman, Plasmas in and in contact with liquids: a retrospective and an outlook, J.Phys .D: Appl. Phys. 45(2012) 253001
- [8] Нагдалян А.А, Исследование характеристик электроимпульсного разряда в водных растворах хлористого натрия. Научный журнал КубГАУ. №86 (02) 2013
- [9] Сваровская Н.А.Физическая химия растворов. М.2013
- [10] Peyrous R, et.al. Kinetic simulation of gaseous species created by electrical discharge in dry or humid oxygen, Journal of physics D: Applied Physics, 1989.22.p.1658-1667
- [11] Андреев.С.Н и др. Получение чистых растворов пероксида водорода при активации воды плазмой безэлектродного СВЧ-разряда и их применение для управления ростом растений. Доклады Академий Наук. 2019, Т.486. №3 с. 297-300
- [12] Бобкова Е.С, Научные основы низкотемпературных плазменных процессов разложения органических соединений растворенных в воде. Дисс. Иваново. 205
- [13] Колесников В.А и др. Исследование инактивации болезнетворных микроорганизмов в воде воздействием низкотемпературной плазмы. Гигиена и санитария. 2016. 95(6)
- [14] К.В.Вилков, Ю.А.Нагель. Обеззараживающее действие мощного импульсного электрического разряда в воде. Зарождение, эволюция и структура ударных волн. Письма в ЖТФ. 2004. том 30. вып.5
- [15] Савилов.С.В,Физикохимические основы пиролитического синтеза и функционализации углеродных наноструктур, Дисс. М 2017
- [16] Fatemeh Rezaei et.al. Applications of Plasma-Liquid Systems:AReview, Materials 2019. 12.2751
- [17] Iima S, Direct observation of the tetrahedral bonding in graphitized carbon black by high resolution electron microscopy, J.Cryst.Growth.1980, V.50. p.675-683
- [18] Sato N, Wang H, Chhowalla M, Nature. 2001.V.414. p.506-507
- [19] Б.Гэрэлцэцэг, Ахуйн хаягдал усыг плазмт ниргэлэгээр боловсруулах боломж. Магистрийн дипломын ажил. УБ.2012
- [20] Абрамов О.В, Плазменный разряд в кавитирующей жидкости. Инженерная физика. 2009. №8. 43-43
- [21] КоленькоЮ.В,Синтез нанокристаллических материалов на основе диоксид титана с использованием гидротермальных и сверхкритических растворов. М 2004
- [22] N.A.H.Ramli, et.al. Review on the development of plasma discharge in liquid solution, AIP Conference Proceedings 1824. 030015(2017)
- [23] Ц.Очирхүү, Усан доторхи очит ниргэлэг.Бакалаврын дипломын ажил. УБ.2012
- [24] Л.Цэлмэг, Усан доторхи плазмт ниргэлэгийн автомат удирдлагын систем. Бакалаврын курсын ажил. УБ.2012
- [25] Anne Mai-Prochnow et.all, Interactions of plasma-activated water with biofilms of action. Biofilms and Microbiomes (2021)11
- [26] Renwu Zhou et.all8 Journal of Physics D: Applied Physics. 53(30). 3(2020)
- [27] Новицкий И.О, Шилин Л.Ю, Метод биоэлектрографии на современном этапе. Беларусь. Онлайн
- [28] Коротков К.Г, Виллиамс Б, Виснески Л.А, Биофизические механизмы метода ГРВ биоэлектрографии. Санкт-Петербург. 1998
- [29] О.Гэрэлмаа, Усны судалгаанд хийн ниргэлэгийн зургийн аргыг ашиглах. Бакалаврын дипломын ажил. УБ. 2012
- [30] D.D.Hinde, D.Birtwistle, Water drop to metal and water drop corona discharge.

ГАРЧИГ

1. Effective Raman Hamiltonian revisited Tuguldur Kh. Begzjav, Zhenhuan Yi and Jonathan S. Ben-Benjamin	1
2. $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$/Графены нийлмэл нэгдлийн электрон бүтцийн онолын судалгаа А.Мөнхбаатар, Л.Сарантуяа, Н.Цогбадрах Э.Уранбайгал, Г.Сэвжидсүрэн	9
3. Органик нарны зайн идэвхт гадаргуун гэрлийн шингээлтийг сайжруулах судалгаа А.Амарзаяа, Н.Төвжаргал, Алата, Нинжин, Ж.Даваасамбуу	13
4. Печинигийн аргаар гарган авсан $\text{Fe-Co/Al}_2\text{O}_3$ биметалл катализаторын судалгаа С.Энхтөр, Ц.Цог-Очир, Б.Номин-Эрдэнэ, Р.Галбадрах, Д.Рэнцэнмядаг, Г.Эрдэнэ-Очир	17
5. Гелийн атомын фотоэлектроны голограф Ч.Алдармаа, Г.Зоригт, Л.Хэнмэдэх	24
6. Даралтын нөлөөнд чулуулаг дээжиний кристалл бүтцэд үүсэх үлдэгдэл хэв гажилт болон текстур бүтцийг нисэлтийн хугацааны нейтрон дифракцын аргаар судалсан үр дүн А.Бадмаараг, К.Шеффцюк, Д.Сангаа, Б.Мюллер, Ф.Шиллинг, Л.Энхтөр	27
7. Физические и физико-химические свойства металл-фуллереновых пленок, полученных вакуумными технологиями П. Тувшинтур, Д. Улам-Оргих, Э.М. Шпилевский, С.А. Филатов, Г. Шилагарди	34
8. Тогтмол гүйдлийн соронзон орны 3D компьютер загвар бүтээх нь Б.Алтанхүү, О.Лхагва	38
9. Цагаан тугалга (Sn) болон нүүрстөрөгчийн нано мяндсаар (CNF) хольцолсон шпинел $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$-ийн бүтэц, шинж чанарын судалгаа Э.Уранбайгал, А.Мөнхбаатар, Л.Сарантуяа, Н.Цогбадрах, Г.Сэвжидсүрэн ...	44
10. Альфа-протон системийн фазын шилжилтийг комплекс хувиргалтын арга ашиглан тодорхойлсон нь А.Золбаяр, Г.Хүүхэнхүү, С.Даваа, А. Сарсембаева, Н. Амангелди, М. Одсүрэн	50
11. Улаанбаатар хотын аэрозолийн оптик үзүүлэлтүүдийн судалгаа (2013-2021) Ц.Баатарчулуун, Б.Түвшинжаргал, Т.Нарангарав, Б.Даариймаа, Б.Жавзандолгор, Г.Батсүх	56
12. Тосон-Уулын ордын XIX талбайн газрын тосны давхаргын усны цацраг идэвхийн судалгаа М.Эрдэнэтуяа, Н. Норов, В.Алимаа, Ш.Жаргалсүрэн	61
13. Усан доторхи плазмт ниргэлэг Ш.Мөнхжаргал	66