

MNS 2492:2004

А Хавсралт(мэдээллийн)

Улсын бүртгэлийн

дугаар.....Нууцын зэрэглэл: Б

Аравтын бүрэн Төсөл хэрэгжүүлэх гэрээний ангиллын код дугаар:
ШуГх(ОХУ)-2019/01

**МОНГОЛ УЛСЫН ИХ СУРГУУЛЬ
ХЭРЭГЛЭЭНИЙ ШИНЖЛЭХ УХААН
ИНЖЕНЕРЧЛЭЛИЙН СУРГУУЛЬ**

**Хэт бага температурт энергийн саадын резонансын системийг туннелийн
маягийн замаар дамжин өнгөрөх изотопуудын квантын шигшилтийн математик
загварчлал**

Гадаадтай хамтарсан төслийн тайлан
2019-2022

Төслийн удирдагч: Ж.Сонинбаяр, МУИС, Хэрэглээний шинжлэх ухаан
инженерчлэлийн сургуулийн Зөвлөх дэдпрофессор

Санхүүжүүлэгч байгууллага : Шинжлэх ухаан технологийн сан

Захиалагч байгууллага : Боловсрол, шинжлэх ухааны яам

Тайлан өмчлөгч : Монгол улсын их сургууль, ХШУИС, Их
сургуулийн Гудамж –3, Бага тойруу, Сүхбаатар
дүүрэг, Улаанбаатар.

**УЛААНБААТАР ХОТ
2023**

Реферат

Төслийн үндэслэл (Шинжлэх ухаан, эдийн засаг, нийгмийн ач холбогдол) *

Судалгааны ажлын зорилго

Хольцыг изотопоор баяжуулах шинэ аргыг судлах зорилготой байсан бөгөөд үүнд: байгалийн болон сэргээгдэх нөөц, түүний зохистой хэрэглээг нэмэгдүүлэх бодлогыг шийдэн, шинэ ухаалаг материал бий болох өргөн цар хүрээтэй суурь судалгаа явууллаа. Иймд ОХУ-ын Томскийн Их Сургуулийн эрдэмтэдтэй хамтран хийсэн нь стратегийн нэн чухал ач холбогдолтой, орчин цагийн байгалийн шинжлэх ухааны салбарын судлаачдын анхаарлыг татаж буй судалгаа юм. Маш төстэй шинж чанартай бөөмсийг салгах нь зөвхөн резонансын нөлөөгөөр боломжтой болсон өнөө үед шинэ байгальд ээлтэй **ухаалаг материал-шүүлтүүр** бүтээхтэй холбоотой судалгаанууд нь ашигт малтмал,уул, уурхай, байгалийн хий, цөмийн технологийн ашиглах их нөөцтэй ОХУ, Монгол улсуудын хувьд үнэтэй бүтээгдхүүн гарган авах боломжийг бүрдүүлэх, баяжуулах үнэ өртгийг хэдэн зуу дахин ч багасгах боломжтой.

Төслийн тухай

Ухаалаг материал-шүүлтүүр бий болгох тухайлбал, байгалийн хийнээс стратегийн элемент болох гелийг графен ухаалаг шүүлтүүр- ухаалаг материал бий болгон ялган авах, бөөмсийг зөвхөн резонансын нөлөөгөөр салган авах судалгаа юм. Молекуляр динамикийн аргуудыг хэрэглэн /Термодинамикийн тэнцвэрийн төлөв дэх бөөмсийн системийн тархалтыг бичих, Максвеллийн арга/, саадын системийн хувьд Шредингерын интеграл нэг хэжээст стационар тэгшитгэлийн шийдийг анх удаа олсон ба туршилтаар баталгаажуулсан юм, Шварца-Кристоффелийн интегралын тогтмолуудыг тодорхойлох Куфаревын аргын хэрэглээг өргөжүүлж динамик систем болгон , математик загвар боловсруулж туршилтаар баталгаажуулсан.

Динамик системийн онолын үндсэн хэсгийн нэг нь эргодик онол юм. Шингэний динамик, кодлох онол, комплекс динамик, эсэн бүтцийн автомат, динамик хаосын онол, динамик систем, энтропийн онол зэрэгт эргодик онолыг хэрэглэж байна. Динамик системийн онолын теоремууд ба шинж чанарууд улам төгөлдөржин сайжирч байна.

Тиймээс зарим нэг чухал теоремууд ба шинж чанарын баталгааг сайжруулах, онолын үр дүнг нэгтгэх, хольцыг изотопоор баяжуулах шинэ аргыг судлах зорилготой байсан бөгөөд байгалийн болон сэргээгдэх нөөц, түүний зохистой хэрэглээ рүү чигэлсэн бодлогыг Томскийн Их Сургуулийн эрдэмтэдтэй хамтран математик загвар хийж, чанарын судалгааг хийсэн юм.

Түлхүүр үгс: Математик загварчлал, ухаалаг материал, математик физик

Талархал

Энэ төсөл нь ОХУ-ын Суурь судалгааны сан ба Монгол улсын Боловсрол, шинжлэх ухааны яам, Шинжлэх ухаан технологийн сангийн хамтарсан санхүүжилтээр хийгдсэн төсөл юм.

Хамтарсан төслийн гүйцэтгэгчид

Монголын талын гүйцэтгэгчид

- 1.** Ж. Сонинбаяр Монгол улсын их сургуулийн Зөвлөх дэд профессор, доктор, төслийн монголын талын удирдагч
- 2.** Д. Цэдэнбаяр ШУТИС-ийн Профессор, доктор
- 3.** Д. Ганхуяг ШУТИС-ийн Профессор, доктор

ОХУ-ын талын гүйцэтгэгчид

- 1.** Бубенчиков Алексей Михайлович, ШУ-ы физ.-мат. доктор, профессор, Томскийн их сургуулийн бүсийн математик эрдэм шинжилгээ-боловсролын төвийн ЭШТА.
- 2.** Бубенчиков Михаил Алексеевич, ШУ-ы физ.-мат. доктор, Томскийн их сургуулийн онолын механикийн тэнхмийн дэд профессор, ОХУ-ын талын төслийн удирдагч
- 3.** Мамонтов Дмитрий Владимирович, Томскийн их сургуулийн бүсийн математик эрдэм шинжилгээ-боловсролын төвийн ЭШДА.
- 4.** Челнокова Анна Сергеевна, Томскийн их сургуулийн онолын механикийн тэнхмийн ахлах багш

Төслийн хүрээнд хэвлэгдсэн бүтээлийн жагсаалт

Олон улсын сэтгүүлд хэвлэгдсэн өгүүллүүд

Олон улсын WEB of SCIENCE ба SCOPUS -ийн Q1, 2, 3 индекстэй мэргэжлийн сэтгүүлд бш өгүүлэл хэвлүүлсэн(хавсралт 1-6):

1. V A Poteryaeva , M A Bubenchikov, S Jambaa , D Gankhuyag, D Tsendenbayar, Quantum tunneling of molecules through compound barriers, Journal of Physics: Conference Series, 1537 012008, 22 June 2020.
<https://iopscience.iop.org/issue/1742-6596/1537/1>
2. Alexey Mikhailovich Bubenchikov, Mikhail Alekseevich Bubenchikov, Soninbayar Jambaa, Aleksandr Viktorovich Lun-Fu, and Anna Sergeevna Chelnokova, Low-temperature separation of helium-helion mixture, Reviews on Advanced Materials Science, volume 59; Issue 1, 361-370, 10 Aug 2020.
<https://www.degruyter.com/view/journals/rams/59/1/article-p361.xml>
3. Bubenchikov M.A., Bubenchikov A.M., Jambaa S., Lun-Fu A.V., Chelnokova A.S., ANALYTICAL SOLUTION OF THE SCHRÖDINGER INTEGRAL EQUATION, Tomsk State University, Journal of Mathematics and Mechanics, №67, - pp.5-17, DOI: 10.17223/19988621/67/1, Tomsk, Russia, -2020.
http://journals.tsu.ru/mathematics/&journal_page=archive&id=2030
4. Lun-Fu A.V., Bubenchikov M.A., Jambaa S., Tsydyrov S.G.-Ts. Determining frequencies of transverse vibrations for crossovers and dead ends of gas pipelines, Tomsk State University, Journal of Mathematics and Mechanics, №68, - pp.95-105, DOI 10.17223/19988621/68/9, Tomsk, Russia, -2020.
5. Alexey Mikhailovich Bubenchikov, Mikhail Alekseevich Bubenchikov, Anna Sergeevna Chelnokova ,* and Soninbayar Jambaa, An Analytical Solution to the Problem of Hydrogen Isotope Passage through Composite Membranes Made from 2D Materials, Mathematics 2021, 9(19), 2353, 22 September 2021.
<https://doi.org/10.3390/math9192353>
6. Valentina A Poteryaeva¹, Alexey M Bubenchikov^{1,2}, Michael A Bubenchikov^{1,3}, Alexandr V Lun-Fu⁴ and Soninbayar Jambaa⁴, Helium isotope separation by bi-layer membranes of g-C₃N₄, Published 22 December 2021 • © 2021 Vietnam Academy of Science & Technology, Advances in Natural Sciences: Nanoscience and Nanotechnology, Volume 12, Number 4.
<https://iopscience.iop.org/article/10.1088/2043-6262/ac4108>

Компьютерийн 5ш программын бүртгэлийн ОХУ-ын гэрчилгээ

1. № 2021680776
2. № 2021680468
3. № 2021680775,
4. №2021666867,
5. №2021666869 (ОХУ-ын талын хамтрагч нарын нэр дээр) авсан (хавсралт 20-24).

Гадаадад олон улсын эрдэм шинжилгээний хуралд 4ш илтгэл тавьсан

1. Jambaa S. Поток тяжёлой несжимаемой жидкости, Международная конференция «Декабрьские чтения в Томске», 10-15/XII, 2019, г.Томск , РФ.
2. Jambaa S. Обтекание препятствий потоком тяжёлой несжимаемой жидкости, the International Conference "Dynamics in Siberia", February 24-29, 2020, Novosibirsk, Russia.
3. Valentina A. Poteryaeva, Alexey M. Bubenchikov, Michael A. Bubenchikov and Soninbayar Jambaa. Hydrogen isotope separation via carbon nitride bi-layer membrane, the 3rd International SNAIA2020 Conference- Smart Nanomaterials: Advances, Innovations and Applications, Online Conference, the Book of Abstracts pp 116, 8-11 December 2020, Paris, France.
4. Jambaa S, Dynamics of Inverse Vertex Images in the Schwarz-Christoffel Integral: Kufarev's Differential Equations and Initial Conditions, 2023 INFORMS Annual meeting, the Book of Abstracts, octomber 13-18, 2023, Phoenix, Arizona, USA.(2023 оноос Ж.Сонинбаяр АНУ-ын The Institute for Operations Research and the Management Sciences (INFORMS) институт, нийгэмлэгийн гишүүн болж "Aviation Applications Section", " Computing Society" секторуудын байнгын хурал, семинар, хэлэлцүүлэгт online-аар тогтмол оролцож байна хийсэн ажлаа сурталчлах, дэлгэрүүлэх, эш илтгэл тавихаар 2023 онд оролцно).

Дотоодод олон улсын эрдэм шинжилгээний хурал 3ш илтгэл тавьсан

1. Jambaa S. Applications of the Kufarev method to a conformal mapping using the Christoffel-Schwartz integral, First International Conference on Applied Science and Engineering-Proceeding 2019, Mongolian University of science and technology, Ulaanbaatar, Mongolia, 05-06/IV, 2019.
2. Jambaa S. Kufarev's method for conformal mapping with the Schwarz-Chisoffel integral in some practical problems, the 6th International Conference on Optimization, simulation and control (cosc2019), program and abstracts, pp.64-65, 21-23/06.2019, Ulaanbaatar, Mongolia.
3. Jambaa S., Conformal mapping using the Christoffel-Schwartz integtal, transformations and appications, "The 7th International Conference on Optimization, Simulation and Control · June 20-22, 2022 | Ulaanbaatar, Mongolia.

Дотоодод олон улсын хурал зохион байгуулах ажлын хүрээнд 3ш хурал зохион байгуулахад оролцсон

1. First International Conference on Applied Science and Engineering-Proceeding 2019, Mongolian University of science and technology, Ulaanbaatar, Mongolia, 05-06/IV, 2019он, олон улсын хуралд Д.Цэдэнбаяр, Д.Ганхуяг нар зохион байгуулагчаар ороцсон(уг төслөөс санхүүжилт аваагүй).
2. "The 6th International Conference on Optimization, Simulation and Control (COSC2019)" Улаанбаатар, Монгол улс, 20-22/VI 2019он, Д.Цэдэнбаяр, Ж.Сонинбаяр нар зохион байгуулагчаар ороцсон(уг төслөөс санхүүжилт аваагүй)
3. "The 7th International Conference on Optimization, Simulation and Control (COSC2022)" Улаанбаатар, Монгол улс, 20-22/VI 2022он, Д.Цэдэнбаяр, Ж.Сонинбаяр нар зохион байгуулагчаар ороцсон.

Дотоодын улсын хэмжээний хуралд 3ш илтгэл тавьсан

1. Жамбаа С. Шварц-Кристоффелийн интегралаар коформ буулгалт хийх, зарим хэрэглээ, “Хэрэглэний математик 2019” эрдэм шинжилгээний хурал, МУИС, 23/11 2019, Улаанбаатар, Монгол улс.
2. Жамбаа С. Конформ буулгалтад Куфарёвын аргыг хэрэглэн саадыг тойрох шингэний урсгалын шугамуудыг тодорхойлох, “Хэрэглэний математик 2020” эрдэм шинжилгээний хурал, МУИС, ШУТИС, 15/05 2021, Улаанбаатар, Монгол улс.
3. Jambaа Soninbayar. Relationship between ergodicity and mixing in the ergodic theory of dynamical systems, “Хэрэглэний математик 2021” эрдэм шинжилгээний хурал, МУИС, ШУТИС, 17/01 2022, Улаанбаатар, Монгол улс.

Дотоодын улсын хэмжээний 1ш хурал, 2ш семинар зохион байгуулсан

1. Хэрэглээний математик-2022, 2022 оны 12 сарын 10, Ж.Сонинбаяр нар зохион байгуулагчаар ороцсон.
2. “Лабораторийн нөхцөлд синтезийн процессын давтамжийг хангах графен хавтанг гаргаж авах технологийн горимын тухай судалгаа явуулах” идэвхитэй явагдаж ШУТИС-ийн ХШУС-дээр “Динамик систем” семинарууд 2020 оны 04 сард зохион байгуулж явуулсан. Нийт 2ш семинар зохион байгуулсан (уг төслөөс санхүүжилт аваагүй болно).

Гарчиг

Реферат.....	3
Талархал.....	5
Төслийн хүрээнд хэвлэгдсэн бүтээлийн жагсаалт.....	7
Төслийн үр дүнгийн даалгавар, түүний биелэлт [хавсралт 1]	14
Оршил.....	22
НЭГДҮГЭЭР БҮЛЭГ.....	24
1.1 Шийдвэрлэхээр зорьж буй шинжлэх ухааны суурь асуудлын тодорхойлолт...	24
1.2 Төслийн хэрэгжилтийн явцад Монгол-Оросын талын багуудын гишүүд болон Монгол-Оросын түншүүдийн харилцан уялдаа холбоо, зохицуулалт.....	34
ХОЁРДУГААР БҮЛЭГ.....	48
2.1 Судалгааны ажлын сонгосон арга, гол үр дүн.....	48
2.2 Математикийн талаас сонгосон арга, гол үр дүн.....	50
ДҮГНЭЛТ.....	63
Хавсралт 1.....	65-69
Хавсралт 2.....	70-78
Хавсралт 3.....	79-91
Хавсралт4.....	92-102
Хавсралт 5.....	103-113
Хавсралт 6.....	114-133
Хавсралт 7.....	134-142
Хавсралт 8.....	143-144
Хавсралт 9.....	145-146
Хавсралт 10.....	147-149
Хавсралт 11	150-152
Хавсралт 12.....	153-157
Хавсралт 13.....	158-162
Хавсралт 14.....	163-164
Хавсралт 15.....	165-167
Хавсралт 16.....	168-171
Хавсралт 17	172-178
Хавсралт 18	179
Хавсралт 19	180
Хавсралт 20.....	181

Хавсралт 21.....	182
Хавсралт 22.....	183
Хавсралт 23.....	184
Хавсралт 24.....	185

Төслийн үр дүнгийн даалгавар, түүний биелэлт

Гарах үр дүн	Гарсан үр дүн(хавсралт 1-24):
<p>1. ОХУ-ын хамтран ажилласан түнш Томскийн эрдэмтэдтэй хамтран WEB of SCIENCE ба SCOPUS - ийн Q1, 2, 3 индекстэй мэргэжлийн сэтгүүлд эрдэм шинжилгээний 4ш өгүүлэл нийтлүүлэх. 2019-2022он.</p>	<p>1. 6ш өгүүлэл хэвлүүлсэн:</p> <ol style="list-style-type: none">1. V A Poteryaeva , M A Bubenchikov, S Jambaa , D Gankhuyag, D Tsedenbayar, Quantum tunneling of molecules through compound barriers, Journal of Physics: Conference Series, 1537 012008, 22 June 2020. https://iopscience.iop.org/issue/1742-6596/1537/12. Alexey Mikhailovich Bubenchikov, Mikhail Alekseevich Bubenchikov, Soninbayar Jambaa, Aleksandr Viktorovich Lun-Fu, and Anna Sergeevna Chelnokova, Low-temperature separation of helium-helion mixture, Reviews on Advanced Materials Science, volume 59; Issue 1, 361-370, 10 Aug 2020. https://www.degruyter.com/view/journals/rams/59/1/article-p361.xml3. Bubenchikov M.A., Bubenchikov A.M., Jambaa S., Lun-Fu A.V., Chelnokova A.S., ANALYTICAL SOLUTION OF THE SCHRÖDINGER INTEGRAL EQUATION, Tomsk State University, Journal of Mathematics and Mechanics, №67, - pp.5-17, DOI: 10.17223/19988621/67/1, Tomsk, Russia, -2020. http://journals.tsu.ru/mathematics/&journal_page=archive&id=20304. Lun-Fu A.V., Bubenchikov M.A., Jambaa S., Tsydyrov S.G.-Ts. Determining frequencies of transverse vibrations for crossovers and dead ends of gas pipelines, Tomsk State University, Journal of Mathematics and Mechanics, №68, - pp.95-105, DOI 10.17223/19988621/68/9, Tomsk, Russia, -2020.5. Alexey Mikhailovich Bubenchikov, Mikhail Alekseevich Bubenchikov, Anna Sergeevna Chelnokova ,* and Soninbayar Jambaa, An Analytical Solution to the Problem of Hydrogen Isotope Passage through Composite Membranes Made from 2D Materials, Mathematics 2021, 9(19), 2353, 22 September 2021. https://doi.org/10.3390/math91923536. Valentina A Poteryaeva¹, Alexey M Bubenchikov^{1,2}, Michael A Bubenchikov^{1,3}, Alexandr V Lun-Fu⁴ and Soninbayar Jambaa⁴, Helium isotope separation by bi-layer membranes of g-C₃N₄, Published 22 December 2021 • © 2021 Vietnam Academy of

2. Хэрэглээний шинжлэх ухааны болон хэрэглээний математикийн эрдэм шинжилгээний хурал зохион байгуулах, 3ш илтгэл тавих. 2019-2022 он.

Science & Technology, Advances in Natural Sciences: Nanoscience and Nanotechnology, Volume 12, Number 4.
<https://iopscience.iop.org/article/10.1088/2043-6262/ac4108>

2. Гадаадад ОУ-ын эрдэм шинжилгээний хуралд тавьсан 4ш илтгэл:

1. Jambaa S. Потоки тяжелой несжимаемой жидкости, Международная конференция «Декабрьские чтения в Томске», 10-15/XII, 2019, г.Томск , РФ.
2. Jambaa S. Обтекание препятствий потоком тяжелой несжимаемой жидкости, the International Conference "Dynamics in Siberia", February 24-29, 2020, Novosibirsk, Russia.
3. Valentina A. Poteryaeva, Alexey M. Bubenchikov, Michael A. Bubenchikov and Soninbayar Jambaa. Hydrogen isotope separation via carbon nitride bi-layer membrane, the 3rd International SNAIA2020 Conference- Smart Nanomaterials: Advances, Innovations and Applications, Online Conference, the Book of Abstracts pp 116, 8-11 December 2020, Paris, France.
4. Jambaa S, Dynamics of Inverse Vertex Images in the Schwarz-Christoffel Integral: Kufarev's Differential Equations and Initial Conditions, 2023 INFORMS Annual meeting, the Book of Abstracts, octomber 13-18, 2023, Phoenix, Arizona, USA. (2023 оноос Ж.Сонинбаяр АНУ-ын The Institute for Operations Research and the Management Sciences (INFORMS) институт, нийгэмлэгийн гишүүн болж "Aviation Applications Section", "Computing Society", "Natural Resources" секторуудын байнгын хурал, семинар, хэлэлцүүлэгт online-аар тогтмол оролцож байна хийсэн ажлаа сурталчлах, дэлгэрүүлэх, эш илтгэл тавихаар уригдсан 2023онд оролцно)

Дотоодын ОУ-ын хэрэглээний математикийн эрдэм шинжилгээний хуралд тавьсан 3ш илтгэл:

1. Jambaa S. Applications of the Kufarev method to a conformal mapping using the Christoffel-Schwartz integral, First International Conference on Applied Science and Engineering-Proceeding 2019, Mongolian University of science and technology, Ulaanbaatar, Mongolia, 05-06/IV, 2019.

2. Jambaa S. Kufarev's method for conformal mapping with the Schwarz- Chisoffel integral in some practical problems, the 6th International Conference on Optimization, simulation and control (cosc2019), program and abstacks, pp.64-65, 21-23/06.2019, Ulaanbaatar, Mongolia.

3. Jambaa S., Conformal mapping using the Christoffel-Schwartz integtal, transformations and appications, "The 7th International Conference on Optimization, Simulation and Control · June 20-22, 2022 | Ulaanbaatar, Mongolia.

Дотоодын олон улсын математикийн эрдэм шинжилгээний 2ш хурал зохион байгуулахад ороцсон:

1. First International Conference on Applied Science and Engineering-Proceeding 2019, Mongolian University of science and technology, Ulaanbaatar, Mongolia, 05-06/IV, 2019он, олон улсын хуралд .Цэдэнбаяр, Д.Ганхуяг нар зохион байгуулагчаар ороцсон(уг төслөөс санхүүжилт аваагүй).

2. "The 6th International Conference on Optimization, Simulation and Control (COSC2019)" Улаанбаатар, Монгол улс, 20-22/VI 2019он, Д.Цэдэнбаяр, Ж.Сонинбаяр нар зохион байгуулагчаар ороцсон(уг төслөөс санхүүжилт аваагүй)

3. Дотоодын улсын хэмжээний хэрэглээний математикийн хуралд 3ш илтгэл тавьсан:

1. Жамбаа С. Шварц-Кристоффелийн интегралаар коформ буулгалт хийх, зарим хэрэглээ, "Хэрэглэний

<p>3. Төслийн ОХУ-ын талын хамтрагч, ОХУ -ын талын удирдагч М.А. Бубенчиков ШУ –ы докторын зэрэг хамгаална. 2021 он.</p> <p>4. Монголын талын МУИС, ШТИС-ийн болон бусад хими, нано технологийн хамтран ажиллах лабораториуд ОХУ-ын хамтран ажиллах түнш Томскийн эрдэмтдийн туслалцаатай орчин үеийн судалгааны тэргүүлэх чиглэлийн туршилтыг явуулах дадлага, туршлага эзэмшин графен шүлтүүр материалыг үйлдвэрлэх хөрс суурьтай болох талаар</p>	<p>математик 2020” эрдэм шинжилгээний хурал, МУИС, 23/11 2019, Улаанбаатар, Монгол улс.</p> <p>2. Жамбаа С. Конформ буулгалтад Куфарёвын аргыг хэрэглэн саадыг тойрох шингэний урсгалын шугамуудыг тодорхойлох, “Хэрэглээний математик 2020” эрдэм шинжилгээний хурал, МУИС, ШУТИС, 15/05 2021, Улаанбаатар, Монгол улс.</p> <p>3. Jambaa Soninbayar. Relationship between ergodicity and mixing in the ergodic theory of dynamical systems, “Хэрэглэний математик 2021” эрдэм шинжилгээний хурал, МУИС, ШУТИС, 17/01 2022, Улаанбаатар, Монгол улс.</p> <p>3. Төслийн ОХУ-ын талын хамтрагчын хувьд ОХУ-ын талын удирдагч М.А. Бубенчиков 2020.07.10 –нд “Математические модели взаимодействия молекул газовых компонент с наночастицами и нанопористыми структурами” ШУ –ы докторын зэрэг хамгаалсан.</p> <p>4. Дотоодод олон улсын, улсын хэмжээний хурал, семинар зохион байгуулахад оролцсон:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Хэрэглээний математик-2022, 2022 оны 12 сарын 10, Ж.Сонинбаяр зохион байгуулагчаар ороцсон. 2. “The 7th International Conference on Optimization, Simulation and Control (COSC2022)” Улаанбаатар, Монгол улс, 20-22/VI 2022он, Д.Цэдэнбаяр, Ж.Сонинбаяр нар зохион байгуулагчаар ороцсон. 3. “Лабораторийн нөхцөлд синтезийн процессын давтамжийг хангах графен хавтанг гаргаж авах технологийн горимын тухай судалгаа явуулах” идэвхитэй явагдаж ШУТИС-ийн ХШУС-дээр “Динамик систем” 2ш семинар Д.Цэдэнбаяр,
--	--

3ш семинар зохион байгуулна. 2020он.

Д.Гнахуяг 2020 оны 04 сард зохион байгуулж явуулсан. (уг төслөөс санхүүжилт аваагүй болно).

5. Компьютерын программын бүртгэлийн 3ш гэрчилгээ авах:

1.хэт бага температурт саадыг резонанс системд хийн төлөвтэй гели, гелионы туулах, ойх тооцооллоор

2. Хэт бага температуртсаадын резонанс системд хийн

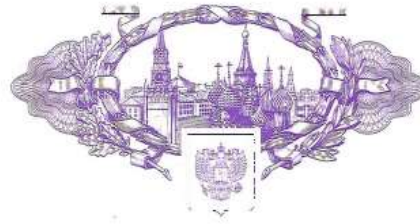
5. ОХУ-ын компьютерийн 5ш программын бүртгэлийн гэрчилгээ № 2021680776, № 2021680468, № 2021680775, №2021666867, №2021666869 (ОХУ-ын талын хамтрагч нарын нэр дээр) авсан(хавсралт 20-24).

төлөвтөй гели ба
гелионы тусгаарлах
интеграл
коэффициентын
тооцооллоор

3. Ойртон ирэх гели ба
атомуудыг
нүүрстөрөгчийн би-
давхаргын бүтцийн
хуваарилалтын(моекул
хоорондын харилцан
үйлчлэлийн хүчний
талбарууд, электрон
нягтралын талбар)
тооцооллоор



РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



СВИДЕТЕЛЬСТВО

о государственной регистрации программы для ЭВМ

№ 2021680776

Quantum sieving 3.0: Моделирование квантового просеивания изотопов через двухслойные мембраны с использованием полиномов Эрмита

Правообладатель: *Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» (RU)*

Авторы: *Потеряева Валентина Александровна (RU), Бубенчиков Михаил Алексеевич (RU)*

Заявка № 2021669467

Дата поступления 02 декабря 2021 г.

Дата государственной регистрации
в Реестре программы для ЭВМ 14 декабря 2021 г.

Руководитель Федеральной службы
по интеллектуальной собственности

Г.И. Ивлиев



РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



СВИДЕТЕЛЬСТВО

о государственной регистрации программы для ЭВМ

№ 2021666867

Имя:

Программное обеспечение: *Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Бурятский государственный университет имени Доржи Банзарова» (RU)*

Автор: *Пидыкин Севин Гуро-Цыренович (RU), Буденников Михаил Алексеевич (RU)*



Возраст: *20216660943*

Дата государственной регистрации: *09 июля 2021 г.*

Тип государственной регистрации:

Программа для ЭВМ: *21 октября 2021 г.*

Сведения о государственной регистрации программы для ЭВМ

[Signature]

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



СВИДЕТЕЛЬСТВО

о государственной регистрации программы для ЭВМ

№ 2021666869

Contact

Правообладатель: *Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Бурятский государственный университет имени Доржи Банзарова» (RU)*

авторы: *Цыдыпов Севан Гуро-Цыренович (RU), Бубеничков Михаил Алексеевич (RU)*

Заявка № 2021660944

Дата поступления 09 июля 2021 г.

Дата государственной регистрации

в Реестре программ для ЭВМ 21 октября 2021 г.



Руководитель Федеральной службы
по интеллектуальной собственности

Г.В. Немов

Г.В. Немов

Оршил

Төсөл нь хольцыг изотопоор баяжуулах шинэ аргыг дараах чиглэлийн хүрээнд: байгалийн болон сэргээгдэх нөөц, түүний зохистой хэрэглээг судлах зорилготой.

Квант механикийн үндсэн нөхцлүүд болон молекул динамикийн тооцооллын сонгодог аргууд дээр үндэслэн хэт бага температурт нийлмэл саадууд дээр өөрөөр хэлбэл долгионлог чанарын хүчтэй илрэлийн нөхцөлд атомыг тусгаарлах судалгааг энэ төслөөр санал болгож байна. Үнэмлэхүй тэг (практик дээр шингэн гелиэр хөргөх боломжтой нөхцөлд) –ийн орчимд бөөмсийг хурдаар нь ангилж максвеллийн тархалтын хонх үүсэх ба тэдний деброилиан долгионуудын хоорондох зөрүү ихэнхдээ тэдний жингийн зөрүүгээр тодорхойлогдож эхэлдэг. Ийнхүү харгалзах долгионы функцын хувьд хилийн нөхцлийг хангаж байх шаардлагын улмаас хоёр энергийн саадыг туулах янз бүрийн масстай хоёр бөөмсийн системд хэрэглэгдэж байгаа Ландаугийн дамжуулах коэффициентын сонгодог бодлого нь дамжуулалтын резонансийн горим өгдөг. Өөрөөр хэлбэл, хэрэв саадуудын хоорондох зай нь деброилиан уртад хуваагддаг бол саадан системээс гарах бөөмийг илрүүлэх магадлал илүү их байх болно. Тийнхүү хөнгөн атомуудын хольцыг саадын резонансын системийн тусламжтай ялган авах замаар сонгосон бүрэлдэхүүн хэсгийн хувьд харьцангуй их нэгжийн хуваагдлын коэффициентыг олж болох ба түүний утгыг тоон туршилтаар ойролцоолж болно. Жишээ нь, конденсацгийн цэгийн ойролцоо температурт гели-гелий системийг гелий гелионы системийн ялгаруулалтын хувьд ийм резонансийн систем болгон хэт нимгэн хоёр гурван давхаргаар хийсэн балан хавтанг (энэ системд хавтангуудын хоорондох зай нь дундаж дулааны хурд бүхий гелийн атомын деброилон долгионы урттай яг таардаг) авч болохыг үнэлгээнүүд үзүүлж байна.

Энэхүү төсөл нь HDT, He4-He3, Li6-Li7, Be8-Be9, B10-B11-ийн цогцуудаар дамжих шууд тоон загварчлалыг санал болгож байна. Үүнд: Давхаргууд хоорондын олон хувилбарт зайтай (хэт хүчтэй даралтанд байгаа балан хавтангийн загвар) C-C ба C = C холбоосын (sp^3 гибридизацийн байдалтай нэгэн төрлийн нэгдэл дэх 4 валенттай нүүрстөрөгчийн $2S22P6$ зангилаанууд) гаднах орбиталиудын бүтцийг тооцон байгуулагдсан 3 энгийн эс бүхий зургаан өнцөгт талст 2-3 атомын давхаргуудтай загвар систем, харгалзах коэффициентуудыг хамгийн зөв

тодорхойлохын тулд стационар 3-хэмжээст каноник гамильтониантой боловч тархалтын хүчийг тооцсон хосолсон харилцан үйлчлэлийн нийлмэл потенциалтай Шредингерийн тэгшитгэлийн тоон шийдлийн явцад олдсон цогцын (бүрдэл хэсгийг ялгах) дэд системд харгалзах долгионы функцуудыг ашиглах болно. Тооцооллын асар их хэмжээний хүндрэлтэй харьцуулахад орон зайн потенциалын хуваарилалтын хамгийн нарийн тооцоо нь зөвхөн атомын хольц ч биш (эдийн засгийн хувьд ашигтай биш) хамгийн чухал нь изотопын хольцын хэт криогенийн тусгаарлалтын кристалл бүтцийн сонголтод зайлшгүй шаардлагатай хамгийн найдвартай үр дүнг өгдөг.

Хольцыг изотопоор баяжуулах шинэ аргыг судлах зорилготой бөгөөд үүнд: байгалийн болон сэргээгдэх нөөц, түүний зохистой хэрэглээ юм.

Маш төстэй шинж чанартай бөөмсийг салгах нь зөвхөн резонансын нөлөөгөөр боломжтой болсон.

Шинэ байгальд ээлтэй **ухаалаг материал-шүүлтүүр** бүтээхтэй холбоотой судалгаанууд нь ашигт малтмал,уул, уурхай, байгалийн хий, цөмийн технологийн ашиглах их нөөцтэй ОХУ, Монгол улсуудын хувьд үнэтэй бүтээгдхүүн гарган авах боломжийг бүрдүүлэх юм.

НЭГДҮГЭЭР БҮЛЭГ. СУДАЛГААНЫ ТОЙМ

1.1 Шийдвэрлэхээр зорьж буй шинжлэх ухааны суурь асуудлын тодорхойлолт

Төслөөр шийдвэрлэхийг зорьсон шинжлэх ухааны суурь асуудал нь хэт бага температурт дан атомын давхаргаар үүсгэгдсэн энергийн саадын системээр туннелэн шигшилтийн тусламжтайгаар изотопыг тусгаарлах өөр аргыг боловсруулах явдал юм. Үүний тулд изотопын тусгаарлах процессийн үндсэн судалгааг компьютерийн загварчлалаар гүйцэтгэнэ. Энэ тохиолдолд хэрэглэгддэг математикийн загварууд нь сонгодог онол (онолын физик) болон ийм төрлийн асуудлуудын тоон шийдлийн (тооцоолох квант хими, тооцоолох молекулын динамик) орчин үеийн дэлхийн туршлагад нийцэх болно.

Судалгааны цаг үеэ олсон байдал

Орчин үед гелион нь халуун цөмийн урвалын ирээдүйтэй түлш гэгддэг бөгөөд онолын хувьд Лоусенагийн шинжүүрээр илүү таатай ач холбогдолтой гэж тооцогддог.

Гелийн атомууд нь 12 MeV-аас их энерги ялгаруулдаг халуун цөмийн синтезийн урвалд өөр хоорондоо болон дейтери эсвэл трититай оролцдог тул онолын хувьд хүн төрөлхтөний энергийн хэрэгцээний ихэнх хэсгийг хангахад хэрэглэх боломжийг олгодог.

Гэвч түүний хэрэглээг хязгаарлах хүчин зүйлсүүд бас бий. Хамгийн гол нь гелион агуулсан хуурай газрын нөөц юм. Энэ нь зөвхөн ойролцоогоор 45 тэрбум куб метр юм. Газар дээрх түүний илрэл нь дэлхий үүссэний дараах анхдагч бодисын нөөц биш харин одоо байгаа цацраг идэвхт элементийн дийлэнх хэсгийн альфа бөөмсийн, өөрөөр хэлбэл гелийн цөмийн тусгаарлалттай холбоотой задрал юм.

Орчин үед БНХАУ саран дээрээс гелионыг олборлох хөтөлбөрийг хэрэгжүүлж байгааг дэлхий нийт мэдэх билээ. Гэвч жинхэнэдээ гели ба гелионы шавхагдашгүй эх үүсвэр бол нарны аймгийн хийн супер аварга Бархасбадь, Санчир гаригууд юм.

Ирээдүйд ашигт малтмалын олборлолтын оргил нь эх дэлхийгээс хальж өргөжих нь гарцаагүй боловч сарны гадаргуу ба Юпитерийн тойрог орчмоос байгалийн хийн

дахин боловсруулалтын үйлдвэрт гелионыг хичнээн гаргаж авсан ч түүнийг тусгаарлах үр дүнтэй технологитой байх шаардлагатай.

Өнөө үед бүүр дэлхийн 2-р дайны үед боловсруулсан изотоп ялгах технологийг өргөн хэрэглэж байна. Энэ технологи нь хийн байдалтай хольцод центрифугийг ашиглан центрифугийн тунадасжилт суурилдаг.

Эдгээр аргууд нь изотоп үйлдвэрлэх стратегийн асуудлыг шийддэг боловч эрчим хүчний хэрэглээ ихтэй, түлшний үйл явцын EROEI-ийг эрс багасгадаг. Хэдийгээр центрифугийн тунадасжилтийн хувьд уран-235 ба уран-238-ийг бодвол массын маш их зөрүүгээс хамааран Гели 4 ба гели 3-ын массын харьцаа нь хавьгүй илүү таатай ч тусгаарлах процессийг хэрэгжүүлэх эрчим хүчний зарцуулалт арай багатай аргууд бий гэж зохиогчид үзэж байгаа юм.

Лазерын гадаргууг ашиглан изотоп тусгаарлах аргууд бас байдаг боловч энэ аргаар гаргаж авсан изотопын EROEI гадаргуу дээр гадаргын болон монохроматын цацрагийн эх үүсвэрүүдийн (хэд хэдэн хувь) үр нөлөөтэй байдал нь хязгаарлагдмал байдаг.

Өнөөдөр изотопын тусгаарлалтын асуудал улам бүр хурцаар тавигдаж байна. Учир нь түлшний (газрын тос, байгалийн хий, нүүрс) уламжлалт эх үүсвэрүүд нь дэлхий дахинд тархсан декарбонизацийн хөтөлбөрийн нөлөөгөөр цөмийн болон сэргээгдэх эрчим хүчинд аажмаар зайгаа тавьж өгч байна. Термостат эрчим хүчний шинжлэх ухааны дэвшил хөгжил нь уламжлалт U235-U238 төдийгүй He4-He3 гэх мэт изотопын баяжуулах технологийг хөгжүүлэхийг шаарддаг.

Энэ чиглэлээр судалгаа явуулж байгаа өнөөгийн байдалд хийсэн дүн шинжилгээ (шинжлэх ухааны ном хэвлэлд гарсан нийтлэлүүдээс эш татан энэ салбарт хийгдсэн судалгааны тоймыг харуулав)

Энэ төслийн хүрээнд моноатомын давхаргууд буюу молекулын сүвэрхэг бүтцээр үүссэн энергийн хаалтуудын систем ашиглан гелионы атомыг сонгох туннелэн дамжуулалтаар татах асуудлын сонирхолтой талыг судлахаар төлөвлөж байсан. Өмнө нь субнано нүхээр гелийн атомууд нэвчин өнгөрөх математикийн загварчлалын үр дүнгээр түүний нийлмэл саадаар дамжин өнгөрөх коэффициент нь ижил бүтэцтэй нэг саадыг өнгөрөхөөс илүү байж болох тогтоогдсон билээ [1]. Энэ

нь биднийг гелийг бодвол гелионы хувьд илүү өндөр дамжуулах коэффициенттэй нийлмэл саадыг үүсгэх боломжтой гэсэн дүгнэлтэд хүргэж байна.

Эхний зарчимд тулгуурласан тооцооллын тусламжтайгаар графены нитрид ($r\text{-C}_3\text{N}_4$) нь H_2 , N_2 , CO , ба CH_4 агуулсан хольцуудаас гадна гелийн Ne ба Ar тай хийнүүдээс гелийг ялгахад нь илүү үр дүнтэй болохыг [2]-т харуулсан. Мөн 3He / 4He хольцыг квант шигшилтээр 49 К-ийн температурт тусгаарлалтын түвшинг 18 нэгж хүргэж болохыг тооцооллын аргаар харуулсан $r\text{-C}_3\text{N}_4$ мембран ихээхэн сонирхол татаж байна.

[3] -д химийн урвалын явцын динамикийг тооцоолол ашиглах аргуудын боловсруулалт нь, туннел ашиглахыг оруулан, химийн үзэгдлийн талаарх бидний ойлголтыг сайжруулдаг болохыг харуулж байна. Химийн урвалын хурдны талаарх мэдлэг нь химийн гол сэдэв юм. Гэсэн ч квант идэвхжилийн нөлөөгөөр хэвийн байдлаасаа төлөв байдал нь өөрчлөгддөг урвалын тоо нэмэгдэж байна. Бөөмсийн долгионы хоёрдмол байдлаас туннелийн нөлөө үүсдэг. Даван туулах чадвартай эсэхээс үл хамааран боломжит саадны нөгөө талд бөөмс олдох магадлал үргэлж байдаг. Тиймээс дээрх саад дээгүүр шилжих (сонгодог шилжилтийн) болон саадын дундуур туннелээр нэвтрэх (квантмеханикийн шилжилт) шилжилтийн хооронд химийн урвал явагдах замыг сонгоход өрсөлдөөн үүсч болох юм. Урьдчилан таамаглалтай харьцуулахад урвалын хурдыг хянах асуудлын хувьд саадын өргөн нь (цөмийн саадыг даван туулах зай) түүний химийн үйл явцын идэвхжилийн энергиэс илүү чухал ач холбогдолтой байж болох юм.

Сонгодог ба квант механик тохиолдлыг ялгах гол онцлог нь температураас хамаарах урвалын хурдны хамаарал юм. Сонгодог тохиодол нь температураас (Arrhenius хамаарал) хүчтэй хамаардаг бол эхний ойртолтоор туннелийн арга нь температураас хамаарахгүй юм. Туннелийн нөлөө зөвхөн криогенийн температурт чухал ач холбогдолтой гэдэг буруу ойлголт нийтлэг байдаг. Орчин үед туннелийн нөлөөний хувь нэмэр нь тасалгааны температурт ч мэдэгдэхүйц ач холбогдолтой болохыг тогтоожээ.

[4] -д саадын тусламжтайгаар квант механик шилжилтийн асуудлын тоон шийдлийг авч үздэг. Энэ шийдэл нь Шредингерийн тэгшитгэл дээр тулгуурладаг. Санал болгож буй аргыг зарим тасалдлын боломжит тархалт дээр туршиж үзсэн. Квадрат саад болон цооногийн тооцооллын үр дүн нь дамжуулалтын коэффициент (квадрат саад доторх) -ын хэлбэлзлийн төлөв болон харгалзах резонанс шилжилтүүдийг

оруулан тооцсон нарийн тооцоололтой тохирч байгаа юм. Саадын урд талдах хэлбэлзэл нь саадын ар талдах явж өнгөрсөн долгионы хавтгай төлвөөс ялгаатай нь унаж буй болон ойж буй бөөмсийн хоорондох хөндлөнгийн нөлөөллөөс үүдэлтэй.

[5]-д $^3\text{He} / ^4\text{He}$, H_2 / D_2 , H_2 / T_2 хөнгөн изотопын тусгаарлалт нь изотопын шошго, цөмийн урвал, криогенны боловсруулалт, эрчим хүч үйлдвэрлэх зэрэг төрөл бүрийн дэвшилтэт технологид маш чухал ач холбогдолтой юм. Онолын судалгаагаар квант шигшилтийн тусламжтайгаар нүүрстөрөгчийн нитритээр хийгдсэн сүвэрхэг графен материалыг ашиглан $^3\text{He} / ^4\text{He}$ -ыг үр ашигтайгаар тусгаарлаж болохыг харуулжээ. Бага зэрэг деформацийн улмаас энэ материалаас мембраны тархалтыг тохируулахын тулд $^3\text{He} / ^4\text{He}$ -ийн тусгаарлах өндөр сонголттой мөн изотопыг үр дүнтэй цуглуулахад ашигладаг өндөр нэвчилттэй хаалт бүхий температуран цонх үүсгэж болно.

[6] -д H_2 / T_2 , $^3\text{He} / ^4\text{He}$, $\text{CH}_4 / \text{CD}_4$, H_2 / HD гэсэн хольцыг судлав. Нано нүхүүдэд квант шигшилтээс тэг даралтын үед сонголтыг тооцоолох энгийн онолыг үзүүлэв. Изотоп ба нано хоолойнуудын хоорондох харилцан үйлчлэлийн хувьд бодитой, үнэн зөв потенциалууд ашиглагдсан билээ. Энгийн онол болон нарийвчилсан тооцооллын хооронд сайн нийцэл гаргаж авсан юм.

[7]-д молекул динамикийн загварчлал, Монте Карлогийн арга ба 30-150 К температурын интервалд цеолит дотор устөрөгч болон дейтумын шингээлт, тархалтыг судлахын тулд нейтроны тархалтын туршилтын өгөгдлүүд ашиглагдсан байна. Квант залруулгад зориулсан Фейнман – Хиббсийн олон хувилбарт ялгаатай аргын хүрээнд ашиглаж болохуйц устөрөгчийн боломжит параметруудийн шинэ цуглуулгыг санал болгож байна . Бага температурын үед изотопын дамжуулалтанд квант идэвхжил мэдэгдэхүйц нөлөө үзүүлэхийг тооцооллуудаар харуулна .

[8] дугаар илтгэлд бага температурт цеолит мембранаар дамжуулан устөрөгч ба дейтерийн молекул шигшилтийн тухай нийтлэгдсэн. Квантын нөлөөг хамарсан атомын загварыг Фейнман – Хиббсийн арга ашиглагдана. Бага температуртай үед тархалтын урвуу кинетик нөлөө үүсдэг бөгөөд хүнд изотоп, деутериум нь устөрөгчөөс хурдан тархдаг. 65 К температурт тархалтын сонголт 46 нэгжид хүрдэг байна.

Сүүлийн жилүүдэд 50-70 К-ийн бага температурт хэт нимгэн нано нүхт бүтцээр хөнгөн хийн изотопуудыг дамжуулахын тулд туннелийн үр нөлөө бүхий энергийн саадаар долгионы дамжих онолыг идэвхитэй ашиглаж ирсэн. Энэ онол нь нэг

хэмжээст Шредингерийн тэгшитгэлийн нарийн шийдлийн жишээнүүдийг харуулсан Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшицийн номонд нийтлэгдсэн байна. Гэсэн хэдий ч, энэхүү энгийн бөгөөд үр дүнтэй онол нь давтагдах шинж чанарыг харуулсан нийлмэл саадыг давах долгионыг тодорхойлоход ашиглагдаагүй байсан юм.

[9] -д 1D Шредингерийн тэгшитгэлийг шийдсэний үр дүнд ерөнхий хэлбэрийн хаалтаар массыг шилжүүлэх коэффициентүүд олдсон. Компьютер дээр алгоритмийг хэрэгжүүлэх аргыг танилцуулсан болно. Энэ арга нь тэгш өнцөгт хэлбэрийн саадын хувьд шийдэх нарийн шийдлүүдийг өгдөг. Жишээлбэл, Аррениусын хуультай адилаар хурд нь өөрчлөгдөж байдаг химийн урвалыг загварчилсан байдаг.

Ном зүй

1. А.М. Бубенчиков, М.А. Бубенчиков, А.И. Потеев, Э.Е. Либин, Ю.П. Худобина В.В. Кулагина. Прохождение микрочастиц через сложные составные потенциальные барьеры // Известия высших учебных заведений. Физика, Т. 60, № , 2017, с.: 119-126.
2. Li Feng, Qu Yuanyuan, Zhao Mingwen. Efficient Helium Separation of Graphitic Carbon Nitride Membrane // Carbon. 2015. 95. P. 51–57. DOI: 10.1016/j.carbon.2015.08.013.
3. Hauser A.W., Schrier J, Schwerdtfeger P. Helium tunneling through nitrogen-functionalized graphene pores: pressure-and temperature-driven approaches to isotope separation // The Journal of Physical Chemistry. C. 2012. Vol. 116 (19). P. 10819–10827.
4. Gedillo A. Quantum Mechanical Tunneling through Barriers: a Spreadsheet Approach // J. of Chemical Education. 2000. Vol. 77, № 4. P. 528–531.
5. Qu Y. et al. Highly Efficient Quantum Sieving in Porous Graphene-like Carbon Nitride for Light Isotopes Separation // Scientific Reports. 2016. 6:19952.DOI: 10.1038/srep19952.
6. Challa S.R., Sholl D.S., Johnson J.K. Light isotope separation in carbon nanotubes through quantum molecular sieving // Physical Review B. 2001. Vol. 63. 245419.
7. Kumar A.V.A., Jobic H., Bhatia S.K. Quantum effects on adsorption and diffusion of hydrogen and deuterium in microporous materials // J. Phys. Chem. B. 2006. Vol. 110. P. 16666–16671.

8. Kumar A.V.A., Bhatia S.K. Quantum effect induced reverse kinetic molecular sieving in microporous materials // Physical Review Letters. 2005. Vol. 95. 245901.

9. Cedillo A. Quantum mechanical tunneling through barriers: A spreadsheet approach // Journal of chemical education. 2000. Vol. 77. № 4. P. 528–531.

Төслийн зорилго, зорилтууд

Төслийн зорилго нь энергийн саадын системээр дундуур атомын туннел хийх математикийн загварчлалыг гаргах, түүнчлэн тэдгээрт атомыг оновчтой салгахад тохирсон харгалзах үйл явцын үзүүлэлтийг харуулах тодорхой молекул бүтцийг заасан саадын систем, бодит бүтцийг сонгох явдал юм.

Зохиогчдын үзэж буйгаар эдгээр зорилтууд нь дараах үе шатуудаар хэрэгжих ёстой юм:

- 1) Саадуудын системийн потенциалын орон зайн хуваарилалтын байгууламж
- 2) Каноник гамильтонтой, тархалтын харилцан үйлчлэлтэйгээр 3-хэмжээст Шредингерийн тогтмол тэгшитгэлийг байгуулах.
- 3) Гаргаж авсан Шредингерийн тэгшитгэлийн үр дүнгийн тоон шийдэл ба шигшигдсэн бөөмсийн харгалзах долгионы функцийг тодорхойлох.
- 4) Гарч ирсэн долгионы функц дээрээ үндэслэн бөөмсийн хоорондох зай зэргээс хамаарсан саадын системээр бөөмсийн олдох магадлалын талбарыг тодорхойлох.
- 5) Бөөмсийн төрөл бүрийн хувьд тэдгээрийн хоорондох зай ба тэдгээрийн хэлбэрээс хамаарсан саадыг туулах дамжуулалтын харгалзах коэффициентүүдийн хамаарлыг тодорхойлох
- 6) Төслийн хүрээнд хийгдэхээр төлөвлөсөн туршилтын өгөгдлүүдтэй авсан судалгааны үр дүнг харьцуулах.
- 7) Изотопын квант шигшилтийн оновчтой молекул бүтцийг сонгох.
- 8) Нөлөөллийн өндөр зэрэглэл бүхий хэвлэлүүд дээр гарсан үр дүнгийн тухай нийтлэх.

Төсөлд тусгагдсан судалгааны шинэлэг зүйл (шинжлэх ухааны шинэ санаа нь боловсруулагдсан, санал болгосон асуудлыг шийдэх шинэлэг арга нь нотлогдсон)

Төслийн шинжлэх ухааны шинэлэг зүйл нь нэн түрүүнд тавигдсан зорилтод байгаа юм. Учир нь бөөмсийг тусгаарлах зорилготой нийлмэл саадан дундуур туннел маягаар туулах үйл явцыг анх удаа судлагдах юм.

Бөөмсийн энергийн саад дундуур дамжуулах тухай бодлого нь сонгодог [1] боловч олон давхраат саадын хувьд түүнийг хэрэглэх нь онолын зарим бэрхшээлтэй тулгардаг бөгөөд тооцооллын маш их хүндрэлтэй байдаг. Энэ бүхнээс гадна, төслийн хүрээнд туршилтын судалгааг гадаадын түншүүдийн хүчин чармайлтаар гүйцэтгэх ба ингэснээр олж авсан онолын үр дүнг бататгаж, энэ явцад хийгдсэн математикийн загваруудыг баталгаажуулна.

Энергийн саадаар дамжуулах криоген шигшилтийн туршилтууд хийгдсэн [2] боловч, саадын давтамжит систем дээр квант шигшилт хийх туршилт анх удаа хийгдэх юм.

Эцэст нь, изотопыг квант криогенээр тусгаарлах төхөөрөмжийн шинжлэх ухаан, техникийн үзэл баримтлалыг анх удаа авч хэлэлцэх бөгөөд энэ нь магадгүй ирээдүйд практикт нэвтрэх болно. Гарсан үр дүнгүүд нь Acta Crystallographica (Q1), Даймонд ба Холбогдох материал (Q1) гэх зэрэг өндөр зэрэглэл бүхий сэтгүүлийн нийтлэлээр батлагдах болно. RISC болон SCOPUS сэтгүүлд хэвлэгдсэн нийтлэлүүдээр баталгаажсан олон жилийн ажлын туршлагатай, хамгийн сүүлийн үеийн тоног төхөөрөмж, програм хангамжтай, түүнчлэн шаардлагатай бүхий л чадавхитай энэ төслийн баг нь төслийн зүгээс тавьсан зорилтуудыг бүрэн шийдвэрлэх чадвартай гэдэгт итгэлтэй байна.

Төслийн тогтоосон зорилтуудыг шийдвэрлэх магадлал дараах байдалтай байна. нийлмэл саадаар дамжих бөөмсийг судалгаа нь найдвартай үйл ажиллагаа юм. Учир нь түүний шийдэлд зориулсан арга техникүүд нь энэ төрлийн зорилтыг шийдвэрлэхэд амжилттай ашиглагдаж байгаа орчин үеийн квант механик ба тооцоолох математикийн бүхий л аппаратыг багтаадаг бөгөөд М.Бубенчиков зохиогчдын нэг нь байсан [3] өгүүлэл дээр багаараа ажиллах явцад дээрх арга техникүүдийг амжилттай хэрэгжүүлсэн юм. Энэ төслийн ялгаа нь, түүнээс ч илүү ач холбогдол нь гарсан үр дүнгүүд дан атомын давхаргын резонанс системээр изотоп тусгаарлах шинэ процессийн онолын судалгаанд ашиглагдахад оршино. Энэ

төслийг зохиогчдын баг нь одоо байгаа нүүрстөрөгчийн бүтцэд H-D-T, He4-He3, Li6-Li7, Be8-Be9, B10-B11 изотопуудийг үр ашигтай тусгаарлах термодинамикийн нөхцлийг олох эсвэл одоохондоо практикаар гаргаагүй байгаа бүтцүүдэд тавигдах шаардлагыг тодорхойлох боломжтой юм.

1. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Теоретическая физика. КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА (нерелятивистская теория). 4-е изд., испр. -М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит. 1989. - 768 с. ISBN 5-02-014421-5 (т. III)
2. Qu Y. et al. Highly Efficient Quantum Sieving in Porous Graphene-like Carbon Nitride for Light Isotopes Separation // Scientific Reports. 2016. 6:19952.DOI: 10.1038/srep19952.
3. А.М. Бубенчиков, М.А. Бубенчиков, А.И. Потеекаев, Э.Е. Либин, Ю.П. Худобина В.В. Кулагина. Прохождение микрочастиц через сложные составные потенциальные барьеры // Известия высших учебных заведений. Физика, Т. 60, № , 2017, с.: 119-126.

Санал болгож буй арга барил, тэдгээрийн зорилго, зорилтыг хэрэгжүүлэх үндэслэл (Санал болгож буй судалгааны дэлгэрэнгүй тодорхойлолт; танилцуулга нь зорилго, зорилт, үр дүнгийн найдвартай байдал, судалгааны арга барил, судалгааны аргыг үнэлэх боломжийг шинжээчид олгоно)

Төсөлд заасан зорилтуудыг шийдвэрлэхийн тулд дараах аргыг ашиглахаар төвлөж байна:

- Квант механикийн сонгодог арга: саадын системээр бөөмс дамжих явцыг тодорхойлох тогтмол нэг хэмжээст болон тогтмол гурван хэмжээст Шредингерийн тэгшитгэл, Хартри- Фок-Рутаны арга, MO LCAO ойролцоо, электрон корреляци , саад үүсгэгч дан атомын давхаргын электрон нягтралын хуваарилалтыг олох электрон нягтралын функциональ онол (DFT) гэх мэт;

- Молекул физикийн сонгодог аргууд - Шредингерийн тэгшитгэлд кулоны, тархалтын, индукцэн харилцан үйлчлэлийг тооцох молекул хоорондын харилцан үйлчлэлийн потенциалын арга -танилцуулах, атомын арга барил нь (Морс, Леннард-Джонс, Пешля-Теллерийн өөрчлөгдсөн потенциал- загварууд нь энэ төслийн OCD шатанд туршилтын өгөгдлүүдтэй шалгагдах юм) , молекулын бүтцийн цаашдын потенциалыг байгуулах Хилл- Китайгородскийн атом- атом хоорондын

харилцан үйлчлэлийн арга, бөөмсийн импульс (деброилэн долгион) тархалтыг тооцох Максвелл хуваарилалт болон бусад;

- Тооцон бодох математикийн сонгодог аргууд: Рунге-Куттын арга (бөөмсийн хөдөлгөөний тэгшитгэлийн шийдэл), Гаусс-Зайделийн болон урвуу давталтын арга (молекул хоорондын харилцан үйлчлэлийн хүчний талбарын хуваарилалтын интегралыг тооцоолох, Шредингерийн тэгшитгэл, Монте Карло (гүйн ирэх бөөмсийн баллистик туршилтууд) болон бусад зэрэгцээ тооцооллын алгоритм (НИ ТГУ-гийн компьютер кластер дээр дээр эхний хавсарсан бодлогын хувьд), түүнчлэн математик физик гэх мэт тэгшитгэлийг шийдвэрлэх сонгодог аргууд.

- Магадлалын онол, математик статистикийн сонгодог аргууд: молекул статистикийн бодлогуудад тархсан байн тухай бодлого, Монте-Карло арга) түүнчлэн квант статистикийн сонгодог аргууд болон бусад.

Шинжлэх ухааны судалгааны үр дүн, тэдгээрийн шинжлэх ухаанч, хэрэглээний ач холбогдол

1. Тоон болон бодит туршилтын явцад дээр дурдсан аргаар изотопыг үр ашигтай тусгаарлах боломжууд баталгаажсан тохиолдолд цөмийн үйлдвэрлэлийн хэрэгцээнд квант криогений шигшилтийн аргыг нэвтрүүлж болно. Цаашид U238-U235 изотопын тусгаарлалтын үйл явцын компьютер загварчлалыг ашиглан тооцоолохоор төлөвлөж байна. Энэ процессыг загварчлах үед саадын резонанс системээр ураны дамжуулалтын үр ашгийн коэффициентийн тухай өгөгдлүүд олдож болох бөгөөд ийм аргын хэт бага температур гарган авах ба шүүлтийн үеийн атомчлалын зардлыг тооцсон эдийн засгийн үр ашгийг тооцоолох эхний тооцоог олж авах болно.

2. Ажлын үр дүнгээс үзэхэд сонгодог аргаар хийсэн тоон туршилт дээр үндэслэн хэт бага температурт саадын резонанс системийн туннелэн нэвчилтийн тухай таамаглал, мөн түүнчлэн энэ аргаар изотопыг үр ашигтай тусгаарлах боломжийн тухай таамаглал батлагдана. Энэ үр дүн нь саадын резонанс системийг ашиглах тал дээр анхдагч болох бөгөөд өнөөдөр аль хэдийн гели-гели хийн хольцыг нүүрстөрөгчийн нано нүхэн дан саад дээр тусгаарлах ажлууд хийгдээд эхэлсэн байна.(судалгааны өнөөгийн байдал бүлгийг үз).

3. Баяжуулах үйл ажиллагааны макро шинж чанарыг гели-гелиний хольцын жишээн дээр тодорхойлно: температур, саадын резонанс систем үүсгэгч нүүрстөрөгчийн бүтцийн молекулын багууламж; түүний хэмжээ; саадыг үүсгэж буй моноатомын

давхрагууд байрлах резонанс төлөв; хольцын тусгаарлах коэффициент. Энэ үр дүн нь бүрэн анхдагч байх болно. Учир нь квант механик шинж чанар (хэт бага температур) -ын нөхцөлд атомын резонанс дифракц нь анх удаа изотопыг тусгаарлахад ашиглагдана.

4. Геометрийн болон энергийн үзүүлэлтүүдээр эдгээр саад дээр гелионы тусгаарлалтын оновчтой байдлын асуудал шийдэгдэнэ. Энэ үр дүн технологийн тусгай параметруудийг тусгах тул бүрэн анхдагч нь болох юм.

5. Үүнээс гадна моноатомын давхаргын системийн атомын нэвтрэлтийг тооцоолох цогц хөтөлбөрийн тоон үзүүлэлтийг ашиглан тодорхойлсон саадын резонанс системээр дамжин өнгөрөх атомын харилцан үйлчлэлийг тодорхойлох, тооцоолоход нэгдсэн арга барил бий болно. Хэдийгээр молекул шүүлтүүр болон бөөмсийн энергийн саадтай квант механик харилцан үйлчлэлийн олон тооны загвар хангалттай байгаа ч гэсэн энэ үр дүн тодорхой асуудлыг шийдэх цогц шийдлийн жишээ болохынхоо хувьд шинжлэх ухааны нийгэмлэгийн сонирхлыг татах юм.

Төслийг хэрэгжүүлэх явцад гарсан үр дүнд үндэслэн төлөвлөсөн болно:

1. Шинжлэх ухааны зөвшөөрөгдсөн (ВАК жагсаалтаас) хэвлэлүүдэд дор хаяж 12 баримт бичгийг, SCOPUS буюу WEB of SCIENCE-ийн индексжилттэй сэтгүүлүүдэд доод тал нь 4 өгүүлэл, тэдгээрийн дор хаяж 3 нь 1-2 хэсгээс бүрдэх, нийтлүүлэх.

2. Төслийн хариуцсан гүйцэтгэгчээр 1 докторын диссертацийг хамгаалах (М.А. Бубенчиков).

3. Төслийн гүйцэтгэгчдийн 3 нь нэр дэвшигчийн диссертацийг хамгаалах (Мамонтов Д.В., Уколов А.В., Челнокова А.С.)

4. Компьютерийн программын бүртгэлийн 3 гэрчилгээ авах:

1) хэт бага температурт саадын резонанс системд хийн төлөвтэй гели, гелионы туулах, ойх тооцооллоор.

2) Хэт бага температурт саадын резонанс системд хийн төлөвтэй гели ба гелионы тусгаарлах интеграл коэффициентын тооцооллоор.

3) Ойртон ирэх гели ба гелионы атомуудыг нүүрстөрөгчийн би-давхаргын бүтцийн хуваарилалтын (молекул хоорондын харилцан үйлчлэлийн хүчний талбарууд, электрон нягтралын талбар) тооцооллоор.

1.2 Төслийн хэрэгжилтийн явцад Монгол-Оросын талын багуудын гишүүд болон Монгол-Оросын түншүүдийн харилцан уялдаа холбоо, зохицуулалт

Төслийн Монголын талын хамтран гүйцэтгэгчдийн гол оролцоо бол гелигээс гелионыг ялгах тусгаарлах хаалтыг гүйцэтгэдэг дефекттэй графен хавтангийн синтезээр хийх ажлууд бөгөөд хэт бага температурт тэдгээрийг тусгаарлах туршилт хийхэд оршино.

Хамтарсан ажлын хамгийн эрчимтэй үе шат бол дефекттэй графен хавтангуудын ба тэдгээрийн синтезийн болон изотопын тусгаарлалт хийх туршилтын аргын техникийн шаардлагыг боловсруулах, түүнчлэн туршилтыг өөрөө явуулахад оршино.

Томскийн их сургууль, Монгол Улсын Их Сургуулийн зайны сургалтад харилцаа холбооны боломжийг ашиглан гадаадын хамтран гүйцэтгэгчдийн хамтын ажиллагааг онлайнгаар явуулахаар төлөвлөж байна.

Монгол Улсын Их Сургуульд алсын зайнаас хандах боломжтой тул хоёр талаас ТГУ-ийн компьютерийн кластер дээр боловсруулсан математик загварчлалыг ажиллуулж болно.

Ажлын явцад сонгон шалгаруулалт , семинар зохион байгуулж, Оросын болон гадаадын хэвлэлд хамтран гаргасан үр дүнгүүдээ нийтлэхээр төлөвлөж байна. МУИС-д хийгдсэн ажлын үр дүнд квантын химийн салбарт математик загварчлалын шинжлэх ухааны болон боловсролын шинэ чиглэлийг нээж, стратегийн түншлэлийн тухай хэлэлцээр байгуулагдана.

Төслийг хэрэгжүүлэх эхний жилд шинжлэх ухааны үр дүн гарна (төсөлд дурдагдсан судалгааны төлөвлөгөөний хэрэгжилтийн боломжит түвшин, үр дүнг судлах, үнэлэх боломжийг шинжээчид олгохуйцаар бичигдсэн байх)

Төслийн дагуу хийгдсэн ажлын үр дүнгээр сонгодог аргаар хийсэн тоон туршилтыг үндэслэн хэт бага температурт саадын резонанс системээр гелионы туннелэн нэвчилтийн тухай , түүнчлэн энэхүү аргаар гелигээс түүнийг үр дүнтэй тусгаарлах боломжийн талаарх таамаглалууд батлагдах болно. Энэ үр дүн нь саадын резонанс системийг ашиглах тал дээр анхдагч болох бөгөөд одоогийн байдлаар гели-гели хийн хольцыг нүүрстөрөгчийн нано нүхт дан хаалт дээр тусгаарлах ажил хийгдэж байна (судалгааны өнөөгийн байдал бүлгийг үз).

Судалгааны эхний жилд Оросын талаас дараах үр дүнд хүрэхээр төлөвлөж байна. Үүнд:

1. Нано бүтцээр изотопын квант шигшилт хийх салбарт онолын болон туршилтын судалгааны өнөөгийн төлөв байдлын тойм. Судалгааны тактикуудыг бий болгох, асуудлыг шийдэхийн тулд тодорхой тоон алгоритмыг бий болгох.

Энэ үе шатанд математик загварын цуглуулга ба төсөл хэрэгжүүлэгчид авч үзэх боломжтой тооцоолох станцын тооцооллын хүчин чадал, компьютерийн кластерийн тооцооллын хүчин чадал зэргийг харгалзсан компьютер загварчлалын тооцооллын аргууд бий болно. Үүний үр дүнд тооцооллын нарийвчлал ба боломжит чадамжийн хоорондын тэнцвэрийн үнэлгээг тооцоолно.

Хариуцан гүйцэтгэгчид: Бубенчиков М.А., Челнокова А.С

2. Саадын электрон нягтралын хуваарилалтын дагуу потенциалын сонголтыг хийх асуудлын тодорхойлолт. Графен үүрний хувьд болон харилцан үйлчлэлийн эх үүсвэрүүдийн орон зайн нягтралын магадлалын талбарын хувьд тооцоолол нь хэдийнээ хийгдсэн электрон нягтралын хуваарилалтуудыг харьцуулах. Боловсруулсан компьютерийн загварчлалаар энгийн графен үүрнүүдийн хувьд электроны нягтралын хуваарилалтыг судалж одоогийн байдлаар олж авсан үр дүнгүүдийг нэгтгэх. Ab initio саадтай бөөмсийн харилцан үйлчлэлийг тодорхойлох. Энэ үе шатанд бэлэн байгаа нийтлэлүүдийн өгөгдлөөс судалгаа хийхээр сонгосон нүүрстөрөгчийн бүтцийн хамгийн бага хэмжээний сегментийн потенциал зохион бүтээгдэх бөгөөд хэрэв шаардлагатай бол тооцооллоор баяжуулна. Энгийн графен үүрний компьютерийн загварыг хийж 2-3 давхаргын системд өргөтгөнө.

Хариуцан гүйцэтгэгчид: Бубенчиков М.А., Мамонтов Д.В.

3. Тооцоолох квант механик аргыг ашиглан хоёр дираковский саадын резонанс системээр He3, He4 атомуудын резонанс туулалтын хялбарчилсан загварчлалын асуудлыг томъёолох

Хариуцан гүйцэтгэгчид: Бубенчиков М.А., Уколов А.В.

4. $Unb + Ueb + Uee$ бүрэн потенциал бүхий харгалзах атомуудын хувьд Борн-Оппенгеймерийн нарийвчлалтайгаар Шредингерийн нэг хэмжээст тогтмол тэгшитгэлийн тоон шийдэл: потенциалын харилцан үйлчлэлүүд нь : Unb –саад + цөм, Ueb – саад + электрон, Uee – электрон + электрон, дисперсийн хүчийг тооцсон.

Саадуудтай хамааралтай He3 / He4 бөөмсийн байршлын магадлалын тархалтын функцийг тодорхойлох.

Хариуцан гүйцэтгэгчид: Бубенчиков М.А., Мамонтов Д.В.

Эдгээр 2 үе шатанд математикийн загвар бүтээгдэх ба He3, He4-ийн хоёр дирак саадын резонанс системийг туулах тухай 1-хэмжээст асуудлын тоон шийдэл гарна. Зохиогчдын баг энэхүү асуудлыг суурь үзлийн үүднээс маш сонирхолтой гэж үздэг бөгөөд гаргасан үр дүнгээ 1-2 улирлын сэтгүүл дээр нийтлэх төлөвлөгөөтэй байна.

Үүнд:

1. Acta Crystallographica Section A: Foundations and Advances,
2. Nanoscale,
3. Advanced Materials,
4. Diamond and related materials,
5. Journal of Physical Chemistry Letters,
6. Бөөмийн кинетик энергийн (температур) дамжуулалтын коэффициентээс хамаарах хамаарлыг тодорхойлох ба саад хоорондын зай. Ab initio резонанс шүүлтийн процессын математикийн загварчлалыг аргыг бий болгох.

Хариуцан гүйцэтгэгчид: Бубенчиков М.А., Уколов А.В.

Энэ шатанд саадуудын хоорондох зайг болон He3 ба He4 бөөмсийн хамгийн үр дүнтэй тусгаарлалтын температурыг тодорхойлно. Заагдсан үзүүлэлтүүдээс He3 ба He4-ийн дамжуулалтын коэффициентүүдийн хамаарах хамаарлыг олно. Практикт энэ аргын хэрэглээний үр нөлөөг үнэлэх болно. Энэ үе шатын төгсгөлд төсөл баг нь 3-D тохиолдолд хэрэглэгдэх компьютерийн загвартай болох ба НИР -ийн дараагийн шатуудад саадын илүү нарийн бүтэцтэй болох юм.

Оросын тал Монголын түншүүдтэй хамтран судалгаа шинжилгээ хийх зайлшгүй шаардлагын үндэслэл (олон улсын хамтын ажиллагааны үед олж авах боломж)

ТУИС нь энэ төслийн онолын үе шатыг хэрэгжүүлэхэд шаардагдах бүх тоног төхөөрөмжтэй боловч изотопын тусгаарлах станцын лабораторийн загварыг бий болгох тоног төхөөрөмжгүй юм. Төслийн үндсэн шинж чанарыг үл харгалзан түүний зохиогчид онолын үр дүнг туршилтаар баталгаажуулахыг хүсч байгаа билээ. Энэ

зорилгын хүрээнд эрдэм шинжилгээ, судалгааны үйл ажиллагаа явуулдаг Монгол Улсын Их Сургуулийн чадамжийг ашиглах юм.

Томск Улсын Их Сургуулийн эрдэм шинжилгээний ажлын амжилттай гүйцэтгэлийн дараа ОКР шатыг МУИС гүйцэтгэх болно. Мөн онолын завсрын үр дүнгийн хувьд, нээлттэй хэвлэлийн өгөгдөлд түшиглэх боломжгүй нөхцөлд, зохиосон математик загвараа засварлах боловсронгуй болгох туршилттай үе үе харьцуулах нь маш чухал юм.

Гадаадын түншийг сонгох нь ОХУ, Монгол улсын хоорондын харилцааны хөгжлийн стратегийн асуудалтай хамаатай . Өнөө үед ТУИС ба МУИС-ын ХШУИС-ийн хоорондын хамтын ажиллагаа нь шинжлэх ухаан, боловсролын чиглэлээр хөгжиж байна.

ТУИС-д Монгол Улсын Их сургуулийн аспирант, оюутнуудын суралцдаг хэд хэдэн боловсролын чиглэл бий . Мөн энэ төслийн чиглэлээр шинжлэх ухааны хамтарсан ажил хөгжиж байна. Томскийн Их Сургуулийн квант химийн, паралель тооцоолол, молекулын динамик математикийн аргын онолын хувьд хамаагүй давуу талтай ч төслийн зохиогчдын үзэж байгаагаар ОХУ, Монгол Улсын стратегийн хамтын ажиллагаанд монголын залуу мэргэжилтнүүдийг судалгааны талбарт татан оролцуулах нь АНУ, Хятадын эрдэм шинжилгээ, боловсролын төвүүдээс хэрэгжүүлж буй (дунд сургуулиудаас эхлэн докторын дараах үе шат дуустал) хөтөлбөрүүдийн эсрэг маш чухал юм.

Төслийн шинжлэх ухааны үндэслэл (гарсан үр дүнгүүд , боловсруулсан аргачлал, хөтөлбөр, туршилтын тоног төхөөрөмж, төслийг хэрэгжүүлэхэд судлаачдын багийн мэдэлд буй материалууд,мэдээллийн нөөцийг багтаасан)

-Төслийн судлаачид

Судалгааны баг 2008 оноос хойш молекулын динамикийн асуудлын салбарт ажиллаж байгаа (Бубенчиков) бөгөөд 2016 он гэхэд төслийн багийн бүрэлдэхүүн эцсийн байдлаар бүрдсэн байна (Челнокова, Уколов, Мамонтов). Багийн гол үйл ажиллагаа нь – нүүрстөрөгчийн нано бүтэц бүхий хийн орчны атом ба молекулуудын харилцан үйлчлэлийн молекулын динамик асуудлуудын тоон шийдэл юм.

“MD-simulation of rotation fullerenes in the plastic phase of fullerit” гэсэн нэртэй хамгийн сүүлийн үеийн ажил нь 7.93 нөлөөллийн зэрэглэлтэй Q1 Acta Crystallographica- сэтгүүлд хэвлэгдэхээр зөвшөөрөгдсөн байгаа бөгөөд 2019 оны 4-р улиралд гарах болно.

Өмнөх ажлын явцад :

- сонгодог молекулын динамикийн аргыг ашиглан хийн орчин бүхий нүүрстөрөгчийн нанобөөмсийн хөдөлгөөн ба харилцан үйлчлэлийг тодорхойлох, тооцоолох аргачлал (онол, тооцоолол) - ыг бүрэн боловсруулагдаж, туршигдаж байсан. [1-21]

- Соронзон орны нөлөөгөөр хийн орчинд соронзон агшинтай нано хоолойн гиродинамикийн тооцооллыг анх удаа хийсэн. [2]

- Фуллеритийн бүтцэд C60 фуллерений гиродинамикийн тооцоолол хийгдсэн бөгөөд тэдгээрийн эргэх энергийн давтамжуудын туршилтын үр дүнтэй давхцаж байгааг онолын хувьд тодорхойлсон . [3]

- Янз бүрийн нано-бөөмсийн механик чичиргээний хувийн давтамжийг тодорхойлов. Тэдгээрийн аналитик илэрхийлэлийг олж авсан [4].

- Хийн орчин дахь төрөл бүрийн нанобөөмсийн хэлбэрээсээ хамаарч шилжилтийг эсэргүүцэх коэффициентүүдийг тодорхойлсон. Анх удаа тэдгээрийн аналитик илэрхийллийг олж авсан [5].

- Хийн орчин бүхий молекулуудтай янз бүрийн хэлбэрийн нанобөөмс орон зайд мөргөлдөх молекулын статистик (кластерт молекул орох) – ийн асуудлыг шийдсэн [6].

- Хийн орчинд төрөл бүрийн нанобөөмсийн термофорезийн тэдгээрийн хэлбэрээс хамаарсан хурдыг тодорхойлсон. Тэдгээрийн аналитик илэрхийллийг нь онолын хувьд [7] гаргасан юм.

- Таталцлын болон төвөөс зугтах тунадасжилт [8], центрифугжих [9], цахилгаан талбайн орны нөлөөгөөр хий дотор нанобөөмсийн тусгаарлалын тооцооллууд хийгдсэн [10].

- Хэт нарийхан наноутасны молекул хоорондын харилцан үйлчлэлийн хүчний потенциалын аналитик илэрхийллийг анх удаа гаргасан [11].

- Наносувгуудын багц, сүвэрхэг графен, фуллерүүд ба нанобөөмсийн загвар дундуур төрөл бүрийн хийн атомууд,молекулууд нэвчин гарах тооцоо [12-14]хийгдсэн.
- Массшилжилтийн супердамжих чанараар тодорхойлогдсон диффузээс чанарын ялгаатай нэвчилтийн горимыг анх удаа олж авсан [15].
- Хийн үр дүнтэй тусгаарлалтад зориулсан янз бүрийн нанобөөмсийн нүхнүүдийн эсвэл атом бүтцийн дефектийн нягт ба параметруудийг тодорхойлов [16-18].
- Атом / молекулын төрөл бүрийн хэлбэрийг нанобөөмсүүдээр шингээх шингээлтийг энергээс нь хамааруулан тооцоолсон. [19]
- Олон давхар ба шилэн нано бүтцүүдийн хийн орчноор атом/молекулуудын нэвчих чадварыг тооцоолсон. [20]
- Энгийн нэхээст нанотор болон атом/молекулуудын хийн хэлбэртэй фазын харилцан үйлчлэлийн потенциалын аналитик илэрхийллийг анх удаа олж авсан. [21]

Төслийн хариуцан гүйцэтгэгч Бубенчиковын М.А. газрын байгалийн хийнээс гелиг ялгах технологийн үзэл баримтлалыг боловсруулсан өмнөх судалгааны үр дүнг «Газпром» компанийн ТУЗ-ийн дарга А.Б. Миллер докторын диссертаци хамгаалах зорилготой тусгай тэтгэлэг хэлбэрээр(ОАО "Газпром" 02.13.2015-ний №61 Тушаал), түүнчлэн ОХУ-ын шинжлэх ухааны сан (буцалтгүй тусламж № 14-01-31365) ОХУ-ын сан (буцалтгүй тусламж тоо 16- 19-00089) дэмжив.

Судалгааны үр дүн бичигдсэн 70 гаруй ажил шинжлэх ухааны зөвшөөрөгдсөн сэтгүүлүүдэд нийтлэгдсэн бөгөөд үүнээс 20 гаруй нь SCOPUS болон WEB of SCIENCE -ээр индексжүүлэгдсэн байна. Өмнө нь гаргасан үр дүнгийнхээ үндсэн дээр төсөл хариуцан гүйцэтгэгч эрдмийн зэрэг горилогчийн диссертаци хамгаалж, мөн 1 сургалтын гарын авлага бэлтгэжээ.

Төслийн хариуцлагатай гүйцэтгэгч М.А.Бубенчиков нь шинжлэх ухааны ишлэлийн индекс (индекс Хирша) - 9, elibrary.ru –ийн дагуу , (SCOPUS-ийн дагуу 6)-ийг эзэмшдэг.

М.А. Бубенчиков 3 патент зохиогчийн эрхтэй : "Циклонон камер, ксенон ялгах арга ба төхөөрөмж" бүтээл (давамгайлах огноо 01.07.2011), "Металл суурьтай тээвэрлэгч дээр хатуу ислийн түлшний элементийн үүрийг бэлтгэх арга" бүтээл (давамгайлах огноо 11.12.2014), "Хий дамжуулах хоолойн краны ослын автомат

хаалт” бүтээл (тэргүүлэх огноо 04/06/2015) мөн компьютерийн программын 8 улсын бүртгэлийн гэрчилгээ: «S-RimplyGraphen-2.0 Үрчгэр графений гадаргуутай молекулын харилцан үйлчлэх энергийн тооцоо хийх программ ” давамгайлах огноо - 04.02.2016, , "S-ThinLayer. Хэт нарийн ширхэгтэй аморф ялтасны нэвтрүүлэх чанар тооцох программ "давамгайлах огноо - 04.02.2016, « S-RimplyGraphen 1.0 Үрчгэр графений нөлөөллийн энергийг тооцоолох программ "давамгайлах огноо - 04.02.2016, " Фуллерэн нанобөөмсийн молекултай харилцан үйлчлэлийн тооцооллын программ"- . давамгайлах огноо 04.08.2015 " Полидисперс нанобөөмсийн шигүү баглааны элементийн нэвтрүүлэх чадварыг тодорхойлох программ" - давамгайлах огноо 08.04.2015 , “ Дуплетийн нэвтрүүлэх чадварыг тодорхойлох программ " давамгайлах огноо 16/06/2015, ОХУ - 04.08.2015-өөс 16/06/2025," Бөмбөрцөг хэлбэртэй нанобөөмсөн туннелийн нэвтрүүлэх чадварыг тодорхойлох программ"давамгайлах огноо - 06.16.2015, "Нээлттэй нанохоолойн молекултай харилцан үйлчлэлийг тооцох программ "давамгайлах огноо - 04.07.2015.

М.А. Бубенчиков судалгааны гарсан үр дүнгээрээ олон улсын эрдэм шинжилгээний бага хурал дээр илтгэл тавьсан байна, тухайлбал:

- 1) Полимер ба нийлмэл материалын 2015 оны дэлхийн чуулга уулзалт (PCM 2015) 5-р сарын 16-19, Бээжин хот, Хятад;
- 2) Цахилгааны инженерчлэл. Эрчим хүч. Механик инженерийн ажил I Залуу эрдэмтдийн олон улсын эрдэм шинжилгээний бага хурал. Новосибирск хот, 2014 он;
- 3) Олон талт геометр ба түүний хэрэглээ: Олон улсын оролцоотой эрдэм шинжилгээний бага хурлын материал, Улаан-Үд хот, 2014 он;
- 4) Залуу эрдэмтэн, мэргэжилтнүүдийн эрдэм шинжилгээний болон практикийн 7-р хурал, Томск хот, 2015 он, Газпром Трансгаз Томск ХХК;
- 5) Залуучуудын шинжлэх ухаан, практикийн олон улсын VI бага хурал "Хийн аж үйлдвэрийн шинэ технологи: туршлага, тасралтгүй байдал. импортын орлуулалтын хэтийн төлөв, асуудал ", ХХК Газпром ВНИИГАЗ, Москва хот, 2015 он;
- 6) Бүх Оросын эрдэм шинжилгээний олон улсын оролцоотой VI бага хурал "Эрчим хүчний технологийн дулаанфизикийн үндсүүд", Томск хот, 2015 он;

7) "Эрчим хүчний хэмнэлтийн техник, технологийн тоноглолын дулааны горимыг хангах системүүдийн дулаан масс шилжилт" олон улсын залуучуудын эрдэм шинжилгээний бага хурал", Томск хот, 2016 он.

8) Олон улсын оролцоотой эрдэм шинжилгээний IV уулзалт "Олон талт геометр ба түүний хэрэглээ", Улаан-Үд хот . Щучье нуур, 2016 он

9) Шинэ технологи, найдвартай байгууламжийн шаталсан бүтэц бүхий дэвшилтэт материал, Олон улсын бага хурал, Томск хот, 2016 он

10) Ю.А. Гагарины нислэгийн 55 жилийн ойд зориулсан "Орчин үеийн механикийн суурь ба хэрэглээний асуудлууд" Бүх Оросын эрдэм шинжилгээний IX бага хурал , Томск хот, 2016 он. 11) "Эрчим хүчний технологийн дулааны физик" Бүх Оросын эрдэм шинжилгээний олон улсын оролцоотой VII бага хурал, Томск хот, 2016 гэх мэт.

М.А. Бубенчиков судалгааны төслүүдэд оролцох, удирдах туршлагатай. Үүнд:

1) Оросын Суурь Судалгааны сан " Тогтмол биш соронзон оронд нүүрстөрөгч нанохоолойн эргэлдэх хөдөлгөөний динамикийг судлах нь" 14-01-31365 мол_a, 2014-2015он. (удирдагч).

2) Шинжлэх ухаан, техникийн салбарт туслах бүтээгдэхүүний жижиг хэлбэрийг хөгжүүлэх сангийн туслалцаагаар Засгийн газрын гэрээ "Нано материал ба түүгээр хийсэн бүтээгдэхүүний шинж чанарыг судлах программ хангамж , төхөөрөмжийн загварын боловсруулалт" сэдвээр "УМНИК" хөтөлбөрийн хүрээнд (удирдагч)

3) ОХУ-ын Шинжлэх Ухааны Сангийн дэмжлэг "Ионы плазмын аргаар нимгэн хальсан хатуу оксид түлшний элементийг байгуулах"№ 16-19-00089 (гүйцэтгэгч).

4) Оросын Суурь Судалгааны сан " Аневризмтай артерийн судасны гидродинамикын кинематик ба электрофизикийн механизмуудын математик загварчлалыг соронзон орон байх үед" № 08-01-00484-а (гүйцэтгэгч).

5) 2009-2013 онуудад "Шинжлэх ухаан, шинжлэх ухаан-сурган хүмүүжүүлэгч оросын мэргэжилтэн" Холбоотын зорилтот төсөл. Засгийн газрын гэрээ № 8345 (гүйцэтгэгч).

6) Дэлхийн шинжлэх ухаан, боловсролын тэргүүлэгч төвүүдийн дунд ОХУ-ын тэргүүлэх их сургуулиудын өрсөлдөх чадварыг дээшлүүлэх зорилготой төрийн

дэмжлэгтэй төсөл "Байгалийн хийн хольцын гели, нүүрсустөрөгчийн бүрэлдэхүүний хувьд нүхэн графены нэвтрүүлэх чадвар" ФГАОУ ВО НИ ТГУ 09.08.2016 - 31.12.2016 (гүйцэтгэгч).

7) Дэлхийн шинжлэх ухаан, боловсролын тэргүүлэгч төвүүдийн дунд ОХУ-ын тэргүүлэх их сургуулиудын өрсөлдөх чадварыг дээшлүүлэх зорилготой төрийн дэмжлэгтэй төсөл "Хий шууд ялгаруулах зориулалттай хэт нимгэн нүхэн давхаргын боловсруулалт ба шинж чанарын судалгаа" ФГАОУ ВО НИ ТГУ 01.01.2015 - 31.12.2016 (гүйцэтгэгч).

8) Дэлхийн шинжлэх ухаан, боловсролын тэргүүлэгч төвүүдийн дунд ОХУ-ын тэргүүлэх их сургуулиудын өрсөлдөх чадварыг дээшлүүлэх зорилготой төрийн дэмжлэгтэй төсөл "Байгалийн хийнээс гели ба гелион ялгахад зориулсан мембран технологиуд" ФГАОУ ВО НИ ТГУ 01.01.2014 - 31.12.2014 (гүйцэтгэгч).

Одоогоор М.А. Бубенчиков ТУИС-ийн ММФ ЭШХ-ийн онолын механик (ТМ) тэнхимийн багшаар ажиллаж, Молекулын физик, Наномеханикийн чиглэлээр лекц уншдаг.

Эрдэм шинжилгээ-судалгааны баг нь тооцоолох математикийн болон параллель тооцоолох алгоритмуудыг хэрэглэх практик ур чадвартай бөгөөд ТУИС-ийн ЭШХ – ийн "SKIF Cyberia" суперкомпьютерийн кластерт нэвтрэх боломжтой. 64-битийн өргөтгөлийг дэмжсэн X86 кластер; (Westmere) зангилаа бүр дээр хоёр 6-цөмт Intel Xeon 5670 2.93 GHz процессортой 358 тооцооллын зангилаатай, ба хоёр цөмт Intel Xeon 5150 2.93 GHz процессороор (Westmere) тоноглогдсон 282 тооцооллын зангилаа агуулдаг. Системийн сүлжээ Mellanox Infiniband QDR 40 GB / sec. Хамгийн өндөр бүтээмж нь 62 TFlops юм. Тус баг нь мөн GAUSSIAN-09, FIREFLY, GAMESS-US, TURBOMOLE, MOLPRO, COMSOL MULTYPHISICS гэсэн тусгай зөвшөөрөлтэй программын пакеттай бөгөөд ТУИС-ийн ЭШХ-гийн шинжлэх ухааны номын сан нь шинжлэх ухааны тогтмол хэвлэлүүдийн архивын сүлжээний өргөн хүрээг хамарсан бөгөөд Springer, Institute of Physics, American Mathematical Society, Elsevier гэх мэт шинжлэх ухааны тэргүүлэх төвүүдэд нэвтрэх эрхтэй. Төслийн баг мөн дараахь тоног төхөөрөмжүүдийг ашиглах боломжтой:

Спектрофотометр UV-1800
Производитель: Shimadzu (Япония)
Год выпуска и ввода в эксплуатацию: 2013

Линейка газовых хроматографов "Хроматэк Кристалл 500.1 и 5000.2"
Производитель: ЗАО СКБ «Хроматэк» (Россия)
Год выпуска и ввода в эксплуатацию: 2007

Квадрупольный масс-спектрометр API 2000
Производитель: Dionex (США)
Год ввода в эксплуатацию: 2013

Квадрупольно-времяпролетный масс-спектрометр высокого разрешения Agilent 1260/6550
Производитель: AgilentTechnologies (США)
Год выпуска: 2015

Дифрактометр рентгеновский X PERT PRO MRD (PANalytical)
Фирма-изготовитель: PANalytical (Philips Analytical)
Год выпуска: 2012

Рентгеновский дифрактометр Shimadzu XRD 6000
Производитель: Shimadzu (Япония)
Год выпуска и ввода в эксплуатацию: 2004

Комплекс аналитический исследования структуры и фазового состава Advanced AZtechKL на основе детектора NordlysMax
Год выпуска: 2012

Система для определения газопроницаемости материалов манометрическим методом
Год выпуска: 2012

Микроскоп для лабораторных исследований Axio Imager.M2 (Carl Zeiss)
Год выпуска: 2013

Сканирующий зондовый микроскоп SPM 9600 SHIMADZU
Фирма-изготовитель: Shimadzu (Шимадзу)
Год выпуска: 2012

[1] Dynamics of nanoscale particles in gas [in Russ]. PhD Thesis. Tomsk, TSU, 2011

[2] Bubenchikov M.A. Ideal nanotube vibrations in natural magnetic field [in Russ]. VestnikTomskogogosudarstvennogouniversiteta. Matematikaimekhanika [in Russ]. 2010. N 2 (10). Pp. 45-52.

[3] Calculating permeability of the low-temperature phase of a fullerite Bubenchikov M.A., Bubenchikov A.M., Tarasov E.A., Usenko O.V., Chelnokova A.S. Diamond and Related Materials. 2018. T. 86. C. 146-158.

[5] A.I. Potekaev, A.M. Bubenchikov, M.A. Bubenchikov New Physical Ideas and Method of Description and Calculation of Resistance to Motion of Small Particles in a Gaseous Medium // Russian Physics Journal. – 2013. – Vol. 55, №12. – P. 1434–1443. DOI: 10.1007/s11182-013-9977-8.

[6] M.A. Bubenchikov, A.I. Potekaev, A.M. Bubenchikov Three fundamental problems of molecular statistics // Russian Physics Journal. – 2013. – Vol. 56, №3. – P. 341–348. DOI: 10.1007/s11182-013-0038-0.

- [7] M.A. Bubenchikov, A.I. Potekaev, A.M. Bubenchikov Thermophoresis of Ultrafine and Nanosized Particles // Russian Physics Journal. – 2013. Vol. 56, №7. – P. 785–790. DOI: 10.1007/s11182-013-0100-y.
- [8] Bubenchikov M.A. Nanotube motion in air under electromagnetic field effect [in Russ]. VestnikTomskogogosudarstvennogouniversiteta. Matematikaimekhanika [in Russ]. 2010. N 4 (12). Pp. 68-77.
- [9] Sedimentation of nanoparticles in the field of centrifugal forces Potekaev A.I., Bubenchikov M.A. Russian Physics Journal. 2011. T. 54. № 2. С. 211-220.
- [10] Bubenchikov M.A. Motions of ultradispersed particles in a twisted section of a ring channel. VestnikTomskogogosudarstvennogouniversiteta. Matematikaimekhanika [in Russ]. 2010. N 2 (10). Pp. 38-44.
- [11] Bubenchikov A.M., Bubenchikov M.A., Malozemov A.V., Ovcharenko V.V. Selective permeability of carbyne membranes. Russian Physics Journal. 2019. V. 61. N 11 (731) (in press)
- [12] Mathematical modelling of permeability for materials composed of spherical nanoparticles Sherstobitov A.A., Bubenchikov M.A. В сборнике: Proceedings of 2014 International Conference on Mechanical Engineering, Automation and Control Systems, MEACS 2014, 2014. С. 6986905.
- [13] Permeability of nanonet structures constructed on the basis of carbon tubes Bubenchikov M.A., Chelnokova A.S., Nikipelova T.I., Tsyrenova V.B. В сборнике: Journal of Physics: Conference Series 6. Сер. "6th International Conference Current Issues of Continuum Mechanics and Celestial Mechanics, CICMCM 2016" 2017. С. 012020.
- [14] Permeability of ultra-thin amorphous carbon films Bubenchikov M.A., Bubenchikov A.M., Usenko O.V., Ukolov A.V. В сборнике: EPJ Web of Conferences Сер. "Thermophysical Basis of Energy Technologies 2015" 2016. С. 01078.
- [15] Permeability of nanonet structures constructed on the basis of carbon tubes Bubenchikov M.A., Chelnokova A.S., Nikipelova T.I., Tsyrenova V.B. В сборнике: Journal of Physics: Conference Series 6. Сер. "6th International Conference Current Issues of Continuum Mechanics and Celestial Mechanics, CICMCM 2016" 2017. С. 012020.
- [16] Separation of gases using ultra-thin porous layers of monodisperse nanoparticles Bubenchikov M.A., Bubenchikov A.M., Usenko O.V., Poteryaeva V.A., Jambaa S. В сборнике: EPJ Web of Conferences Сер. "Thermophysical Basis of Energy Technologies 2015" 2016. С. 01014.
- [17] A thin carbon film as a separator of light gases Bubenchikov A.M., Bubenchikov M.A., Potekaev A.I., Libin E.E., Khudobina Y.P. Russian Physics Journal. 2014. T. 57. № 8. С. 1126-1131.
- [18] The effect of graphene shape on its ability to separate gases Bubenchikov A.M., Potekaev A.I., Usenko O.V., Zhambaa S., Bubenchikov M.A., Kulagina V.V. Russian Physics Journal. 2016. T. 58. № 12. С. 1711-1719.
- [19] The potential field of carbon bodies as a basis for sorption properties of barrier gas systems Bubenchikov A.M., Bubenchikov M.A., Potekaev A.I., Libin A.E., Khudobina Y.P. Russian Physics Journal. 2015. T. 58. № 7. С. 882-888.
- [20] The interaction potential of an open nanotube and its permeability: molecular dynamics simulation Bubenchikov M.A., Potekaev A.I., Bubenchikov A.M., Usenko O.V., Malozemov A.V., Tarasov E.A. В сборнике: EPJ Web of Conferences Сер. "Thermophysical Basis of Energy Technologies 2015" 2016. С. 01061.

[21] Ukolov A.V., Bubenchikov M.A. Permeability of carbon nanofabrics. Proc. 10th Int. Sci. Conf. of Students and Young Scientists 'Prospects of Fundamental Sciences Development', I.A. Kurzina, G.A. Voronova Eds., 2018. Pp. 307-309.

- Монголын талын судлаачид

Монголын түншүүд янз бүрийн хэмжээтэй нанобөөмсийн системтэй молекулуудын (атом) харилцан үйлчлэлийг загварчлах чадвартай, нүхэн графен хуудасны сонгох шинж чанарыг үнэлэх ба нэвчих чанарын тооцооллыг хийх ур чадвар, тухайлбал, хийн ялгах чадвартай графен хуудсын хэлбэрийн нөлөөллийг шинжлэх чадвартай байдаг. Үүнээс гадна, тэд салаалсан нано хоолойнууд агуулсан систем дэх хийн бүрэлдэхүүний шилжилтийг тооцоолох арвин туршлагатай юм.

Үүний зэрэгцээ сүүлийн жилүүдэд Улаанбаатар хотын түншүүд нь металлын субстрат дээр химийн ууршуулах аргыг ашиглах боломжтой болсон. Энэ аргаар макро хэмжээст графенийг үйлдвэрлэх боломжтой юм. Энэ арга катализаторын гадаргуу дээр нүүрстөрөгч агуулсан өөр нэг хий эсвэл метаны каталитик задралын үйл явц дээр тулгуурладаг. Катализатор (субстрат) нь ихэвчлэн зэс ялтас байдаг. прекурсор-хийг шахах шахуургын температур нь 1000 ° C байна. Ийм температурт хий нь задарч зэсийн гадаргуу дээр графен бүрхүүл үүсэх ба субстрат бүрэн бүрхэгдсэний дараа процесс зогсдог. Энэ арга нь дефектгүй хуудсууд графен хуудсууд, тогтмол нүхтэй нүүрстөрөгчийн 2D материалыг нэгтгэх боломжтой болгох ба мөн түүнчлэн субстрат дээрх уурын найрлагыг өөрчлөнгөө сүвэрхэг графен материалыг гаргаж авах боломжийг олгодог.

Энэ төсөлт эхлэхээс өмнөх хамгийн их холбоотой байдаг оросын талын багийн гишүүд болон монголын талын судлаачидтай хамтарсан хэвлэлүүд бүтээлийн жагсаалт

1. Шерстобитов А. А. Нано бөөмсийн системтэй молекулын харилцан үйлчлэл / А. А. Шерстобитов, С. Жамбаа, О. В. Усенко, В. Б. Цыренова, Д. К. Фирсов // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2014. – Т. 57, № 8/2. – хуу 210–214

2. Бубенчиков А. М. Графений хийнүүдийг тусгаарлах чадварт хэлбэр нь нөлөөлөх нь / А. М. Бубенчиков, М. А. Бубенчиков, А. И. Потеев, О. В. Усенко, С. Жамбаа, В. В. Кулагина // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2015. – Т. 58, №12. – хуу. 39–45.

Web of Science сэтгүүлийн индексжсэн орчуулгын хувилбараар:

Bubenchikov A. M. The effect of graphene shape on its ability to separate gases / A. M. Bubenchikov, M. A. Bubenchikov, A. I. Potekaev, O. V. Usenko, S. Jambaa, V. V. Kulagina // Russian Physics Journal. – 2016. – Vol. 58, is. 12. – P. 1711–1719. – DOI: 10.1007/s11182-016-0706-y.

3. Бубенчиков М. А. О селективных свойствах наноразмерной бифуркации / М. А. Бубенчиков, А. В. Уколов, Р. Ю. Уколов, С. Жамбаа // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. – 2018. – № 51. – С. 104–116. – DOI: 10.17223/19988621/51/9.

Web of Science:

Bubenchikov M. A. On the selective properties of nanoscale bifurcation / M. A. Bubenchikov, A. V. Ukolov, R. Yu. Ukolov, S. Jambaa // Tomsk state university journal of mathematics and mechanics. – 2018. – Vol. 51. – P. 104–116.

Статья в зарубежном научном издании, индексируемом Web of Science:

4. Bubenchikov M. A. Separation of gases using ultra-thin porous layers of monodisperse nanoparticles / M. A. Bubenchikov, A. M. Bubenchikov, O. V. Usenko, V. A. Poteryaeva, S. Jambaa // EPJ Web of Conferences. – 2016. – Vol. 110 : conference on Thermophysical basis of energy technologies. Tomsk, October 13-15, 2015. – Article number 01014. – 6 p. – DOI: 10.1051/epjconf/201611001014.

5. Лун-Фу А. В. Определение частот поперечных колебаний переходников и тупиковых ответвлений газопроводов / А.В. Лун-Фу, М.А. Бубенчиков, С. Жамбаа, С. Г.-Ц. Цыдыпов // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. – 2019. (принята в печать)

Төсөл эхлэхээс өмнөх сүүлийн 5 жилийн туршид төслийн удирдагчийн мэргэжлийн сэтгүүлд хэвлэгдсэн гол нийтлэлүүд

[1] Bubenchikov A.M., Bubenchikov M.A., Potekaev A.I., Libin A.E., Khudobina Y.P. The potential field of carbon bodies as a basis for sorption properties of barrier gas systems. Russian Physics Journal. 2015. T. 58. № 7. C. 882-888. (Q3)

[2] Bubenchikov A.M., Potekaev A.I., Usenko O.V., Zhambaa S., Bubenchikov M.A., Kulagina V.V. The effect of graphene shape on its ability to separate gases. Russian Physics Journal. 2016. T. 58. № 12. C. 1711-1719. (Q3)

[3] Bubenchikov M.A., Bubenchikov A.M., Tarasov E.A., Usenko O.V., Chelnokova A.S. Calculating permeability of the low-temperature phase of a fullerite. Diamond and Related Materials. 2018. T. 86. C. 146-158. (Q1)

[4] Bubenchikov A.M., Bubenchikov M.A., Malozemov A.V., Ovcharenko V.V. Selective permeability of carbyne membranes. Russian Physics Journal. 2019. V. 61. № 11 (731). (Q3)

[5] Bubenchikov M.A., Bubenchikov A.M., Mamontov D.V. MD-simulation of rotation fullerenes in the plastic phase of fullerite. Acta Crystallographica: Section A. 2019. (in press) (Q1)

Монголын багийн удирдагчийн тухай мэдээлэл (англи хэлээр):

- Овог Surname: Jambaa, Нэр Name: Soninbayar
- Төрсөн он сар өдөр 04.11.1960
- Улс Mongolia
- Ажлын газар Mongolian State University, Institute of Applied Science and Engineering, Department of Applied Mathematics, Ulaan-Baatar, Mongolia.
- Албан тушаал(Ph.D), Assistant Professor, Senior Lecturer.
- Contact phone (976) 95006512
- Email jsoninbayar@yahoo.com

- Төсөл эхлэхээс өмнөх сүүлийн 5 жилд хэвлэгдсэн э/ш өгүүллийн жагсаалт (2013 - 2018)

1. M. A. Bubenchikov, A. M. Bubenchikov, O. V. Usenko, V. A. Poteryaeva and S. Jambaa Separation of gases using ultra-thin porous layers of monodisperse nanoparticles // EPJ Web of Conferences , 110, 01014 (2016) DOI: 10.1051/epjconf/201611001014

2. Bubenchikov A.M., Bubenchikov M.A., Potekaev A.I., Usenko O.V., Zhambaa S., Kulagina V.V. The Effect of Graphene Shape on its Ability to Separate Gases Russian Physics Journal, Volume 58, Issue 12, 1 April 2016, Pages 1711-1719 DOI: 10.1007/s11182-016-0706-y

<http://link.springer.com/article/10.1007/s11182-016-0706-y>

3. Жамбаа С., Касаткина т.В., Бубенчиков А.М. Об определении констант в интеграле Кристоффеля-Шварца по методу П.П. Куфарева // Вестник ТГУ. Математика и механика. 2016. №5 (43). С 21-27. DOI: 10.17223/19988621/43/2

ХОЁРДУГААР БҮЛЭГ. ҮР ДҮН БА ХЭЛЭЛЦҮҮЛЭГ

2.1 Судалгааны ажлын сонгосон арга, гол үр дүн

1. Саадын системийн хувьд Шредингерын интеграл нэг хэжээст стационар тэгшитгэлийн шийдийг анх удаа олсон болно.
2. Шредингерын интеграл нэг хэмжээст стационар тэгшитгэлийн шийдлийг ойлт ба дамжин өнгөрүүлэлтийн коэффициентуудын хувьдах илэрхийлэл нь шууд гарч ирэх хэлбэртэй бодлогуудад дифференциал- оператор хэлбэртэйгээр олж гаргаж авсан.
3. Төслийн явцад янз бүрийн боломжит потенциал саадын (барьер) хувьд гарч ирж буй Шредингерийн тэгшитгэлүүдийн шийдүүдийг олох үр дүнтэй тоон алгоритмуудыг сонгосон.
4. Сайн танигдсан Адамс - Башфорт, Адамс - Моултон нарын олон шатлалт схемийг дөрөвдүгээр эрэмбийн нарийвчлалтай сонгодог Рунге - Кутта схемтэй харьцуулсан болно.
5. ОХУ-ын талын төслийн удирдагч М.А. Бубенчиков 2020.07 сард ШУ-ын докторын зэрэг хамгаалсан.
6. ОХУ-ын компьютерийн **5ш** программын бүртгэлийн гэрчилгээ № 2021680776, № 2021680468, № 2021680775, №2021666867, №2021666869 (ОХУ-ын талын хамтрагч нарын нэр дээр) авсан. (хавсралт)
7. Олон улсын WEB of SCIENCE ба SCOPUS -ийн Q1, 2, 3 индекстэй мэргэжлийн сэтгүүлд **6ш** өгүүлэл хэвлүүлсэн.
8. Олон улсын э/ш хуралд **7ш**, додоодын э/ш хуралд **3ш** итгэл тавьсан.
9. Олон улсын э/ш дотоодын **3ш** хурал, дотоодын э/ш **1ш** хурал зохион байгуулахад оролцсон, дотоодод **2ш** семинар зохион байгуулсан.

10. Гадаадын олон улсын 3ш хурал, семинарт: 2020 оноос одоог хүртэл хоёр долоо хоногт нэг удаа явагдаж байгаа олон улсын «Beijing-Novosibirsk seminar on geometry and mathematical physics» online семинарт Ж.Сонинбаяр идэвхитэй оролцож ирлээ. <https://srmc.pku.edu.cn/рус/xzyj/kylt/128485.htm>, 2023 оноос Ж.Сонинбаяр АНУ-ын The Institute for Operations Research and the Management Sciences (INFORMS) институт, нийгэмлэгийн гишүүн болж “Aviation Applications Section”, “Computing Society” секторуудын байнгын 3ш хурал, семинар, хэлэлцүүлэгт online тогтмол оролцож байна. <https://connect.informs.org/>

2.2 Математикийн талаас сонгосон арга, гол үр дүн

Байгальд ээлтэй эдийн засгийн өндөр ач холбогдолтой ухаалаг материал-шүүлтүүр хийх судалгааг эхлэх үед ямар математикийн тэгшитгэлээр бичих талаар хэлцүүлэг ОХУ-д Оросын талын судлаачидтай хийж Шредингерийн тэгшитгэлээр бичихээр шийдсэн юм. Улмаар Шредингерийн тэгшитгэлээр Оросын талтай хамтарч орос хэл дээр тухайн шатны судалгааны ажлын үр дүн бичигдэж, туршилтуудаар баталгаажсан, гадаадын олон судлаачдын анхаарлыг татаж байгаа ажил болсон.

АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ ИНТЕГРАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА¹

Построено аналитическое решение задачи о волновом транспорте вещества через составные сверхтонкие барьеры. Показано, что для составной мембраны, состоящей из двух одинаковых сверхтонких слоев, всегда существуют расстояния между слоями, при которых реализуется резонансное прохождение одной из компонент. Резонанс позволяет разделять дебройлевские волны частиц, одинаковых по свойствам и различающихся лишь массами. При температуре 25 К найдена широкая полоса гиперселективного разделения гелион-гелиевой смеси.

Ключевые слова: интегральное уравнение, вырожденное ядро, оператор сдвига, экспоненциальные функции, тождество Фурье.

Введение

В качестве элементов составной мембраны наилучшим образом подходит пористый графен или пористый нитрид бора. Такие материалы могут быть получены методом эпитаксии [1,2] или способом осаждения из паровой фазы на подложку, содержащую бездефектный графен или пористый нитрид бора [3,4]. Однако существует еще целая группа стабильных листов толщиной в один атом, которые на этапе синтеза или после механического отслоения могут быть превращены в пористый 2D-материал. Так в работе [5] сообщается о листах GeH, которые являются термически стабильными до 75°C. Известен также силикон – графеновый эквивалент кремния [6], имеющий большие перспективы для новых применений. В работе [7] авторы указывают на черный фосфор как на слоистый материал из которого может быть получен фосфорен – одноатомный слой, физические свойства которого значительно отличаются от его объемного аналога. В работе [8] сообщается об успешном изготовлении двумерного станена на основе Sc методом молекулярно-лучевой эпитаксии. В [9] отличается, что функционализация гексагонального нитрида бора молекулами амина вызвала расслоение слоистой структуры, что привело к образованию листов нитрида бора. В работе [10] говорится, что “разработка новых слоистых материалов претерпела эволюцию от графена к металлическим оксидам и металлическим халькогенидным нанолентам”. В [11] также упоминается металлдихалькогениды как новейшие 2D-материалы и приводится пример материала, созданного на основе MoS₂. В [12] изучаются электронные свойства следующих металлдихалькогенидов, имеющих

¹ Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Министерством культуры, образования, науки и спорта Монголии в рамках научного проекта № 19-51-44002

двумерную структуру: MoS₂, WS₂, WTe₂, TiSe₂, NbS₂, VSe₂, NbSe₂, TaS₂. Все материалы при соответствующем способе их синтеза или последующей обработки, приводящей к образованию пор могут быть приспособлены для разделения газов. В [13] сообщается о слоистой двумерной сетчатой структуре, которая содержит равномерно распределенные дырки и имеет в своей основе стехиометрию C₂N.

Таким образом, уже синтезировано достаточно много двумерных материалов, которые могут быть применены в работах по квантовому просеиванию изотопов.

Цель настоящей работы состоит в нахождении условий, обеспечивающих резонансное прохождение компонент газовой смеси через составные барьеры.

Дифференциальное уравнение Шредингера

Дифференциальное уравнение волновой динамики имеет вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U\Psi + \frac{\hbar^2}{i}\frac{\partial\Psi}{\partial t} = 0. \quad (1)$$

Здесь Ψ – волновая функция, \hbar – постоянная Планка, U – энергия взаимодействия частицы с окружением, m – масса частицы, Δ – оператор Лапласа, i – мнимая единица.

В частном случае, когда потенциальная энергия U явно не зависит от времени, решение уравнения (1) ищется в виде:

$$\Psi = \psi e^{-iEt/\hbar}. \quad (2)$$

где E – энергия частицы.

Тогда для нахождения амплитуды волны Ψ будем иметь стационарное уравнение Шредингера:

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi = 0. \quad (3)$$

В задачах низкотемпературного мембранного разделения газовых смесей определяющее значение имеет направление переноса, перпендикулярное поверхности мембраны. Ввиду малых размеров нанопор любой макроскопический фрагмент мембраны можно считать бесконечно протяженным в направлениях, параллельных мембране. Определяя по некоторому представительному фрагменту поверхности мембраны среднее значение энергии взаимодействия и используя одномерное волновое уравнение переноса вещества, мы можем говорить о барьерной теории проницаемости мембраны.

Таким образом, при получении результата по проницаемости отдельных компонент смеси или по селективности ее разделения можно исходить из уравнения (3).

Ниже будут представлены некоторые аналитические построения, которые оказались весьма эффективными при анализе задач прохождения изотопов через составные мембраны. В связи с этим удобней будет иметь безразмерную форму уравнения переноса вещества.

Если массу частицы отнести к m_0 – массе атома водорода, за масштаб энергии взять U_0 – глубину потенциальной ямы в распределении энергии парных взаимодействий вещества мембраны и подвижных частиц, а в качестве масштаба длины принять величину

$$L = \hbar/\sqrt{m_0 U_0}. \quad (4)$$

то безразмерное уравнение волновой динамики не будет содержать постоянной Планка \hbar :

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + 2m(E - U(x))\psi = 0. \quad (5)$$

В записи (5) все величины безразмерные, включая координату x .

Таким образом, мы уменьшили количество констант задачи на единицу. Это является существенным при проведении дальнейших аналитических выкладок.

Интегральное уравнение Шредингера и его преобразования

Реализация численных методов решения дифференциального уравнения Шредингера ориентирована на конечную область изменения независимой переменной, а также на применение «сшивки» полученных численных данных с асимптотическими распределениями вычисляемой величины. Обычно под условиями «сшивки» понимаются равенства самой волновой функции и ее производной. Однако отсутствуют какие-либо обоснования в отношении использования этой формы условий. Также требует обоснования и сам размер конечной области интегрирования. В связи с этим важными являются попытки проведения интегрирования по всей действительной оси. По-видимому, это возможно сделать аналитическими методами. Вполне подходящим для этого является интегральное уравнение Шредингера:

$$\psi(x) - \frac{2m}{2ik} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik|x-\zeta|} U(\zeta) \psi(\zeta) d\zeta = e^{ikx}. \quad (6)$$

Здесь m – безразмерная масса частицы, $k = \sqrt{2mE}$ – параметр волны, E – безразмерная энергия частицы.

В книге Ф.М. Морса и Г. Фешбаха [14] доказывается эквивалентность дифференциального и интегрального подходов в описании процессов распространения волн материи.

Уравнение (6) есть интегральное уравнение с вырожденным ядром. Для проведения дальнейших его преобразований воспользуемся дифференциальным оператором сдвига:

$$e^{-h\frac{d}{dx}} f(x) = f(x-h). \quad (7)$$

Доказательство последнего равенства можно провести с помощью разложения экспоненты в ряд Тейлора, а также посредством применения уже линейных операторов к функции $f(x)$ и нахождения новой суммы ряда. Применяя равенство (7) к $e^{ik|x-\zeta|}$, исходное уравнение можем переписать в виде:

$$\psi(x) - \lambda \left(\int_{-\infty}^{\infty} U(\zeta) \psi(\zeta) e^{-\zeta\frac{d}{dx}} d\zeta \right) \cdot e^{ik|x|} = e^{ikx}, \quad \lambda = \frac{m}{ik} = \frac{1}{2i} \cdot \sqrt{\frac{2m}{E}}. \quad (8)$$

Обратим внимание на выражение в скобках. Это выражение можно рассматривать как дифференциальный оператор или аналитическую функцию параметра $p = d/dx$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} U(\zeta) \psi(\zeta) e^{-\zeta\frac{d}{dx}} d\zeta = \int_{-\infty}^{\infty} U(\zeta) \psi(\zeta) e^{-\zeta p} d\zeta = L(p), \quad p = \frac{d}{dx}. \quad (9)$$

С учетом введенного обозначения уравнение (9) можно переписать в следующем виде:

$$\psi(x) - \lambda \cdot L(p) \cdot e^{-ik|x|} = e^{ikx}. \quad (10)$$

Вид дифференциального оператора, действующего на стоящую от него справа экспоненциальную функцию, пока что нам неизвестен. Однако его можно найти. Умножая (10) на $U(x)\exp(-xp)$ и интегрируя в бесконечных пределах найдем

$$\left(\int_{-\infty}^{\infty} U(x) \psi(x) e^{-xp} dx \right) - \lambda L(p) \cdot \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{ik|x|} U(x) e^{-xp} dx \right) = \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} U(x) e^{-xp} dx \right). \quad (11)$$

Здесь появляются еще два дифференциальных оператора, для которых введем следующие обозначения:

$$B(p) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} U(x) e^{-xp} dx, \quad Q(p) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik|x|} U(x) e^{-xp} dx. \quad (12)$$

С учетом этих обозначений операторное равенство (11) примет вид:

$$L(p) \cdot [1 - \lambda Q(p)] = B(p). \quad (13)$$

Отсюда получаем

$$L(p) = \frac{B(p)}{1 - \lambda Q(p)}. \quad (14)$$

Иногда интегралы (12) могут быть вычислены аналитическим способом. В общем случае нужно проводить численное интегрирование. В любом случае эти интегралы зависят только от формы потенциального барьера. Подставляя (14) в выражение (10), получаем решение интегрального уравнения в виде:

$$\psi(x) = e^{ikx} + \frac{\lambda B(p)}{1 - \lambda Q(p)} \cdot e^{ik|x|}, \quad p = \frac{d}{dx}, \quad k = \sqrt{2mE}, \quad \lambda = \frac{m}{ik}. \quad (15)$$

Если бы дифференциальный оператор $L(p)$ действовал на показательную функцию обычного вида, то результат был бы следующим:

$$L\left(\frac{d}{dx}\right) \cdot e^{\mu x} = L(\mu) \cdot e^{\mu x}. \quad (16)$$

Однако в формуле (10) этот оператор действует на экспоненту от модуля аргумента. Поэтому непосредственное применение (16) невозможно. Но экспоненту от модуля аргумента можно привести к обычной экспоненте, если воспользоваться тождеством Фурье:

$$e^{ik|x|} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega x} e^{i\omega\alpha} e^{ik|\alpha|} d\alpha d\omega. \quad (17)$$

Применяя правила (16) и (17) к формуле (15), получим:

$$\psi(x) = e^{ikx} + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} L(-i\omega) e^{-i\omega x} e^{ik|\alpha|} e^{i\omega\alpha} d\alpha d\omega. \quad (18)$$

Выражение (18) и представляет собой решение интегрального уравнения Шредингера, записанное в виде двойного интеграла по спектральной оси. Как видим, в отличие от (6), в его правой части находятся все известные величины, поскольку функции $B(\omega)$ и $Q(\omega)$, называемые спектрами барьера, определяются лишь его формой, т.е. являются известными функциями постановки задачи. Кроме формы барьера до получения решения нам известен характер асимптотического поведения решения по оси физической переменной x .

На этом этапе интегрирования мы уже освободились от дифференциального оператора $L(p)$, заменив его с использованием правила (16) функцией $L(\omega)$. Функцию $L(-i\omega)$ обозначим через $G(\omega)$. Тогда с учетом (14) получим:

$$G(\omega) = \frac{\lambda B(-i\omega)}{1 - \lambda Q(-i\omega)} = \frac{\lambda \int_{-\infty}^{\infty} U(x) e^{ix(\omega+k)} dx}{1 - \lambda \int_{-\infty}^{\infty} U(x) e^{ik|x|} e^{i\omega x} dx}. \quad (19)$$

В результате будем иметь

$$\psi(x) = e^{ikx} + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega x} G(\omega) e^{ik|\alpha|} e^{i\omega\alpha} d\alpha d\omega. \quad (20)$$

Если функция $G(\omega)$ является спектром некоторой функции $K(x)$, то

$$G(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} K(x) \cdot e^{i\omega x} dx, \quad K(x) = \frac{1}{2\pi} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} G(\omega) e^{-i\omega x} d\omega. \quad (21)$$

Тогда решение (20) запишется в виде последовательности трех интегралов:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= e^{ikx} + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega x} \int_{-\infty}^{\infty} K(\beta) e^{i\omega\beta} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik|\alpha|} e^{i\omega\alpha} d\alpha d\beta d\omega = \\ &= e^{ikx} + \int_{-\infty}^{\infty} K(\beta) \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik|\alpha|} \left(\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega(-x+\beta+\alpha)} d\omega \right) d\alpha d\beta. \end{aligned} \quad (22)$$

Интеграл, стоящий в скобках последнего выражения, представляет собой дельта функцию Дирака. Поэтому далее можем записать:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= e^{ikx} + \int_{-\infty}^{\infty} K(\beta) d\beta \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik|\alpha|} \delta(\alpha - (x - \beta)) d\alpha = \\ &= e^{ikx} + \int_{-\infty}^{\infty} K(\beta) \cdot e^{ik|x-\beta|} d\beta. \end{aligned} \quad (23)$$

Таким образом, наиболее компактная запись решения, в котором интеграл берется по направлению изменения физической переменной, выглядит следующим образом:

$$\psi(x) = e^{ikx} + \int_{-\infty}^{\infty} K(\zeta) \cdot e^{ik|x-\zeta|} d\zeta. \quad (24)$$

При решении уравнения Шредингера методом интегрального уравнения не предусмотрено выполнение условий «сшивки». Поэтому необходимо проверить выполнение условий при $x = \pm\infty$. Для этого перепишем решение (24) в следующие виде:

$$\psi(x) = e^{ikx} \left[1 + \int_{-\infty}^x K(\zeta) e^{-ik\zeta} d\zeta \right] + e^{-ikx} \left[\int_x^{\infty} K(\zeta) e^{ik\zeta} d\zeta \right]. \quad (25)$$

Опираясь на последнюю форму решения, можно сделать заключение об асимптотическом поведении волновой функции следующим образом:

$$\begin{aligned} \psi(x) &\approx e^{ikx} \left[1 + \int_{-\infty}^{\infty} K(\zeta) e^{-ik\zeta} d\zeta \right], \quad x \rightarrow \infty; \\ \psi(x) &\approx e^{ikx} + e^{-ikx} \int_{-\infty}^{\infty} K(\zeta) e^{ik\zeta} d\zeta, \quad x \rightarrow -\infty. \end{aligned} \quad (26)$$

Как видим из этих соотношений, после барьера мы имеем проходящую волну, а до барьера имеются и падающая, и отраженная волны. Таким образом решение (24) верно отражает асимптотическое поведение искомой функции.

Одиночный барьер в виде импульса Гаусса

Пусть барьер определяется простейшей формулой:

$$U(x) = e^{-x^2}. \quad (27)$$

Вычислим графики спектральных функций:

$$B_1(\omega+k) = \int_{-\infty}^{\infty} U(x)e^{ix(\omega+k)} dx, \quad B_2(\omega-k) = \int_{-\infty}^{\infty} U(x)e^{ix(\omega-k)} dx, \quad (28)$$

$$Q(\omega) = B_3(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} U(x) e^{ik|x|} e^{i\omega x} dx.$$

Графики этих трех функций, рассчитанные численным методом, показаны на рис. 1.

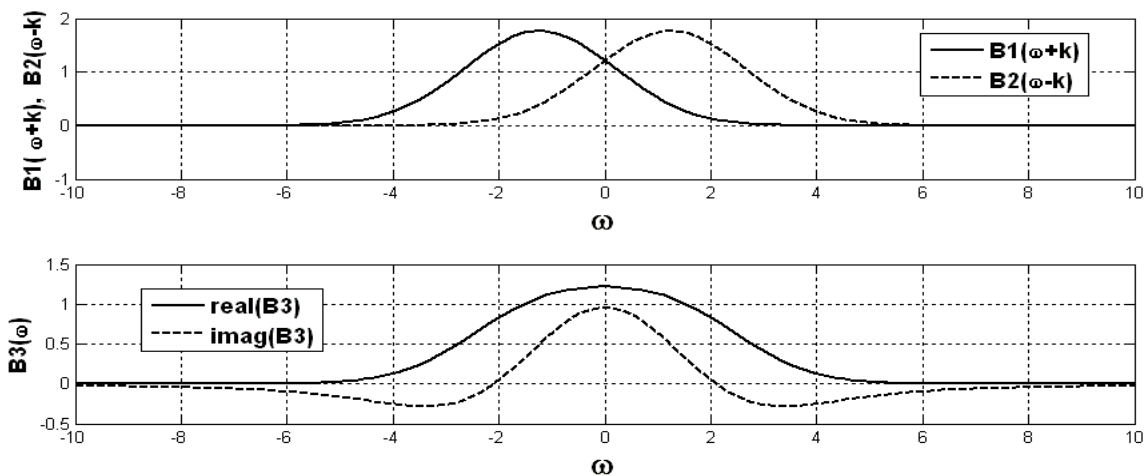


Рис. 1. Графики $B_1(\omega+k)$, $B_2(\omega-k)$ и $B_3(\omega)$
Fig. 1. Graphs $B_1(\omega+k)$, $B_2(\omega-k)$ and $B_3(\omega)$

Функций $B_1(\omega+k)$ и $B_2(\omega-k)$ являются вещественными функциями частоты ω и соответствуют сдвигу спектра барьера на величину $\pm k$. Что касается функции $B_3(\omega)$, то она является комплексной. Легко заметить, что вещественная часть функции $B_3(\omega)$ равна полусумме величин B_1 и B_2 . При этом, вся комплексная функция $B_3(\omega)$ является четной функцией относительно частоты ω . Кроме того, видно, что все три функции достаточно быстро убывают с увеличением модуля ω . Последнее обстоятельство позволяет, после вычисления спектра $G(\omega)$, легко восстановить и функцию $K(x)$ по формуле (21). Графики функций $G(\omega)$ и $K(x)$ приведены на рис. 2.

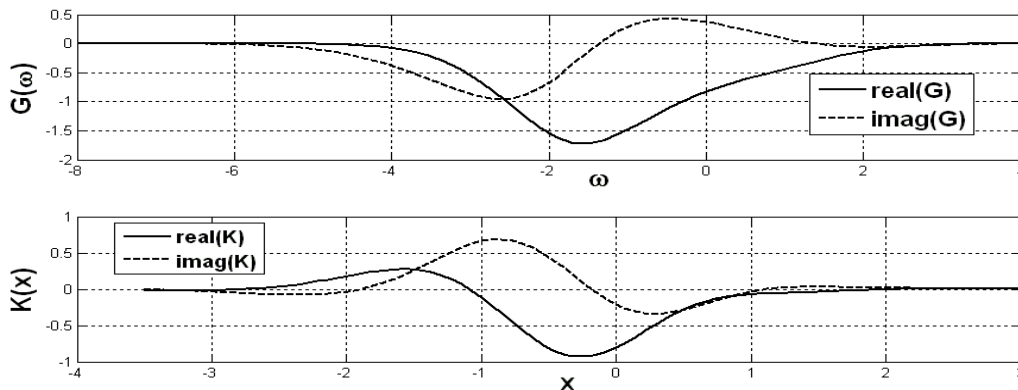


Рис. 2. Графики вещественных и мнимых частей функций $G(\omega)$ и $K(x)$, вычисленные для значений: $m = 3$ и $E = 0.5$

Fig. 2. Graphs of the real and imaginary parts of the functions $G(\omega)$ and $K(x)$ calculated for the values: $m = 3$ and $E = 0.5$

Видно, что обе функции $G(\omega)$ и $K(x)$ отличны от нуля только на ограниченных участках, как по переменной ω , так и по расстоянию x .

Коэффициент отражения

Очень важным преимуществом точного решения, по сравнению с решениями, получаемыми с помощью численных методов «сшивки», является то, что точное решение позволяет вычислять полный коэффициент прохождения S или отражения R для потенциального барьера $U(x)$ заданной формы. Из распределения (25) сразу же находим коэффициент отражения:

$$R = \left| \int_{-\infty}^{\infty} K(\zeta) e^{i k \zeta} d\zeta \right|^2. \quad (29)$$

Коэффициент прохождения будет равен:

$$S = \left| 1 + \int_{-\infty}^{\infty} K(\zeta) e^{-i k \zeta} d\zeta \right|^2. \quad (30)$$

Эти интегралы записаны с бесконечными пределами и, по крайней мере, один из них можно выразить через спектральную функцию $G(\omega)$. Действительно, формулы (21) и (19) дают:

$$\int_{-\infty}^{\infty} K(x) e^{ikx} dx = G(k) = \frac{\lambda \int_{-\infty}^{\infty} U(x) e^{2ikx} dx}{1 - \lambda \int_{-\infty}^{\infty} U(x) e^{ik|x|} e^{ikx} dx}. \quad (31)$$

Интеграл, входящий в формулу (30), не выражается подобным же простым образом через спектр $G(\omega)$, однако в книге Ф.М. Морса и Г. Фешбаха [14] доказывается, что между коэффициентами S и R выполняется равенство:

$$S + R = 1. \quad (32)$$

Поскольку справедливо соотношение (29), то имеем следующие формулы для коэффициентов прохождения и отражения, выраженные в явном виде через интегралы от потенциального барьера:

$$R = |G(k)|^2 = \left| \frac{\lambda \int_{-\infty}^{\infty} U(x) e^{2ikx} dx}{1 - \lambda \int_{-\infty}^{\infty} U(x) e^{ik|x|} e^{ikx} dx} \right|^2. \quad (33)$$

Формулы (33) удобны для случаев, когда спектральная функция потенциального барьера находится аналитическим путем.

Нахождение нулевой спектральной функции

Для барьера в виде импульса Гаусса нулевая спектральная функция имеет вид:

$$U_0(x) = e^{-\beta x^2}, \quad B_0(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} U(x) e^{i\omega x} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\beta}} \cdot e^{-\frac{\omega^2}{4\beta}}. \quad (34)$$

Для прямоугольного импульса с шириной h , основной спектр определяется следующим образом:

$$U_0(x) = \begin{cases} 0, & x < -\frac{h}{2} \\ 1, & -\frac{h}{2} \leq x \leq \frac{h}{2} \\ 0, & x > \frac{h}{2} \end{cases}, \quad B_0(\omega) = \int_{-h/2}^{h/2} e^{i\omega x} dx = h \cdot \left(\frac{\sin \frac{\omega h}{2}}{\frac{\omega h}{2}} \right). \quad (35)$$

Для барьера обратного квадрату гиперболического косинуса, имеем:

$$U_0(x) = \frac{1}{ch^2(\sigma x)}, \quad B_0(\omega) = \frac{2}{\sigma} \left(\frac{\frac{\omega \pi}{\sigma}}{sh \frac{\omega \pi}{\sigma}} \right). \quad (36)$$

Можно найти и другие примеры спектра $B_0(\omega)$ в справочнике Градштейна и Рыжика [15]. Все они являются четными вещественными функциями ω и быстро убывают, когда ω стремится к бесконечности.

Свойства составных потенциальных барьеров

В известных литературных источниках никогда не заострялось внимание на особом поведении составных потенциальных барьеров, т.е. таких, когда два или несколько барьеров находятся на некотором расстоянии друг от друга, и между ними образуется потенциальная яма. Между тем, при численных решениях, использующих метод «сшивки», для составных барьеров часто наблюдались значительные колебания коэффициента отражения R и коэффициента прохождения S с изменением энергии частицы E . Метод «сшивки» носит сугубо численный характер и при его применении трудно понять причину того, почему частица легче проходит через двойной барьер, чем через барьер одиночный, вследствие чего склонялись к тому, чтобы относить такой эффект к ошибкам счета.

Сначала заметим, что если одиночный барьер сдвинуть на расстояние d от начала координат, то его спектр просто умножится на множитель $e^{i\omega d}$, т.е.

$$\int_{-\infty}^{\infty} U(x-d) e^{i\omega x} dx = e^{i\omega d} \cdot B_0(\omega). \quad (37)$$

Спектр двойного барьера тогда будет равен:

$$\int_{-\infty}^{\infty} [U(x) + U(x-d)] e^{i\omega x} dx = (1 + e^{i\omega d}) \cdot B_0(\omega). \quad (38)$$

Функция $G(\omega)$, определяемая формулой (21), изменится при этом следующим образом:

$$G(\omega) = \frac{\lambda \int_{-\infty}^{\infty} U(x) e^{ix(\omega+k)} dx \cdot (1 + e^{i(\omega+k)d})}{1 - \lambda \int_{-\infty}^{\infty} [U(x) + U(x-d)] e^{ik|x|} e^{i\omega x} dx}. \quad (39)$$

Естественно, что и функция $K(x)$, входящая в решение (24), также поменяется с изменением функции $G(\omega)$.

Подставляя в (39) $\omega = k$, получаем следующее выражение для коэффициента отражения:

$$R = |G(k)|^2 = \left| \frac{\lambda \int_{-\infty}^{\infty} U(x) e^{2ikx} dx \cdot (1 + e^{2ikd})}{1 - \lambda \int_{-\infty}^{\infty} [U(x) + U(x-d)] e^{ik|x|} e^{ikx} dx} \right|^2, \quad S = 1 - R. \quad (40)$$

Формула (40), представляющая коэффициент отражения составной мембраны, определяет основной математический результат работы, поскольку позволяет выявить резонансные режимы прохождения компонентов газовой смеси. Наличие множителя $(1 + e^{2ikd})$ существенно усложняет спектр двойного барьера, по сравнению со спектром одиночного барьера, и этим объясняется чувствительность коэффициента отражения к параметрам формы потенциального барьера.

Присутствие множителя $(1 + e^{2ikd})$ в числителе формулы (40) означает, что коэффициент отражения R должен обращаться в ноль при определенных значениях расстояния d между барьерами. Приравнявая этот множитель нулю, находим:

$$e^{2ikd} = -1 = e^{i\pi(2n+1)}, \quad d = \frac{\pi\left(n + \frac{1}{2}\right)}{k} = \frac{\pi\left(n + \frac{1}{2}\right)}{\sqrt{2mE}}, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (41)$$

Отсюда видно, что коэффициент отражения обращается в ноль не при одном, а при многих значениях расстояния d между одиночными барьерами.

Выбирая таким способом расстояние d в формуле (40) мы достигаем эффекта избирательности, т.е. того, что частица с массой m и с энергией E будет свободно проходить, без всякого отражения, через потенциальный барьер, состоящий из двух одинаковых частей.

Если имеется возможность изменять расстояние d между двумя потенциальными барьерами, то представляет интерес проследить зависимость коэффициента прохождения $S(d)$, вычисленного с использованием формулы (40), при частных значениях массы и энергии. На рис. 3 показан результат такого расчета, выполненного для случая, когда: $E=0.5$ и $m_1=3$, $m_2=4$.

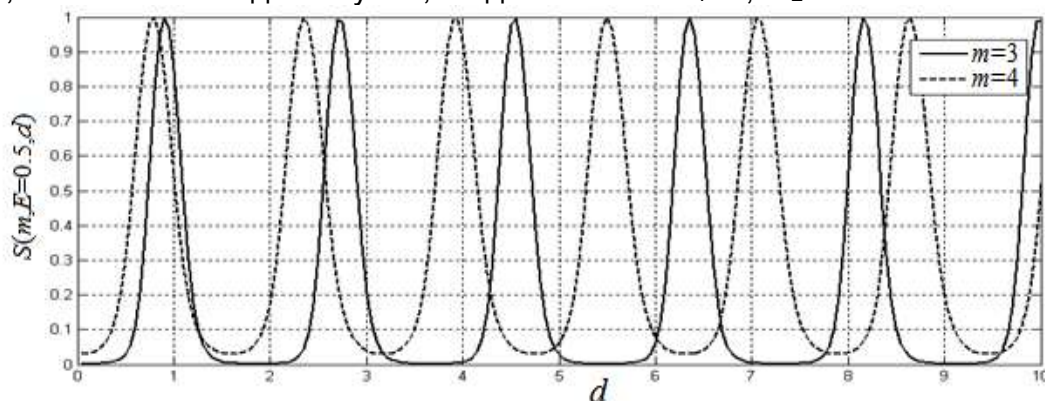


Рис. 3. Графики коэффициента прохождения $S(m, E, d)$, при значении энергии $E = 0.5$ для двух значений масс: $m = 3$ и $m = 4$

Fig. 3. Graphs of the transmission coefficient $S(m, E, d)$, at an energy value of $E = 0.5$ for two mass values: $m = 3$ and $m = 4$

Из этого расчета видно, что существует эффект сепарации частиц, различающихся по массе. Регулируя расстояние d между барьерами, можно

добиться прохождения одной из частиц и при этом прохождение другой будет полностью заблокировано.

Блокирование гелиона определяется участками сплошной кривой, лежащими на горизонтальной оси. При этом если $d \in [5,6]$, то волны коэффициента прохождения идут в противофазе. Это означает, что на большей части отмеченного интервала мы имеем сверхвысокие значения коэффициента разделения гелий-гелионовой смеси. В том, что изотоп ^4He проходит через составные барьеры лучше, чем ^3He , нет ничего удивительного. Поскольку даже по меркам классической механики частица, имеющая тот же эффективный размер, но большую массу, должна проходить лучше.

Заключение

Получено аналитическое решение интегрального уравнения Шредингера, из которого сразу следуют выражения для коэффициентов отражения и прохождения. Благодаря наличию второго барьера, коэффициент отражения обращается в ноль в последовательности значений по расстояниям между моноатомными слоями мембраны. Это означает, что на этих дистанциях коэффициент прохождения гелия будет равен единице. В то же время гелион, имеющий другую массу не будет иметь резонансного прохождения на указанных дистанциях между слоями мембраны.

Таким образом, одна из компонент будет проходить через систему барьеров, другая же не будет проходить вовсе. В результате мы получаем эффективную систему для просеивания изотопов. Эту систему можно настраивать на разделение газов, меняя расстояние между барьерами. При этом выводы оказываются справедливыми для сверхтонких одинаковых барьеров различной формы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Berger C., Song Z., Li X., Wu X., Brown N., Naud C., Mayou D., Li T., Hass J., Marchenkov A.N. Electronic confinement and coherence in patterned epitaxial graphene // *Science*. 2006. № 5777. P. 1191–1196.
2. Sutter P.W., Flege J.-I., Sutter E.A. Epitaxial graphene on ruthenium // *Nature Materials*. 2008. Vol. 5. № 7. P. 406–411. DOI: 10.1038/nmat2166.
3. Zhang Y., Gomez L., Ishikawa F.N., Madaria A., Ryu K., Wang C., Badmaev A., Zhou C. Comparison of graphene growth on single-crystalline and polycrystalline Ni by chemical vapour deposition // *The Journal of Physical Chemistry Letters*. 2010. Vol. 1. № 20. P. 3101–3107. DOI: 10.1021/jz1011466.
4. Yu J., Qin L., Hao Y., Kuang S., Bai X., Chong Y.-M., Zhang W., Wang E. Vertically aligned boron nitride nanosheets: Chemical vapor synthesis, ultraviolet light emission, and superhydrophobicity // *ACS Nano*. 2010. Vol. 4. № 1. P. 414–422. DOI: 10.1021/nn901204c.
5. Bianco E., Butler S., Jiang S., Restrepo O.D., Windl W., Goldberger J.E. Stability and exfoliation of germanane: A germanium graphane analogue // *ACS Nano*. 2013. Vol. 7. № 5. P. 4414–4421. DOI: 10.1021/nn4009406.
6. Vogt P., De Padova P., Quaresima C., Avila J., Frantzeskakis E., Asensio M.C., Resta A., Ealet B., Le Lay G. Silicene: Compelling experimental evidence for graphenelike two-dimensional silicon // *Physical Review Letters*. 2012. Vol. 108. № 15. Article number 155501. DOI: 10.1103/PhysRevLett.108.155501.
7. Liu H., Du Y., Deng Y., Ye P.D. Semiconducting black phosphorus: synthesis, transport properties and electronic applications // *Chemical Society Reviews*. 2015. Vol. 44. № 9. P. 2732–2743. DOI: 10.1039/c4cs00257a.

8. Zhu F., Chen W., Xu Y., Gao C., Guan D., Liu C., Qian D., Zhang S.-C., Jia J. Epitaxial growth of two-dimensional stanene // *Nature Materials*. 2015. Vol. 14. № 10. P. 1020–1025. DOI: 10.1038/nmat4384.
9. Lin Y., Williams T.V., Connell J.W. Soluble, exfoliated hexagonal boron nitride nanosheets // *Journal of Physical Chemistry Letters*. 2009. Vol. 1. № 1. P. 277–283. DOI: 10.1021/jz9002108.
10. Zhang J., Chen Y., Wang X. Two-dimensional covalent carbon nitride nanosheets: Synthesis, functionalization, and applications // *Energy and Environmental Science*. 2015. Vol. 8. № 11. P. 3092–3108. DOI: 10.1039/c5ee01895a.
11. Huang X., Zeng Z., Zhang H. Metal dichalcogenide nanosheets: preparation, properties and applications // *Chemical Society Reviews*. 2013. Vol. 42. № 5. P. 1934–1946. DOI: 10.1039/c2cs35387c.
12. Lv R., Robinson J.A., Schaak R.E., Sun D., Sun Y., Mallouk T.E., Terrones M. Transition metal dichalcogenides and beyond: synthesis, properties, and applications of single- and few-layer nanosheets // *Accounts of Chemical Research*. 2015. Vol. 48. № 1. P. 56–64. DOI: 10.1021/ar5002846.
13. Mahmood J., Lee E.K., Jung M., Shin D., Jeon I.-Y., Jung S.-M., Choi H.-J., Seo J.-M., Bae S.-Y., Sohn S.-D., Park N., Oh J.H., Shin H.-J., Baek J.-B. Nitrogenated holey two-dimensional structures // *Nature communications*. 2015. Vol. 6. № 1. Article number 6486. DOI: 10.1038/ncomms7486.
14. Морс Ф.М., Феибах Г. Методы теоретической физики : в двух томах. Том 1. М. : Книга по Требованию, 2012. 894 с.
15. Градштейн И.С., Рыжик Н.М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М. : Физматлит, 1963. 1100 с.

Статья поступила

Bubenchikov M.A., Bubenchikov A.M., Jambaa S., Lun-Fu A.V., Chelnokova A.S. (2020) ANALYTICAL SOLUTION OF THE SCHRÖDINGER INTEGRAL EQUATION. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika* [Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics].

The present paper considers the use of wave dynamics in solving problems of membrane separation of helium isotopes in a gas state at cryogenic temperatures. The dimensionless form of the stationary Schrödinger differential equation is obtained. Following that, the integral representation form of the wave function which is equivalent to the classical equation is written. This form is similar to the integral equation with a degenerate core; however, it contains a modulus of the argument with a shift along the real axis. Using the shift operator, the existing exponential function in the Schrödinger integral equation can be split into a differential operator and an exponential function of the argument module which does not contain a shift. The Fourier identity allows reducing the exponent of the modulus of the argument to a regular exponent. Next, basing on the general ability of the differential operator acting on the exponent, it is possible to calculate the spectral functions of the problem and write down the distribution for the wave function. This distribution is ultimately expressed through the spectra of the potential barrier. Thereafter, the structure and the spectrum of the composite barrier are considered. With the expression determining the reflection coefficient it is found that the double-barrier system can have a resonant passage of one of the components in the sequence of distances between the layers of the membrane.

Keywords: integral equation, degenerate kernel, shift operator, exponential functions, Fourier identity.

Financial support. The reported study was funded by RFBR and MCESSM according to the research project № 19-51-44002.

В работе рассмотрен вопрос о применении волновой динамики для решения задач мембранного разделения изотопов гелия, находящихся при криогенных температурах в газовом состоянии. Получена безразмерная форма стационарного дифференциального уравнения Шредингера. После этого записывается эквивалентная классическому уравнению интегральная форма представления для волновой функции. По своему виду эта форма аналогична интегральному уравнению с вырожденным ядром, однако содержит модуль от аргумента со сдвигом по вещественной оси. Используя оператор сдвига, имеющуюся экспоненциальную функцию в интегральном уравнении Шредингера удается расщепить на дифференциальный оператор и экспоненциальную функцию от модуля аргумента, не содержащую сдвиг. Тожество Фурье позволяет экспоненту от модуля аргумента привести к обычной экспоненте. Далее, опираясь на общее свойство дифференциального оператора, действующего на экспоненту, удается вычислить спектральные функции задачи и выписать распределение для волновой функции. Это распределение в итоге выражается через спектры потенциального барьера. После чего рассмотрена структура и спектр составного барьера. По выражению, определяющему коэффициент отражения, найдено, что двухбарьерная система может иметь резонансное прохождение одной из компонент в последовательности расстояний между слоями мембраны.

Ключевые слова: интегральное уравнение, вырожденное ядро, оператор сдвига, экспоненциальные функции, тождество Фурье.

BUBENCHIKOV Mikhail Alekseevich (Candidate of Physics and Mathematics, Assoc. Prof., Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: michael121@mail.ru

BUBENCHIKOV Aleksey Mikhaylovich (Doctor of Physics and Mathematics, Prof., Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: bubenchikov_am@mail.ru

JAMBAA Soninbayar (Candidate of Physics and Mathematics, Assoc. Prof., National University of Mongolia, Ulaanbaatar, Mongolia). E-mail: jsoninbayar@yahoo.com

LUN-FU Alexander Viktorovich (Chief Engineer, Gazprom Transgaz Tomsk Ltd., Tomsk, Russian Federation). E-mail: a.lunfu@gtt.gazprom.ru

CHELNOKOVA Anna Sergeevna (Assistant, Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation) E-mail: smolina-nyuta@mail.ru

REFERENCES

1. Berger C., Song Z., Li X., Wu X., Brown N., Naud C., Mayou D., Li T., Hass J., Marchenkov A.N. (2006) Electronic confinement and coherence in patterned epitaxial graphene. *Science*. 5777. pp. 1191–1196.

2. Sutter P.W., Flege J.-I., Sutter E.A. (2008) Epitaxial graphene on ruthenium. *Nature Materials*. 5(7). pp. 406–411. – DOI: 10.1038/nmat2166.

3. Zhang Y., Gomez L., Ishikawa F.N., Madaria A., Ryu K., Wang C., Badmaev A., Zhou C. (2010) Comparison of graphene growth on single-crystalline and polycrystalline Ni by chemical vapour deposition. *The Journal of Physical Chemistry Letters*. 1(20). pp. 3101–3107. – DOI: 10.1021/jz1011466.

4. Yu J., Qin L., Hao Y., Kuang S., Bai X., Chong Y.-M., Zhang W., Wang E. (2010) Vertically aligned boron nitride nanosheets: Chemical vapor synthesis, ultraviolet light emission, and superhydrophobicity. *ACS Nano*. 4(1). pp. 414–422. – DOI: 10.1021/nn901204c.
5. Bianco E., Butler S., Jiang S., Restrepo O.D., Windl W., Goldberger J.E. (2013) Stability and exfoliation of germanane: A germanium graphane analogue. *ACS Nano*. 7(5). pp. 4414–4421. – DOI: 10.1021/nn4009406.
6. Vogt P., De Padova P., Quaresima C., Avila J., Frantzeskakis E., Asensio M.C., Resta A., Ealet B., Le Lay G. (2012) Silicene: Compelling experimental evidence for graphenelike two-dimensional silicon. *Physical Review Letters*. 108(15). 155501. – DOI: 10.1103/PhysRevLett.108.155501.
7. Liu H., Du Y., Deng Y., Ye P.D. (2015) Semiconducting black phosphorus: synthesis, transport properties and electronic applications. *Chemical Society Reviews*. 44(9). pp. 2732–2743. – DOI: 10.1039/c4cs00257a.
8. Zhu F., Chen W., Xu Y., Gao C., Guan D., Liu C., Qian D., Zhang S.-C., Jia J. (2015) Epitaxial growth of two-dimensional stanene. *Nature Materials*. 14(10). P. 1020–1025. – DOI: 10.1038/nmat4384.
9. Lin Y., Williams T.V. (2009) Connell J.W. Soluble, exfoliated hexagonal boron nitride nanosheets. *Journal of Physical Chemistry Letters*. 1(1). pp. 277–283. – DOI: 10.1021/jz9002108.
10. Zhang J., Chen Y., Wang X. (2015) Two-dimensional covalent carbon nitride nanosheets: Synthesis, functionalization, and applications. *Energy and Environmental Science*. 8(11). pp. 3092–3108. – DOI: 10.1039/c5ee01895a.
11. Huang X., Zeng Z., Zhang H. (2013) Metal dichalcogenide nanosheets: preparation, properties and applications. *Chemical Society Reviews*. 42(5). pp. 1934–1946. – DOI: 10.1039/c2cs35387c.
12. Lv R., Robinson J.A., Schaak R.E., Sun D., Sun Y., Mallouk T.E., Terrones M. (2015) Transition metal dichalcogenides and beyond: synthesis, properties, and applications of single- and few-layer nanosheets. *Accounts of Chemical Research*. 48(1). pp. 56–64. – DOI: 10.1021/ar5002846.
13. Mahmood J., Lee E.K., Jung M., Shin D., Jeon I.-Y., Jung S.-M., Choi H.-J., Seo J.-M., Bae S.-Y., Sohn S.-D., Park N., Oh J.H., Shin H.-J., Baek J.-B. (2015) Nitrogenated holey two-dimensional structures. *Nature Communications*. 6(1). 6486. – DOI: 10.1038/ncomms7486.
14. Morse F.M., Feshbach G. (2012) *Metody teoreticheskoy fiziki: v dvukh tomakh. Tom 1* [Methods of theoretical physics: in two volumes. Volume 1]. Moscow: Book on Demand.
15. Gradshteyn I.S., Ryzhik N.M. *Tablitsy integralov, summ, ryadov i proizvedeniy* [Tables of integrals, sums, series and products]. Moscow: Fizmatlit.

Дүгнэлт

Төслийн зорилго биелсэн талаар: Изотопуудыг, өөрөөр хэлбэл, маш төстэй шинж чанартай бөөмсийг салгах нь зөвхөн резонансын нөлөөгөөр боломжтой болсон. Тиймээс энэ хүнд хэцүү ажлыг олон улсын хамтарсан төсөл болгон ОХУ, Монгол улсын хоёр хэсэгт хувааж, хэсэг тус бүр ажлаа 100 хувь гүйцэтгэсэн

ХАВСРАЛТУУД

PAPER • OPEN ACCESS

Quantum tunneling of molecules through compound barriers

To cite this article: V A Poteryaeva et al 2020 *J. Phys.: Conf. Ser.* **1537** 012008

View the [article online](#) for updates and enhancements.



IOP ebooks™
Bringing together innovative digital publishing with leading authors from the global scientific community.
Start exploring the collection—download the first chapter of every title for free.

This content was downloaded from IP address 5.136.247.150 on 03/08/2020 at 06:03

ХАВСРАЛТ 1

Quantum tunneling of molecules through compound barriers

V A Poteryaeva¹, M A Babenchikov^{1,2}, S Jambaa³, D Gankbuyag⁴ and D Tsedenbaya⁴

¹ Department of Theoretical Mechanics, National Research Tomsk State University, 36 Lenin Avenue, Tomsk 634050 Russia

² Gazprom Transgas Tomsk Ltd, 9 Frunze Avenue, Tomsk 634029 Russia

³ Department of Applied Mathematics, National University of Mongolia, Ikh Singsulin gulomj-1, Sukhbaatar District, Ulaanbaatar 210646 Mongolia

⁴ Mongolian University of Science and Technology, 34 Baga Toiruu, Sukhbaatar District, Ulaanbaatar 14191 Mongolia.

* valentina.poteryaeva@gmail.com

Abstract. The use of hydrogen and helium as a fuel requires well-developed technologies for the separation of gas mixtures, in particular, separation of isotopes of an element. The presence of quantum effects makes such processes possible, and the proposed system of two potential barriers enhances the differences in the passage of isotopes through two layers of matter providing high separation efficiency. The probability of atoms passing through composite barriers is derived from the solving of stationary Schrodinger equation.

1. Introduction

The investigation of the separation of helium isotopes using a system of double energy barriers is presented. The presence of the second potential barrier that is located at a certain distance from the first barrier can have a critical impact on the permeability of the system, even in the case of atoms which differ only in mass (isotopes of an element)[1-4]. It causes a resonant transmission mode. Such an effect is possible if the distance between the potential barriers is chosen in such a way that it is a multiple of the de Broglie wavelength of the moving toward the barrier particle. Thus, it is possible to choose the distance between the barriers so that some isotopes pass through the system while others do not.

2. Mathematical model

The motion of waves in the space of the potential barrier's $U(z)$ influence is described by the stationary Schrodinger equation:

$$\Psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U(z))\Psi = 0, \quad (1)$$

where Ψ is the wave function; Ψ'' is the second derivative of Ψ ; m is the mass of the particle; \hbar is the reduced Plank constant; E is the energy of the system. Equation (1) is reduced to the following form at a distance from the barrier:

$$\Psi'' + k^2\Psi = 0, \quad k = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar}E. \quad (2)$$

The form of the function $\Psi(z)$ depending on the interval is as follows:

 Content from this work may be used under the terms of the Creative Commons Attribution 3.0 license. Any further distribution of this work must maintain attribution to the author(s) and the title of the work, journal citation and DOI. Published under license by IOP Publishing Ltd

ХАВСРАЛТ 1

$$\begin{aligned} \Psi(z) &= e^{uz} + Ce^{-uz}, \quad z < 0, \\ \Psi(z) &= A\Psi_1(z) + B\Psi_2(z), \quad 0 < z < L, \\ \Psi(z) &= D\psi^{k(z-L)}, \quad z > L. \end{aligned} \tag{3}$$

We can obtain the transmission coefficient $|D|^2$ by solving the system of equations based on conditions of equality of the values of the function $\Psi(z)$ and its derivative $\Psi'(z)$ at the points of the solutions' crosslinking [5].

$$\begin{pmatrix} \Psi_1(0) & \Psi_2(0) & 0 & -1 \\ \Psi_1'(0) & \Psi_2'(0) & 0 & ik \\ \Psi_1(L) & \Psi_2(L) & -1 & 0 \\ \Psi_1'(L) & \Psi_2'(L) & -ik & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ ik \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{4}$$

3. Results

The exact solutions for the cases of rectangular potential barrier $U(z)$ and a smooth barrier of the form $U(z) = 1/\text{ch}^2(xz)$ have already been received [6]. First of all we compared our results calculated via (4) with the analytical solution (figure 1). Here, the curves correspond to the analytical solution, the markers correspond to the solution of the problem described above. The results are indistinguishable. A single potential barrier does not provide the necessary degree of isotopes mixture separation as in the case of rectangular barrier, so in the case of a smooth barrier.

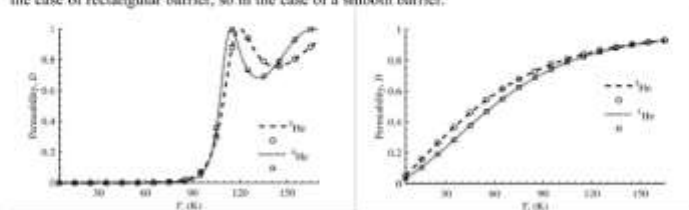


Figure 1. The transmission coefficient D of helium isotopes passing through the rectangular (left) and smooth (right) barriers.

However, a system of two identical potential barriers located at a certain distance from each other stimulates a more intense passage of one of the isotope, while the permeability of the system for the other isotope is significantly reduced (figure 2). In both cases the helium-4 prevails over helium-3, but the degree of separation varies from 0.7192 (0.7357) in the case of a single barrier to 396.7333 (22.8519) in the case of double rectangular (smooth) barrier. The ratio of the given values is 550 (31).

ХАВСРАЛТ 1

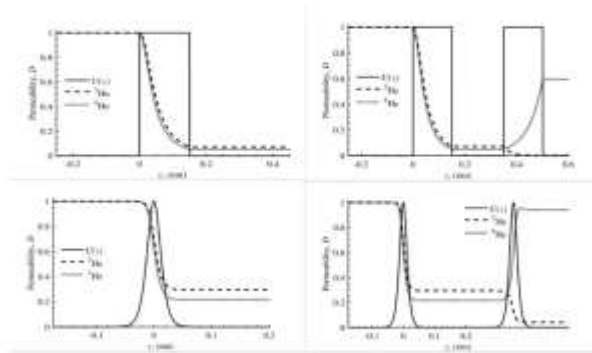


Figure 2. Helium isotopes passing through the single potential barrier (left) and the double potential barrier (right) in the case of rectangular (top) and smooth (bottom) barriers.

Differences in the masses of isotopes affect their de Broglie wavelengths. A heterogeneous character of the isotopes' passage through the system of barriers is observed when the distance between the peaks of two barriers b is a multiple of the de Broglie wavelength of one of the isotopes and does not coincide with the same parameter of the other isotope. The choosing of the value of b that corresponds to the peak of permeability of one isotope and coincides with the smallest value of the transmission for another isotope will provide the best degree of separation.

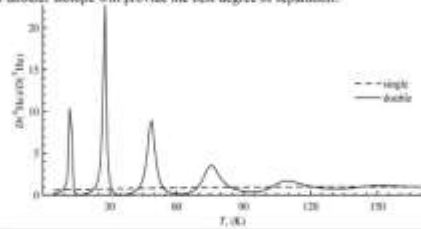


Figure 3. The degree of isotopes separation through the systems of single and double smooth barriers

As can be seen in figure 3, while the use of a single barriers does not provide a degree of separation greater than 1, the system of two barriers enhances the difference in the passage of helium-3 and helium-4 to 30.

4. Conclusion

The systems of the double barrier that correspond to the usage of bilayer membranes provide very efficient separation of isotope mixtures. Thorough adjustment of the parameters will provide a degree of separation suitable for industrial needs, which will increase the productivity of membrane gas separation.

5. Acknowledgements

This work was supported by a grant from the Russian Foundation for Basic Research (Project No. 19-51-44002).

References

- [1] Hauser A V and Schwerdtfeger P 2012 *J. Phys. Chem. Letters* **3** 209–13
- [2] Qu Y, Li F, Zhou H and Zhao M 2016 *Sci. Rep.* **6** 19952
- [3] Carbajo J P, Parra J B, Ania C O, Merklng P J and Calero S 2019 *ACS Appl. Mat. And Int.* **11(20)** 18833–40
- [4] Kumar A V, Jobic H and Bhatia S K 2006 *J. Phys. Chem. B* **110**, 16666–71
- [5] Bubenchikov A M, Bubenchikov M A, Potekuev A I, Libin E Y, Khudobina Y P and Kulagina V V 2017 *Rus. Phys. J* **60(1)** 140–8
- [6] Landau L D and Lifshitz E M 1965 *Quantum mechanics. Non-relativistic Theory. Vol. 3 of Theoretical Physics* (London: Pergamon press) pp 60–80



Research Article

Alexey Mikhailovich Bubenchikov, Mikhail Alekseevich Bubenchikov, Soninbayar Jambaa, Aleksandr Viktorovich Lun-Fu, and Anna Sergeevna Chelnokova*

Low-temperature separation of helium-helion mixture

<https://doi.org/10.1515/rams-2020-0004>
Received Sep 18, 2019; accepted Dec 11, 2019

Abstract: The research is devoted to the problem of designing materials with an adjustable property of permeability. The obtained tool for property regulation allows achieving hyper-selectivity in relation to separation of helium isotope mixtures, as well as some other gas mixtures. The research is theoretical in nature; however, it suggests a clear direction of activity for experimenters. The result obtained is valid for ultrathin barriers of any form. As a result, a new exact solution of the Schrödinger equation of wave dynamics, which is valid for the case of two-barrier systems, is found. This solution allows for comprehensive consideration of the process of wave passage through a barrier and identification of the causes leading to super-permeability of individual components.

Keywords: membrane permeability, Schrödinger equations, selectivity of gas mixtures

1 Introduction

Porous graphenes and porous boron nitride are best suited as elements of a composite membrane. Such materials can be obtained by epitaxy [1, 2] or by vapour deposition onto a substrate containing a defect-free graphene or porous boron nitride [3, 4]. However, there is another entire group of stable sheets with a thickness of one atom which can be converted into a porous 2D material at the stage of synthesis or after mechanical peeling. Thus, GeH sheets

which are thermally stable at the temperature of up to 75°C are investigated in [5]. Another known material is silicon which is an equivalent to graphenes [6, 7]; it has great prospects for new applications. In [8] the authors consider black phosphorus as a layered material from which it is possible to obtain a phosphorene – a monoatomic layer whose physical properties differ significantly from its bulk counterpart. The work [9] reports on successful manufacturing of a two-dimensional stanene based on Sc by the method of molecular beam epitaxy. In [10] it is suggested that functionalization of hexagonal boron nitride by amine molecules causes exfoliation of the layered structure which leads to the formation of boron nitride sheets. The authors of [11] state that the development of new layered materials has evolved from graphenes to metallic oxides and metallic chalcogenide nanosheets. Additionally, in [12] the authors mention metal dichalcogenides as the latest 2D materials and give an example of a material based on MoS₂. In [13] the electronic properties of the following metal dichalcogenides with a two-dimensional structure are observed: MoS₂, WS₂, WTe₂, TiSe₂, NbS₂, VSe₂, NbSe₂, TaS₂. All the materials can be adapted for separation of gases with an application of an appropriate method for their synthesis or subsequent processing leading to the formation of pores. In [14] a layered two-dimensional network structure, which contains uniformly distributed holes and is based on C₂N stoichiometry is reported.

Thus, a significant number of two-dimensional materials have already been synthesized, and they can be used in works on quantum sifting of isotopes. The r-C₃N₄ membrane is of great interest in terms of quantum screening of ³He/⁴He mixtures. Using this membrane makes it possible to achieve a degree of separation equal to 18 units [15]. In [16] it is suggested that tunnelling problems improve understanding of chemical phenomena. In [17] the authors consider a numerical solution to the problem of quantum-mechanical transitions through barriers. The proposed method was tested on some discontinuous potential distributions. Theoretical studies were carried out and demonstrated that efficient separation of ³He/⁴He can be achieved using a porous graphene-like material from carbon nitride with application of the quantum sieving ef-

*Corresponding Author: Anna Sergeevna Chelnokova: Tomsk State University, 634050, 36 Lenin av., Tomsk, Russia.
Email: smolna-myuta@mail.ru

Alexey Mikhailovich Bubenchikov: Tomsk State University, 634050, 36 Lenin av., Tomsk, Russia

Mikhail Alekseevich Bubenchikov, Aleksandr Viktorovich Lun-Fu: Gazprom Transgaz Tomsk Ltd., 634029, 9 Frunze av., Tomsk, Russia

Soninbayar Jambaa: National University of Mongolia, 210646, Ikh Surguulin godamj-1, Sukhbaatar district, Ulaanbaatar, Mongolia

Open Access. © 2020 A. M. Bubenchikov et al., published by De Gruyter.



This work is licensed under the Creative Commons

XABCPAИT 2

fect [18]. Mixtures of H_2/T_2 , $^3He/^4He$, CH_4/CD_4 , H_2/HD are studied in [19]. The work presents a simple theory for calculating selectivity at zero pressure due to quantum sieving in nanopores. In [20] the authors use molecular dynamics modelling, as well as the Monte Carlo method and experimental neutron scattering data, to study adsorption and diffusion of hydrogen and deuterium in zeolite in the temperature range of 30–150 K. In [21] molecular sieving of hydrogen and deuterium through a zeolite membrane at low temperatures is observed. There occurs an inverse kinetic scattering effect which consists in the fact that the heavier isotope, deuterium, diffuses faster than hydrogen. At 65 K scattering selectivity reaches 46 units. A number of works suggest that a porous graphene of a certain structure can be used for quantum screening of a helium–helion mixture [22]. Naturally, porous boron nitride, as well as any nanoporous membrane with a thickness of one atom of a given substance, is also suitable for these purposes. Several pore structures for separation of hydrogen from methane or helium from other noble gases are presented in [23–26]. The authors in [27–32] mainly analyse single-layer materials. There are works on controlled separation [33]. These studies assume that temperature plays the role of the control parameter. In addition, the case of a tunable potential barrier is analysed in [34]. In [35, 36] diffusion membranes are considered. In [37, 38] authors investigate membranes for industrial applications. Bimaterial is considered in [39]. Helium enrichment by resonant tunnelling through bilayers is presented in [40]. Works [41–52] consider application of classical mechanics in molecular sieving problems. However, at temperatures of the order of 50–60 K, the Schrödinger wave dynamics should be used for the problems under consideration.

2 The Schrödinger differential equation

Passage of matter waves and their reflection from a potential barrier $U(x)$ are described by the stationary Schrödinger differential equation:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + [k^2 - 2mU(x)]\psi = 0. \quad (1)$$

It is assumed that the barrier $U(x)$ and the desired function $\psi(x)$ are defined on the entire real axis x , and the wave which is incident on the left side of the barrier has the form:

$$\psi_0 = e^{ikx} \quad (2)$$

If the values m and E represent the dimensionless mass and the energy of the material particle, the wave parameter k is equal to:

$$k = \sqrt{2mE}. \quad (3)$$

Numerous literature sources devoted to solving the Schrödinger equation (1) [53, 54] describe various methods of solution. Exact solutions are known for a potential barrier $U(x)$ of a rectangular shape, as well as for a barrier having the form:

$$U(x) = \frac{1}{\text{ch}^2(ax)}. \quad (4)$$

For barriers of other shapes approximate numerical methods of calculation are usually used. They are based on the assumption that, firstly, it is necessary to calculate two linearly independent solutions $\Phi_1(x)$ and $\Phi_2(x)$ of differential equation (1) within a certain interval $0 < x < L$ adjacent to the $U(x)$ barrier region. Such solutions can be found by various numerical methods, using, for example, the Runge–Kutta method, or other modifications of finite-difference schemes. Figure 1 shows one of the results of such calculations for a barrier of a numerically specified shape.

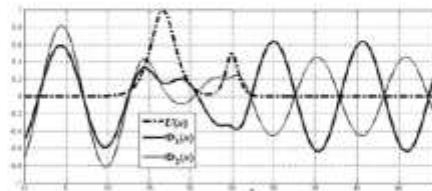


Figure 1: Fundamental solutions of stationary Schrödinger equation for barriers of given shape

It should be noted that the process of finding the functions $\Phi_1(x)$ and $\Phi_2(x)$ from equation (1) written in the difference form can be significantly facilitated by using the null(\mathbf{M}) subroutine which is available in the MatLab system. Factually, the difference form of equation (1) is as follows:

$$\mathbf{M} \cdot \boldsymbol{\psi} = 0, \quad \mathbf{M} = \mathbf{D2} + \text{diag} [k^2 + 2mU(x)], \quad (5)$$

$\boldsymbol{\psi}$ – the vector of grid values of the desired function,
 $\mathbf{D2}$ – the matrix analogue of the second derivative with respect to x .

If we remove the first and the last rows of the matrix \mathbf{M} obtained in such a way and apply the null(\mathbf{M}) opera-

XABCPAИT 2

tion, we will, as a result, obtain two desired column vectors $\Phi_1(x)$ and $\Phi_2(x)$. Moreover, they are immediately issued by the null(M) program in an orthonormal form.

The graphs of linearly independent functions $\Phi_1(x)$ and $\Phi_2(x)$ satisfying the Schrödinger equation (1), shown in Figure 1, were calculated by this method. This method completely replaces the “sweep method” known in computational mathematics and even surpasses it in terms of the solution accuracy.

On determining the functions $\Phi_1(x)$ and $\Phi_2(x)$ we continue the solution with reference to the entire real axis x by cross-linking with the solutions outside the barrier interval. It is assumed that the solutions in different areas have the following form:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= e^{ikx} - D \cdot e^{-ikx} & x < 0, \\ \psi(x) &= A \cdot \Phi_1(x) + B \cdot \Phi_2(x) & 0 < x < L, \\ \psi(x) &= C \cdot e^{ik(x-L)} & x > L. \end{aligned} \quad (6)$$

The latter expressions imply that within the region in front of the barrier there are both an incident and a reflected wave, and behind the barrier there is only one passing wave. The problem of cross-linking the solutions consists in determining the four coefficients A, B, C, D from the condition that the ψ function values are equal to its derivative at the contact points of the adjacent solutions. This leads to a system of four linear algebraic equations:

$$\begin{pmatrix} \Phi_1(0) & \Phi_2(0) & 0 & -1 \\ \Phi_1'(0) & \Phi_2'(0) & 0 & -ik \\ \Phi_1(L) & \Phi_2(L) & -1 & 0 \\ \Phi_1'(L) & \Phi_2'(L) & -ik & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ ik \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (7)$$

Since the coefficients A, B, C, D obtained from system (7) are complex quantities, the function $\psi(x)$ expressed by formulas (6) is also a complex quantity.

In quantum mechanics the function $\psi(x)$ expressed by formulas (6) and (7) is less significant than the square of its module $\rho = |\psi|^2$ because it is equal to the density of probability that the particle is at a point with the coordinate x . If the graph of the function $\rho(x)$ is displayed, it usually fluctuates strongly with a doubled spatial frequency equal to $2k$ due to the interference of the incident and the reflected waves. Therefore, such a graph is rarely presented on the screen. Instead, more informative parameters appear to be the current transmission coefficient $a = |C|^2$ and the reflection coefficient $b = |D|^2$.

The system of equations given in (7) is particular as the following equation is always observed:

$$|C|^2 + |D|^2 = 1 \quad (8)$$

That is, the sum of the transmission and the reflection coefficients is equal to unity, and this equality can be used

as a control tool for calculations. The current values of $C(x)$ and $D(x)$ can be determined from the same system of equations (7) in which the letter L is replaced by the letter x .

Figure 2 shows how the graphs of the functions $\rho(x) = |\psi|^2$ and $a(x)$ look against the background of the composite potential barrier $U(x)$ given in the numerical form.

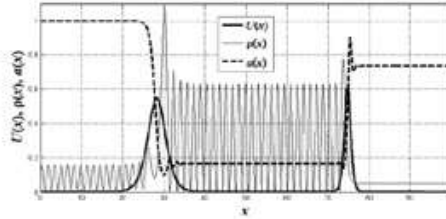


Figure 2: Result of numerical solution of Schrödinger differential equation

The calculation was carried out according to formulas (6) and (7) observing that the mass m and the energy E of the particle had the following dimensionless values: $E = 0.5$; $m = 4$.

Thus, the described method of cross-linking applied for linearly independent solutions gives acceptable results in some cases. However, since it is only numerical, it does not allow for complete evaluation of the shape of the barrier influencing the transmission coefficient of particles.

3 The Schrödinger integral equation

In addition to the cross-linking method of solutions, there is also an approach based on the fact that the Schrödinger differential equation (1) can be reduced to the corresponding integral equation, which has the form:

$$\psi(x) - \frac{2m}{2ik} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik|x-\zeta|} U(\zeta) \psi(\zeta) d\zeta = e^{ikx}. \quad (9)$$

Such an integral equation is given in the well-known book by Morse and Feshbach [53].

This large book pays much attention to the description of various approximate methods for solving equation (9), such as the iterative-perturbation Born approximations, the Fredholm series, long-wave approximations, short-wave approximations, and WKBJ-approximations. The abbreviation WKBJ stands for the first letters of the names G.

Introducing (19) in (17) we obtain:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= e^{ikx} + \left[\frac{\lambda \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(x-k+\omega)U(x)} dx}{1 - \lambda \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(x-k+\omega)U(x)} dx} \right] \\ &\quad - \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega x} d\omega \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega a} e^{ik|a|} da \\ &= e^{ikx} + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega x} \left[\frac{\lambda \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(x-k+\omega)U(x)} dx}{1 - \lambda \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(x-k+\omega)U(x)} dx} \right] d\omega \\ &\quad - \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik|a|} \cdot e^{i\omega a} da. \end{aligned} \quad (20)$$

For further transformations of formula (20) it is convenient to introduce the concept of the spectrum of the potential barrier $B(\omega)$ and calculate the integral over the variable a in the explicit form:

$$\begin{aligned} B(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} U(x) e^{i\omega x} dx, \quad (21) \\ \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik|a|} \cdot e^{i\omega a} da &= \frac{2ik}{k^2 - \omega^2} \end{aligned}$$

Then formula (20) takes the form:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= e^{ikx} \quad (22) \\ &\quad + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega x} \left[\frac{\lambda \cdot B(\omega + k)}{1 - \lambda \cdot B(\omega + k)} \right] \frac{2ik}{k^2 - \omega^2} d\omega \end{aligned}$$

This is the solution of the Schrödinger integral equation (9) written as an integral along the real axis ω in the spectral region. The factor enclosed in square brackets is responsible for the influence of the shape of the barrier on the de Broglie wave passing through it. Since the integrand has two poles $\omega = \pm k$ and possibly other poles of the denominator of the fraction in square brackets, the integrand is considered to be meromorphic. If we knew all its poles, integral (22) could be found as the sum of the residues. In numerical integration, integral (22) should be taken along a line parallel to the real axis and lying slightly below it.

4 Further transformations of the solution

A solution of form (22) can be transformed in such a way that it is expressed as an integral along the real axis x . To

do this we need to introduce a new function $K(x)$ related to the spectrum of the potential barrier $U(x)$ by the relations known from the theory of integral Fourier transforms:

$$\begin{aligned} \frac{\lambda B(\omega + k)}{1 - \lambda B(\omega + k)} &= \int_{-\infty}^{\infty} K(x) \cdot e^{i\omega x} dx, \quad (23) \\ K(x) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{\lambda B(\omega + k)}{1 - \lambda B(\omega + k)} \right] \cdot e^{-i\omega x} d\omega \end{aligned}$$

Then formula (22) can be written as a sequence of three integrals:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= e^{ikx} \quad (24) \\ &\quad + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega x} d\omega \int_{-\infty}^{\infty} K(\beta) \cdot e^{i\omega \beta} d\beta \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik|a|} e^{i\omega a} da \\ &= e^{ikx} \\ &\quad + \int_{-\infty}^{\infty} K(\beta) d\beta \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik|a|} da \left(\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega(x-\beta+a)} d\omega \right). \end{aligned}$$

The last integral in this formula, with respect to the variable ω , is the Dirac delta function, therefore, we obtain:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= e^{ikx} + \int_{-\infty}^{\infty} K(\beta) d\beta \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik|a|} \delta(a - (x - \beta)) da \quad (25) \\ &= e^{ikx} + \int_{-\infty}^{\infty} K(\beta) \cdot e^{ik|x-\beta|} d\beta. \end{aligned}$$

Thus, instead of formula (22), to find the wave function $\psi(x)$ we can use a more compact expression:

$$\psi(x) = e^{ikx} + \int_{-\infty}^{\infty} K(\zeta) \cdot e^{ik|x-\zeta|} d\zeta \quad (26)$$

For its calculation it is necessary to find numerically the function $K(x)$ associated with the barrier spectrum by formulas (23).

5 The reflection and transmission coefficients

Solving the Schrödinger equation using the integral equation method does not provide observation of the cross-linking condition. Therefore, it is necessary to make sure that the boundary conditions are satisfied at $x = \pm \infty$. For

this purpose, we will rewrite equation (27) in more detail:

$$\psi(x) = e^{ikx} \left[1 + \int_{-\infty}^x K(\zeta) e^{-ik\zeta} d\zeta \right] + e^{-ikx} \int_x^{\infty} K(\zeta) e^{ik\zeta} d\zeta \quad (27)$$

From here we see that at a great distance $|x| \rightarrow \infty$ the function $\psi(x)$ behaves as follows:

$$\psi(x) = e^{ikx} \left[1 + \int_{-\infty}^{\infty} K(\zeta) e^{-ik\zeta} d\zeta \right], \quad x \rightarrow \infty, \quad (28)$$

$$\psi(x) = e^{ikx} + e^{-ikx} \int_{-\infty}^{\infty} K(\zeta) e^{ik\zeta} d\zeta, \quad x \rightarrow -\infty.$$

That is, behind the barrier only the incident wave is preserved, and in front of the barrier there are both the incident and the reflected wave of the matter. Therefore, the boundary conditions of the problem at infinity are satisfied.

We can now immediately get the expression for the reflection coefficient:

$$b = \left| \int_{-\infty}^{\infty} K(\zeta) e^{ik\zeta} d\zeta \right|^2 \quad (29)$$

Further, we note that the reflection coefficient (29) can also be written explicitly through the spectrum of the potential barrier $B(\omega)$. Applying formula (23) we find:

$$b = \left| \frac{AB(2k)}{1 - AB(2k)} \right|^2 \quad (30)$$

After the reflection coefficient is found, the passage coefficient can be determined by the formula:

$$a = 1 - b. \quad (31)$$

6 Examples

There are cases when the spectral function of the potential barrier is found analytically.

For example, for a barrier in the form of the Gaussian pulse we get:

$$U(x) = e^{-\beta^2 x^2}, \quad B(\omega) = \frac{\sqrt{\pi}}{\beta} \cdot e^{-\frac{\omega^2}{4\beta^2}} \quad (32)$$

In this case, formula (30) for the reflection coefficient takes the form:

$$b(m, E) = \left| \frac{A\beta^{-1}\sqrt{\pi}e^{-\frac{k^2}{\beta^2}}}{1 - A\beta^{-1}\sqrt{\pi}e^{-\frac{k^2}{\beta^2}}} \right|^2, \quad \text{where } k = 2mE, \quad (33)$$

$$\lambda = \frac{2m}{2ik}$$

Figure 3 shows the shape of the potential barrier and the graphs of the reflection coefficient $b(m, E)$ calculated by formula (33).

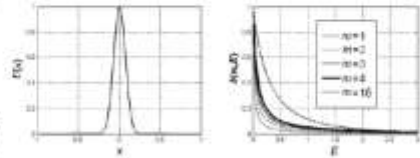


Figure 3: Single barrier (left) and reflection coefficient depending on particle energy (right)

These graphs demonstrate that particles with a larger mass at the same energy E are reflected more strongly for this type of barrier, while smaller particles with a very small mass pass through it being weakly reflected at sufficiently high energies.

Let us now consider the question of how the compound potential barrier which, for example, consists of two identical barriers spaced apart by a distance of d affects the reflection coefficient. The shape of such a barrier is as follows:

$$U(x) = e^{-\beta^2 x^2} + e^{-\beta^2 (x-d)^2} \quad (34)$$

Calculating its spectrum, we obtain:

$$B(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta^2 x^2} e^{i\omega x} dx + \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta^2 (x-d)^2} e^{i\omega x} dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta^2 x^2} e^{i\omega x} dx + e^{i\omega d} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta^2 (x-d)^2} e^{i\omega(x-d)} dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta^2 x^2} e^{i\omega x} dx \cdot [1 + e^{i\omega d}]$$

$$= \frac{\sqrt{\pi}}{\beta} e^{-\frac{\omega^2}{4\beta^2}} \cdot [1 + e^{i\omega d}].$$

Thus, the addition of a new barrier introduces only an additional factor in its spectrum.

Formula (33) for the reflection coefficient, therefore, takes the form:

$$b(m, E, d) = \left| \frac{\lambda\beta^{-1}\sqrt{\pi}e^{-\frac{k^2}{2\beta^2}} \cdot (1 + e^{2ikd})}{1 - \lambda\beta^{-1}\sqrt{\pi}e^{-\frac{k^2}{2\beta^2}} \cdot (1 + e^{2ikd})} \right|^2 \quad (36)$$

Due to the presence of an additional factor in formula (36), it is always possible to find such values of the distances d between two barriers at which the reflection coefficient $b(m, E_0, d)$ automatically vanishes at energy values $E = E_0$. Equating the factor (in parentheses) to zero we get:

$$e^{2ikd} = -1 = e^{i\pi(2n+1)}, \quad d = \frac{\pi(n + \frac{1}{2})}{k} = \frac{\pi(n + \frac{1}{2})}{\sqrt{2mE_0}}, \quad (37)$$

$$n = 0, 1, 2, 3 \dots$$

Choosing the distance d in formula (36) in this way we achieve the selectivity effect, i.e. a particle with the mass m and energy E_0 freely passes, without any reflection, through a potential barrier consisting of two pulses.

Figure 4 shows the position of the composite potential barrier $U(x)$ and the result of calculating the reflection coefficient by formula (36).

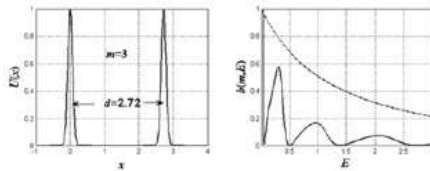


Figure 4: Composite barrier (left) and reflection coefficient (right). dotted line - reflection coefficient of single barrier

The dashed line on the right side shows, for comparison, a graph of the reflection coefficient for a single barrier. It can be seen from this calculation that the double barrier significantly reduces the reflection coefficient, compared with the single barrier, and turns it to zero for a discrete series of energy values E , as predicted by formula (36).

When the Schrödinger equation (1) was solved by the numerical method of cross-linking for composite barriers, significant fluctuations in the reflection coefficient b and the transmission coefficient a with a change in energy E were also quite often observed. The method of cross-linking is purely numerical in nature, and it is difficult to understand the reason why a particle passes through a double barrier more easily than through a single barrier. As

a result, there has been a tendency to attribute this effect to counting errors.

As for formulas (36) and (37), they are a consequence of the exact solution of the Schrödinger integral equation (9) and, therefore, are not in doubt. Compound potential barriers are accompanied by potential wells the bound states of which resonate with the incident wave.

Let the composite barrier have the form of two Gaussian pulses: $U(x) = \exp(-\beta^2 x^2)$, $U(x) = \exp(-\beta^2(x-d)^2)$. We will consider the nature of passage of isotopes with a change in the distance d between the vertices of the pulses. Figure 5 shows the permeability distributions of helium a_3 and helium a_4 , as well as the degree of separation for the mixture $\chi = a_3/a_4$.

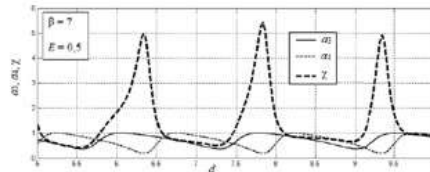


Figure 5: Change in permeability and selectivity with increasing distance between barriers

The change in permeability takes place in the form of vibrations. Moreover, these fluctuations nearly occur in antiphase. Because of this, there arise bursts of selectivity. Figures 6, 7 show the distributions of the same characteristics, but for the cases $E = 0.49$ and $E = 0.475$. We can observe a quantum character of the change in selectivity with the distance between the barriers, as well as a sharp increase in the degree of separation of the mixture in narrow bands.

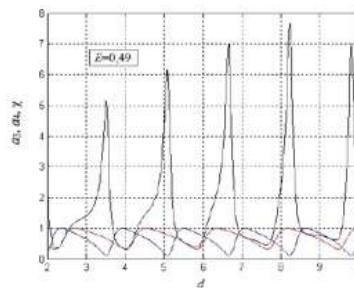


Figure 6: Change in permeability and selectivity

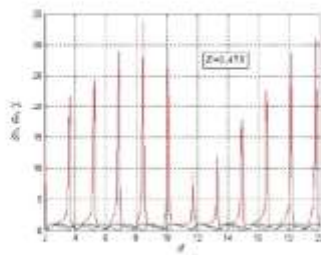


Figure 7: Changes in permeability and selectivity with increasing distance between barriers

Figures 8, 9 show that at low temperatures there are areas that correspond to super-permeability of the composite membrane with respect to helium. Moreover, the system as a whole is characterized by hyper-selectivity. In addition, with a decrease in temperature, an expansion of the super-permeability bands is observed.

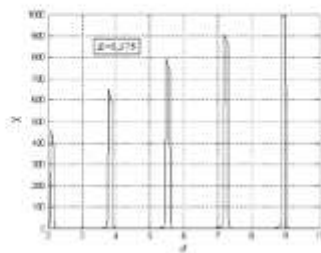


Figure 8: Selectivity at particle energy value $E = 0.375$

7 Conclusion

The solution of the Schrödinger integral equation in the differential operator form was obtained. The expressions for the reflection and transmission coefficients immediately follow from this form. Due to the presence of the second barrier, the reflection coefficient vanishes in a sequence of values along the distances between the barriers. This means that at these values the transmission coefficient of helium is equal to unity. At the same time, the helium isotope, helium, has a different mass; therefore, it has a non-

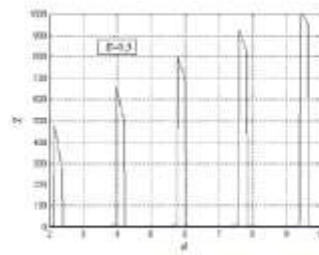


Figure 9: Selectivity at particle energy $E = 0.3$

zero reflection coefficient at the found values of the distance between the barriers. Thus, one of the components passes through the system of barriers, while the other does not pass at all. As a result, we get an effective system for sifting isotopes. This system can be configured for screening by changing the distance between the barriers. Moreover, the conclusions turn out to be true for ultrathin barriers made of any materials.

Acknowledgement: Alexey Mikhailovich Bubenchikov is supported by the Ministry of Science and Higher Education of Russia (agreement No. 075-02-2020-1479/1); Mikhail Alekseevich Bubenchikov and Anna Sergeevna Chelnokova are supported by RFBR and MCESSM according to the research project No. 19-51-64002.

References

- [1] Berger, C., Z. Song, X. Li, X. Wu, N. Brown, C. Naud, et al. Electronic confinement and coherence in patterned epitaxial graphene. *Science*, Vol. 312, No. 5777, 2006, pp. 1191–1196.
- [2] Sutter, P. W., J.-I. Rego, and E. A. Sutter. Epitaxial graphene on ruthenium. *Nature Materials*, Vol. 7, No. 5, 2008, pp. 406–411.
- [3] Zhang, Y., L. Gomez, F. N. Ishikawa, A. Madara, K. Ryu, C. Wang, et al. Comparison of Graphene Growth on Single-Crystalline and Polycrystalline Ni by Chemical Vapor Deposition. *Journal of Physical Chemistry Letters*, Vol. 1, No. 20, 2010, pp. 3103–3107.
- [4] Yu, L., L. Qin, Y. Han, S. Kuang, X. Bai, Y.-M. Cheng, et al. Vertically aligned boron nitride nanosheets: Chemical vapor synthesis, ultraviolet light emission, and superhydrophobicity. *ACS Nano*, Vol. 4, No. 1, 2010, pp. 434–422.
- [5] Bianco, E., S. Butler, S. Jiang, O. D. Restrepo, W. Windl, and J. E. Goldberger. Stability and exfoliation of germanane: A germanium-graphene analogue. *ACS Nano*, Vol. 7, No. 5, 2013, pp. 4434–4423.
- [6] Yabuuchi, K., and Y. Sugimoto. Evidence for honeycomb chained trimer structure of multilayer silicone on Ag(111) with noncontact atomic force microscopy. *Japanese Journal of Applied Physics*.

- Vol. 58, No. 2, 2019, p. 020903.
- [7] Vogt, P., P. De Padova, C. Quaresima, I. Avila, E. Frantzeskakis, M. C. Asensio, et al. Silicene: Compelling experimental evidence for graphene-like two-dimensional silicon. *Physical Review Letters*, Vol. 108, No. 15, 2012, id. 155501.
- [8] Liu, H., Y. Du, Y. Deng, and P. D. Ye. Semiconducting black phosphorus: Synthesis, transport properties and electronic applications. *Chemical Society Reviews*, Vol. 44, No. 9, 2015, pp. 2732–2743.
- [9] Zhu, F. F., W. J. Chen, Y. Xu, C. L. Gao, D. D. Guan, C. H. Liu, et al. Epitaxial growth of two-dimensional stanene. *Nature Materials*, Vol. 14, No. 10, 2015, pp. 1020–1025.
- [10] Lin, Y., T. V. Williams, and J. W. Connell. Soluble, Exfoliated Hexagonal Boron Nitride Nanosheets. *Journal of Physical Chemistry Letters*, Vol. 1, No. 1, 2009, pp. 277–283.
- [11] Zhang, J., Y. Chen, and X. Wang. Two-dimensional covalent carbon nitride nanosheets: Synthesis, functionalization, and applications. *Energy & Environmental Science*, Vol. 8, No. 11, 2015, pp. 3092–3108.
- [12] Huang, X., Z. Zeng, and H. Zhang. Metal dichalcogenide nanosheets: Preparation, properties and applications. *Chemical Society Reviews*, Vol. 42, No. 5, 2013, pp. 1934–1946.
- [13] Lv, R., J. A. Robinson, R. E. Schaak, D. Sun, Y. Sun, T. E. Mallouk, and M. Terrones. Transition metal dichalcogenides and beyond: Synthesis, properties, and applications of single- and few-layer nanosheets. *Accounts of Chemical Research*, Vol. 48, No. 1, 2015, pp. 56–64.
- [14] Mahmood, J., E. K. Lee, M. Jung, D. Shin, I. Y. Jeon, S.-M. Jung, et al. Nitrogenated holey two-dimensional structures. *Nature Communications*, Vol. 6, No. 1, 2015, p. 6486.
- [15] Li, F., Y. Qu, and M. Zhao. Efficient helium separation of graphitic carbon nitride membrane. *Carbon*, Vol. 95, 2015, pp. 51–57.
- [16] Hauser, A. W., J. Schrier, and P. Schwerdtfeger. Helium tunneling through nitrogen-functionalized graphene pores: pressure- and temperature-driven approaches to isotope separation. *Journal of Physical Chemistry*, Vol. 116, No. 19, 2012, pp. 10819–10827.
- [17] Gedillo, A. *Journal of Chemical Education*, Vol. 77, No. 4, 2000, pp. 528–531.
- [18] Qu, Y., F. Li, H. Zhou, and M. Zhao. Highly Efficient Quantum Sieving in Porous Graphene-like Carbon Nitride for Light Isotopes Separation. *Scientific Reports*, Vol. 6, No. 1, 2016, id. 19952.
- [19] Challa, S. R., D. S. Shall, and J. K. Johnson. Light isotope separation in carbon nanotubes through quantum molecular sieving. *Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics*, Vol. 63, No. 24, 2001, id. 245419.
- [20] Kumar, A. V. A., H. Iobic, and S. K. Bhatia. Quantum effects on adsorption and diffusion of hydrogen and deuterium in microporous materials. *Journal of Physical Chemistry B*, Vol. 110, No. 33, 2006, pp. 16666–16671.
- [21] Kumar, A. V. A., and S. K. Bhatia. Quantum effect induced reverse kinetic molecular sieving in microporous materials. *Physical Review Letters*, Vol. 95, No. 24, Dec. 9, 2005, id. 245901.
- [22] Leenaerts, O., B. Partoens, and F. M. Peeters. Graphene: A perfect nanoballoon. *Applied Physics Letters*, Vol. 93, No. 19, 2008, id. 193107.
- [23] Jiang, D., V. R. Cooper, and S. Dai. Porous Graphene as the ultimate membrane for gas separation. *Nano Letters*, Vol. 9, No. 12, 2009, pp. 4019–4024.
- [24] Li, Y., Z. Zhou, P. Shen, and Z. Chen. Two-dimensional polyphenylene: Experimentally available porous graphene as a hydrogen purification membrane. *Chemical Communications (Cambridge)*, Vol. 46, No. 21, 2010, pp. 3672–3674.
- [25] Blankenburg, S., M. Bieri, R. Fasel, K. Müllen, C. A. Pignedoli, and D. Passerone. Porous graphene as an atmospheric nanofilter. *Small*, Vol. 6, No. 20, 2010, pp. 2266–2271.
- [26] Jiao, Y., A. Du, M. Hankel, Z. Zhu, V. Rudolph, and S. Smith. Graphdiyne: A versatile nanomaterial for electronics and hydrogen purification. *C. Chem. Commun.*, Vol. 47, No. 43, 2011, pp. 11843–11845.
- [27] Hauser, A. W., J. Schrier, and P. Schwerdtfeger. Helium tunneling through nitrogen functionalized graphene pores: pressure- and temperature-driven approaches to isotope separation. *Journal of Physical Chemistry C*, Vol. 16, No. 19, 2012, pp. 10819–10827.
- [28] Hauser, A. W., and P. Schwerdtfeger. Nanoporous Graphene Membranes for Efficient ³He/⁴He Separation. *Journal of Physical Chemistry Letters*, Vol. 3, No. 2, 2012, pp. 209–213.
- [29] Jiao, Y., A. Du, M. Hankel, and S. C. Smith. Modelling carbon membranes for gas and isotope separation. *Physical Chemistry Chemical Physics*, Vol. 15, No. 14, 2013, pp. 4832–4843.
- [30] Zakrzewska-Koftuniewicz, G. *Encyclopedia of membranes: isotope separation, membrane for*. E. Drioli and L. Giorno, Eds. Springer, Berlin, Heidelberg, 2016, p. 1075.
- [31] Lei, F. Two-dimensional atomic crystal: a new type of high-efficiency hydrogen isotope separation filter. *Acta Physico-Chimica Sinica*, Vol. 32, No. 3, 2016, pp. 800–801.
- [32] Schrier, J., and J. McClain. Thermally driven isotope separation across nanoporous graphene. *Chemical Physics Letters*, Vol. 521, 2012, pp. 118–124.
- [33] Yang, S., H. Xie, H. Zhu, L. Zhang, Y. Zhou, H. Zhang, and Z. Zhao. Highly effective hydrogen isotope separation by cryogenic gas chromatography in a new stationary phase material MnCl₂@CPL-18p-γ-Al₂O₃. *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 43, No. 16, 2018, pp. 7973–7981.
- [34] Qu, Y., F. Li, and M. Zhao. Efficient hydrogen isotopologues separation through a tunable potential barrier: The case of a C₂N membrane. *Scientific Reports*, Vol. 7, No. 1, 2017, p. 1483.
- [35] Liu, Y., F. Yan, H. Pei, J. Li, Z. Cui, B. He, and L. Wang. Preparation of PSf-g-BN15CS/NWF composite membrane with sponge-like pore structure for lithium isotopes adsorptive separation. *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers*, Vol. 91, 2018, pp. 507–516.
- [36] Serrano, D. A., and H. S. Wio. Separation factor of membranes used for isotopic separation by gaseous diffusion: Pore morphology influence and effect of cracks. *Journal of Membrane Science*, Vol. 204, No. 1-2, 2002, pp. 5–23.
- [37] Pistunovich, V. I., A. Ya. Pigarov, A. O. Busnyuk, A. I. Livshits, M. E. Netkin, A. A. Samartsev, et al. Membrane pumping technology for helium and hydrogen isotope separation in the fusion reactor. *Fusion Engineering and Design*, Vol. 28, No. 1-2, 1995, pp. 336–340.
- [38] Ogawa, R., H. Matsushima, and M. Ueda. Hydrogen isotope separation with an alkaline membrane fuel cell. *Electrochemistry Communications*, Vol. 70, 2016, pp. 5–7.
- [39] Pui, H., F. Yan, Z. Wang, C. Liu, S. Hou, X. Ma, et al. Wickramasinghe Polysulfone-graft-4'-aminobenzo-15-crown-5-ether based tandem membrane chromatography for efficient adsorptive separation of lithium isotopes. *Journal of Chromatography A*, Vol. 1602, 2019, pp. 206–216.
- [40] Mandrà, S., J. Schrier, and M. Ceotto. Helium isotope enrichment by resonant tunneling through nanoporous graphene bilayers.

- Journal of Physical Chemistry A*, Vol. 118, No. 33, 2014, pp. 6457–6465.
- [41] Potekaev, A. I., and M. A. Bubenchikov. Sedimentation of nanoparticles in the field of centrifugal forces. *Russian Physics Journal*, Vol. 54, No. 2, 2011, pp. 211–220.
- [42] Potekaev, A. I., A. M. Bubenchikov, and M. A. Bubenchikov. New physical ideas and method of description and calculation of resistance to motion of small particles in a gaseous medium. *Russian Physics Journal*, Vol. 55, No. 12, 2013, pp. 1434–1443.
- [43] Bubenchikov, M. A., A. M. Bubenchikov, and A. I. Potekaev. Three fundamental problems of molecular statistics. *Russian Physics Journal*, Vol. 56, No. 3, 2013, pp. 341–348.
- [44] Bubenchikov, M. A., A. M. Bubenchikov, and A. I. Potekaev. Thermophoresis of ultrafine and nanosized particles. *Russian Physics Journal*, Vol. 56, No. 7, 2013, pp. 785–790.
- [45] Bubenchikov, A. M., A. I. Potekaev, O. V. Usenko, M. A. Bubenchikov, A. S. Maslov, and V. V. Ovcharenko. Thermophoresis of graphene plates. *Russian Physics Journal*, Vol. 57, No. 7, 2014, pp. 956–962.
- [46] Bubenchikov, A. M., M. A. Bubenchikov, A. I. Potekaev, E. E. Libin, and Y. P. Khudobina. A thin carbon film as a separator of light gases. *Russian Physics Journal*, Vol. 57, No. 8, 2014, pp. 1126–1131.
- [47] Bubenchikov, A. M., M. A. Bubenchikov, S. V. Tyschenko, M. A. Sheremet, and A. I. Potekaev. Convection in a limited space between two rotating cylinders. *Russian Physics Journal*, Vol. 57, No. 6, 2014, pp. 749–754.
- [48] Bubenchikov, A. M., M. A. Bubenchikov, A. I. Potekaev, E. E. Libin, and Y. P. Khudobina. The potential field of carbon bodies as a basis for sorption properties of barrier gas systems. *Russian Physics Journal*, Vol. 58, No. 7, 2015, pp. 882–888.
- [49] Bubenchikov, A. M., A. I. Potekaev, O. V. Usenko, S. Zhambaa, M. A. Bubenchikov, and V. V. Kulagina. The Effect of Graphene Shape on its Ability to Separate Gases. *Russian Physics Journal*, Vol. 58, No. 12, 2016, pp. 1711–1719.
- [50] Bubenchikov, M. A., A. S. Chelnokova, T. I. Nikipelova, and V. B. Tsyrenova. Permeability of nanonet structures constructed on the basis of carbon tubes. *Journal of Physics: Conference Series*, Vol. 6, 2017, p. 012020.
- [51] Bubenchikov, A. M., M. A. Bubenchikov, A. I. Potekaev, E. E. Libin, Y. P. Khudobina, and V. V. Kulagina. Penetration of microparticles through composite potential barriers. *Russian Physics Journal*, Vol. 60, No. 1, 2017, pp. 140–148.
- [52] Bubenchikov, A. M., M. A. Bubenchikov, E. A. Tarasov, O. V. Usenko, and A. S. Chelnokova. Calculating permeability of the low-temperature phase of a fullerite. *Diamond and Related Materials*, Vol. 86, 2018, pp. 146–158.
- [53] Morse, F. M., and G. Feshbach. *Methods of Theoretical Physics*, Vol. I. Book on Demand, Moscow, 2012.
- [54] Landau, L. D. *Theoretical Physics. Quantum mechanics (nonrelativistic theory)*, Vol. II. Fizmatlit, Moscow, 2004.

XABCPAJT 2

МАТЕМАТИКА

УДК 517.9
DOI 10.17223/19988621/67/1

MSC 45H05

М.А. Бубенчиков, А.М. Бубенчиков, С. Жамбаа, А.В. Лун-Фу, А.С. Челнокова

АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ
ИНТЕГРАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА¹

Построено аналитическое решение задачи о волновом транспорте вещества через составные сверхтонкие барьеры. Показано, что для составной мембраны, состоящей из двух одинаковых сверхтонких слоев, всегда существуют расстояния между слоями, при которых реализуется резонансное прохождение одной из компонент. Резонанс позволяет разделять дебройлевские волны частиц, одинаковых по свойствам и различающихся лишь массами. При температуре 25 К найдена широкая полоса гиперселективного разделения гелион-гелиевой смеси.

Ключевые слова: интегральное уравнение, вырожденное ядро, оператор сдвига, экспоненциальные функции, тождество Фурье.

В качестве элементов составной мембраны наилучшим образом подходит пористый графен или пористый нитрид бора. Такие материалы могут быть получены методом эпитаксии [1, 2] или способом осаждения из паровой фазы на подложку, содержащую бездефектный графен или пористый нитрид бора [3, 4]. Однако существует еще целая группа стабильных листов толщиной в один атом, которые на этапе синтеза или после механического отслоения могут быть превращены в пористый 2D-материал. Так, в работе [5] сообщается о листах GeH, которые являются термически стабильными до 75 °С. Известен также силшцен – графеновый эквивалент кремния [6], имеющий большие перспективы для новых применений. В работе [7] авторы указывают на черный фосфор как на слоистый материал из которого может быть получен фосфорен – одноатомный слой, физические свойства которого значительно отличаются от его объемного аналога. В работе [8] сообщается об успешном изготовлении двумерного станена на основе Sc методом молекулярно-лучевой эпитаксии. В [9] отмечается, что функционализация гексагонального нитрида бора молекулами амина вызвала расслоение слоистой структуры, что привело к образованию листов нитрида бора. В работе [10] говорится, что «разработка новых слоистых материалов претерпела эволюцию от графена к металлическим оксидам и металлическим халькогенидным нанолентам». В [11] также упоминаются металлдихалькогениды как новейшие 2D-материалы и приводится пример материала, созданного на основе MoS₂. В [12] изучаются электронные свойства следующих металлдихалькогенидов, имеющих двумерную структуру: MoS₂, WS₂, WTe₂, TiSe₂, NbS₂, VSe₂, NbSe₂, TaS₂. Все ма-

¹ Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Министерством культуры, образования, науки и спорта Монголии в рамках научного проекта № 19-51-44002.

териалы при соответствующем способе их синтеза или последующей обработке, приводящей к образованию пор, могут быть приспособлены для разделения газов. В [13] сообщается о слоистой двумерной сетчатой структуре, которая содержит равномерно распределенные дырки и имеет в своей основе стехиометрию C_2N .

Таким образом, уже синтезировано достаточно много двумерных материалов, которые могут быть применены в работах по квантовому просеиванию изотопов.

Цель настоящей работы состоит в нахождении условий, обеспечивающих резонансное прохождение компонент газовой смеси через составные барьеры.

Дифференциальное уравнение Шредингера

Дифференциальное уравнение волновой динамики имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U\Psi + \frac{\hbar^2}{i}\frac{\partial\Psi}{\partial t} = 0. \quad (1)$$

Здесь Ψ – волновая функция, \hbar – постоянная Планка, U – энергия взаимодействия частицы с окружением, m – масса частицы, Δ – оператор Лапласа, i – мнимая единица.

В частном случае, когда потенциальная энергия U явно не зависит от времени, решение уравнения (1) ищется в виде

$$\Psi = \psi e^{-iEt/\hbar}, \quad (2)$$

где E – энергия частицы.

Тогда для нахождения амплитуды волны Ψ будем иметь стационарное уравнение Шредингера:

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0. \quad (3)$$

В задачах низкотемпературного мембранного разделения газовых смесей определяющее значение имеет направление переноса, перпендикулярное поверхности мембраны. Ввиду малых размеров нанопор любой макроскопический фрагмент мембраны можно считать бесконечно протяженным в направлениях, параллельных мембране. Определяя по некоторому представительному фрагменту поверхности мембраны среднее значение энергии взаимодействия и используя одномерное волновое уравнение переноса вещества, мы можем говорить о барьерной теории проницаемости мембраны.

Таким образом, при получении результата по проницаемости отдельных компонент смеси или по селективности ее разделения можно исходить из уравнения (3).

Ниже будут представлены некоторые аналитические построения, которые оказались весьма эффективными при анализе задач прохождения изотопов через составные мембраны. В связи с этим удобнее будет иметь безразмерную форму уравнения переноса вещества.

Если массу частицы отнести к m_0 – массе атома водорода, за масштаб энергии взять U_0 – глубину потенциальной ямы в распределении энергии парных взаимодействий вещества мембраны и подвижных частиц, а в качестве масштаба длины принять величину

$$L = \hbar/\sqrt{m_0 U_0}, \quad (4)$$

то безразмерное уравнение волновой динамики не будет содержать постоянной Планка \hbar :

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + 2m(E - U(x))\psi = 0. \quad (5)$$

В записи (5) все величины безразмерные, включая координату x .

Таким образом, мы уменьшили количество констант задачи на единицу. Это является существенным при проведении дальнейших аналитических выкладок.

Интегральное уравнение Шредингера и его преобразования

Реализация численных методов решения дифференциального уравнения Шредингера ориентирована на конечную область изменения независимой переменной, а также на применение «спявки» полученных численных данных с асимптотическими распределениями вычисляемой величины. Обычно под условиями «спявки» понимаются равенства самой волновой функции и ее производной. Однако отсутствуют какие-либо обоснования в отношении использования этой формы условий. Также требует обоснования и сам размер конечной области интегрирования. В связи с этим важными являются попытки проведения интегрирования по всей действительной оси. По-видимому, это возможно сделать аналитическим методом. Вполне подходящим для этого является интегральное уравнение Шредингера:

$$\psi(x) - \frac{2m}{2ik} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik|x-\zeta|} U(\zeta) \psi(\zeta) d\zeta = e^{ikx}. \quad (6)$$

Здесь m – безразмерная масса частицы, $k = \sqrt{2mE}$ – параметр волны, E – безразмерная энергия частицы.

В книге Ф.М. Морса и Г. Фешбаха [14] доказывается эквивалентность дифференциального и интегрального подходов в описании процессов распространения волны материи.

Уравнение (6) есть интегральное уравнение с вырожденным ядром. Для проведения дальнейших его преобразований воспользуемся дифференциальным оператором сдвига:

$$e^{-h\frac{d}{dx}} f(x) = f(x-h). \quad (7)$$

Доказательство последнего равенства можно провести с помощью разложения экспоненты в ряд Тейлора, а также посредством применения уже линейных операторов к функции $f(x)$ и нахождения новой суммы ряда. Применяя равенство (7) к $e^{ik|x-\zeta|}$, исходное уравнение можем переписать в виде

$$\psi(x) - \lambda \left(\int_{-\infty}^{\infty} U(\zeta) \psi(\zeta) e^{-\zeta\frac{d}{dx}} d\zeta \right) e^{ik|x|} = e^{ikx}, \quad \lambda = \frac{m}{ik} = \frac{1}{2i} \sqrt{\frac{2m}{E}}. \quad (8)$$

Обратим внимание на выражение в скобках. Это выражение можно рассматривать как дифференциальный оператор или аналитическую функцию параметра $p = d/dx$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} U(\zeta) \psi(\zeta) e^{-\zeta\frac{d}{dx}} d\zeta = \int_{-\infty}^{\infty} U(\zeta) \psi(\zeta) e^{-\zeta p} d\zeta = L(p), \quad p = \frac{d}{dx}. \quad (9)$$

С учетом введенного обозначения уравнение (9) можно переписать в следующем виде:

$$\psi(x) - \lambda \cdot L(p) \cdot e^{-k|x|} = e^{ikx}. \quad (10)$$

Вид дифференциального оператора, действующего на стоящую от него справа экспоненциальную функцию, пока что нам неизвестен. Однако его можно найти. Умножая (10) на $U(x)\exp(-xp)$ и интегрируя в бесконечных пределах найдем

$$\left(\int_{-\infty}^{\infty} U(x) \psi(x) e^{-xp} dx \right) - \lambda L(p) \cdot \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{ik|x|} U(x) e^{-xp} dx \right) = \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} U(x) e^{-xp} dx \right). \quad (11)$$

Здесь появляются еще два дифференциальных оператора, для которых введем следующие обозначения:

$$B(p) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} U(x) e^{-xp} dx, \quad Q(p) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik|x|} U(x) e^{-xp} dx. \quad (12)$$

С учетом этих обозначений операторное равенство (11) примет вид:

$$L(p) \cdot [1 - \lambda Q(p)] = B(p). \quad (13)$$

Отсюда получаем

$$L(p) = \frac{B(p)}{1 - \lambda Q(p)}. \quad (14)$$

Иногда интегралы (12) могут быть вычислены аналитическим способом. В общем случае нужно проводить численное интегрирование. В любом случае эти интегралы зависят только от формы потенциального барьера. Подставляя (14) в выражение (10), получаем решение интегрального уравнения в виде

$$\psi(x) = e^{ikx} + \frac{\lambda B(p)}{1 - \lambda Q(p)} e^{k|x|}, \quad p = \frac{d}{dx}, \quad k = \sqrt{2mE}, \quad \lambda = \frac{m}{ik}. \quad (15)$$

Если бы дифференциальный оператор $L(p)$ действовал на показательную функцию обычного вида, то результат был бы следующим:

$$L\left(\frac{d}{dx}\right) \cdot e^{\mu x} = L(\mu) \cdot e^{\mu x}. \quad (16)$$

Однако в формуле (10) этот оператор действует на экспоненту от модуля аргумента. Поэтому непосредственное применение (16) невозможно. Но экспоненту от модуля аргумента можно привести к обычной экспоненте, если воспользоваться тождеством Фурье:

$$e^{ik|x|} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega x} e^{i\omega a} e^{k|a|} da d\omega. \quad (17)$$

Применяя правила (16) и (17) к формуле (15), получим

$$\psi(x) = e^{ikx} + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} L(-i\omega) e^{-i\omega x} e^{ik|a|} e^{i\omega a} da d\omega. \quad (18)$$

Выражение (18) и представляет собой решение интегрального уравнения Шредингера, записанное в виде двойного интеграла по спектральной оси. Как видим, в отличие от (6), в его правой части находятся все известные величины, поскольку

функции $B(\omega)$ и $Q(\omega)$, называемые спектрами барьера, определяются лишь его формой, т.е. являются известными функциями постановки задачи. Кроме формы барьера, до получения решения нам известен характер асимптотического поведения решения по оси физической переменной x .

На этом этапе интегрирования мы уже освободились от дифференциального оператора $L(p)$, заменив его с использованием правила (16) функцией $L(\omega)$. Функцию $L(-i\omega)$ обозначим через $G(\omega)$. Тогда с учетом (14) получим

$$G(\omega) = \frac{\lambda B(-i\omega)}{1 - \lambda Q(-i\omega)} = \frac{\lambda \int_{-\infty}^{\infty} U(x) e^{i\omega(x-k)} dx}{1 - \lambda \int_{-\infty}^{\infty} U(x) e^{ik(x)} e^{i\omega x} dx}. \quad (19)$$

В результате будем иметь

$$\psi(x) = e^{ikx} + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega x} G(\omega) e^{ik|\alpha|} e^{i\omega \alpha} d\alpha d\omega. \quad (20)$$

Если функция $G(\omega)$ является спектром некоторой функции $K(x)$, то

$$G(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} K(x) \cdot e^{-i\omega x} dx, \quad K(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G(\omega) e^{-i\omega x} d\omega. \quad (21)$$

Тогда решение (20) запишется в виде последовательности трех интегралов:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= e^{ikx} + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega x} \int_{-\infty}^{\infty} K(\beta) e^{i\omega \beta} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik|\alpha|} e^{i\omega \alpha} d\alpha d\beta d\omega = \\ &= e^{ikx} + \int_{-\infty}^{\infty} K(\beta) \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik|\alpha|} \left(\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega(\alpha-x+\beta)} d\omega \right) d\alpha d\beta. \end{aligned} \quad (22)$$

Интеграл, стоящий в скобках последнего выражения, представляет собой дельта-функцию Дирака. Поэтому далее можем записать:

$$\psi(x) = e^{ikx} + \int_{-\infty}^{\infty} K(\beta) d\beta \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik|\alpha|} \delta(\alpha - (x-\beta)) d\alpha = e^{ikx} + \int_{-\infty}^{\infty} K(\beta) \cdot e^{ik|x-\beta|} d\beta. \quad (23)$$

Таким образом, наиболее компактная запись решения, в котором интеграл берется по направлению изменения физической переменной, выглядит следующим образом:

$$\psi(x) = e^{ikx} + \int_{-\infty}^{\infty} K(\zeta) \cdot e^{ik|x-\zeta|} d\zeta. \quad (24)$$

При решении уравнения Шредингера методом интегрального уравнения не предусмотрено выполнение условий «спинки». Поэтому необходимо проверить выполнение условий при $x = \pm\infty$. Для этого перепишем решение (24) в следующем виде:

$$\psi(x) = e^{ikx} \left[1 + \int_{-\infty}^x K(\zeta) e^{-ik\zeta} d\zeta \right] + e^{-ikx} \left[\int_x^{\infty} K(\zeta) e^{ik\zeta} d\zeta \right]. \quad (25)$$

Опираясь на последнюю форму решения, можно сделать заключение об асимптотическом поведении волновой функции следующим образом:

$$\begin{aligned}\psi(x) &\approx e^{ikx} \left[1 + \int_{-\infty}^{\infty} K(\zeta) e^{-ik\zeta} d\zeta \right], & x \rightarrow \infty; \\ \psi(x) &\approx e^{ikx} + e^{-ikx} \int_{-\infty}^{\infty} K(\zeta) e^{ik\zeta} d\zeta, & x \rightarrow -\infty.\end{aligned}\quad (26)$$

Как видим из этих соотношений, после барьера мы имеем проходящую волну, а до барьера имеются и падающая, и отраженная волны. Таким образом, решение (24) верно отражает асимптотическое поведение искомой функции.

Одиночный барьер в виде импульса Гаусса

Пусть барьер определяется простейшей формулой:

$$U(x) = e^{-x^2}. \quad (27)$$

Вычислим графики спектральных функций:

$$\begin{aligned}B_1(\omega+k) &= \int_{-\infty}^{\infty} U(x) e^{ix(\omega+k)} dx, \\ B_2(\omega-k) &= \int_{-\infty}^{\infty} U(x) e^{ix(\omega-k)} dx, \\ Q(\omega) = B_3(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} U(x) e^{ikx} e^{i\omega x} dx.\end{aligned}\quad (28)$$

Графики этих трех функций, рассчитанные численным методом, показаны на рис. 1.

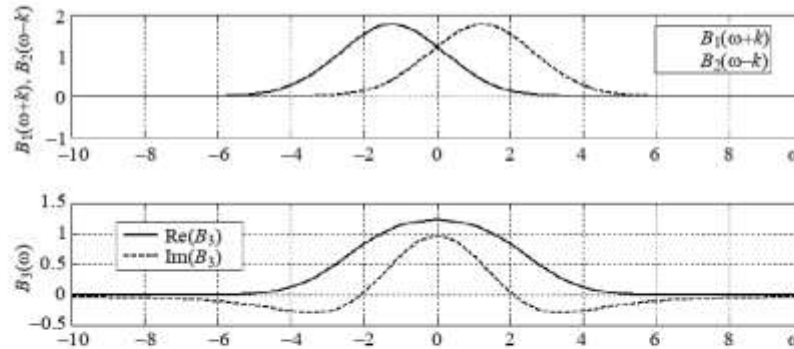


Рис. 1. Графики $B_1(\omega+k)$, $B_2(\omega-k)$ и $B_3(\omega)$
Fig. 1. Graphs $B_1(\omega+k)$, $B_2(\omega-k)$ and $B_3(\omega)$

Функции $B_1(\omega+k)$ и $B_2(\omega-k)$ являются вещественными функциями частоты ω и соответствуют сдвигу спектра барьера на величину $\pm k$. Что касается функции

$B_3(\omega)$, то она является комплексной. Легко заметить, что вещественная часть функции $B_3(\omega)$ равна полусумме величин B_1 и B_2 . При этом вся комплексная функция $B_3(\omega)$ является четной функцией относительно частоты ω . Кроме того, видно, что все три функции достаточно быстро убывают с увеличением модуля ω . Последнее обстоятельство позволяет после вычисления спектра $G(\omega)$ легко восстановить и функцию $K(x)$ по формуле (21). Графики функций $G(\omega)$ и $K(x)$ приведены на рис. 2.

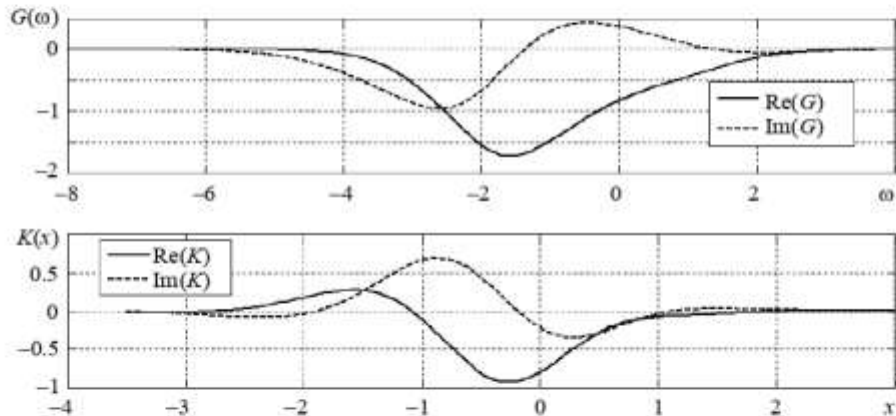


Рис. 2. Графики вещественных и мнимых частей функций $G(\omega)$ и $K(x)$, вычисленные для значений: $m = 3$ и $E = 0.5$
 Fig. 2. Graphs of the real and imaginary parts of the functions $G(\omega)$ and $K(x)$, calculated for the values: $m = 3$ and $E = 0.5$

Видно, что обе функции $G(\omega)$ и $K(x)$ отличны от нуля только на ограниченных участках, как по переменной ω , так и по расстоянию x .

Коэффициент отражения

Очень важным преимуществом точного решения, по сравнению с решениями, получаемыми с помощью численных методов «спивки», является то, что точное решение позволяет вычислять полный коэффициент прохождения S или отражения R для потенциального барьера $U(x)$ заданной формы. Из распределения (25) сразу же находим коэффициент отражения:

$$R = \left| \int_{-\infty}^{\infty} K(\zeta) e^{i k \zeta} d\zeta \right|^2. \quad (29)$$

Коэффициент прохождения будет равен

$$S = \left| 1 + \int_{-\infty}^{\infty} K(\zeta) e^{-i k \zeta} d\zeta \right|^2. \quad (30)$$

Эти интегралы записаны с бесконечными пределами и, по крайней мере, один из них можно выразить через спектральную функцию $G(\omega)$. Действительно, формулы (21) и (19) дают

$$\int_{-\infty}^{\infty} K(x) e^{ikx} dx = G(k) = \frac{\lambda \int_{-\infty}^{\infty} U(x) e^{2ikx} dx}{1 - \lambda \int_{-\infty}^{\infty} U(x) e^{ik|x|} e^{ikx} dx}. \quad (31)$$

Интеграл, входящий в формулу (30), не выражается подобным же простым образом через спектр $G(\omega)$, однако в книге Ф.М. Морса и Г. Фешбаха [14] доказывается, что между коэффициентами S и R выполняется равенство

$$S + R = 1. \quad (32)$$

Поскольку справедливо соотношение (29), то имеем следующие формулы для коэффициентов прохождения и отражения, выраженные в явном виде через интегралы от потенциального барьера:

$$R = |G(k)|^2 = \left| \frac{\lambda \int_{-\infty}^{\infty} U(x) e^{2ikx} dx}{1 - \lambda \int_{-\infty}^{\infty} U(x) e^{ik|x|} e^{ikx} dx} \right|^2. \quad (33)$$

Формулы (33) удобны для случаев, когда спектральная функция потенциального барьера находится аналитическим путем.

Нахождение нулевой спектральной функции

Для барьера в виде импульса Гаусса нулевая спектральная функция имеет вид

$$U_0(x) = e^{-\beta x^2}, \quad B_0(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} U(x) e^{i\omega x} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\beta}} \cdot e^{-\frac{\omega^2}{4\beta}}. \quad (34)$$

Для прямоугольного импульса с шириной h , основной спектр определяется следующим образом:

$$U_0(x) = \begin{cases} 0, & x < -\frac{h}{2} \\ 1, & -\frac{h}{2} \leq x \leq \frac{h}{2} \\ 0, & x > \frac{h}{2} \end{cases}, \quad B_0(\omega) = \int_{-h/2}^{h/2} e^{i\omega x} dx = h \cdot \left(\frac{\sin \frac{\omega h}{2}}{\frac{\omega h}{2}} \right). \quad (35)$$

Для барьера, обратного квадрату гиперболического косинуса, имеем

$$U_0(x) = \frac{1}{ch^2(\sigma x)}, \quad B_0(\omega) = \frac{2}{\sigma} \left(\frac{\frac{\omega \pi}{\sigma}}{sh \frac{\omega \pi}{\sigma}} \right). \quad (36)$$

Можно найти и другие примеры спектра $B_0(\omega)$ в справочнике Градштейна и Рыжика [15]. Все они являются четными вещественными функциями ω и быстро убывают, когда ω стремится к бесконечности.

Свойства составных потенциальных барьеров

В известных литературных источниках никогда не заострялось внимание на особом поведении составных потенциальных барьеров, т.е. таких, когда два или несколько барьеров находятся на некотором расстоянии друг от друга и между ними образуется потенциальная яма. Между тем, при численных решениях, использующих метод «сшивки», для составных барьеров часто наблюдались значительные колебания коэффициента отражения R и коэффициента прохождения S с изменением энергии частицы E . Метод «сшивки» носит сугубо численный характер и при его применении трудно понять причину того, почему частица легче проходит через двойной барьер, чем через барьер одиночный, поэтому чаще всего относили такой эффект к ошибкам счета.

Сначала заметим, что если одиночный барьер сдвинуть на расстояние d от начала координат, то получим, что его спектр нужно просто умножить на множитель $e^{i\omega d}$, т.е.

$$\int_{-\infty}^{\infty} U(x-d) e^{i\omega x} dx = e^{i\omega d} \cdot B_0(\omega). \tag{37}$$

Спектр двойного барьера тогда будет равен

$$\int_{-\infty}^{\infty} [U(x) + U(x-d)] e^{i\omega x} dx = (1 + e^{i\omega d}) \cdot B_0(\omega). \tag{38}$$

Функция $G(\omega)$, определяемая формулой (21), изменится при этом следующим образом:

$$G(\omega) = \frac{\lambda \int_{-\infty}^{\infty} U(x) e^{ix(\omega+k)} dx \cdot (1 + e^{i(\omega+k)d})}{1 - \lambda \int_{-\infty}^{\infty} [U(x) + U(x-d)] e^{ik|x|} e^{i\omega x} dx}. \tag{39}$$

Естественно, что и функция $K(x)$, входящая в решение (24), также поменяется с изменением функции $G(\omega)$.

Подставляя в (39) $\omega = k$, получаем следующее выражение для коэффициента отражения:

$$R = |G(k)|^2 = \left| \frac{\lambda \int_{-\infty}^{\infty} U(x) e^{2ikx} dx \cdot (1 + e^{2ikd})}{1 - \lambda \int_{-\infty}^{\infty} [U(x) + U(x-d)] e^{ik|x|} e^{ikx} dx} \right|^2, \quad S = 1 - R. \tag{40}$$

Формула (40), представляющая коэффициент отражения составной мембраны, определяет основной математический результат работы, поскольку позволяет выявить резонансные режимы прохождения компонентов газовой смеси. Наличие множителя $(1 + e^{2ikd})$ существенно усложняет спектр двойного барьера по сравнению со спектром одиночного барьера, и этим объясняется чувствительность коэффициента отражения к параметрам формы потенциального барьера.

Присутствие множителя $(1 + e^{2ikd})$ в числителе формулы (40) означает, что коэффициент отражения R должен обращаться в ноль при определенных значениях

расстояния d между барьерами. Приравнявая этот множитель нулю, находим

$$e^{2ikd} = -1 = e^{i\pi(2n+1)}, \quad d = \frac{\pi\left(n + \frac{1}{2}\right)}{k} = \frac{\pi\left(n + \frac{1}{2}\right)}{\sqrt{2mE}}, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (41)$$

Отсюда видно, что коэффициент отражения обращается в ноль не при одном, а при многих значениях расстояния d между одиночными барьерами.

Выбирая таким способом расстояние d в формуле (40), мы достигаем эффекта избирательности, т.е. того, что частица с массой m и с энергией E будет свободно проходить, без всякого отражения, через потенциальный барьер, состоящий из двух одинаковых частей.

Если имеется возможность изменять расстояние d между двумя потенциальными барьерами, то представляет интерес проследить зависимость коэффициента прохождения $S(d)$, вычисленного с использованием формулы (40), при частных значениях массы и энергии. На рис. 3 показан результат такого расчета, выполненного для случая, когда: $E = 0.5$ и $m_1 = 3, m_2 = 4$.

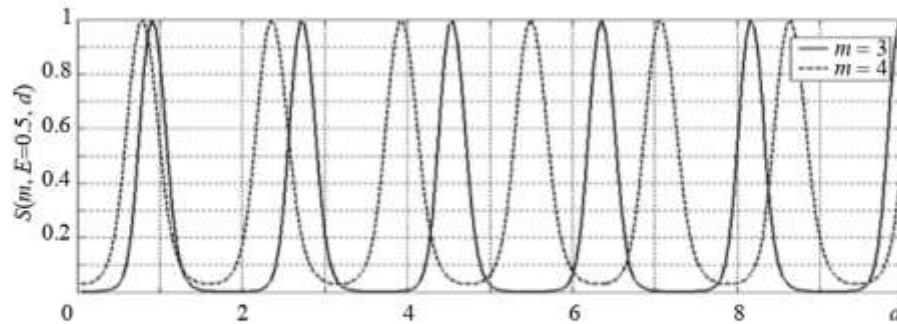


Рис. 3. Графики коэффициента прохождения $S(m, E, d)$, при значении энергии $E = 0.5$ для двух значений масс: $m = 3$ и $m = 4$

Fig. 3. Graphs of the transmission coefficient $S(m, E, d)$, at an energy value of $E = 0.5$ for two mass values: $m = 3$ and $m = 4$

Из этого расчета видно, что существует эффект сепарации частиц, различающихся по массе. Регулируя расстояние d между барьерами, можно добиться прохождения одной из частиц и при этом прохождение другой будет полностью заблокировано.

Блокирование гелиона определяется участками сплошной кривой, лежащими на горизонтальной оси. При этом если $d \in [5, 6]$, то волны коэффициента прохождения идут в противофазе. Это означает, что на большей части отмеченного интервала мы имеем сверхвысокие значения коэффициента разделения гелий-гелионовой смеси. В том, что изотоп ${}^4\text{He}$ проходит через составные барьеры лучше, чем ${}^3\text{He}$, нет ничего удивительного. Поскольку даже по меркам классической механики частица, имеющая тот же эффективный размер, но большую массу, должна проходить лучше.

Заключение

Получено аналитическое решение интегрального уравнения Шредингера, из которого сразу следуют выражения для коэффициентов отражения и прохождения. Благодаря наличию второго барьера, коэффициент отражения обращается в ноль в последовательности значений по расстояниям между моноатомными слоями мембраны. Это означает, что на этих дистанциях коэффициент прохождения гелия будет равен единице. В то же время гелион, имеющий другую массу, не будет иметь резонансного прохождения на указанных дистанциях между слоями мембраны.

Таким образом, одна из компонент будет проходить через систему барьеров, другая же не будет проходить вовсе. В результате мы получаем эффективную систему для просеивания изотопов. Эту систему можно настраивать на разделение газов, меняя расстояние между барьерами. При этом выводы оказываются справедливыми для сверхтонких одинаковых барьеров различной формы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Berger C., Song Z., Li X., Wu X., Brown N., Naud C., Mayou D., Li T., Hass J., Marchenkov A.N. Electronic confinement and coherence in patterned epitaxial graphene // *Science*. 2006. No. 5777. P. 1191–1196.
2. Sutter P.W., Flege J.-I., Sutter E.A. Epitaxial graphene on ruthenium // *Nature Materials*. 2008. V. 5. No. 7. P. 406–411. DOI: 10.1038/nmat2166.
3. Zhang Y., Gomez L., Ishikawa F.N., Madaria A., Ryu K., Wang C., Badmaev A., Zhou C. Comparison of graphene growth on single-crystalline and polycrystalline Ni by chemical vapour deposition // *Journal of Physical Chemistry Letters*. 2010. V. 1. No. 20. P. 3101–3107. DOI: 10.1021/jz1011466.
4. Yu J., Qin L., Hao Y., Kuang S., Bai X., Chong Y.-M., Zhang W., Wang E. Vertically aligned boron nitride nanosheets: Chemical vapor synthesis, ultraviolet light emission, and superhydrophobicity // *ACS Nano*. 2010. V. 4. No. 1. P. 414–422. DOI: 10.1021/nm901204c.
5. Bianco E., Butler S., Jiang S., Restrepo O.D., Windl W., Goldberger J.E. Stability and exfoliation of germanane: A germanium graphane analogue // *ACS Nano*. 2013. V. 7. No. 5. P. 4414–4421. DOI: 10.1021/nm4009406.
6. Vogt P., De Padova P., Quaresima C., Avila J., Frantzeskakis E., Asensio M.C., Resta A., Ealet B., Le Lay G. Silicene: Compelling experimental evidence for graphenelike two-dimensional silicon // *Physical Review Letters*. 2012. V. 108. No. 15. Article number 155501. DOI: 10.1103/PhysRevLett.108.155501.
7. Liu H., Du Y., Deng Y., Ye P.D. Semiconducting black phosphorus: synthesis, transport properties and electronic applications // *Chemical Society Reviews*. 2015. V. 44. No. 9. P. 2732–2743. DOI: 10.1039/c4cs00257a.
8. Zhu F., Chen W., Xu Y., Gao C., Guan D., Liu C., Qian D., Zhang S.-C., Jia J. Epitaxial growth of two-dimensional stanene // *Nature Materials*. 2015. V. 14. No. 10. P. 1020–1025. DOI: 10.1038/nmat4384.
9. Lin Y., Williams T.V., Connell J.W. Soluble, exfoliated hexagonal boron nitride nanosheets // *Journal of Physical Chemistry Letters*. 2009. V. 1. No. 1. P. 277–283. DOI: 10.1021/jz9002108.
10. Zhang J., Chen Y., Wang X. Two-dimensional covalent carbon nitride nanosheets: Synthesis, functionalization, and applications // *Energy and Environmental Science*. 2015. V. 8. No. 11. P. 3092–3108. DOI: 10.1039/c5ee01895a.
11. Huang X., Zeng Z., Zhang H. Metal dichalcogenide nanosheets: preparation, properties and applications // *Chemical Society Reviews*. 2013. V. 42. No. 5. P. 1934–1946. DOI: 10.1039/c2cs35387c.
12. Lv R., Robinson J.A., Schaak R.E., Sun D., Sun Y., Mallouk T.E., Terrones M. Transition metal dichalcogenides and beyond: synthesis, properties, and applications of single- and few-

- layer nanosheets // *Accounts of Chemical Research*. 2015. V. 48. No. 1. P. 56–64. DOI: 10.1021/ar5002846.
13. Mahmood J., Lee E.K., Jung M., Shin D., Jeon I.-Y., Jung S.-M., Choi H.-J., Seo J.-M., Bae S.-Y., Sohn S.-D., Park N., Oh J.H., Shin H.-J., Baek J.-B. Nitrogenated holey two-dimensional structures // *Nature Communications*. 2015. V. 6. No. 1. Article number 6486. DOI: 10.1038/ncomms7486.
14. Морс Ф.М., Феибах Г. Методы теоретической физики: в 2 т. Т. 1. М.: Книга по Требованию, 2012. 894 с.
15. Градштейн И.С., Рыжик Н.М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М.: Физматлит, 1963. 1100 с.

Статья поступила 21.02.2020 г.

Bubenchikov M.A., Bubenchikov A.M., Jambaa S., Lun-Fu A.V., Chelnokova A.S. (2020) ANALYTICAL SOLUTION OF THE SCHRÖDINGER INTEGRAL EQUATION, *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika* [Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics]. 67. pp. 5–17

DOI 10.17223/19988621/67/1

Keywords: integral equation, degenerate kernel, shift operator, exponential functions, Fourier identity.

In this paper, the question about the use of wave dynamics for solving problems of membrane separation of helium isotopes in the gas state at cryogenic temperatures is considered. The dimensionless form of the stationary Schrödinger differential equation is obtained. Following that, the integral representation form of the wave function is written. This form, which is equivalent to the classical equation, is similar to the integral equation with a degenerate core; however, it contains a modulus of the argument with a shift along the real axis. Using the shift operator, the existing exponential function in the Schrödinger integral equation can be split into a differential operator and an exponential function of the argument module which does not contain a shift. The Fourier identity allows reducing the exponent of the modulus of the argument to a regular exponent. Next, based on the general property of a differential operator acting on an exponent, it is possible to calculate the spectral functions of the problem and write down the distribution for the wave function. This distribution is ultimately expressed through the spectra of the potential barrier. Thereafter, the structure and the spectrum of the composite barrier are considered. With the expression determining the reflection coefficient, it is found that the double-barrier system can have a resonant passage of one of the components in the sequence of distances between the layers of the membrane.

AMS 2020 Mathematical Subject Classification: 45H05

Financial support. The reported study was funded by RFBR and MCESSM according to the research project no. 19-51-44002.

Mikhail A. BUBENCHIKOV (Candidate of Physics and Mathematics, Assoc. Prof., Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: michael121@mail.ru

Aleksey M. BUBENCHIKOV (Doctor of Physics and Mathematics, Prof., Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: bubenchikov_am@mail.ru

Soninbayar JAMBAA (Candidate of Physics and Mathematics, Director Centre for Fundamental Research of Mongolian University of Science and Technology, National University of Mongolia, Ulaanbaatar, Mongolia). E-mail: jsoninbayar@yahoo.com

Alexander V. LUN-FU (Chief Engineer, Gazprom Transgaz Tomsk Ltd., Tomsk, Russian Federation). E-mail: a.lunfu@gtt.gazprom.ru

Anna S. CHELNOKOVA (Assistant, Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation) E-mail: smolina-nyuta@mail.ru

REFERENCES

1. Berger C., Song Z., Li X., Wu X., Brown N., Naud C., Mayou D., Li T., Hass J., Marchenkov A.N. (2006) Electronic confinement and coherence in patterned epitaxial graphene. *Science*. 5777. pp. 1191–1196.
2. Sutter P.W., Flege J.-I., Sutter E.A. (2008) Epitaxial graphene on ruthenium. *Nature Materials*. 5(7). pp. 406–411. DOI: 10.1038/nmat2166.
3. Zhang Y., Gomez L., Ishikawa F.N., Madaria A., Ryu K., Wang C., Badmaev A., Zhou C. (2010) Comparison of graphene growth on single-crystalline and polycrystalline Ni by chemical vapour deposition. *Journal of Physical Chemistry Letters*. 1(20). pp. 3101–3107. DOI: 10.1021/jz1011466.
4. Yu J., Qin L., Hao Y., Kuang S., Bai X., Chong Y.-M., Zhang W., Wang E. (2010) Vertically aligned boron nitride nanosheets: Chemical vapor synthesis, ultraviolet light emission, and superhydrophobicity. *ACS Nano*. 4(1). pp. 414–422. DOI: 10.1021/nn901204c.
5. Bianco E., Butler S., Jiang S., Restrepo O.D., Windl W., Goldberger J.E. (2013) Stability and exfoliation of germanane: A germanium graphane analogue. *ACS Nano*. 7(5). pp. 4414–4421. DOI: 10.1021/nn4009406.
6. Vogt P., De Padova P., Quaresima C., Avila J., Frantzeskakis E., Asensio M.C., Resta A., Ealet B., Le Lay G. (2012) Silicene: Compelling experimental evidence for graphenelike two-dimensional silicon. *Physical Review Letters*. 108(15). 155501. DOI: 10.1103/PhysRevLett.108.155501.
7. Liu H., Du Y., Deng Y., Ye P.D. (2015) Semiconducting black phosphorus: synthesis, transport properties and electronic applications. *Chemical Society Reviews*. 44(9). pp. 2732–2743. DOI: 10.1039/c4cs00257a.
8. Zhu F., Chen W., Xu Y., Gao C., Guan D., Liu C., Qian D., Zhang S.-C., Jia J. (2015) Epitaxial growth of two-dimensional stanene. *Nature Materials*. 14(10). P. 1020–1025. DOI: 10.1038/nmat4384.
9. Lin Y., Williams T.V. (2009) Connell J.W. Soluble, exfoliated hexagonal boron nitride nanosheets. *Journal of Physical Chemistry Letters*. 1(1). pp. 277–283. DOI: 10.1021/jz9002108.
10. Zhang J., Chen Y., Wang X. (2015) Two-dimensional covalent carbon nitride nanosheets: Synthesis, functionalization, and applications. *Energy and Environmental Science*. 8(11). pp. 3092–3108. DOI: 10.1039/c5ee01895a.
11. Huang X., Zeng Z., Zhang H. (2013) Metal dichalcogenide nanosheets: preparation, properties and applications. *Chemical Society Reviews*. 42(5). pp. 1934–1946. DOI: 10.1039/c2cs35387c.
12. Lv R., Robinson J.A., Schaak R.E., Sun D., Sun Y., Mallouk T.E., Terrones M. (2015) Transition metal dichalcogenides and beyond: synthesis, properties, and applications of single- and few-layer nanosheets. *Accounts of Chemical Research*. 48(1). pp. 56–64. DOI: 10.1021/ar5002846.
13. Mahmood J., Lee E.K., Jung M., Shin D., Jeon I.-Y., Jung S.-M., Choi H.-J., Seo J.-M., Bae S.-Y., Sohn S.-D., Park N., Oh J.H., Shin H.-J., Baek J.-B. (2015) Nitrogenated holey two-dimensional structures. *Nature Communications*. 6(1). 6486. DOI: 10.1038/ncomms7486.
14. Morse P.M., Feshbach H. (1953) *Methods of Theoretical Physics. Vol. 1*. New York: McGraw-Hill.
15. Gradshteyn I.S., Ryzhik N.M. (2007) *Table of Integrals, Series, and Products*. Elsevier.

Received: February 21, 2020

УДК 534.2

DOI 10.17223/19988621/68/9

А.В. Лун-Фу, М.А. Бубенчиков, С. Жамбаа, С.Г.-Ц. Цыдыпов

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЧАСТОТ ПОПЕРЕЧНЫХ КОЛЕБАНИЙ
ПЕРЕХОДНИКОВ И ТУШКОВЫХ ОТВЕТВЛЕНИЙ ГАЗОПРОВОДОВ**

С помощью волнового уравнения для упругой деформации осевой линии трубы, а также метода разделения переменных и функции Крылова, найдено точное решение задачи о распространении малых деформаций по трубе, имеющей различные способы закрепления на концах выделенного фрагмента трубопровода. Представлены также компактные программы расчета форм и частот колебаний во всех рассматриваемых случаях закрепления концов трубы.

Ключевые слова: *фрагмент трубопровода, упругая волна, стоячая волна осевой линии, спектр частот, основной тон колебаний.*

Вибрации трубопроводов являются основным фактором, который выводит систему газоподачи из строя. Поэтому важными являются углубленное понимание явлений, приводящих к вибрациям, и построение эффективных математических моделей колебаний стенок трубы. В работе [1] на основе экспериментальных исследований описаны возможные причины акустически-индуцированной вибрации и предложены меры по снижению вибрационной нагрузки газопровода. В [2] рассмотрена модель вибрационного анализа трубопровода под действием пульсационной муфты давления газа. Приводится уравнение вынужденной вибрации трубопровода, позволяющее определить скорости вибрационного смещения трубопровода в зависимости от скорости подачи газа. В [3] описан метод конечных элементов, применяемый для определения виброакустических характеристик трубопроводной системы. Разработанные методики ориентированы на диаметр трубопровода, значительно меньший, чем длина акустической волны в жидкости. Результаты теоретических исследований подтверждены экспериментальными данными, полученными на гидравлическом стенде. Работа [4] посвящена обсуждению механизмов, приводящих к вибрациям трубопроводов, а также разработке мер корректирующего обслуживания трубопроводов. В [5] предлагается новый метод поиска и уплотнения отличительных признаков акустических сигналов, поступающих с микрофонных датчиков, установленных на системе охлаждения атомной электростанции лабораторного масштаба. Предлагаемый метод позволяет улучшить точность классификации данных, несмотря на громкие машинные шумы поблизости.

Таким образом, изменяющееся давление в системах подачи среды, газа или жидкости, является причиной возникновения вибраций в трубопроводе, которые при определенных условиях могут приводить к резонансным явлениям и разрушению узла технической системы.

ХАВСРАЛТ 4

**Дифференциальное уравнение статического прогиба трубы
под действием поперечной нагрузки**

На рис. 1 показан пример трубы длины L , закрепленной с одного или двух концов, на которую действует поперечная нагрузка $q(x)$. Требуется найти дифференциальное уравнение, описывающее прогиб $w(x)$ оси этой полой конструкции.

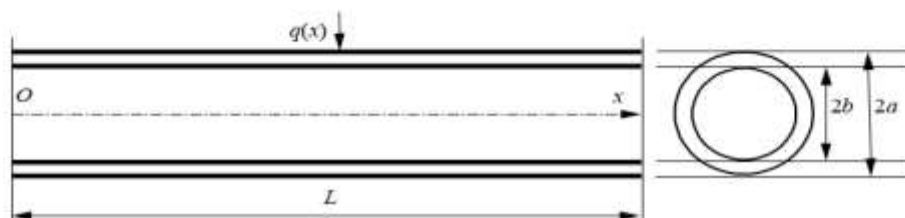


Рис. 1. Эскиз балки, выполненной конструктивно в виде цилиндрической трубы, закрепленной с одного или двух концов

Fig. 1. Beam design represented constructively as a cylindrical pipe fixed at one or two ends

Приближенная инженерная теория, пригодная для малых деформаций, основана на предположении о том, что потенциальная энергия упругих деформаций пропорциональна квадрату кривизны осевой линии и выражается интегралом

$$U = \frac{1}{2} \int_0^L EJ \left(\frac{d^2 w}{dx^2} \right)^2 dx. \quad (1)$$

В нем $y = w(x)$ – искомое уравнение осевой линии, а выражение EJ называется коэффициентом жесткости на изгиб и состоит из произведения модуля Юнга E и геометрического момента инерции J поперечного сечения балки относительно оси, проходящей через центр тяжести сечения, и перпендикулярной к плоскости изгиба.

Так, например, в справочниках можно найти, что для стали модуль Юнга равен $E = 20.6 \cdot 10^{10}$ Н/м². Для круглой цилиндрической трубы, показанной на рис. 1, площадь поперечного сечения S и момент инерции J

$$S = \pi(a^2 - b^2), \quad J = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_b^a \sin^2 \varphi r^3 dr = \pi \frac{a^4 - b^4}{4} = S \cdot \frac{a^2 + b^2}{4}. \quad (2)$$

С другой стороны, потенциальная энергия упругих деформаций (1) образовалась за счет работы A сил поперечной нагрузки $q(x)$ на перемещении $w(x)$

$$A = \int_0^L q w dx. \quad (3)$$

Таким образом, приравняв выражения (1) и (3), получаем равенство

$$\frac{1}{2} \int_0^L EJ \left(\frac{d^2 w}{dx^2} \right)^2 dx = \int_0^L q w dx. \quad (4)$$

Из интегрального выражения (4) нужно определить функцию $w(x)$, такую, которая придает минимальное значение функционалу (4). Это достигается применением средств вариационного исчисления. Вычисляя вариацию от обеих частей равенства (4), находим:

$$\int_0^L EJ w'' \delta(w'') dx = \int_0^L q(x) \delta(w) dx. \quad (5)$$

Под вариацией $\delta(w)$ обычно подразумевается произвольная функция от переменной x , которая ограничена тем условием, что должна обращаться в ноль на концах интервала интегрирования. Кроме того, операция вариации перестановочна с операцией дифференцирования, т.е. выполняется равенство

$$\delta(w') = \frac{d}{dx} \delta(w). \quad (6)$$

Учитывая это обстоятельство, можно интеграл в левой части (5) проинтегрировать два раза по частям. Интегрируя первый раз, получим

$$\int_0^L EJ w'' \delta(w'') dx = \int_0^L EJ w'' \frac{d}{dx} \delta(w') dx = EJ w'' \delta(w') \Big|_0^L - \int_0^L \frac{d}{dx} (EJ w'') \delta(w') dx. \quad (7)$$

Точно так же, после второго интегрирования по частям, получается выражение

$$\int_0^L EJ w'' \delta(w'') dx = EJ w'' \delta(w'') \Big|_0^L - \frac{d}{dx} [EJ w''] \delta(w'') \Big|_0^L + \int_0^L \frac{d^2}{dx^2} (EJ w'') \delta(w'') dx. \quad (8)$$

Таким образом, формула (5) после подстановки (8) приобретает вид

$$EJ w'' \delta(w'') \Big|_0^L - \frac{d}{dx} [EJ w''] \delta(w'') \Big|_0^L + \int_0^L \left[\frac{d^2}{dx^2} \left(EJ \frac{d^2 w''}{dx^2} \right) - q(x) \right] \delta(w'') dx = 0. \quad (9)$$

Вне-интегральные члены в уравнении (9) обращаются в ноль, так как считается, что вариации $\delta(w)$ и $\delta(w')$ равны нулю на концах рассматриваемой области (при $x = 0$ и при $x = L$).

Это приводит к равенству нулю интегрального члена в формуле (9), что, в свою очередь, требует равенства нулю выражения в квадратных скобках. В результате приходим к дифференциальному уравнению, определяющему функцию прогиба $w(x)$:

$$\frac{d^2}{dx^2} \left(EJ \frac{d^2 w''}{dx^2} \right) = q(x). \quad (10)$$

Таким образом, если нам известна поперечная нагрузка на трубу $q(x)$, то для получения прогиба $w(x)$ нужно просто решать дифференциальное уравнение (10) аналитическим или численным способом с соответствующими граничными условиями на концах. Поскольку это уравнение четвертого порядка, то нужно задавать четыре граничных условия, в качестве которых можно задавать значения функции $w(x)$ и ее производных, или их линейные комбинации, при $x = 0$ и $x = L$. Уравнение (10) является основным уравнением, описывающим поперечные колебания фрагмента трубопровода. Оно обычно приводится в учебниках по сопротивлению материалов без подробного вывода, так как уравнение (10) можно получить многими различными способами.

Отметим следующие важные для расчета формулы. Изгибающий момент $M(x)$ и поперечная сила $F(x)$, которые приложены к трубе в сечении $x = const$, определяются выражениями:

$$EJ \frac{d^2 w}{dx^2} = M(x), \quad \frac{d}{dx} \left[EJ \frac{d^2 w}{dx^2} \right] = F(x). \quad (11)$$

Формулы (11) можно использовать для расчета этих величин, если известна функция прогиба $w(x)$.

Такая элементарная теория прогиба широко применяется в строительной механике при изучении прогиба мостов или других балочных конструкций под действием неподвижных или подвижных грузов при различных условиях закрепления концов конструкций.

Граничные условия при решении дифференциального уравнения (10) должны выбираться в зависимости от способа закрепления концов трубы. Так, например, если оба конца жестко зажаты, то должны выполняться следующие четыре граничных условия:

$$w(0) = 0, \quad w'(0) = 0, \quad w(L) = 0, \quad w'(L) = 0. \quad (12)$$

Если второй конец свободен, то на нем должны быть равны нулю сила и момент, приложенные в сечении $x = L$. Тогда из (11) следует, что для трубы постоянного сечения граничные условия будут иметь вид

$$w(0) = 0, \quad w'(0) = 0, \quad w''(L) = 0, \quad w'''(L) = 0. \quad (13)$$

То есть на свободном конце вторая и третья производная от функции прогиба $w(x)$ должны обе обращаться в ноль.

Конечно, вся теория прогиба значительно усложняется, если поперечное сечение трубы не симметрично. В этом случае не существуют чисто изгибные деформации, поскольку появляются еще крутильные деформации. Поперечные сечения трубы при этом получаются не плоскими фигурами. В таких случаях трубы совершают совместные упруго-крутильные деформации.

Поперечные изгибные колебания упругой трубы

Дифференциальное уравнение поперечных колебаний упругой трубы можно получить из основного статического уравнения (10), заменяя в нем нагрузку $q(x)$ силой инерции единичного фрагмента трубы:

$$q(x) = -\rho S \frac{\partial^2 w}{\partial t^2}. \quad (14)$$

Здесь S – площадь сечения, а ρ – плотность материала трубы. Для стали эта плотность приблизительно равна $\rho \approx 8 \cdot 10^3$ кг/м³.

Таким образом, уравнение изгибных колебаний трубы имеет вид

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(EJ \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \right) + \rho S \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} = 0. \quad (15)$$

Если труба имеет постоянное поперечное сечение, то коэффициент жесткости EJ можно вынести за скобку и уравнение (15) упрощается:

$$\frac{\partial^4 w}{\partial x^4} + \frac{\rho S}{EJ} \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} = 0. \quad (16)$$

Решение уравнения (16) можно искать в виде произведения двух множителей, один из которых является периодической функцией времени и колеблется с угловой частотой ω :

$$w(x, t) = \cos(\omega t + \varepsilon)W(x). \quad (17)$$

Тогда для функции $W(x)$ получается обыкновенное дифференциальное уравнение, определяющее стоячую волну осевой линии:

$$\frac{d^4 W}{dx^4} - \frac{1}{L^4} \left(\frac{\rho S \omega^2 L^4}{EJ} \right) W = 0. \quad (18)$$

Выражение в круглых скобках в формуле (18) представляет собой безразмерную величину. Поэтому имеет смысл ввести для него специальное обозначение:

$$\frac{\rho S \omega^2 L^4}{EJ} = \lambda^4. \quad (19)$$

Если значение параметра λ нам известно, то из (19) можно найти частоту колебаний трубы ω :

$$\omega^2 = \frac{EJ\lambda^4}{\rho SL^4}, \quad \omega = \frac{\lambda^2}{L^2} \sqrt{\frac{J}{S}} \sqrt{\frac{E}{\rho}}. \quad (20)$$

Радикалы в формуле (20) имеют следующий физический смысл: $\sqrt{J/S}$ – радиус инерции поперечного сечения трубы, величина $\sqrt{E/\rho}$ имеет размерность скорости и определяет порядок величины скорости перемещения точек поперечного сечения трубы при изгибных деформациях. Для стальной трубы $\sqrt{E/\rho} \approx 13622$ м/с. Из формулы (2) также имеем, что для цилиндрической трубы с внешним радиусом a и внутренним b радиус инерции поперечного сечения конструкции будет равен $\sqrt{J/S} = \sqrt{a^2 + b^2}/2 \approx a/\sqrt{2}$. Таким образом, угловая частота поперечных колебаний трубы зависит от ее размеров и от безразмерного параметра λ , который можно найти из условий закрепления ее концов.

Стационарное уравнение для средних положений колеблющихся точек осевой линии с учетом обозначения (19) записывается в виде

$$\frac{d^4 W}{dx^4} - \frac{\lambda^4}{L^4} W = 0. \quad (21)$$

Его общее решение с произвольными константами A, B, C, D выражается через гиперболические и тригонометрические функции и записывается в виде

$$W(x) = A \operatorname{ch} \lambda \frac{x}{L} + B \cos \lambda \frac{x}{L} + C \operatorname{sh} \lambda \frac{x}{L} + D \sin \lambda \frac{x}{L}. \quad (22)$$

Решения для частных случаев закрепления концов трубы

Рассмотрим решения уравнения (21) для трех случаев закрепления краев трубы: оба конца жестко зажаты; оба конца являются свободными; один конец жестко зажат, а второй является свободным.

В первом случае должны выполняться граничные условия:

$$W(0) = 0, \quad W'(0) = 0; \quad W(L) = 0, \quad W'(L) = 0. \quad (23)$$

Они означают, что осевая линия $y = W(x)$ соприкасается с прямолинейным отрезком длины L на его концах. В этом случае решение вида (22) можно составить в виде следующей линейной комбинации из двух функций:

$$W(x) = A \left[\operatorname{ch} \lambda \frac{x}{L} - \cos \lambda \frac{x}{L} \right] + B \left[\operatorname{sh} \lambda \frac{x}{L} - \sin \lambda \frac{x}{L} \right]. \quad (24)$$

Здесь, очевидно, обе функции в квадратных скобках, называемые обычно функциями Крылова, удовлетворяют уравнению (21) и обращаются в ноль вместе с первой производной при $x = 0$. Граничные условия (23) для выражения (24) на втором конце трубы (при $x = L$) запишем в виде двух равенств:

$$\begin{aligned} W(L) &= A[\operatorname{ch} \lambda - \cos \lambda] + B[\operatorname{sh} \lambda - \sin \lambda] = 0, \\ W'(L) &= A \frac{\lambda}{L} [\operatorname{sh} \lambda + \sin \lambda] + B \frac{\lambda}{L} [\operatorname{ch} \lambda - \cos \lambda] = 0. \end{aligned} \quad (25)$$

Таким образом, получаем однородную систему двух алгебраических уравнений относительно коэффициентов A и B :

$$\begin{aligned} A[\operatorname{ch} \lambda - \cos \lambda] + B[\operatorname{sh} \lambda - \sin \lambda] &= 0, \\ A[\operatorname{sh} \lambda + \sin \lambda] + B[\operatorname{ch} \lambda - \cos \lambda] &= 0. \end{aligned} \quad (26)$$

Для того чтобы эта система имела ненулевое решение, необходимо, чтобы ее определитель был равен нулю, и, кроме того, можно выразить коэффициент B через коэффициент A по формуле

$$B = -A \frac{\operatorname{ch} \lambda - \cos \lambda}{\operatorname{sh} \lambda - \sin \lambda}. \quad (27)$$

Подставляя (27) в (24), получаем следующее выражение для поперечного прогиба трубы, жестко закрепленной на ее концах, с точностью до постоянного множителя A :

$$W(x) = \left[\operatorname{ch} \lambda \frac{x}{L} - \cos \lambda \frac{x}{L} \right] - \frac{\operatorname{ch} \lambda - \cos \lambda}{\operatorname{sh} \lambda - \sin \lambda} \left[\operatorname{sh} \lambda \frac{x}{L} - \sin \lambda \frac{x}{L} \right]. \quad (28)$$

Параметр λ найдем из условия равенства нулю определителя системы (26):

$$\begin{vmatrix} \operatorname{ch} \lambda - \cos \lambda & \operatorname{sh} \lambda - \sin \lambda \\ \operatorname{sh} \lambda + \sin \lambda & \operatorname{ch} \lambda - \cos \lambda \end{vmatrix} = 0.$$

После вычисления и упрощения этого определителя, получаем

$$\begin{aligned} (\operatorname{ch} \lambda - \cos \lambda)^2 - (\operatorname{sh} \lambda + \sin \lambda)(\operatorname{sh} \lambda - \sin \lambda) = \\ \operatorname{ch}^2 \lambda - 2 \operatorname{ch} \lambda \cos \lambda + \cos^2 \lambda - \operatorname{sh}^2 \lambda + \sin^2 \lambda = 2 - 2 \operatorname{ch} \lambda \cos \lambda = 0. \end{aligned}$$

Характеристическое уравнение для определения параметра λ имеет вид

$$\operatorname{ch} \lambda \cdot \cos \lambda = 1. \quad (29)$$

Уравнение (29) имеет бесконечное множество корней. Корню $\lambda = 0$ соответствует решение $W(x) = 0$. Остальные положительные корни уравнения (29) можно вычислить каким-либо численным способом. Они имеют следующие приближенные числовые значения:

$$\lambda_1 = 4.730, \quad \lambda_2 = 7.853, \quad \lambda_3 = 10.996, \quad \lambda_4 = 14.137, \quad \lambda_5 = 17.279... \quad (30)$$

Причем для больших значений $n > 3$ с хорошей точностью выполняется следующее соотношение:

$$\lambda_{n+1} \approx \lambda_n + \pi.$$

Так как для каждого значения корня λ_n существует своя частота колебаний, вычисляемая по формуле (20), и своя форма колебаний (см. (28)), то

$$W_n(x) = \left[\operatorname{ch} \lambda_n \frac{x}{L} - \cos \lambda_n \frac{x}{L} \right] - \frac{\operatorname{ch} \lambda_n - \cos \lambda_n}{\operatorname{sh} \lambda_n - \sin \lambda_n} \left[\operatorname{sh} \lambda_n \frac{x}{L} - \sin \lambda_n \frac{x}{L} \right]. \quad (31)$$

Подобные формулы можно получить и для других способов закрепления концов трубы.

Во втором случае закрепления, когда оба конца являются свободными, граничные условия сводятся к равенству нулю силы и момента (11), т.е. на обоих концах должны равняться нулю вторая и третья производная по x от функции $W(x)$:

$$W''(0) = 0, \quad W'''(0) = 0; \quad W''(L) = 0, \quad W'''(L) = 0. \quad (32)$$

Для этого случая решение уравнения колебаний (21) следует искать в виде

$$W(x) = A \left[\operatorname{ch} \lambda \frac{x}{L} + \cos \lambda \frac{x}{L} \right] + B \left[\operatorname{sh} \lambda \frac{x}{L} + \sin \lambda \frac{x}{L} \right]. \quad (33)$$

Действительно, здесь обе функции в квадратных скобках удовлетворяют условию равенства нулю второй и третьей производной при $x = 0$. Чтобы эти условия выполнялись также и при $x = L$, имеем следующую однородную систему линейных уравнений относительно коэффициентов A и B :

$$\begin{aligned} A[\operatorname{ch} \lambda - \cos \lambda] + B[\operatorname{sh} \lambda - \sin \lambda] &= 0, \\ A[\operatorname{sh} \lambda + \sin \lambda] + B[\operatorname{ch} \lambda - \cos \lambda] &= 0. \end{aligned}$$

Она оказалась в точности совпадающей с аналогичной системой (26) для трубы с двумя зажатými концами. Поэтому корни характеристического уравнения λ_n будут совпадать с числами (30). Это говорит о том, что частоты колебаний для трубы со свободными концами будут такими же, как и для трубы с зажатými концами. Однако формы их колебаний в этом случае будут другими. Они, в отличие от формулы (31), имеют следующий вид:

$$W_n(x) = \left[\operatorname{ch} \lambda_n \frac{x}{L} + \cos \lambda_n \frac{x}{L} \right] - \frac{\operatorname{ch} \lambda_n - \cos \lambda_n}{\operatorname{sh} \lambda_n - \sin \lambda_n} \left[\operatorname{sh} \lambda_n \frac{x}{L} + \sin \lambda_n \frac{x}{L} \right]. \quad (34)$$

Из этого решения видно, что функция $W_n(x)$ и ее производная по x не равны нулю при $x = 0$ и при $x = L$.

Третий случай: труба закреплена в точке $x = 0$, а другой ее конец свободен. Тогда граничные условия для уравнения (21) имеют вид

$$W(0) = 0, \quad W'(0) = 0; \quad W''(L) = 0, \quad W'''(L) = 0. \quad (35)$$

В этом случае решение следует искать в форме (28), т.е.

$$W(x) = A \left[\operatorname{ch} \lambda \frac{x}{L} - \cos \lambda \frac{x}{L} \right] + B \left[\operatorname{sh} \lambda \frac{x}{L} - \sin \lambda \frac{x}{L} \right]. \quad (36)$$

Приравнивая к нулю в точке $x = L$ вторую и третью производные от функции (36) по переменной x , получим систему двух линейных уравнений относительно коэффициентов A и B , которая имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} A[\operatorname{ch} \lambda + \cos \lambda] + B[\operatorname{sh} \lambda + \sin \lambda] &= 0, \\ A[\operatorname{sh} \lambda - \sin \lambda] + B[\operatorname{ch} \lambda + \cos \lambda] &= 0. \end{aligned} \quad (37)$$

Из ее первого уравнения находим коэффициент B :

$$B = -A \frac{\operatorname{ch} \lambda + \cos \lambda}{\operatorname{sh} \lambda + \sin \lambda}. \quad (38)$$

Раскрывая и упрощая определитель системы (37), имеем

$$(\operatorname{ch} \lambda + \cos \lambda)^2 - (\operatorname{sh}^2 \lambda - \sin^2 \lambda) = 2 + 2 \operatorname{ch} \lambda \cdot \cos \lambda = 0.$$

Отсюда следует, что величины λ_n являются корнями характеристического уравнения

$$\operatorname{ch} \lambda \cdot \cos \lambda = -1. \quad (39)$$

Они не совпадают с корнями (30). Вычисленные численным методом, они имеют следующие приближенные значения:

$$\lambda_1 = 1.875, \quad \lambda_2 = 4.694, \quad \lambda_3 = 7.855, \quad \lambda_4 = 10.996, \quad \lambda_5 = 14.137, \quad \lambda_6 = 17.279 \dots \quad (40)$$

Сравнение этих значений с данными предыдущих задач (30) показывает, что отличия касаются только первых трех корней, а остальные корни практически совпадают. Таким образом, для трубы, у которой один конец закреплен, а другой свободен, первые три тона колебаний имеют более низкую частоту, а остальные тоны имеют те же частоты, что и труба с двумя зажатými или с двумя свободными концами.

Формы колебаний трубы, у которой один конец зажат, а другой конец свободен, определяются следующим выражением:

$$W_n(x) = \left[\operatorname{ch} \lambda_n \frac{x}{L} - \cos \lambda_n \frac{x}{L} \right] - \frac{\operatorname{ch} \lambda_n + \cos \lambda_n}{\operatorname{sh} \lambda_n + \sin \lambda_n} \left[\operatorname{sh} \lambda_n \frac{x}{L} - \sin \lambda_n \frac{x}{L} \right]. \quad (41)$$

Пример расчета

Предполагается, что нам известны числа λ как корни соответствующих характеристических уравнений (см. (30) и (40)):

$$\operatorname{ch} \lambda \cdot \cos \lambda = 1 \quad \text{и} \quad \operatorname{ch} \lambda \cdot \cos \lambda = -1.$$

Для расчета собственных частот $f = \omega/2\pi$ по формулам (20) и соответствующих форм колебаний по выражениям (31), (34) и (41) составлена программа.

Результаты работы программы (1) представлены на рис. 2 и 3.

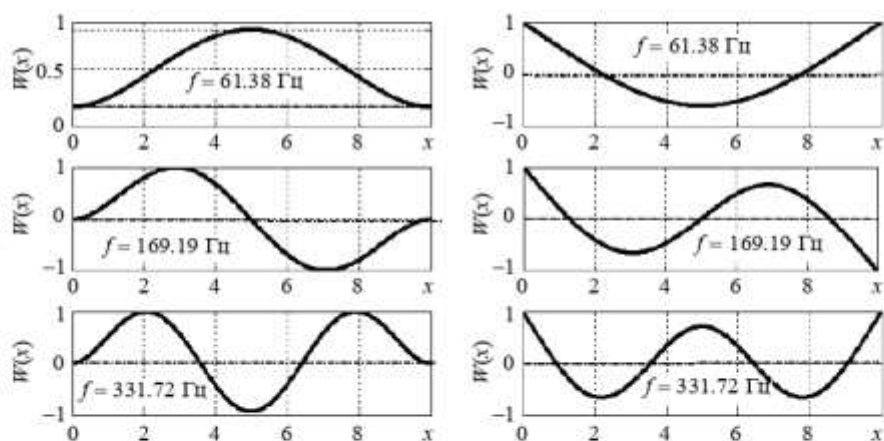


Рис. 2. Формы и частоты колебаний трубы с двумя зажатыми концами (слева) и с двумя свободными концами (справа)

Fig. 2. Shapes and frequencies of vibrations for a pipe with two fixed (at the left) and unfixed (at the right) ends

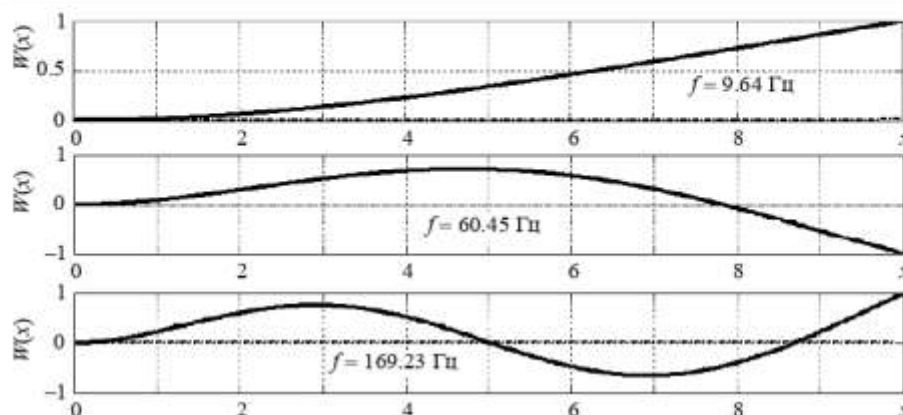


Рис. 3. Формы и частоты колебаний трубы, зажатой на одном краю и свободной на другом
Fig. 3. Shapes and frequencies of vibrations for a pipe with one fixed and another unfixed ends

Наиболее низкий тон $f = 9.64$ Гц соответствует корню $\lambda = 1.875$ (см. рис. 3)

Заключение

В рамках предположения о малости изгибных деформаций трубы, при которых форма сечений, находящихся в плоскостях, перпендикулярных осевой линии деформированного фрагмента трубопровода, остается постоянной, получено уравнение для изгибных деформаций. Такое уравнение и ранее получалось различными способами. В данной работе оно выведено с применением средств вариационного исчисления. Гиперболическое уравнение для смещения точек осевой линии трубы интегрируется аналитически с применением метода разделения переменных и функций Крылова, являющихся фундаментальными соответствующего стационарного уравнения для осевой линии. Естественно, что получающиеся частоты и формы колебаний зависят от конкретных случаев закрепления концов трубы.

Исследованы все возможные варианты закрепления концов, следовательно, и распространения упругих волн по отдельному прямоугольному фрагменту трубопровода. Счетные множества корней характеристических уравнений для стоячих волн, отвечающих конкретным способам закрепления концов, определяют спектры частот колебаний. По найденной в работе связи частоты с корнями характеристического уравнения легко определяются основной тон упругих колебаний и все другие моды колебаний фрагмента трубопровода.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Musaakhunova L.F., Igoikin A.A., Shabanov K.Y.* The vibroacoustic characteristics research of the gas pipeline // *Procedia Engineering*. 2015. V. 106. P. 316–324. DOI: 10.1016/j.proeng.2015.06.041.
2. *Tian J., Yuan C., Wu C., Liu G., Yang J.* The vibration analysis model of pipeline under the action of gas pressure pulsation coupling // *Engineering Failure Analysis*. 2016. V. 66. P. 328–340. DOI: 10.1016/j.engfailanal.2016.05.017.
3. *Mironova T.B., Prokofiev A.B., Sverbilov V.Y.* The finite element technique for modeling of pipe system vibroacoustical characteristics // *Procedia Engineering*. 2017. V. 176. P. 681–688. DOI: 10.1016/j.proeng.2017.02.313.

4. Guo B., Song S., Ghalambor A., Lin T.R. Pipeline vibration and condition based maintenance // Design, Installation and Maintenance. 2014. P. 299–337. DOI: 10.1016/B978-0-12-397949-0.00018-2.
5. Oh S.W., Yoon D-B., Kim G.J., Bae J-H., Kim H.S. Acoustic Data condensation to enhance pipeline leak detection // Nuclear Engineering and Design. 2018. V. 327. P. 198–211. DOI: 10.1016/j.nucengdes.2017.12.006.
6. Ляв А. Математическая теория упругости. М.: Л.: Изд-во НКТП СССР, 1935. 675 с.
7. Стрент Дж.В. (лорд Рэлей). Теория звука. М.: ГИТТЛ, 1955. Т. 1. 503 с.
8. Тимошенко С.П., Янг Д.К., Уивер У. Колебания в инженерном деле. М.: Наука, 1967. 446 с.
9. Бабаков И.М. Теория колебаний. М.: ГИТТЛ, 1958. 628 с.

Статья поступила 11.03.2019 г.

Lun-Fu A.V., Bubenchikov M.A., Jambaa S., Tsydypov S.G.-Ts. (2020) DETERMINING OF TRANSVERSE VIBRATION FREQUENCIES FOR CROSSOVERS AND DEAD ENDS OF GAS PIPELINES. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika* [Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics]. 68. pp. 95–105

DOI 10.17223/19988621/68/9

Keywords: pipeline segment, elastic wave, standing wave of an axial line, frequency spectrum, basic vibration mode.

The paper presents a stationary equation for bending deformations of a hollow rod derived by means of variational calculus. Further, the authors introduce into consideration an inertial term as consistent with a standard procedure and obtain the wave equation for pipe bending vibrations. Applying the method of separation of variables, the resulting hyperbolic equation of vibrations is reduced to an ordinary fourth-order differential equation for a standing wave on the axial line of the pipe. Fundamental solutions to the latter equation are referred to as the Krylov functions, while the standing wave is represented as a linear combination of two independent Krylov functions. The solution to the obtained homogeneous equation is only found at certain values of characteristic parameters which are amounted to a countable set for each case of fixed ends of the pipeline segment. Thus, the whole frequency spectrum of the pipe bending vibrations is determined, and the main vibration mode is revealed for each case of fixed pipeline ends.

Aleksandr V. LUN-FU (Gazprom Transgaz Tomsk Ltd., Tomsk, Russian Federation). E-mail: a.lunfu@gtt.gazprom.ru

Mikhail A. BUBENCHIKOV (Candidate of Physics and Mathematics, Gazprom Transgaz Tomsk Ltd., Tomsk, Russian Federation). E-mail: michael121@mail.ru

Soninbayar JAMBAА (Candidate of Physics and Mathematics, Director Centre for Fundamental Research of Mongolian University of Science and Technology, National University of Mongolia, Ulaanbaatar, Mongolia). E-mail: jsoninbayar@yahoo.com

Sevan G. TSYDYPPOV (Buryat State University, Ulan-Ude, Russian Federation). E-mail: sivan77@mail.ru

REFERENCES

1. Musaakhunova L.F., Igolkin A.A., Shabanov K.Y. (2015) The vibroacoustic characteristics research of the gas pipeline. *Procedia Engineering*. 106. pp. 316–324. DOI: 10.1016/j.proeng.2015.06.041.
2. Tian J., Yuan C., Wu C., Liu G., Yang J. (2016) The vibration analysis model of pipeline under the action of gas pressure pulsation coupling. *Engineering Failure Analysis*. 66. pp. 328–340. DOI: 10.1016/j.engfailanal.2016.05.017.
3. Mironova T.B., Prokofiev A.B., Sverbilov V.Y. (2017) The finite element technique for modeling of pipe system vibroacoustical characteristics. *Procedia Engineering*. 176. pp. 681–688. DOI: 10.1016/j.proeng.2017.02.313.

4. Guo B., Song S., Ghalambor A., Lin T.R. (2014) Pipeline vibration and condition based maintenance. *Design, Installation and Maintenance*. pp. 299–337. DOI: 10.1016/B978-0-12-397949-0.00018-2.
5. Oh S.W., Yoon D-B., Kim G.J., Bae J-H., Kim H.S. (2018) Acoustic data condensation to enhance pipeline leak detection. *Nuclear Engineering and Design*. 327. pp. 198–211. DOI: 10.1016/j.nucengdes.2017.12.006.
6. Love A.A (1892) *A Treatise on the Mathematical Theory of Elasticity. Vol. 1*. Cambridge: Cambridge University Press.
7. Strutt Rayleigh J.W. (1955) *Theory of Sound. Vol. 1*. Ann Arbor: The University of Michigan Library.
8. Weaver Jr.W., Timoshenko S.P., Young. D.H. (1990) *Vibration Problems in Engineering, 5th Edition*. Hoboken: John Wiley & Sons.
9. Babakov I.M. (1964) *Theory of Vibrations*. Tonopah: Foreign Technology Division.

Received: March 11, 2019

Article

An Analytical Solution to the Problem of Hydrogen Isotope Passage through Composite Membranes Made from 2D Materials

Alexey Mikhailovich Bubenchikov ¹, Mikhail Alekseevich Bubenchikov ², Anna Sergeevna Chelnokova ^{2,*} and Soninbayar Jambaa ³¹ Regional Scientific and Educational Mathematical Center, Tomsk State University, Lenin Avenue 36, 634050 Tomsk, Russia; bubenchikov_am@mail.ru² Department of Mechanics, Tomsk State University, Lenin Avenue 36, 634050 Tomsk, Russia; mschael121@mail.ru³ Department of Applied Mathematics, School of Engineering & Applied Sciences, National University of Mongolia, Centre for Fundamental Research of Mongolian University of Science and Technology, 3 Bld Sarguulain Gudang, Sukhbaatar District, Ulanbaatar 14201, Mongolia; jsoninbayar@yahoo.com

* Correspondence: smolina-nyuta@mail.ru; Tel.: +7-913-8794911

Abstract: An analytical solution to the problem of wave transport of matter through composite hyper-fine barriers is constructed. It is shown that, for a composite membrane consisting of two identical ultra-thin layers, there are always distances between the layers at which the resonant passage of one of the components is realized. Resonance makes it possible to separate de Broiler waves of particles with the same properties, which differ only in masses. Broad bands of hyper-selective separation of a hydrogen isotope mixture are found at the temperature of 40 K.

Keywords: wave dynamics; compound barriers; resonant transmission; the Schrödinger equation; analytical solutions

Citation: Bubenchikov, A. M.; Bubenchikov, M. A.; Chelnokova, A.S.; Jambaa, S. An Analytical Solution to the Problem of Hydrogen Isotope Passage through Composite Membranes Made from 2D Materials. *Mathematics* **2021**, *9*, 2353. <https://doi.org/10.3390/math9192353>

Academic Editor: Christopher Goodrich

Received: 04 August 2021
Accepted: 16 September 2021
Published: 22 September 2021

Publisher's Note: MDPI stays neutral with regard to jurisdictional claims in published maps and institutional affiliations.



Copyright: © 2021 by the authors. Licensee MDPI, Basel, Switzerland. This article is an open access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY) license (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

1. Introduction

It becomes necessary to solve the Schrödinger equation, which is one of the most important equations of mathematical physics in modeling the processes of low-temperature separation of gas components. A fairly large number of modern works are devoted to solving the nonlinear Schrödinger equation (NLSE). In particular, a method for constructing a class of exact analytical solutions of the NLSE model with varying dispersion, nonlinearity, as well as gain or absorption, is developed in [1]. Using the Lie symmetry method, new solutions for nonlinear Schrödinger systems are constructed in [2]. Two cases of exact solutions of the NLSE and an analytical solution of the three-dimensional time-independent equation for a charged particle in the field of an exact electric dipole are found in [3,4]. A functional integral, representing the solution of the wave equation, is obtained in [5]. Various properties of solutions of the extended nonlinear Schrödinger equation, the fractional nonlinear diffusion equation, and the fractional nonlinear Schrödinger equation are studied in [6,7]. A number of works are devoted to the study of solitons [8] and their stability [9], as well as to the question of soliton perturbations [10]. In [11], the authors suggest an exact analytical resolution method for stationary Schrödinger equations with polynomial potentials.

On the basis of various types of potential used in the equation, it is possible to single out works on solving the NLSE for an inseparable complex potential [12], the potential function of the Morse oscillator for a periodic external field [13], an arbitrary potential that

determines bound states [14], a non-central generalized inverse quadratic potential of Yukawa within the Nikiforov–Uvarov framework [15]. Analytical solutions of the Schrödinger equation for some diatomic molecular potentials with any angular momentum are obtained in [16]. Using the Nikiforov–Uvarov method, an exact solution of the N-dimensional radial Schrödinger equation with a generalized Cornell potential is obtained in [17], and one- and two-dimensional NLSE solutions with a double-well potential and a Stark-type perturbing term are presented in [18]. The work presented in [19] proposes a solution to the one-dimensional Schrödinger equation for a potential of a special form. The solution is presented in terms of non-integer order Hermite functions. Finally, in [20] the authors find and analyze the analytical Schrödinger equations with a singular potential of fractional degree called the potential of the second Exton.

The Linear Schrödinger Equation (LSE) is considered learned. However, the problem of wave transport through composite barriers is of great interest for membrane technologies of low-temperature gas separation.

2. Materials and Methods

2.1. The Schrödinger Differential Equation

The differential equation of wave dynamics is:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U\Psi + \frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Psi}{\partial t} = 0 \quad (1)$$

where Ψ is the wave function; \hbar is the Planck's constant; U is the energy of interaction between the particle and the environment; m is the mass of the particle, Δ is the Laplace operator; i is the imaginary unit.

In the special case in which the potential energy U is clearly independent of time, the solution to Equation (1) is found in the form:

$$\Psi = \psi e^{-iEt/\hbar}, \quad (2)$$

where E is the particle energy and ψ is the wave function of coordinates.

Then, the following stationary Schrödinger equation can be used to find the amplitude of the wave ψ :

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0, \quad (3)$$

Below, we will present some analytical constructions which prove to be very effective in analysing problems of isotope transmission through composite membranes. With problems concerning the low-temperature membrane separation of gas mixtures, the direction of transfer, perpendicular to the membrane surface, is of decisive importance. Therefore, only a one-dimensional Schrödinger equation is enough to consider.

It is also convenient to have a dimensionless form of the equation of wave transfer of matter.

If the particle mass is referred to as m_0 , which is the mass of a hydrogen atom, the energy scale is U_0 , which is the depth of the potential well in the distribution of the energy of a pair of interactions between the membrane substance and mobile particles, and the length of the scale is taken as:

$$L = \hbar/\sqrt{m_0U_0}, \quad (4)$$

then the dimensionless equation of wave dynamics does not contain the Planck's constant \hbar :

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + 2m(E - U(x))\psi = 0. \quad (5)$$

In record (5), all quantities are dimensionless, including the coordinate x .

Thus, we reduced the number of problem constants by one. This is essential for further analytical calculations.

2.2. The Integral Schrödinger Equation and Its Transformations

The implementation of numerical methods for solving the Schrödinger differential equation is focused on the finite region of variations of the independent variable, as well as on matching the obtained numerical data with asymptotic distributions of the calculated value. Normally, the conditions of matching are understood as the equality of the wave function itself and its derivative. However, there is no justification for using this form of conditions. The size of the finite region of integration also requires substantiation. In this connection, aiming to carry out integration along the entire real axis is important. This can be done analytical methods. The Schrödinger integral equation is quite suitable for analytical analysis:

$$\psi(x) - \frac{2m}{2ik} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\theta(x-\zeta)} U(\zeta) \psi(\zeta) d\zeta = e^{ikx}, \tag{6}$$

where $k = \sqrt{2mE}$. In their book, Morse and Feshbach note the equivalence of the differential and integral description of propagation of matter waves [21].

Equation (6) is similar in form to an integral equation with a degenerate kernel. However, in fact, it is not the same. In order to separate the variables in the integral term of Equation (6), it is necessary to use the operational calculus. A function of one variable and a differential operator d/dx can be distinguished in the kernel of the equation. To do this, one is only required to use the definition of the shift operator:

$$e^{-x \frac{d}{dx}} f(x) = f(x-h). \tag{7}$$

It is easy to verify that (7) is true if the operator exponent on the left is expanded in a Taylor series in a neighborhood of zero, and the function $f(x-h)$ is expanded in a neighborhood of the point x . Applying equality (7) to (6), we can rewrite the original equation in the following form:

$$\psi(x) - \lambda \left(\int_{-\infty}^{\infty} U(\zeta) \psi(\zeta) e^{-\lambda \frac{d}{dx}} d\zeta \right) e^{ikx} = e^{ikx}, \quad \lambda = \frac{m}{ik} = \frac{1}{2i} \sqrt{\frac{2m}{E}}. \tag{8}$$

Let us pay attention to the expression in parentheses. This expression is a differential operator and, at the same time, is an analytical function of some parameter p :

$$\int_{-\infty}^{\infty} U(\zeta) \psi(\zeta) e^{-\lambda \frac{d}{dx}} d\zeta = \int_{-\infty}^{\infty} U(\zeta) \psi(\zeta) e^{-p \frac{d}{dx}} d\zeta = L(p), \quad p = \frac{d}{dx}. \tag{9}$$

Taking into account the introduced notation, we can write Equation (8) in the following form:

$$\psi(x) - \lambda L(p) e^{ikx} = e^{ikx}. \tag{10}$$

The form of a differential operator acting on the exponential function on the right of it is still unknown. However, it can be found. Multiplying (10) by $U(x) \exp(-xp)$ and performing integration in infinite limits, we obtain:

$$\left(\int_{-\infty}^{\infty} U(x) \psi(x) e^{-xp} dx \right) - \lambda L(p) \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(k-xp)} U(x) e^{-xp} dx \right) = \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(k-xp)} U(x) e^{-xp} dx \right). \tag{11}$$

Two differential operators appear here, for which we introduce the following notation:

$$B(p) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ix} U(x) e^{-ip} dx, \quad Q(p) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i|x|} U(x) e^{-ip} dx. \tag{12}$$

Taking into account these notations, operator equality (11) takes the form:

$$L(p)[1 - \lambda Q(p)] = B(p). \tag{13}$$

Hence, we get:

$$L(p) = \frac{B(p)}{1 - \lambda Q(p)}. \tag{14}$$

Sometimes integrals (12) can be calculated analytically. In a general sense, the result of numerical integration obtained on the basis of the simplest quadrature formulas of the trapezoid method is suitable. In any case, these integrals depend only on the shape of the potential barrier.

Using (14), Equation (10) can be rewritten as:

$$\psi(x) = e^{ix} + \frac{\lambda B(p)}{1 - \lambda Q(p)} e^{i|x|}. \tag{15}$$

The operators $B(p)$ and $Q(p)$, which are included in the last equation, as can be seen from (12), can be determined based on the given shape of the barrier $U(x)$. In principle, relation (15) already determines the desired distribution of $\psi(x)$. However, it still has an operator form, so let us return to relation (10).

If the differential operator $L(p)$ acted on an exponential function of the usual form, the result would be as follows:

$$L\left(\frac{d}{dx}\right) e^{\mu x} = L(\mu) e^{\mu x}. \tag{16}$$

However, in formula (10) this operator acts on the exponent of the modulus of the argument. Therefore, direct application of (16) is impossible. Nevertheless, the exponent from the modulus of the argument can be reduced to the usual exponent if we use the Fourier identity:

$$e^{i|x|} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega x} e^{i\alpha x} e^{i|\alpha|} d\alpha d\omega. \tag{17}$$

Applying rules (16) and (17) to formula (10) we obtain:

$$\psi(x) = e^{ix} + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} L(-i\omega) e^{-i\omega x} e^{i|\alpha|} e^{i\alpha x} d\alpha d\omega. \tag{18}$$

Expression (18) is exactly the solution of the Schrödinger integral equation written as a double integral along the spectral axis. As can be seen, in contrast to (6), its right-hand side contains all known quantities since the functions $B(-i\omega)$ and $Q(-i\omega)$ which make up $L(-i\omega)$ and are called the spectra of the barrier are determined only by its shape, i.e., are known functions of the problem statement. In addition to the shape of the barrier, we know the character of the asymptotic behavior of the solution with respect to the physical variable x .

By this stage of integration, we have already got rid of the differential operator $L(p)$ having replaced it by the function $L(-i\omega)$ using rule (16). Let us denote the function $L(-i\omega)$ by $G(\omega)$. Then, taking into account (14), we get:

$$G(\omega) = \frac{\lambda B(-i\omega)}{1 - \lambda Q(-i\omega)} = \frac{\lambda \int_{-\infty}^{\infty} U(x) e^{i\omega(x-k)} dx}{1 - \lambda \int_{-\infty}^{\infty} U(x) e^{i\omega|x|} e^{i\omega x} dx} \tag{19}$$

As a result, we have:

$$\psi(x) = e^{ikx} + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega x} G(\omega) e^{i\omega|x|} e^{i\omega x} d\omega d\omega. \tag{20}$$

Let us also suppose that function $G(\omega)$ is the spectrum of some function $K(x)$. This means that the following conditions are observed:

$$G(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} K(x) e^{i\omega x} dx, \quad K(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G(\omega) e^{-i\omega x} d\omega. \tag{21}$$

Introducing (21) in (20), we find:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= e^{ikx} + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega x} \int_{-\infty}^{\infty} K(\beta) e^{i\omega\beta} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega|\alpha|} e^{i\omega\alpha} d\alpha d\beta d\omega = \\ &= e^{ikx} + \int_{-\infty}^{\infty} K(\beta) \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega\beta} \left(\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega(\alpha - x + \beta)} d\omega \right) d\alpha d\beta. \end{aligned} \tag{22}$$

The integral in parentheses of the last expression is the Dirac delta function. Therefore, we can further write:

$$\psi(x) = e^{ikx} + \int_{-\infty}^{\infty} K(\beta) d\beta \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega\beta} \delta(\alpha - (x - \beta)) d\alpha = e^{ikx} + \int_{-\infty}^{\infty} K(\beta) e^{i\omega(x-\beta)} d\beta. \tag{23}$$

Thus, the most compact form of the solution, in which the integral is taken in the direction of variation of the physical variable, is as follows:

$$\psi(x) = e^{ikx} + \int_{-\infty}^{\infty} K(\zeta) e^{i\omega(x-\zeta)} d\zeta. \tag{24}$$

When solving the Schrödinger equation by the method of the integral equation, the fulfilment of the matching conditions is not provided. In this case, it is only necessary to check how the solution behaves at $x = \pm\infty$. For this purpose, we will rewrite solution (24) in terms of integrals with a variable upper or lower limit:

$$\psi(x) = e^{ikx} \left[1 + \int_{-\infty}^x K(\zeta) e^{-i\omega\zeta} d\zeta \right] + e^{-ikx} \left[\int_x^{\infty} K(\zeta) e^{i\omega\zeta} d\zeta \right]. \tag{25}$$

Based on this form of writing the distribution $\psi(x)$, we can draw a conclusion about the asymptotic behavior of the wave function:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= e^{ikx} \left[1 + \int_{-\infty}^x K(\zeta) e^{-i\omega\zeta} d\zeta \right], & x \rightarrow \infty; \\ \psi(x) &= e^{ikx} + e^{-ikx} \int_{-\infty}^x K(\zeta) e^{i\omega\zeta} d\zeta, & x \rightarrow -\infty. \end{aligned} \tag{26}$$

As can be seen from these relations, after the barrier, there is a passing wave, and before the barrier there are both the incident and the reflected waves. Thus, solution (24) correctly reflects the asymptotic behavior of the desired function.

2.3. The Reflection Coefficient

It was found in [22] that the Fourier spectrum for the wave function ψ has the form:

$$G(\omega, k) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) e^{i\omega x} dx = \frac{\lambda B(\omega, k)}{1 - \lambda B(\omega, k)}. \tag{27}$$

Here, parameters k and λ are determined by the particle mass m and the energy E :

$$k = \sqrt{2mE}, \quad \lambda = \frac{m}{ik}. \tag{28}$$

As for expression $B(\omega, k)$, this depends on the shape of the potential barrier $U(x)$ and is represented by the following integral:

$$B(\omega, k) = \int_{-\infty}^{\infty} U(x) e^{i(\omega + k)x} dx. \tag{29}$$

The reflection coefficient R of the particle flux has the following formula:

$$R(k, \lambda) = \left| \frac{\lambda B(\omega, k)}{1 - \lambda B(\omega, k)} \right|_{\omega=k}^2. \tag{30}$$

In particular cases of forms of the potential barrier $U(x)$ integral, (29) can be calculated explicitly; then, the corresponding final formulas can be obtained for the reflection coefficient R .

3. Results

3.1. Determining the $B(\omega, k)$ Integral

It is convenient to distinguish between even and odd forms of the potential barrier $U(x)$, since formulas (29) are then written in the form of one-sided integrals. For example, in the case of an even function $U(x)$ integral, (29) is written in the form:

$$B(\omega, k) = 2 \int_0^{\infty} U(x) \cos(\omega + k)x dx. \tag{31}$$

Formula (31) means that it is enough to know only one function, $B_0(\omega)$, which is the cosine Fourier transform for the potential barrier. Using it, we can calculate function $B(\omega, k)$:

$$B_0(\omega) = \int_0^{\infty} U(x) \cos \omega x dx, \quad B(\omega, k) = 2B_0(\omega + k). \tag{32}$$

In this case, the reflection coefficient (30) is equal to:

$$R(k, \lambda) = \left| \frac{\lambda B_0(2k)}{1 - \lambda B_0(2k)} \right|^2, \quad B_0(\omega) = \int_0^{\infty} U(x) \cos \omega x dx. \tag{33}$$

If we carry out similar transformations of integral (29) for an odd function $U(x)$, we get the following result:

$$B_0(\omega) = \int_0^{\infty} U(x) \sin \omega x dx, \quad B(\omega, k) = iB_0(\omega + k), \quad R(k, \lambda) = \left| \frac{\lambda i B_0(2k)}{1 - \lambda i B_0(2k)} \right|^2. \tag{34}$$

Thus, the difference between an odd barrier and an even one is that the cosine Fourier transform of the barrier is replaced by its sinus transformation and the imaginary factor i appears at parameter λ .

There is a significant difference in writing analytical formulas between the cosine and sine Fourier transform of the same function. For example:

$$\int_0^{\infty} e^{-\beta x^2} \cos \omega x dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\beta}} e^{-\omega^2/4\beta},$$

$$\int_0^{\infty} e^{-\beta x^2} \sin \omega x dx = \frac{\omega}{2\beta} \sum_{s=1}^{\infty} \frac{1}{(2s-1)!!} \left(-\frac{\omega^2}{4\beta} \right)^{s-1}.$$

3.2. The Double Potential Barrier

By a double potential barrier, we mean such a function $U(x)$ which for an even barrier has the form:

$$U(x) = U_0(x+d) + U_0(x-d). \tag{35}$$

That is, the double potential barrier consists of the sum of two separate symmetric barriers $U_0(x)$ which are shifted relative to each other by a distance of $\pm d$, as shown in Figure 1.

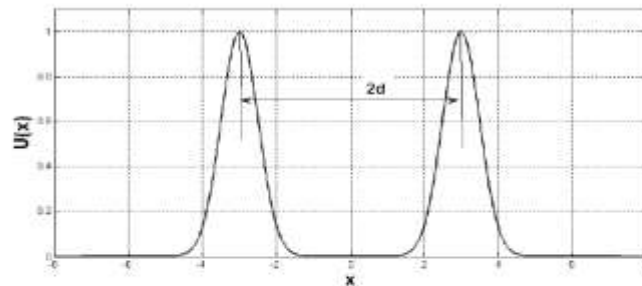


Figure 1. Shape of double potential barrier.

It is clear that, in this case, the value $B(\omega, k, d)$ depends, apart from the parameters ω and k , on the distance d between the barriers.

In order to find the dependence of the integral $B(\omega, k, d)$ on the distance d , we use the formula for the shift of the argument which has the form:

$$\int_{-\infty}^{\infty} U_0(x+d) e^{i(\omega+k)x} dx = \int_{-\infty}^{\infty} U_0(\mu) e^{i(\omega+k)(\mu-d)} d\mu = e^{-i(\omega+k)d} \int_{-\infty}^{\infty} U_0(x) e^{i(\omega+k)x} dx. \tag{36}$$

This means that the spectra of the shifted and the non-shifted barrier momentum differ only by the factor $\exp[-i(\omega+k)d]$.

For a barrier of form (35), therefore, we obtain:

$$B(k+\omega, d) = \int_{-\infty}^{\infty} [U_0(x+d) + U_0(x-d)] e^{i(\omega+k)x} dx =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} U_0(x) e^{i(\omega+k)x} dx [e^{-i(\omega+k)d} + e^{i(\omega+k)d}] = 2 \cos(\omega+k)d \int_{-\infty}^{\infty} U_0(x) e^{i(\omega+k)x} dx. \tag{37}$$

Let us introduce the so-called basic spectral function $B_0(\omega, d)$ for the barrier $U_0(x)$ as follows:

$$B_0(\omega, d) = 2 \cos \omega d \int_{-\infty}^{\infty} U_0(x) e^{i\omega x} dx. \tag{38}$$

Then, the spectrum of the double barrier and the reflection coefficient are equal to:

$$B(\omega + k, d) = B_0(\omega + k, d), \quad R = \left| \frac{\lambda B_0(2k, d)}{1 - \lambda B_0(2k, d)} \right|^2 \tag{39}$$

As can be seen, for a double barrier, the basic function $B_0(\omega, d)$ is a periodic function of the distance d between local barriers. Therefore, the reflection coefficient is repeated by increasing the distance d with a period equal to π/λ .

Noticing that $\lambda = -im/k$ we can write the reflection coefficient R in the following form:

$$R = \left| \frac{-i \frac{m}{k} B_0(2k, d)}{1 + i \frac{m}{k} B_0(2k, d)} \right|^2 = \frac{(m/k)^2 B_0^2(2k, d)}{1 + (m/k)^2 B_0^2(2k, d)} \tag{40}$$

From formula (40) it can be seen that the reflection coefficient R is always included in the interval $0 \leq R \leq 1$.

3.3. An Example of Calculations

For model calculations, it is convenient to use a potential barrier:

$$U_0(x) = e^{-\alpha x^2} \tag{41}$$

The basic functions $B_0(\omega, d)$ for this is equal to:

$$B_0(\omega, d) = 2 \cos \omega d \sqrt{\frac{\pi}{\beta}} e^{-\omega^2/\beta} \tag{42}$$

Using formula (40), it is possible to construct graphs of the reflection coefficient $R(d)$ or the transmission coefficient of particles $C = 1 - R$, depending on the distance d between local barriers.

Figure 2 shows an example of calculating the transmission coefficients of a double barrier for particles with masses $m_1 = 2$ and $m_2 = 5$. Such masses correspond to H₂ and DT molecules. The particle energy E and the barrier width parameter β in the calculations were taken to be equal to the following: $E = 0.8, \beta = 4$.

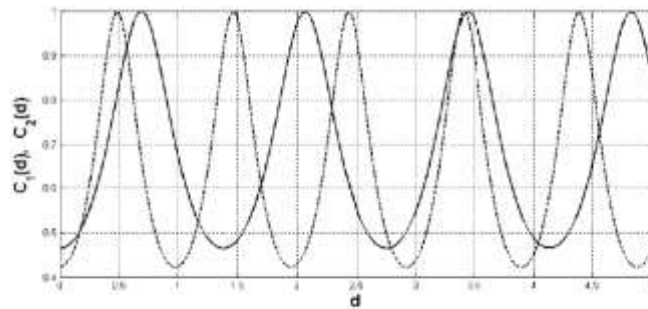


Figure 2. Two graphs of dependence of particle transmission coefficient on distance d between barriers.

The solid line corresponds to the graph for a particle with a mass $m = 2$; the dotted line—to $m = 5, E = 0.8, \beta = 4$.

Since the oscillation periods of these graphs (depending on the distance d) do not coincide, there is a possibility of such a choice of the distance d between the barriers that gives an advantage for one of the substances under consideration to pass through the double barrier.

It is possible that other graphic information is more suitable for a comparative analysis of the permeability of two substances with different masses equal to m_1 and m_2 , for example, when graphs of relative values are displayed on the screen:

$$S_1(d) = \frac{C_1(d) - C_2(d)}{C_1(d)} \quad \text{and} \quad S_2(d) = \frac{C_2(d) - C_1(d)}{C_2(d)} \quad (43)$$

Under the condition, $S_1(d) > 0$, the graph of the function $S_1(d)$ shows how better the first substance passes through the double barrier than the second at the same distance d between the barriers.

The same can be said for the graph of the function $S_2(d)$.

Figure 3 shows graphs of relative deviations for the same calculations, as shown in Figure 2.

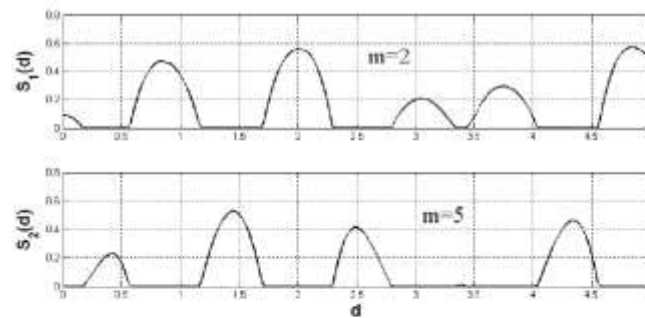


Figure 3. Graphs of relative deviations of transmission coefficients for particles with masses $m = 2$ and $m = 5$.

It is clearly seen in Figure 3 that it is possible to adjust the distance d between the barriers in such a way that only particles with the required mass will pass through the barrier well.

Therefore, it can be stated that there is an effect of separation for particles that differ only in mass. By adjusting the distance d between the barriers, it is possible to provide passage of one of the particles, while passage of the other will be completely blocked.

4. Discussion

In its form, the Schrödinger integral equation is analogous to an integral equation with a degenerate kernel. In the kernel of this equation the variables are not separated due to the presence of the modulus of the difference between the two available variables. Along with this, in relation to the required function, it is a recursion. Thus, in the course of constructing a solution, it is necessary to solve two subproblems: to remove the modulus of the variable difference and to eliminate recursion. The key to implementing these steps is the use of the shift operator. With the use of this operator, the exponential function of the modulus of the variable difference, which is available in the record of the Schrödinger integral equation, is divided into two parts. In case of such a separation one of the variables falls into the operator part, with the other falling into the usual functional dependence. At the operator level it is possible to get rid of recursion with respect to ψ in the original equation.

For this purpose, the original wave equation in integral form is multiplied by $U(x)\exp(-xp)$ and integrated in infinite limits. As a result, an operator relation is obtained which allows finding $L(p)$ as an operator function determined only by the value of the barrier energy. Using the Fourier identity and the properties of a differential operator act-

ing on the exponential function the transition from operator relations to ordinary functional dependences is carried out and the integral representation for the wave function is written in terms of the shape of the barrier. As a result, an integral relation for ordinary functions, in the integral term of which there is no recursion in ψ , is obtained. The last relation determines the solution of the Schrödinger integral equation. The solution is valid on the entire real axis and does not require boundary conditions. Therefore, it only remains necessary to check its asymptotic behaviour. The check allows for finding a compact formula for the total reflection coefficient R . A very important advantage of the exact solution, in comparison with solutions obtained using numerical matching methods, is that this solution allows for calculating the total reflection coefficient R for the potential barrier $U(x)$ of a given shape.

In the case of composite barriers consisting of monolayers of the same shape, according to the formula obtained for R , the zeros of the reflection coefficient are found. It appears that the reflection coefficient vanishes not for one, but for many values of the distance d between single barriers.

The result is an efficient isotope screening system. This system can be configured to separate components by varying the distance between the barriers.

Author Contributions: Conceptualization, formal analysis, supervision, A.M.B.; project administration, M.A.B.; methodology, investigation, funding acquisition, A.M.B. and M.A.B.; validation, visualization, S.J.; resources, data curation, writing—original draft preparation, writing—review and editing, A.S.C. All authors have read and agreed to the published version of the manuscript.

Funding: This research was funded by Ministry of Science and Higher Education of Russia (agreement No. 075-02-2021-1392).

Institutional Review Board Statement: Not applicable.

Informed Consent Statement: Not applicable.

Data Availability Statement: Not applicable.

Acknowledgments: The authors wish to express their thanks to the very competent reviewers for the valuable comments and suggestions.

Conflicts of Interest: The authors declare no conflict of interest. The funders had no role in the design of the study; in the collection, analyses, or interpretation of data; in the writing of the manuscript, or in the decision to publish the results.

References

- Li, B.; Chen, Y.; Wang, Q. Exact analytical solutions to the nonlinear Schrödinger equation model. In Proceedings of the 2005 International Symposium on Symbolic and Algebraic Computation—ISSAC '05, Beijing, China, 24–27 July 2005; doi:10.1145/1073884.1073916.
- Belmonte-Beitia, J.; Gungor, F.; Torres, P.J. Explicit solutions with non-trivial phase of the inhomogeneous coupled two-component NLS system. *J. Phys. A: Math. Theor.* **2020**, *53*, 015201, doi:10.1088/1751-8121/ab561d.
- Parwani, R.; Tabia, G. Universality in an information-theoretic motivated nonlinear Schrödinger equation. *J. Phys. A: Math. Theor.* **2007**, *40*, 5621–5635, doi:10.1088/1751-8113/40/21/012.
- Alhaidari, A.D. Analytic solution of the wave equation for an electron in the field of a molecule with an electric dipole moment. *Ann. Phys.* **2008**, *323*, 1709–1728, doi:10.1016/j.aop.2007.12.005.
- Loboda, A.A. Schrödinger equation with signed Hamiltonian. *Russ. J. Math. Phys.* **2020**, *27*, 99–103, doi:10.1134/s1061920820010094.
- Achilleos, V.; Diamantidis, S.; Frantzeskakis, D.J.; Karachalios, N.I.; Kevrekidis, P.G. Conservation laws, exact traveling waves and modulation instability for an extended nonlinear Schrödinger equation. *J. Phys. A: Math. Theor.* **2015**, *48*, 355205, doi:10.1088/1751-8113/48/35/355205.
- Khawaja, U.A.; Al-Refai, M.; Shchedrin, G.; Carr, L.D. High-accuracy power series solutions with arbitrarily large radius of convergence for the fractional nonlinear Schrödinger-type equations. *J. Phys. A: Math. Theor.* **2018**, *51*, 235201, doi:10.1088/1751-8121/aabe98.
- Syafwan, M.; Susanto, H.; Cox, S.M.; Malomed, B.A. Variational approximations for traveling solitons in a discrete nonlinear Schrödinger equation. *J. Phys. A: Math. Theor.* **2012**, *45*, 075207, doi:10.1088/1751-8113/45/7/075207.

9. Dmitriev, S.V.; Kevrekidis, P.G.; Yoshikawa, N.; Frantzeskakis, D.J. Exact stationary solutions for the translationally invariant discrete nonlinear Schrödinger equations. *J. Phys. A: Math. Theor.* **2007**, *40*, 1727–1746, doi:10.1088/1751-8113/40/8/003.
10. Lashkin, V.M. N-soliton solutions and perturbation theory for the derivative nonlinear Schrödinger equation with nonvanishing boundary conditions. *J. Phys. A: Math. Theor.* **2007**, *40*, 6119–6132, doi:10.1088/1751-8113/40/23/008.
11. Voros, A. Zeta-regularization for exact-WKB resolution of a general 1D Schrödinger equation. *J. Phys. A: Math. Theor.* **2012**, *45*, 374007, doi:10.1088/1751-8113/45/37/374007.
12. Musslimani, Z.H.; Makris, K.G.; El-Ganainy, R.; Christodoulides, D.N. Analytical solutions to a class of nonlinear Schrödinger equations with PT-like potentials. *J. Phys. A: Math. Theor.* **2008**, *41*, 244019, doi:10.1088/1751-8113/41/24/244019.
13. De Lima, E.F.; Ho, T.-S.; Rabitz, H. Solution of the Schrödinger equation for the Morse potential with an infinite barrier at long range. *J. Phys. A: Math. Theor.* **2008**, *41*, 335303, doi:10.1088/1751-8113/41/33/335303.
14. Silvestre-Brac, B.; Semay, C.; Buisseret, F. Auxiliary fields as a tool for computing analytical solutions of the Schrödinger equation. *J. Phys. A: Math. Theor.* **2008**, *41*, 275301, doi:10.1088/1751-8113/41/27/275301.
15. Edet, C.O.; Okoi, P.O.; Chima, S.O. Analytic solutions of the Schrödinger equation with non-central generalized inverse quadratic Yukawa potential. *Rev. Bras. de Ensino de Física* **2020**, *42*, e20190083, doi:10.1590/1806-9126-rbef-2019-0083.
16. Akcay, H.; Sever, R. Analytical solutions of Schrödinger equation for the diatomic molecular potentials with any angular momentum. *J. Math. Chem.* **2012**, *50*, 1973–1987, doi:10.1007/s10910-012-0013-y.
17. Abu-Shady, M. N-dimensional Schrödinger equation at finite temperature using the Nikiforov–Uvarov method. *J. Egypt. Math. Soc.* **2017**, *25*, 86–89, doi:10.1016/j.joems.2016.06.006.
18. Sacchetti, A. Solution to the double-well nonlinear Schrödinger equation with Stark-type external field. *J. Phys. A: Math. Theor.* **2014**, *48*, 035303, doi:10.1088/1751-8113/48/3/035303.
19. Manukyan, V.A.; Ishkhanyan, T.A.; Ishkhanyan, A.M. Schrödinger potential involving $x^{2/3}$ and centrifugal-barrier terms conditionally integrable in terms of the confluent hypergeometric functions. *Nonlinear Phenom. Complex Syst.* **2019**, *22*, 84–92.
20. Ishkhanyan, A.M.; Karwowski, J. The second Exton potential for the Schrödinger equation. *Mod. Phys. Lett. A* **2019**, *34*, 1950195, doi:10.1142/s02177.
21. Morse, P.M.; Feshbach, H. *Methods of Theoretical Physics. Vol. 1*, McGraw-Hill Book Company, Inc.: NY, USA; ON, Canada; London, UK 1953, 997p.
22. Zhuravlev, V.F. *Foundations of Theoretical Mechanics*, Fizmatlit: Moscow, Russia, 2001; 321p.



ADVANCES IN NATURAL SCIENCES: NANOSCIENCE AND NANOTECHNOLOGY

Helium isotope separation by bi-layer membranes of g-C₃N₄

Journal:	<i>Advances in Natural Sciences: Nanoscience and Nanotechnology</i>
Manuscript ID:	ANSN-2021-0163.R1
Manuscript Type:	Original Article
Date Submitted by the Author:	30-Aug-2021
Complete List of Authors:	Poteryaeva, Valentina; National Research Tomsk State University, Bubenchikov, Alexey; National Research Tomsk State University, Department of Theoretical Mechanics Bubenchikov, Mikhail; National Research Tomsk State University, Department of Theoretical Mechanics Iunfu, alexander; LLC "Gazprom Transgaz Tomsk" Jambaa, Soninbayar; National University of Mongolia
Keywords:	isotope separation, hermite polynomials, orthogonal polynomials, Schrödinger equation
Classification numbers:	2.06 Nanomechanics, 4.02 Nanoparticle, 4.10 Thin Film, 4.11 Multilayer, 5.15 Graphene

SCHOLARONE™
Manuscripts

<https://mc04.manuscriptcentral.com/vastansn>

Хавсралт 6

1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
11
12
13
14
15
16
17
18
19
20
21
22
23
24
25
26
27
28
29
30
31
32
33
34
35
36
37
38
39
40
41
42
43
44
45
46
47
48
49
50
51
52
53
54
55
56
57
58
59
60

Helium isotope separation by bi-layer membranes of $g-C_3N_4$

Valentina A. Poteryaeva & Alexey M. Bubenchikov & Michael A. Bubenchikov & Alexandr V. Lun-Fu & Soninbayar Jambaa

National Research Tomsk State University, Department of Mechanics and Mathematics, Tomsk, 634050, Russia

E-mail: valentina.poteryaeva@gmail.com

Abstract. The problem of helium isotope separation via bi-layer membranes of graphitic carbon nitride $g-C_3N_4$ has been studied. The probability of passing isotopes through the membrane is derived from solving the Schrödinger integral equation using Hermite polynomials. The potential energy of the membrane is calculated based on modified Lennard-Johnes potential. The separation degree of the $^3He/^4He$ reaches the value of 1045 due to the resonant effect.

1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
11
12
13
14
15
16
17
18
19
20
21
22
23
24
25
26
27
28
29
30
31
32
33
34
35
36
37
38
39
40
41
42
43
44
45
46
47
48
49
50
51
52
53
54
55
56
57
58
59
60

Introduction

Despite the widespread occurrence of helium in the universe, its terrestrial sources are limited. Currently, helium is extracted from natural gas using cryogenic distillation, pressure swing adsorption as well as the membrane method. The latter appears to be preferred due to its lower cost and simplicity.

In turn, isotope separation is also an urgent problem. The ^4He isotope makes up the main part of helium, while ^3He is a very rare and valuable element. At present, helium-3 is obtained in the process of tritium decay (1), which is far from satisfying the demand for it. Outer space provides great prospects for production of ^3He since this isotope is contained in the Sun and the atmospheres of giant planets in much larger quantities than on Earth. ^3He finds applications in cryogenic industry, medicine (magnetic resonance imaging), neutron detection. The use of helium-3 in reaction with deuterium as a thermonuclear fuel looks promising, yet underdeveloped. The advantages of this type of fuel include low radioactivity, which does not require special precautions and does not entail catastrophic consequences in an accident, low degradation of reactor materials, and the possibility of further use of protons as the by-product of the reaction.

Isotopes of one element have identical chemical properties so their separation is only possible with the use of mass-dependent processes, for example, using quantum effects. In contrast to the classical method for determining membrane permeability, when it is unambiguously known whether a molecule with given kinetic energy will overcome the potential barrier or not, in the quantum-mechanical case, there is always a probability of a molecule passing through the membrane. Separation is achieved due to small differences in the probabilities of two isotopes passing through a narrow potential barrier of a suitable shape, which directly depends on the choice of the material and the design of the nanomembrane.

The probability of an atom passing through the barrier is determined from the solution of the stationary Schrödinger equation. The equation is usually solved numerically using the finite difference method (2). However, this paper proposes a different way to obtain a solution for the Schrödinger equation which provides a more accurate solution compared to other methods because it is mostly analytical.

Isotope separation is more demanding in terms of the choice of membrane material and design, in contrast to gas mixtures separation due to their similar dimensions and properties. The aim is to find the potential barrier which will enhance the differences in the tunneling permeabilities of isotopes and, at the same time, will correspond to the real synthesized material. To adjust the potential energy in this way, pores of a material are often functionalized, that is, functional groups which provide the necessary properties are added. An example is the passivation of pore edges by attaching hydrogen atoms or replacing structure atoms with nitrogen atoms. Stretching of a membrane can also be used. Such methods can reduce the height of the energy barrier by allowing for a more intense flow through the pores (3-9).

Recent studies show that porous graphene and graphene-like membranes, as well

Helium isotope separation by bi-layer membranes of $g - C_3N_4$

3

as zeolite membranes and polymeric materials, can successfully separate isotopes (10, 11). Various designs of carbon allotropes (nanotubes, nanowires, and nanohorns) also show good performance (12).

Graphene membranes with pores obtained by removing one or more atoms of the structure allow mobile particles to overcome the energy barrier and pass through the pores (13–15). At the same time, the creation of nanoscale pores by removing only one carbon ring of a graphene sheet is not enough to ensure the separation of helium isotopes (3). Best results are obtained by removing two rings at the same time as passivating the pore edges and replacing several carbon atoms with nitrogen atoms. In recent years, new carbon allotropes, which are favourable in terms of membrane gas separation, have also been synthesized, for example, graphdiyne (GDY) (16).

Graphene-like materials suitable for the separation of isotopes and gases include membranes made of carbon nitride ($g - C_3N_4$) (17, 18), ($C_2N - h2D$) (19) and boron nitride (20). Two-dimensional carbon-nitride (2DCN) allotropes show a chemical formula C_nN_m , where n and m represent the number of C and N atoms in the primitive lattice, respectively. Layered nanomaterials composed of C and N atoms form strong covalent networks. For different configurations of the atoms, these nanomaterials can exhibit diverse and promising electronic, optical, and mechanical properties (21–23). Carbon nitride material is used for visible-light-driven and photochemical CO_2 reduction in recent studies (24–26). Separation of hydrogen isotopes in single-walled carbon and boron-nitride nanotubes was investigated in (27). Carbon nitride membranes are highly tunable for gas and isotope separation and hydrogen purification (28–31).

The two-dimensional polymer, polyphenylene, which is a porous analogue of graphenes, is also proposed as a membrane (32). It has a graphene structure with the addition of a hydrogen atom to each carbon atom. The resulting material is expressed by the formula C_nH_n . It is thermally stable and can be synthesized and used for gas separation (33). Also, membranes made of porous zeolite have good selective and sorption properties.

However, monolayered membranes do not provide a sufficient degree of isotope separation at the flow density required for industrial needs. In addition, there can be difficulties in obtaining pores of the same size graphene sheets. Double-layer and multi-layer membranes can solve this problem. Mandra et al. (34) investigate enrichment of helium by resonant tunneling through bi-layers. Multilayer membranes are used for gas separation (35), for instance CO_2/N_2 (36), membranes of defective and functionalized graphene desalinate water (37, 38).

The simulation results show that at low kinetic energy the probability of 3He passing through the barrier is higher; however, at energy exceeding the barrier peak the situation changes and the 4He tunneling prevails. However, a low temperature also provides a low flow through the membrane, which negates the possibility of using the technology on an industrial scale, which requires a separation degree equal to at least 6 and membrane permeability of $6.7 \cdot 10^{-8}$ mol/s/cm²/bar. Maintaining a balance between the degree of isotope separation and the flow density is provided by a decrease in the potential barrier,

Helium isotope separation by bi-layer membranes of $g - C_3N_4$

4

which, in turn, has its limitations, or the use of double membranes. The resonant effect arising using bi-layered membranes changes the smooth dependence of the membrane permeability on temperature and increases selectivity.

A. Hauser et al. (3), (4) found that hydrogen-passivated single-sided nitrogen-doped pores provide permeability of the order of 10^{-9} and a separation degree of 19 at the temperature of 10K. Y. Qu et al. (28) worked with a graphene-like carbon nitride membrane ($C_2N - h2D$) which had larger pores (0.551 nm) than porous graphene adjusting its potential energy by stretching. The required selectivity equal to 7 and permeability of $4 \cdot 10^{-7}$ mol/s/cm²/bar were achieved at $T = 15$ K and the degree of membrane stretching equal to 3%. J. Schrier et al. (5) considered the separation of helium isotopes using a two-dimensional polyphenylene (2D-PP) membrane. The paper concludes that the structure can be used to separate light isotopes, such as isotopes of helium and hydrogen. A. Kumar et al. (39, 40) showed the ability of Rho zeolite to separate hydrogen isotopes. At $T = 30$ K the degree of separation reaches 5.81. S. Challa et al. (41) clearly showed a strong dependence of the separation degree of isotopes HD-H₂, T₂-H₂, ³He-⁴He, and CD₄-CH₄ using a nanotube membrane on temperature, as well as the need to select the diameters of nanotubes depending on the selected mixture of isotopes. A. Gijon et al. (42) proposed calculations of quantum permeability of graphdiyne and porous graphene membranes in three-dimensional space. Taking into account the zero point energy effect (the ZPE effect) led to new results differing from the previous, namely, the predominance of the ⁴He isotope flow even at $T = 20$ K and the degree of separation of helium isotopes equal to about 2.5, but not in favour of ³He.

Orthogonal polynomials or special functions are used in numerous physical and engineering problems which contain differential and integral equations. Many methods for solving them are based on Hermite polynomials, i.e. a classical sequence of orthogonal polynomials (43). The fact that Hermite polynomials form a basis makes it possible to arrange various functions in a series, which facilitates solutions of many problems (44, 45). Hermite polynomials played a decisive role in the theory of light fluctuations and quantum states and, in particular, in problems of coastal hydrodynamics and meteorology (46). They are used in biological and epidemiological sciences. For instance, the epidemiological SIR model estimates the number of people who can become infected (47). The use of Hermite polynomials has also found a place in economic problems. J. Perote et al. (48-50) use Hermite polynomial methods to describe the behaviour of financial variables. Also, these polynomials can model non-Gaussian excitations which reflect models of numerous phenomena surrounding us. The wind pressure in areas of flow separation on the surfaces of buildings usually has non-Gaussian characteristics, as well as modelling wind speed in complex areas (51). Additionally, polynomials can be applied in the field of engineering marine structures when assessing the reliability of a hull beam for floating, production, storage, and unloading blocks (52). Such problems are solved using the Hermite impulse model of nonlinear non-Gaussian random oscillations (53).

Expansion in Hermite polynomials greatly facilitates solutions of integro-differential

Helium isotope separation by bi-layer membranes of $g - C_3N_4$

5

(54) and integral equations. Such problems result from analyzing processes of reflection and passage of waves through given potential barriers, that is Schrödinger wave dynamics problems. Solving these problems allows for finding the probability of passage of atoms and molecules in the form of De Broglie waves through various membranes. The work given in (55) presents a numerical solution of the Schrödinger equation for a tunable potential barrier.

Theoretical model*The Schrödinger differential and integral equations*

The differential equation for the Schrödinger wave function $\psi(x)$ in the one-dimensional case is given as:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + [k^2 - 2mU(x)]\psi = 0; \quad k = \sqrt{2mE}. \quad (1)$$

It describes the passage of a particle with a mass of m and energy of E through a potential barrier noted as $U(x)$. The boundary condition at a great distance consists of two parts:

$$\psi \simeq e^{ikx} + Ae^{-ikx} (x \rightarrow -\infty); \quad \psi \simeq Be^{ikx} (x \rightarrow \infty). \quad (2)$$

This means that for large negative values of x the function $\psi(x)$ represents the sum of the incident and the reflected waves; for large positive values of x it approaches the plane passing wave. Thus, to solve the problem it is necessary to find two linearly independent solutions of the homogeneous differential equation given in (1) (numerically or analytically) and then match these solutions so that the boundary conditions given in (2) (56, 57) are satisfied. This is a common way of dealing with the problem of material particles passing through a potential barrier. In this case, the function $\psi(x)$ appears to be complex; however, it is not this function that has the physical meaning, but the square of its module $\rho = |\psi(x)|^2$ which is equal to the density of probability that the particle is found in the section $x = const$. If only the graph of the function $\rho(x)$ is under consideration, it appears to be strongly oscillating in the region where the incident and the reflected waves exist simultaneously. Such a graph complicates the interpretation of calculations since it is practically impossible to correctly separate the amplitudes of the incident and the reflected waves.

However, the differential equation is given in (1) is closely related to the Schrödinger integral equation introduced in the work (58). It has the following form:

$$\psi(x) - \frac{m}{ik} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik|x-x_0|} U(x_0)\psi(x_0)dx_0 = e^{ikx}. \quad (3)$$

Equations (3) and (1) are equivalent in the sense that if equation (3) is twice differentiated with respect to the variable x , equation (1) is obtained. However, the inhomogeneous integral equation given in (3) also contains boundary conditions (2).

Helium isotope separation by bi-layer membranes of $g - C_3N_4$

6

This can be seen if equation (3) is written in a more detailed form:

$$\psi(x) = e^{ikx} \left[1 + \frac{m}{ik} \int_{-\infty}^x e^{ikx_0} U(x_0) \psi(x_0) dx_0 \right] + e^{-ikx} \left[\frac{m}{ik} \int_x^{\infty} e^{ikx_0} U(x_0) \psi(x_0) dx_0 \right]. \quad (4)$$

In square brackets are the amplitudes of the incident and the reflected waves. Equation (4) contains boundary conditions in (2) since for large positive values of x the reflected wave disappears, and for large negative values of x the sum of the incident and the reflected waves is obtained.

Naturally, to use formula (4) it is necessary to obtain the corresponding solution of $\psi(x)$, either with the integral equation given in (3) or with the boundary value problem formulated in (1), (2).

Solving the Schrödinger integral equation

Using the expansion in Hermite polynomials formulas given in Supporting Information we will find a solution to integral equation (3) in the form of a segment of a series with unknown coefficients C_n in Hermite functions:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \sum_{n=0}^N C_n D_n(x); \quad (5) \\ e^{ik|x-x_0|} &= \sum_{n=0}^N D_n(x) \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik|\mu-x_0|} D_n(\mu) d\mu; \\ e^{ikx} &= \sum_{n=0}^N D_n(x) \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik\mu} D_n(\mu) d\mu. \end{aligned}$$

Introducing (5) into integral equation (3) and equating the terms for identical functions $D_n(x)$ we obtain:

$$C_n - \frac{m}{ik} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} U(x_0) \psi(x_0) e^{ik|\mu-x_0|} D_n(\mu) d\mu dx_0 = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik\mu} D_n(\mu) d\mu. \quad (6)$$

Further, with an account of the equality $\psi(x_0) = \sum_{r=0}^N C_r D_r(x_0)$, expression (6) takes the form:

$$C_n - \frac{m}{ik} \sum_{r=0}^N C_r \left[\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} U(x_0) e^{ik|\mu-x_0|} D_n(\mu) D_r(x_0) d\mu dx_0 \right] = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik\mu} D_n(\mu) d\mu. \quad (7)$$

Here the double integral (in square brackets) can be considered as a square matrix \mathbf{G} of an order N ; and the right-hand side as a column vector \mathbf{E} . That is, the following

Helium isotope separation by bi-layer membranes of $g - C_3N_4$

7

notations should be introduced:

$$\mathbf{G}(k, n, r) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} U(x_0) e^{ik|\mu-x_0|} D_n(\mu) D_r(x_0) d\mu dx_0; \quad \mathbf{F}(k, n) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik\mu} D_n(\mu) d\mu. \quad (8)$$

In this case, equality (7) is a system of linear algebraic equations for determining the column vector which is composed of the desired coefficients C_n in the expansion of the function ψ . In the matrix notation this system of equations has the form:

$$\left[\mathbf{E}_N - \frac{m}{ik} \mathbf{G} \right] \mathbf{C} = \mathbf{F}. \quad (9)$$

The question of solving integral equation (3) is, thus, reduced to the most accurate calculation of the integrals in formula (8).

Many integrals containing Hermite functions are calculated explicitly. A list of such integrals is contained in the reference book by Gradstein and Ryzhik (59, p. 851). Among them is the above-mentioned vector \mathbf{F} , i.e.:

$$\mathbf{F}(k, n) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik\mu} D_n(\mu) d\mu = \sqrt{4\pi} i^n D_n(2k). \quad (10)$$

Formula (10) is easily verified in various ways and can be derived independently.

The following integral can be explicitly presented in the same way:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{ik|\mu-x_0|} D_n(\mu) d\mu = \sqrt{4\pi} i^n D_n(2k) e^{-ikx_0} + 2i S_n(x_0), \quad (11)$$

where $S_n(x_0) = \int_{-\infty}^{x_0} \sin k(x_0 - \mu) D_n(\mu) d\mu$. The integral given in (11) is not completely expressed explicitly; the convolution $S_n(x_0)$ is also added and it is usually easily and fairly accurately calculated numerically.

Thus, the elements of the matrix \mathbf{G} and the vector \mathbf{F} of the right-hand side in formula (9) are now represented in the following form:

$$\mathbf{G}(k, n, r) = \int_{-\infty}^{\infty} U(x_0) D_r(x_0) \left[\sqrt{4\pi} i^n D_n(2k) e^{-ikx_0} + 2i S_n(x_0) \right] dx_0; \quad (12)$$

$$\mathbf{F}(k, n) = \sqrt{4\pi} i^n D_n(2k).$$

It is necessary to calculate only the one-dimensional integral that takes into account the shape of the potential barrier which must be solved numerically. However, it can also be calculated with high accuracy since the integration region is limited by the width of the barrier.

<https://mc04.manuscriptcentral.com/vastansn>

Helium isotope separation by bi-layer membranes of $g - C_3N_4$

8

Figure 1 shows one of the results of solving the Schrödinger integral equation using Hermite functions. The algorithm for finding the probabilities of helium isotopes passage through the membrane is as follows. First, the matrix \mathbf{G} and the right-hand side of \mathbf{F} are calculated by formulas (12). Then the expansion coefficients C_n are found as a solution of the system of linear algebraic equations (9). After this, the density distribution of the incident ρ_{passed} and the reflected $\rho_{reflected}$ De Broglie waves are obtained as the squared modulus of amplitudes of the passed and reflected waves. Finally, the desired function $\psi(x)$ can be found based on ().

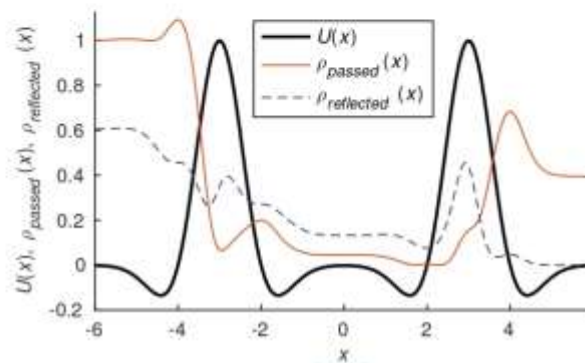


Figure 1. Graphs of potential barrier $U(x)$ and amplitudes of transmitted $\rho_{passed}(x)$ and reflected $\rho_{reflected}(x)$ waves. Initial data: $m = 3$, $E = 0.25$, $k = \sqrt{2mE} = 1.2247$

The graph of the potential barrier shape is indicated in Figure 1 by a thickened line, and the density distribution of the reflected wave $\rho_{reflected}$ is represented as a dashed line. Calculations in Figure 1 show how the dimples at the ends of the potential barrier affect the passage and reflection of particles. In addition, the well-known fact that the sum of the transmission and reflection coefficients is equal to unity is confirmed. The mass is expressed in units related to the mass of the hydrogen atom. Therefore, $m = 3$ corresponds to the helium-3 isotope. The dimensionless energy of the passing particle $E = 0.25$ corresponds to a temperature of 12.5 K.

Since a large number of particles in various states participate in the movement through the membrane, then the behavior of the system as a whole is an average reflection of the movement of individual particles. Thus, it is necessary to take into account the Boltzmann distribution for each of the components of the mixture. The particle distribution function concerning the Boltzmann factor has the following form (28):

$$f(E, T) = \frac{1}{\sqrt{4\pi kTE}} e^{-E/kT}. \quad (13)$$

Then the permeability coefficient, taking into account all possible states of particles, can be determined by the formula

Helium isotope separation by bi-layer membranes of $g - C_3N_4$

9

$$S = \int \rho_{\text{passed}}(E) f(E, T) dE. \quad (14)$$

Potential energy

A mixture of helium isotopes moves through a two-layer membrane in a direction perpendicular to its plane 2.

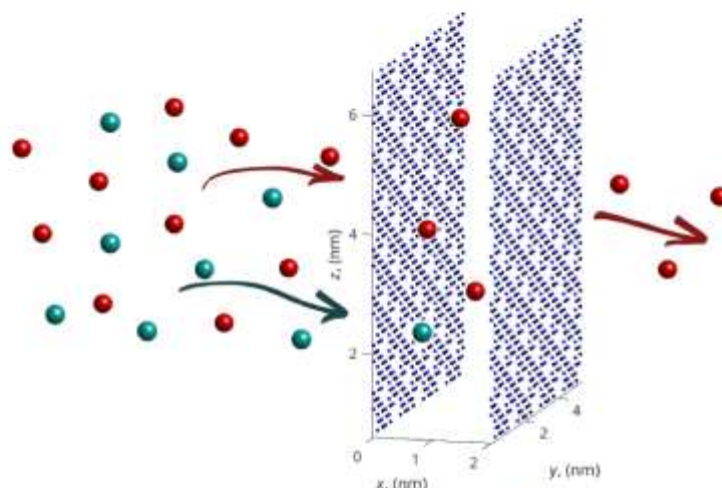


Figure 2. The movement of helium isotopes through the bi-layer membrane

To separate a mixture of helium isotopes, a double membrane of graphitic carbon nitride $g - C_3N_4$ was used. The structure and the energy barrier of the membrane are shown in Fig. 3 (a) and (b), respectively.

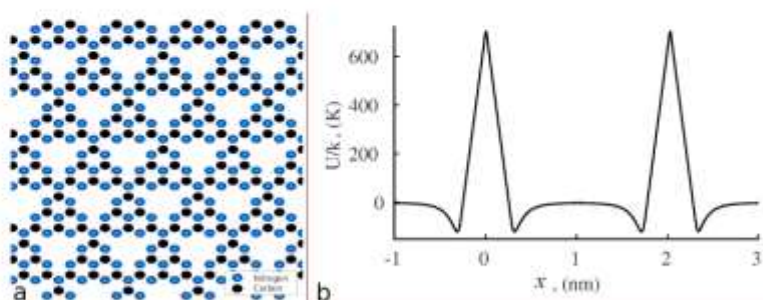


Figure 3. The structure of the membrane of graphitic carbon nitride $g - C_3N_4$ (a) and the potential energy barrier of bi-layer membrane (b)

Helium isotope separation by bi-layer membranes of $g - C_3N_4$

10

When obtaining a model of the energy barrier of a membrane in the spatial case, it is acceptable to use the Lennard-Jones potential, which is often used to describe moving helium atoms. However, to obtain a one-dimensional energy distribution, this pair potential must be finite. In fact, this is exactly what happens, a helium atom, falling into the pore of a graphene-like sheet, has a final cumulative impact from the atoms of the structure. Therefore, the potential of pair interactions must be integrable. The following modification of the Lennard-Jones potential has this property (60):

$$P_1(\rho) = 4\varepsilon \frac{\sigma}{\rho} \tanh \left[\left(\frac{\sigma}{\rho} \right)^{11} - \left(\frac{\sigma}{\rho} \right)^5 \right], \quad (15)$$

where ρ is the distance between the force center of the membrane and the moving gas particle, ε is the relative depth of the potential well, σ is the influence radius of the interaction potential. Parameters ε and σ are taken from the reference (61).

In a real three-dimensional system, waves can propagate in three spatial directions. Let x be the main direction of mass transfer perpendicular to the membrane. Then the coordinates y and z will be directed along with the membrane surface. Due to the global homogeneity of the membrane, wave mass transfer along with the coordinates y and z does not occur. Therefore, the modeling task is to ensure that the mass transfer by x -waves in the one-dimensional problem corresponds to the total flux determined by local transfers in the spatial system. This can be achieved by solving a spatial problem. The barrier distribution of the interaction energy in a one-dimensional problem can act as a means of reconciliation with a complete statement or experimental data. Not being able to realize the complete set, we propose an approximate method for finding the barrier energy.

The one-dimensional potential barrier of the membrane $U(z)$ was obtained using the following procedure. The atom-atomic interactions of a moving helium atom with the carbon and nitrogen atoms that make up the membrane of a representative size were summed up. Then, the obtained three-dimensional potential was averaged over surfaces parallel to the membrane plane. As a result, the distribution along the Ox axis remains.

Each of the monoatomic layers of the composite membrane must be partially permeable for the components of the gas mixture. Two reasons could lead to a distortion of the average interaction energy in comparison with the local energy of the real state of the system. The first is edge effects. However, they are negligible since any macroscopic fragment of a composite membrane can be considered to be infinitely extended in its plane without loss of generality. The second is the specific shape of the wave propagation cell. The average velocity of wave mass transfer is determined in the direction perpendicular to the membrane surface. Therefore, the shape, as well as the size of the cell, are important only to the extent that they provide the passage or non-passage of waves. When calculating the mass flux of a substance through a membrane, the more important is the number of hollow cells per unit area of a monoatomic film. Thus, the actual shape of the passage cell does not affect the mass flow of gas through the wave membrane. The resonance effects also do not depend on the shape of this

Helium isotope separation by bi-layer membranes of $g - C_3N_4$

11

cell since monoatomic films are infinitely extended and the natural frequencies of the potential well of a composite membrane are determined only by the distance between layers.

Results

Before using the proposed model for determining permeability of an ultrathin membrane, the results of the permeability values D were compared with the analytical solution in the case of simple barriers of the square form Fig. 4 and the form of $U(z) = \frac{1}{ch^2(ax)}$ Fig. 5. The shape of the barrier considered and the probability of helium isotopes passing through the membrane were shown. The results obtained with the model (indicated by markers) are very close to the analytical solution (indicated by lines).

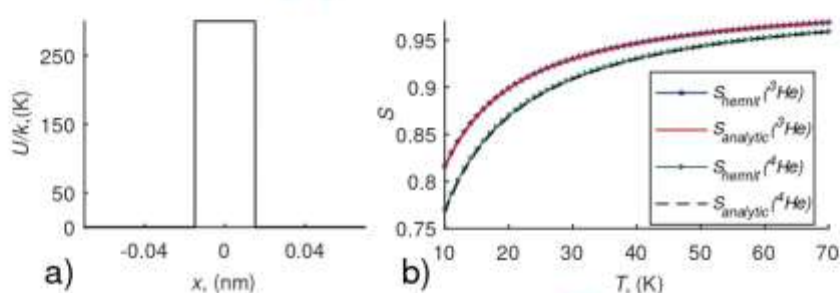


Figure 4. Shape of square potential energy barrier (a) and membrane permeability for helium isotopes (b). The results of the calculated solution are indicated by markers; the results of the analytical solution are indicated by lines.

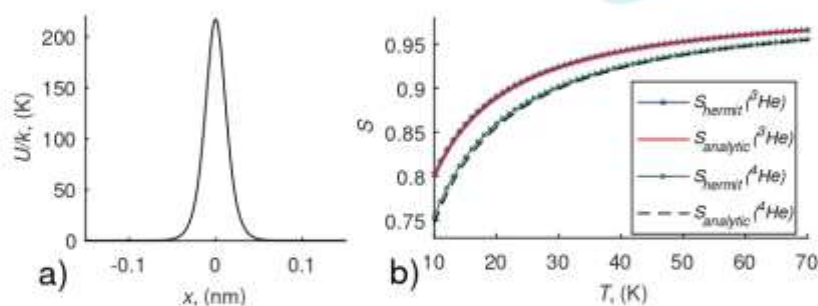


Figure 5. Shape of potential energy barrier of the form of $U(z) = \frac{1}{2k^2(ax)^2}$ (a) and membrane permeability for helium isotopes (b). The results of the calculated solution are indicated by markers; the results of the analytical solution are indicated by lines.

The membrane permeability with respect to the ratio of helium isotopes was calculated for various values of the distance between two layers of thin sheets b at

Helium isotope separation by bi-layer membranes of $g - C_3N_4$

12

cryogenic temperatures in the range of $T = 10 - 60$ K. The temperature dependence is taken into account when calculating the kinetic energy of a moving atom / molecule E . The energy E is included in the variable k when solving the Schrödinger equation. For each value of b in the range from 0.1 to 6 nm the maximum separation degree R for the mixtures $^3He/^4He$ and $^4He/^3He$ was obtained as the ratio of corresponding values of $D(^3He)$ and $D(^4He)$.

The parameters which determine the maximum selectivity of helium mixtures are given in table 1. According to the results obtained, the selectivity value $R = 1046$ is achieved when helium-3 is released. The necessary conditions are the temperature of $T=12$ K, the distance between membrane sheets of $b=4.6$ nm. The membrane permeability, in this case, is shown in Fig. 6 (b). Fig. 6 (a) shows the permeability of a single-layer membrane under the same conditions. The degree of isotope separation here is 1.34.

Extracted component	Barrier retained component		
3He	$R = 1045.8$	$R = 959.323$	$R = 734.349$
	$T = 12$ K	$T = 10$ K	$T = 13$ K
	$b = 4.6$ nm	$b = 3.6$ nm	$b = 5.7$ nm
4He	$R = 604.165$	$R = 518.721$	$R = 506.001$
	$T = 20$ K	$T = 10$ K	$T = 22$ K
	$b = 3.1$ nm	$b = 4.4$ nm	$b = 3.8$ nm

Table 1. The parameters which determine the maximum selectivity of helium mixtures

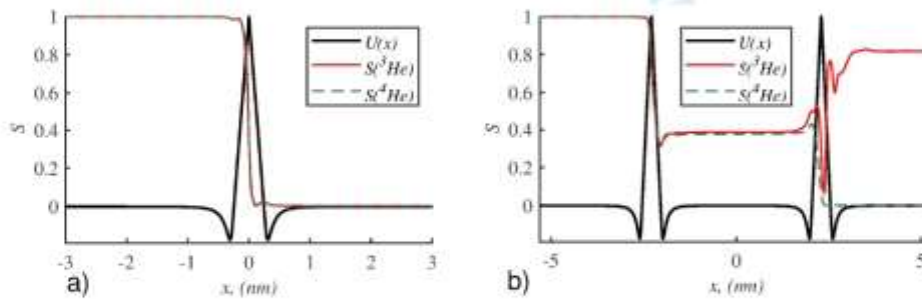


Figure 6. The membrane permeability in the case of a single-layer membrane (a) and bi-layer membrane of graphitic carbon nitride (b), $T = 12$ K, $b = 4.6$ nm

The dependence of the separation degree of the gas mixture R on the distance between the membrane layers b is shown in Fig. 7. It can be noted that the nature of this dependence is periodic, i.e. the selectivity peak is achieved when the membrane

Helium isotope separation by bi-layer membranes of $g - C_3N_4$

13

layers are located at a distance that is a multiple of the de Broglie wavelength of the component which we want to isolate from the mixture.

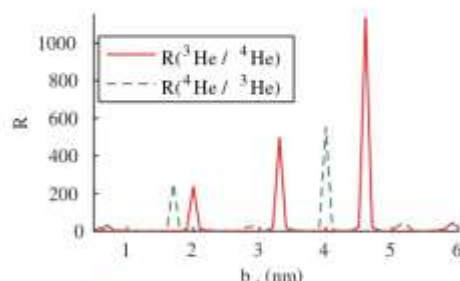


Figure 7. The dependence of the separation degree of the gas mixture R on the distance between the membrane layers b

To sum up, the successful isotope separation is feasible due to resonance effects in a two-barrier system. However, it is realized when the natural frequency of the interlayer space coincides with the frequency of the wave entering this space. Resonances in the x or y direction may or may not exist, but this does not affect the mass transfer in the z -direction.

If z -waves enter into resonance, then the intensity of mass transfer through the composite membrane increases by an order of magnitude. In this work, high-precision calculations have shown that the resonant passage of matter occurs not at one specific distance between single barriers, but a sequence of distances between monoatomic layers.

Certain conditions for the occurrence of resonance correspond to a specific energy value. The data on the membrane permeability presented in the work were obtained by studying the entire energy range to select the maximum value of the degree of the isotope mixture separation.

Discussion

The paper shows the effect of the resonant passage of particles through two-layer barriers. It provides high degrees of separation of isotope mixtures. This process will help to create an efficient membrane isotope separation procedure for industrial use.

A method is proposed for obtaining the probability of particles passing through the barrier from the solution of the Schrödinger integral equation. The use of Hermite polynomials allows getting an almost exact solution which is highly important when we deal with the quantum tunneling in monolayered monoatomic membranes.

The conditions are found that correspond to the highest degree of separation of helium isotopes using a two-layer carbon nitride membrane $g - C_3N_4$. The difference in the passage of helium isotopes across the membrane turned out to be much greater than in works using porous one-layered graphene-like polyphenylene, carbon nitride

REFERENCES

14

membranes $C_2N - h2D$ and $g - C_3N_4$ (3–5, 28, 42, 62), where it reaches the value of 20. This is explained by taking into account the resonance effect. Moreover, it was confirmed that the interlayer spacing of 4.6 nm provides the highest selectivity with respect to 3He both for the graphitic carbon nitride and nanoporous graphene (34).

Conclusion

In processes of wave separation of particles that are close in physical properties and differ only in mass, selectivity of mixture separation can be increased only due to resonant passage of individual components. This means that the mixture of isotopes must pass through two (or more) monoatomic layers.

An analysis of the available solutions of problems related to the passage of De Broglie waves through given potential barriers shows that all the suggested solutions are connected with the use of numerical procedures implemented on a finite interval of variation of the independent variable. However, taking into account resonance effects requires a more accurate description of the solution behaviour. It is achieved by the presented model since almost all improper integrals in the proposed procedure for constructing the solution are calculated analytically.

The conditions which determine the maximum separation degree of the components were found for the considered problem of separating helium isotopes using a carbon nitride membrane.

Thus, the use of Hermite polynomials greatly simplifies the problem of solving the Schrödinger integral equation and allows for finding a solution that is more accurate compared to other known methods.

References

1. M. Shimada, B. Merrill, *Nuclear Materials and Energy* **12**, 699–702 (2017).
2. A. Cedillo, *Journal of Chemical Education* **77**, 528–531 (2000).
3. A. W. Hauser, P. Schwerdtfeger, *The Journal of Physical Chemistry Letters* **3**, 209–213 (2012).
4. A. W. Hauser, J. Schrier, P. Schwerdtfeger, *The Journal of Physical Chemistry C* **116**, 10819–10827 (2012).
5. J. Schrier, J. McClain, *Chemical Physics Letters* **521**, 118–124 (2012).
6. Y. Jiao, A. Du, M. Hankel, S. C. Smith, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **15**, 4832–4843 (14 2013).
7. G. Zakrzewska, in *Encyclopedia of Membranes* (Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2016), pp. 1073–1075, ISBN: 978-3-662-44324-8.
8. F. Lei, *Acta Physico-Chimica Sinica* **32**, 800–801 (2016).
9. Y. Jiao, A. Du, M. Hankel, S. C. Smith, *Physical Chemistry Chemical Physics* **15**, 4832–4843 (14 2013). <https://mc04.manuscriptcentral.com/vastansn>

REFERENCES

15

10. J. Schrier, *Journal of Physical Chemistry Letters* **1**, 2284–2287 (2010).
11. J. Perez-Carbajo, J. B. Parra, C. Ania, P. J. Merkling, S. Calero, *ACS Applied Materials & Interfaces* **11**, 18833–18840 (2019).
12. H. Tanaka, H. Kanoh, M. Yudasaka, S. Iijima, K. Kaneko, *Journal of the American Chemical Society* **127**, PMID: 15898801, 7511–7516 (2005).
13. N. Tyagi, C. Patel, R. Yogi, N. K. Jaiswal, *Diamond and Related Materials* **108**, 107911 (2020).
14. Y. Wang, Q. Yang, C. Zhong, J. Li, *Applied Surface Science* **407**, 532–539 (2017).
15. V. Poteryaeva, M. Bubenchikov, *Russian Physics Journal* **65**, 74–78 (2021).
16. X. Gao, H. Liu, D. Wang, J. Zhang, *Chemical Society Reviews* **48**, 908–936 (3 2019).
17. G. Dong, Y. Zhang, Q. Pan, J. Qiu, *Journal of Photochemistry and Photobiology C: Photochemistry Reviews* **20**, 33–50 (2014).
18. Y. Zheng, J. Liu, J. Liang, M. Jaroniec, S. Z. Qiao, *Energy Environ. Sci.* **5**, 6717–6731 (5 2012).
19. F. Li, Y. Qu, M. Zhao, *Carbon* **95**, 51–57 (2015).
20. J. Xiong, J. Di, W. Zhu, H. Li, *Journal of Energy Chemistry* **40**, 99–111 (2020).
21. A. Bafekry, S. F. Shayesteh, F. M. Peeters, *Journal of Applied Physics* **126**, 215104 (2019).
22. A. Thomas *et al.*, *J. Mater. Chem.* **18**, 4893–4908 (41 2008).
23. M. Makaremi, S. Gixti, K. T. Butler, G. A. Ozin, C. V. Singh, *ACS Applied Materials & Interfaces* **10**, 11143–11151 (2018).
24. B. Ma *et al.*, *Journal of the American Chemical Society* **142**, 6188–6195 (2020).
25. S. Wang *et al.*, *ACS Sustainable Chemistry & Engineering* **8**, 8214–8222 (2020).
26. L. Wang *et al.*, *ACS Sustainable Chemistry & Engineering* **8**, 16048–16085 (2020).
27. P. Kowalczyk, P. A. Gauden, A. P. Terzyk, *The Journal of Physical Chemistry B* **112**, 8275–8284 (2008).
28. Q. Yuanyuan, L. Feng, Z. Hongcai, Z. Mingwen, *Scientific Reports* **6**, 19952 (2016).
29. *Applied Surface Science* **506**, 144675 (2020).
30. Q. Yuanyuan, L. Feng, Z. Mingwen, *Scientific Reports* **7**, 1483 (2017).
31. M. Jia, X.-F. Zhang, J. Yao, *Industrial & Engineering Chemistry Research* **60**, 9189–9195 (2021).
32. M. Bieri *et al.*, *Chemical Communications*, 6919–6921 (45 2009).
33. Y. Li, Z. Zhou, P. Shen, Z. Chen, *Chem. Commun.* **46**, 3672–3674 (21 2010).
34. S. Mandrà, J. Schrier, M. Ceotto, *The Journal of Physical Chemistry A* **118**, 6457–6465 (2014).
35. J. Peter, K.-V. Peinemann, *Journal of Membrane Science* **340**, 62–72 (2009).
<https://mc04.manuscriptcentral.com/vastansn>

REFERENCES

16

36. P. Wang *et al.*, *Computational Materials Science* **140**, 284–289 (2017).
37. P. H. Presumido, A. Primo, V. J. Vilar, H. Garcia, *Chemical Engineering Journal*, 127510 (2020).
38. J. Azamat, *The Journal of Physical Chemistry C* **120**, 23883–23891 (2016).
39. A. V. A. Kumar, H. Jobic, S. K. Bhatia, *The Journal of Physical Chemistry B* **110**, 16666–16671 (2006).
40. A. V. A. Kumar, H. Jobic, S. K. Bhatia, *Physical Review Letters* **95**, 245901 (2005).
41. S. R. Challa, D. S. Sholl, J. K. Johnson, *Physical Review B* **63**, 245419 (June 2001).
42. A. Gijón, J. Campos-Martínez, M. I. Hernández, *The Journal of Physical Chemistry C* **121**, 19751–19757 (2017).
43. M. Wong, in *Weyl Transforms* (Springer New York, New York, NY, 1998), pp. 87–91, ISBN: 978-0-387-22778-8.
44. M. Gulsu, Y. Hatice, *Applications and Applied Mathematics: An International Journal* **6**, 116–129 (2011).
45. C. Baishya, *International Journal of Mathematical, Engineering and Management Sciences* **4**, 182–190 (2019).
46. G. Dattoli, *Integral Transforms and Special Functions* **15**, 93–99 (2004).
47. A. Secer, N. Ozdemir, M. Bayram, *Mathematics* **6**(12) (2018).
48. J. Perote, E. Brió, *International Advances in Economic Research* **12**, 425–425 (Aug. 2006).
49. J. Perote, E. Brió, *SSRN Electronic Journal* (2002).
50. T.-M. Niguez, I. Paya, D. Peel, J. Perote, *Economics Working Paper Series*, 57981 (2013).
51. M. Liu, L. Peng, G. Huang, Q. Yang, Y. Jiang, *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics* **196**, 104041 (2020).
52. X.-Y. Zhang, Y.-G. Zhao, Z.-H. Lu, *Marine Structures* **65**, 362–375 (2019).
53. S. R. Winterstein, *Journal of Engineering Mechanics* **114** (1988).
54. N. Akgönüllü, N. Şahin, M. Sezer, *Numerical Methods for Partial Differential Equations* **27**, 1707–1721 (2011).
55. Y. Qu, F. Li, M. Zhao, *Scientific Reports* **7**, 1483 (1 2017).
56. V. A. Poteryaeva, M. A. Bubenchikov, A. Lun-Fu, *AIP Conference Proceedings* **2212**, 020048 (2020).
57. A. M. Bubenchikov, M. A. Bubenchikov, V. A. Poteryaeva, E. E. Libin, *Vestn. Tomsk. Gos. Univ. Mat. Mekh.* **3**, 51–57 (2016).
58. P. Morse, H. Feshbach, *Methods of Theoretical Physics* (McGraw-Hill, 1953).
59. I. S. Gradshteyn, I. M. Ryzhik, *Tables of Integrals, Series And Products* (Moscow, 1963).
<https://mc04.manuscriptcentral.com/vastansn>

1
2
3
4
5
6
7
8
9
10
11
12
13
14
15
16
17
18
19
20
21
22
23
24
25
26
27
28
29
30
31
32
33
34
35
36
37
38
39
40
41
42
43
44
45
46
47
48
49
50
51
52
53
54
55
56
57
58
59
60

REFERENCES

17

60. A. M. Bubenchikov, M. A. Bubenchikov, A. I. Potekhaev, E. E. Libin, Y. P. Khudobina, *Russian Physics Journal* **58**, 10–15 (2015).
61. B. Nikolsky, *chemist's handbook* (Chemistry, 1966), ISBN: 9785458288859.
62. F. Li, Y. Qu, M. Zhao, *Carbon* **95**, 51–57 (2015).

Supporting information

Brief information from the theory of polynomials and Hermite functions.

Acknowledgements

This work was supported by the Ministry of Science and Higher Education of Russia (agreement No. 075-02-2020-1479/1).

Supporting Information for:

Helium isotope separation by bi-layer membranes of $g - C_3N_4$

Valentina A. Poteryaeva^{1,*}, Alexey M. Bubenchikov^{1,2}, Michael A. Bubenchikov^{1,3},
Alexandr V. Lun-Fu³, and Soninbayar Jambaa⁴

¹National Research Tomsk State University, Department of Mechanics and Mathematics, Tomsk, 634050, Russia

²National Research Tomsk State University, Regional Scientific and Educational Mathematical Center, Tomsk, 634050, Russia

³Gazprom Transgaz Tomsk, Tomsk, 634029, Russia

⁴Mongolian University of Science and Technology, National University of Mongolia, Ulan Bator, 14191, Mongolia

*valentina.poteryaeva@gmail.com

Brief information from the theory of polynomials and Hermite functions

Hermite polynomials $He_n(x)$ were introduced as early as 1864. At present, information concerning them is published in classical monographs and mathematical reference books¹⁻³. The polynomial $He_n(x)$ is a polynomial of the degree n in x with integer coefficients which contains only terms of the same parity as x^n . The explicit expressions for the first Hermite polynomials are:

$$He_0 = 1; He_1(x) = x; He_2(x) = x^2 - 1; He_3(x) = x^3 - 3x; He_4(x) = x^4 - 6x^2 + 3; He_5(x) = x^5 - 10x^3 + 15x; \quad (1)$$

For the generating function we get:

$$He_n(x) = (-1)^n e^{x^2/2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2/2}. \quad (2)$$

Hermite polynomials can also be written in the form of the determinant⁴:

$$He_n(x) = \begin{vmatrix} x & n-1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & x & n-2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & x & n-3 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & x & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & x \end{vmatrix} \quad (3)$$

Moreover, formula (3) is most suitable for practical calculations of coefficients of high order Hermite polynomials. In problems of mathematical physics, they apply Hermite functions $D_n(x)$ which are connected with Hermite polynomials and are given by the expression:

$$D_n(x) = \frac{e^{x^2/4} He_n(x)}{\sqrt{n!} \sqrt{2\pi}}. \quad (4)$$

These functions are easily calculated and form a complete orthogonal and normalized system on the entire real axis⁵:

$$\int_{-\infty}^{\infty} D_n(x) D_m(x) dx = \begin{cases} 0, & n \neq m \\ 1, & n = m \end{cases} \quad (5)$$

This distinctive feature of Hermite functions allows for determining the expansion coefficients of arbitrary functions in a series with respect to Hermite functions reducing them to calculations of the integrals:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n D_n(x); C_n = \int_{-\infty}^{\infty} f(\mu) D_n(\mu) d\mu. \quad (6)$$

Figure 1 shows Hermite functions of a higher order.

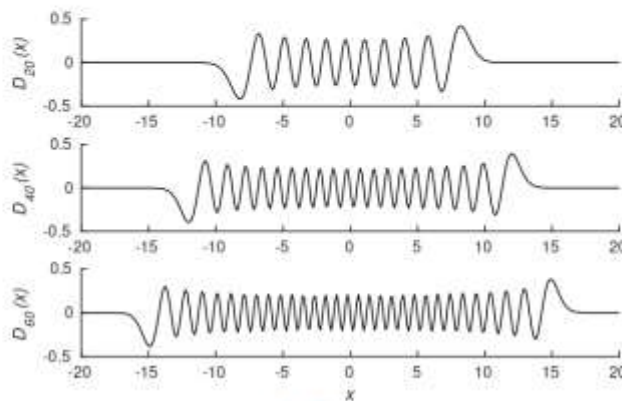


Figure 1. Graphs of functions $D_{20}(x)$, $D_{40}(x)$ and $D_{60}(x)$

Considering such graphs of the functions $D_n(x)$ it is rather difficult to imagine that these functions form an orthonormal system on the entire material axis. Nevertheless, a numerical verification shows the correctness of the above statement.

Note. The formulas given above are taken from the book by Kampe de Fériet⁴ and they correspond to the so-called mathematical or probability Hermite polynomials. However, it should be taken into account that in many works given in⁶⁻⁹ other polynomials $H_n(x)$ used as Hermite polynomials. Both of these Hermite polynomial systems are related by the relation: $H_n(x) = \sqrt{2^n} H_n(x\sqrt{2})$.

References

1. Magnus, W., Oberhettinger, F. & Soni, R. P. *Formulas and Theorems for the Special Functions of Mathematical Physics*, ch. 5 (Springer, 1966).
2. Slater, L. J. *Confluent Hypergeometric Functions*. Proceedings of the Edinburgh Mathematical Society (Cambridge University Press, 1961).
3. Abramowitz, M. & Stegun, I. A. *Orthogonal Polynomials*. No. Ch. 2 in Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables (New York: Dover, 1972).
4. Kampe de Fériet, J. *Fonctions de la physique mathématique* (Paris, Centre National de la Recherche Scientifique, 1957).
5. Szegő, G. *Orthogonal Polynomials*. American Math. Soc: Colloquium publ (American Mathematical Society, 1975).
6. Gradshteyn, I. S. & Ryzhik, I. M. *Tables of Integrals, Series And Products* (Moscow, 1963).
7. Bateman, H. *Higher Transcendental Functions* (McGraw-Hill, 1953).
8. Jahnke, E. & Emde, F. *Tables of Functions with Formulae and Curves* (New York, Dover Publications, 1945).
9. Arfken, G. *Hermite Functions*. Mathematical Methods for Physicists (Academic Press, 1985).

С 10 по 15 декабря 2019 г. Региональный научно-образовательный математический центр (НОМЦ) Томского государственного университета совместно с Лабораторией топологии и динамики Новосибирского государственного университета организует в Томском государственном университете Всероссийскую научную конференцию «Декабрьские чтения в Томске». Сайт конференции: www.dr.rmc.math.tsu.ru.

Мы рады пригласить Вас принять участие в нашей конференции.

С уважением, старший научный сотрудник
Регионального научно-образовательного математического центра
Томского государственного университета
Козловская Татьяна Анатольевна
Всероссийская научная конференция с международным участием «Декабрьские чтения в Томске»

Предварительная программа

Программный комитет конференции

А.Ю. Веснин (Региональный научно-образовательный математический центр ТГУ)
М.А. Гузев (Институт прикладной математики ДВО РАН)
И.А. Дынников (Математический институт им. В.А. Стеклова РАН)
А.Е. Миронов (Институт математики им. С.Л. Соболева СО РАН)
А.В. Старченко (Томский государственный университет)
И.А. Тайманов (Институт математики им. С.Л. Соболева СО РАН)

Организационный комитет конференции

Т.А. Козловская (Региональный научно-образовательный математический центр ТГУ)
Л.В. Гензе (Томский государственный университет)
А.А. Барт (Томский государственный университет)
А.С. Челнокова (Томский государственный университет)

В программу конференции включены доклады, принятые программным комитетом для участия во всероссийской научной конференции с международным участием «Декабрьские чтения в Томске».

Конференция организована за счет средств государственного задания Министерства образования и науки РФ (проект № 1.12877.2018/12.1).

Web-сайт: <http://dr.rmc.math.tsu.ru/>

E-mail: dr.rmc.tsu@gmail.com

Телефон: +7 952 892 50 78

ХАВСРАЛТ 7

11 декабря среда		12 декабря четверг		13 декабря пятница		14 декабря суббота	
<i>Конференц зал, Научная библиотека ТГУ</i>		<i>Конференц зал, Главный корпус ТГУ (ауд. 229)</i>		<i>Конференц зал, Главный корпус ТГУ (ауд. 229)</i>			
9:30–10:00	регистрация участников (кофе-брейк)	9:30–10:20	А.А. Гайфуллин	Т.Е. Панов			
10:00–10:10	открытие конференции	10:20–10:40	кофе-брейк				экскурсия 10:00-12:00 «В гости к Хаски»
10:10–11:00	С.К. Нечаев	10:40–11:30	И.А. Дынников	С.П. Царев		обед	
11:05–11:55	А.Ю. Пальянов	11:40–12:30	А.В. Малютин	А.А. Глазунов		12.00-14:30	
12:00–12:50	А.П. Чупахин			экскурсия		экскурсия	
12:50–13:20	экскурсия музей Редкой книги (НБ ТГУ, каб. 8)	12:40–13:20	Палеонтологический музей (ГК ТГУ, ауд. 234)	Зоологический музей (ГК ТГУ, ауд. 125)		15:00-16:00 Ботанический сад ТГУ	
13:20–14:30	обед	13:20–14:30	обед				
14:30–15:20	В.М. Садовский	14:30–15:20	В.Г. Бардаков	С.Б. Тихомиров			
15:30–16:20	А.А. Шаратов	15:30–16:20	Е.А. Фоминых	И.В. Мирошниченко			
16:20–16:40	кофе-брейк	16:20–16:40	кофе-брейк				
16:40–17:30	Д.С. Капарулин	16:40–17:30	Д.В. Миллионщиков	16:40–17:10 С.В. Аганов 17:10–17:40 Н.Е. Русских			
18:00			банкет				

© Томский государственный университет, 2019

© Авторы статей, 2019



Маршрутная квитанция электронного билета

Идентификатор квитанции	31386692
Агент	Сайт e-traffic.ru, ООО "Артмарк (ИНН: 2221122730)
Дата покупки	26.11.2019 10:34
Номер билета	НС013587553012
Тип билета	Пассажирский
Вид транспортного средства	автобус Мягкий, мест: 11

Информация о пассажире и тарифе

Пассажир	Паспорт (С/Н)	Тариф руб.	Стр. сбор руб.	Комиссия руб.	ИТОГО руб.
JAMBAA SONINBAYAR S	/E1831755	770.00	0.00	46.20	816.20

Информация о рейсе

Рейс	Номер	Платформа	Место	Перевозчик
Толмачево АП — Томск, Межобластное			1	Движение 2000 ООО ТФ

Пункт отправления [отправление]	Дата отправления	Станция назначения [прибытие]	Дата прибытия
Толмачево АП (Терминал А)	11.12.2019 22:50	Томск	12.12.2019 04:05

Информация о платеже

Оплачено	816.20
Форма оплаты	электронный платёж
Итого сумма платежа (руб)	816.20

Время отправления и прибытия указано местное. Для провоза багажа необходимо приобрести дополнительный багажный билет.

Посадка производится строго на станции отправления. При себе необходимо иметь распечатки маршрутных квитанций и оригиналы документов, удостоверяющих личность пассажиров, указанные в квитанциях.

Возврат билетов, купленных на сайте www.e-traffic.ru, производится в личном кабинете сайта по правилам возврата.

Возврат билетов, купленных через агентов, производится у агента-продавца и прекращается за 15 минут до отправления автобуса. При себе необходимо иметь распечатанную маршрутную квитанцию и оригинал документа, удостоверяющего личность, указанного в квитанции.

Условия договора:

Перевозка и другие предоставляемые перевозчиком услуги подпадают под все условия договора перевозки, правилам перевозки и правилам применения выбранного вами тарифа, являющихся неотъемлемой частью этого договора. Условия вашего договора перевозки включены в настоящий билет, посредством ссылки на таковые. С условиями договора перевозки (правилами перевозки, правилами применения тарифа) можно ознакомиться в офисе продаж автовокзала или на сайте автовокзала nsk-avtovozkaz.ru.

Договор перевозки считается заключенным и вступившим в силу с момента покупки Вами билета. Покупкой билета является оплата вами билета и предоставление вам настоящего ваучера, подтверждающего, помимо прочего, факт покупки вами указанного в ваучере билета, на указанный в ваучере рейс.

Благодарим Вас за пользование услугой электронного бронирования билета! Спасибо, что выбрали наш автовокзал!

Телефон для справок: 8 (383) 223-2500.

ПОТОКИ ТЯЖЕЛОЙ НЕСЖИМАЕМОЙ ЖИДКОСТИ ЖАМБАА СОНИНБАЯР

В качестве практического приложения можно рассматривать течения воды, например, в реке текущей по камням и перекатам. Мы, конечно, не имеем возможности решить такую задачу точно, так как это трудная математическая проблема о струйном течении под влиянием силы тяжести. Изложение многих интересных способов решения можно найти в книгах [1], [2].

Чтобы найти приближенное решение мы, как обычно, применяем постулаты линейной теории волн [1], согласно которым граничное условие на верхней (свободной) границе имеет вид:

$$\left. \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{g}{C^2} \frac{\partial \Phi}{\partial y} \right|_{y=h} = 0. \quad (1)$$

1. Рассмотрим сначала простейший случай, когда поток движется по ровному дну, и поставим вопрос о том, какого вида решения возможны при граничном условии (1) на свободной поверхности.

Тогда краевая задача для определения потенциала скорости имеет следующий вид:

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} = 0, \quad \left. \frac{\partial \Phi}{\partial y} \right|_{y=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{g}{C^2} \frac{\partial \Phi}{\partial y} \right|_{y=h} = 0. \quad (2)$$

Решение задачи (2) можно записать в символическом виде:

$$\Phi(x, y) = \frac{\cos\left(y \frac{\partial}{\partial x}\right)}{\cos\left(h \frac{\partial}{\partial x}\right)} \cdot f(x), \quad \frac{\partial \Phi}{\partial x} = \frac{\cos\left(y \frac{\partial}{\partial x}\right)}{\cos\left(h \frac{\partial}{\partial x}\right)} \cdot f'(x), \quad \frac{\partial \Phi}{\partial y} = \frac{-\sin\left(y \frac{\partial}{\partial x}\right)}{\cos\left(h \frac{\partial}{\partial x}\right)} \cdot f'(x). \quad (3)$$

Действительно, из формул (3) видно, что потенциал $\Phi(x, y)$ удовлетворяет уравнению Лапласа и условию не протекания на дне потока. Причем, это справедливо для функции $f(x)$ любого вида. Неизвестную функцию $f(x)$, входящую в решение (3), можно найти, подставив решение (3) в граничное условие (1). Тогда получим следующее операторное уравнение, определяющее эту функцию:

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - \frac{g}{C^2} \frac{d}{dx} \cdot \operatorname{tg}\left(h \frac{d}{dx}\right) \right] \cdot f(x) = 0. \quad (4)$$

Уравнение (4) можно рассматривать как обыкновенное дифференциальное уравнение бесконечного порядка с постоянными коэффициентами. Оно имеет счетное множество собственных решений в виде показательных функций $f(x) = e^{\lambda x}$, где λ — один из корней трансцендентного уравнения:

$$\lambda^2 - \frac{g}{C^2} \lambda \operatorname{tg}(\lambda h) = 0. \quad (5)$$

Уравнение (5) имеет бесконечное множество вещественных корней, в том числе и двойной нулевой корень $\lambda^2 = 0$, которому соответствует линейное решение $f(x) = a + bx$. Такие решения, имеющие вид линейных или показательных функций, не подходят, с физической точки зрения, поскольку они дают неустойчивую свободную границу, сильно отклоняющуюся от положения равновесия, и линеаризованная теория волн здесь не дает правильного результата.

Но частотное уравнение (5) имеет еще и пару чисто мнимых корней $\lambda = \pm ik$; им соответствует дифференциальное уравнение $f'' + k^2 f = 0$, дающее ограниченное решение

для функции $f(x)$. Таким образом, для того, чтобы получать только устойчивые решения граничной задачи (3), нужно в уравнении (5) исключать все вещественные корни. Это эквивалентно тому, что граничное условие (1) на свободной поверхности заменяется следующим, более простым, условием:

$$\left. \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + k^2 \Phi \right|_{y=h} = 0. \quad (6)$$

Подставляя в (5) значение $\lambda = ik$, получим связь между величиной параметра k и скоростью потока C :

$$C^2 = gh \frac{th(kh)}{kh} < gh. \quad (7)$$

Практически, в дисперсионном уравнении (7) удобнее задавать именно величину параметра k , а скорость течения C находить из равенства (7).

Поскольку \sqrt{gh} — это скорость распространения бегущей волны в стоячей воде в канале глубины h , то это соответствует ‘дозвуковому’ случаю, которым мы вынуждены ограничиться, применяя линейную теорию волн.

В ‘сверхзвуковом’ случае, когда $C \geq \sqrt{gh}$ волнообразный профиль свободной границы невозможен. Там может существовать либо гладкий горизонтальный поток, который, очевидно, неустойчив, либо происходит резкое разрушение свободной поверхности, сопровождаемое образованием брызг, гидравлических прыжков и переходом в турбулентное течение. Все эти явления не поддаются изучению в рамках линейной теории.

Ясно, что граничное условие (6) на свободной поверхности должно применяться также и для потока текущего по неровному дну.

2. Для потока, текущего по неровному дну, кроме граничных условий (1) или (6), следует еще выполнить условие не протекания на дне $\Phi_n = 0$ и условие равномерности потока на далеком расстоянии, при $x \rightarrow -\infty$. Чтобы выполнить условие не протекания на дне, нужно произвести конформное отображение выпрямляющее это дно. Таким образом, задачу нужно одновременно решать в двух областях: в физической полосе $Z = x + iy$, и в параметрической полосе $\Omega = \xi + i\eta$, имеющей постоянную ширину h . При этом предполагается, что все точки свободной границы переходят в горизонтальную линию $\eta = h$, а все точки, лежащие на криволинейном дне области Z , переходят в горизонтальную линию $\eta = 0$. Очевидно, что при отсутствии выступов на дне, обе области Z и Ω совпадают.

Практически, нужное конформное отображение области Z на область Ω всегда можно выполнить с помощью формулы Шварца-Кристоффеля

$$\frac{dZ}{d\Omega} = \prod_n (\Omega - a_n)^{\alpha_n}. \quad (8)$$

В нем прообразы вершин многоугольника a_n можно эффективно находить с помощью метода Куфарева. Пусть, например, поток движется над прямоугольным выступом на дне. Тогда отображение на верхнюю полуплоскость осуществляется формулой:

$$\frac{dZ}{d\Omega} = \frac{dx}{d\xi} + i \frac{dy}{d\xi} = \sqrt{\frac{(\xi + ih)^2 - b^2}{(\xi + ih)^2 - a^2}}, \quad b=6, \quad a=6.683. \quad (9)$$

Результат такого расчета на уровне $\eta = h = 1$, показан на рисунке 1.

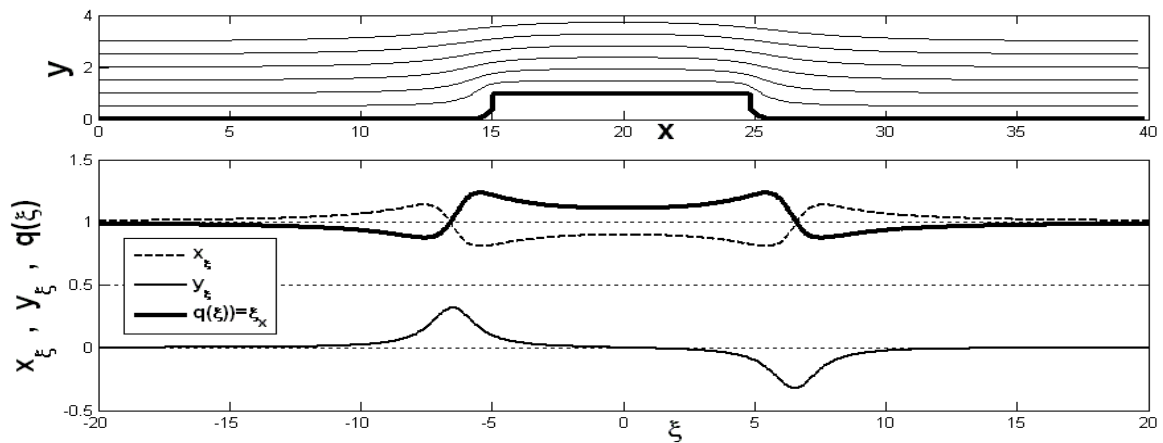


Рисунок.1. Пример расчета конформного отображения дна с прямоугольным выступом на верхнюю полуплоскость по формуле (9).

В верхней половине рисунка (9) показаны линии тока при обтекании прямоугольного выступа, а в нижней половине показаны графики величин: $dx/d\xi$, $dy/d\xi$ и $q(\xi)=d\xi/dx$, которые рассматриваются как функции переменной ξ на уровне $\eta=h$.

Во время решения граничной задачи для потенциала скорости Φ , нужно также принимать во внимание следующие соотношения:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial x} = q \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \quad \text{и} \quad \frac{\partial \Phi}{\partial y} = q \frac{\partial \Phi}{\partial \eta}, \quad \text{где} \quad q = \frac{\partial \xi}{\partial x}, \quad \text{при} \quad \eta=h. \quad (10)$$

Они позволяют выражать производные по переменным x и y от некоторой функции через производные от нее по переменным ξ и η .

Множитель $q(\xi) = d\xi/dx$, получающийся в процессе конформного отображения, можно рассматривать либо как функцию переменной x , либо как функцию переменной ξ , в зависимости от того, какая из этих величин используется в качестве аргумента. Из рисунка (1) видно, как выглядит график функции $q(\xi)$ для случая дна, имеющего форму прямоугольного выступа.

3. Для нахождения потенциала скорости $\Phi(\xi, \eta)$ в полосе Ω представим его в виде суммы двух потенциалов:

$$\Phi(\xi, \eta) = \Phi_0(\xi, \eta) + \varphi(\xi, \eta). \quad (11)$$

Первый из них является известной функцией, удовлетворяющей условию не протекания на дне ($\eta=0$) и на свободной границе ($\eta=h$), а второй $\varphi(\xi, \eta)$ — неизвестен, и он описывает отклонение свободной границы от невозмущенного уровня. Первый потенциал, очевидно, равен $\Phi_0(\xi, \eta) = C \cdot \xi$. Он описывает однородное течение потока со скоростью C . Вторым потенциалом $\varphi(\xi, \eta)$ записываем, по аналогии с формулами (3), в символическом виде:

$$\varphi(\xi, \eta) = \frac{\cos\left(\eta \frac{\partial}{\partial \xi}\right)}{\cos\left(h \frac{\partial}{\partial \xi}\right)} \cdot f(\xi). \quad (12)$$

Потенциал скорости (11) для потока над неровным дном в полосе $\Omega = \xi + i\eta$ имеет, таким образом, следующий вид:

$$\Phi(\xi, \eta) = C\xi + \frac{\cos\left(\eta \frac{d}{d\xi}\right)}{\cos\left(h \frac{d}{d\xi}\right)} \cdot f(\xi) . \quad (13)$$

Решение (13) удовлетворяет уравнению Лапласа и условию не протекания на дне. Для окончательного решения задачи теперь остается лишь найти вид функции $f(\xi)$, который должен определяться из граничного условия на свободной поверхности.

Используя для слагаемого $C\xi$ граничное условие в форме (1), а для второго члена формулы (13) граничное условие в форме (6), получим, что функция $f(\xi)$ должна удовлетворять неоднородному дифференциальному уравнению:

$$q \frac{d}{d\xi} \left(q \frac{df}{d\xi} \right) + k^2 f = - Cq \frac{dq}{d\xi} . \quad (14)$$

Проще, однако, искать функцию $f(\xi)$ в терминах переменной x , пользуясь тем, что дифференциальные операторы d/dx и $d/d\xi$ связаны соотношением: $d/dx = q d/d\xi$. Тогда, для функции $f(x)$, дифференциальное уравнение (14) преобразуется к более простому виду:

$$\frac{d^2 f}{dx^2} + k^2 f = - C \frac{dq}{dx} . \quad (15)$$

Решение неоднородного уравнения (15) записывается в виде интеграла:

$$f(x) = -\frac{C}{k} \int_{-\infty}^x \sin k(\tau - x) q'(\tau) d\tau = -\frac{C}{k} \int_{-\infty}^{\xi} \sin k(\tau - \xi) q'(\tau) d\tau . \quad (16)$$

Следовательно, функция f может быть получена как функция от аргумента x , или от аргумента ξ , с помощью одной и той же формулы (16).

Так как функция $f(\xi)$ считается известной из формулы (16), то решение (13) для потенциала $\Phi(\xi, \eta)$ является конечным результатом, записанным в символической форме.

Символическая запись решения (13) является удобной для проведения аналитических выкладок, но для вычислений мы должны найти интегральный аналог соответствующего дифференциального оператора. Это можно сделать, если использовать известные свойства дельта функции Дирака

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{itx} dt, \quad f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\lambda) \delta(x - \lambda) d\lambda .$$

Тогда получается следующее его интегральное представление:

$$\varphi(\xi, \eta) = \frac{\cos\left(\eta \frac{\partial}{\partial \xi}\right)}{\cos\left(h \frac{\partial}{\partial \xi}\right)} \cdot f(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\lambda) \left[\frac{1}{h} \frac{\operatorname{ch}\left(\frac{\pi(\xi - \lambda)}{2h}\right) \cdot \cos\left(\frac{\pi\eta}{2h}\right)}{\operatorname{ch}\left(\frac{\pi(\xi - \lambda)}{2h}\right) + \cos\left(\frac{\pi\eta}{2h}\right)} \right] d\lambda, \quad \eta < h . \quad (17)$$

Обычно вместе с потенциалом скорости $\varphi(\xi, \eta)$ ищут также и связанную с ним функцию тока $\psi(\xi, \eta)$. Она получается из соотношения Коши-Римана:

$$\frac{\partial \psi}{\partial \xi} = -\frac{\partial \varphi}{\partial \eta} = \frac{\sin\left(\eta \frac{d}{d\xi}\right)}{\cos\left(h \frac{d}{d\xi}\right)} \frac{df}{d\xi}, \quad \text{т.е.} \quad \psi = \frac{\sin\left(\eta \frac{d}{d\xi}\right)}{\cos\left(h \frac{d}{d\xi}\right)} \cdot f(\xi) . \quad (18)$$

Таким образом, полные выражения для функции тока и потенциала скорости (13) в полосе Ω приобретают следующий удобный для вычисления интегральный вид:

$$\Psi(\xi, \eta) = C\eta + \int_{-\infty}^{\infty} f(\lambda) \left[\frac{1}{h} \frac{\operatorname{sh}\left(\frac{\pi(\xi - \lambda)}{2h}\right) \cdot \sin\left(\frac{\pi\eta}{2h}\right)}{\operatorname{ch}\left(\frac{\pi(\xi - \lambda)}{2h}\right) + \cos\left(\frac{\pi\eta}{2h}\right)} \right] d\lambda. \quad (19)$$

$$\Phi(\xi, \eta) = C\xi + \int_{-\infty}^{\infty} f(\lambda) \left[\frac{1}{h} \frac{\operatorname{ch}\left(\frac{\pi(\xi - \lambda)}{2h}\right) \cdot \cos\left(\frac{\pi\eta}{2h}\right)}{\operatorname{ch}\left(\frac{\pi(\xi - \lambda)}{2h}\right) + \cos\left(\frac{\pi\eta}{2h}\right)} \right] d\lambda. \quad (20)$$

4. Численные результаты расчета линий тока, полученные с применением формулы (19) показаны на приведенных ниже рисунках.

Характер линий тока при обтекании дна с эллиптическим выступом, показан на рисунках 2 и 3. В этом случае конформное отображение можно осуществлять без применения формулы Кристоффеля-Шварца (8).

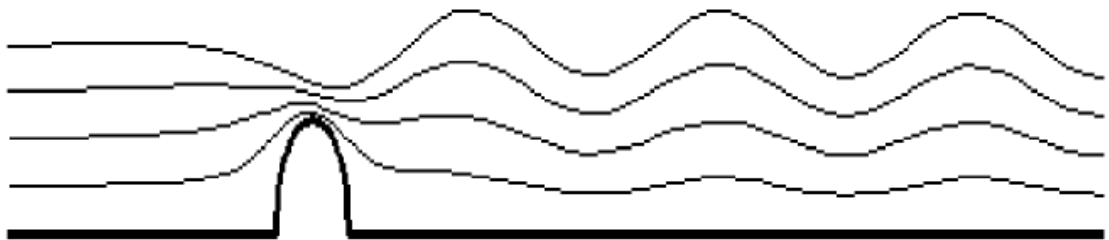


Рисунок.2. Обтекание эллиптического выступа со скоростью $C=0.564\sqrt{gh}$.

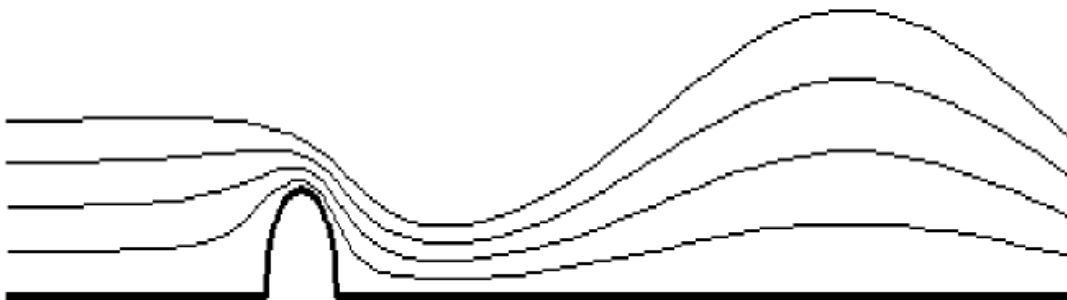


Рисунок.3. Обтекание эллиптического выступа со скоростью $C=0.879\sqrt{gh}$.

Из этих изображений видно, что общее свойство течения таково, что перед препятствием линии тока практически не возмущаются неровностями дна, а за препятствием они имеют волнообразный вид.

Волнообразование вниз по течению в большой степени зависит от скорости течения. Длина волны за препятствием и ее амплитуда возрастают с увеличением скорости. С приближением скорости к своему 'дозвуковому' пределу, рисунок 3, мы получаем картину похожую на гидравлический прыжок, или, по крайней мере, на то, как его развитие описывает приближенная линейная теория. Известно, что в гидравлике, в теории водосливов, рассматриваются гидравлические прыжки, которые образуются, если взять $C \geq \sqrt{gh}$, подобно тому, как в газовой динамике образуются ударные волны при сверхзвуковом течении. Таким образом, линейная теория подтверждает этот факт.

На рисунке 4 показан результат расчета течения над пологой плотиной, где также наблюдается начало образования гидравлического прыжка.



Рисунок.4. Поток над пологой плотиной $C=0.96\sqrt{gh}$.

На рисунках 5 и 6 показано образование волн за препятствием в виде полигональных выступов, для умеренной скорости течения. Здесь уже нельзя обойтись без формулы Кристоффеля-Шварца и без применения метода Куфарева для определения прообразов вершин.



Рисунок.5. Поток над четырехугольным дном $C=0.696\sqrt{gh}$.



Рисунок.6. Поток над двугорбой мелью $C=0.55\sqrt{gh}$.

В заключение еще раз хочется отметить полезность применения численного метода конформных отображений, так как без него произвести расчеты по формулам (19) и (20) для произвольной формы дна было бы невозможно.

Литература

1. Сретенский Л.Е. Теория волновых движений жидкости. М.: Наука, ФМ, —1977, 816 с.
2. Жуковский Н.Е. Определение движения жидкости при каком-нибудь условии, данном на линии тока. // статья в книге Собрание сочинений Том II, Гидродинамика. М.: НАУКА, ФМ, — 1949, – 760 с.

Conference Dynamics in Siberia

February 24 - 29, 2020

[Main](#) | [Participants](#) | [Program](#) | [Location](#) | [Photos](#) | [Registration](#)

[Dynamics in Siberia — 2015](#)
[Dynamics in Siberia — 2017](#)
[Dynamics in Siberia — 2019](#)
[Dynamics in Siberia — 2019](#)

Participants:

Aitmet'ev R. M. (Pushkov Institute of Terrestrial Magnetism, Ionosphere and Radio Wave Propagation of RAS, Moscow, Troitsk)

Alexeeva T. A. (Higher School of Economics, Saint Petersburg)

Bolotin S. V. (Steklov Mathematical Institute of RAS, Moscow)

Borisev A. V. (Institute of Computer Science, Izhevsk)

Chuvpilo A. A. (Kemerovo State University, Kemerovo)

Chupakhin A. A. (Lomonosov Institute of Hydrodynamics SB RAS, Novosibirsk)

Daurbeva N. A. (Kemerovo State University, Kemerovo)

Dobrotchov S. Yu. (Ioffe Institute for Problems in Mechanics of RAS, Moscow Institute of Physics and Technology, Moscow)

Dreynich V. I. (The University of Texas at Dallas, Richardson, TX)

Drozdov D. (Buryat State University, Ulan-Ude)

Dynnikov I. A. (Steklov Mathematical Institute, Moscow)

Florba C. (CNRS, Lyon, France)

Gajfulin A. A. (Siberian Institute of Science and Technology, Steklov Mathematical Institute of RAS, Moscow)

Glutayuk A. A. (Higher School of Economics, Moscow)

Grima V. Z. (Higher School of Economics, Nizhny Novgorod)

Grebenev V. N. (Institute of Computational Technologies SB RAS, Novosibirsk)

Gusev M. A. (Institute of Automation and Control Processes, Vladivostok)

Houkannou H. (University of Abomey-Calavi, Cotonou, Benin)

Javaher S. (School of Engineering & Applied Sciences National University of Mongolia, Ulaanbaatar, Mongolia)

Kabanikhin S. I. (Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics SB RAS)

Konstantinov-Ribas S. (IG. Dzerzhinsk State University, Yaroslavl)

Kordyukov Yu. A. (Institute of Mathematics, Ufa Scientific Center of RAS, Ufa)

Kozlov V. V. (Steklov Mathematical Institute of RAS, Moscow)

Kuznetsov N. V. (Saint Petersburg State University, Saint Petersburg)

Kuvshinov S. V. (Institute of Mathematics of RAS, Novosibirsk)

Marshall I. (Higher School of Economics, Moscow)



Wednesday, February 26 (Conference Hall of the Sobolev Institute of Mathematics)	
9:00-09:40	S. Bolotin. <i>Динамика быстро-медленных гамильтоновых систем около гомологического многообразия.</i>
09:45-10:25	M. Hounkonnou. <i>Geometry and probability on the noncommutative 2-torus in a magnetic field.</i>
Coffee break and poster session (30 minutes)	
10:55-11:35	O. Pochinka. <i>On paths connecting polar diffeomorphisms.</i>
11:40-12:20	A. Borisov. <i>Об одной неголономной системе, близкой к шару Чаплыгина.</i>
12:25-13:05	A. Tsiganov. <i>On rigid body dynamics in a magnetic field.</i>
Cultural program	

Poster Session:

1. T. Alexeeva. *Forecasting Limiting Dynamics in the Shapovalov Model of a Mid-Size Firm.*
2. D. Drozdov. *On the connected components of fractal cubes.*
3. J. Soninbayar. *Обтекание препятствий потоком тяжелой несжимаемой жидкости.*
4. A. Torsultanov. *О задаче Дирихле для эллиптического функционально-дифференциального уравнения с аффинным преобразованием аргумента.*
5. S. Zinina. *Dynamics of systems with a finite hyperbolic chain recurrent set on n-dimensional manifolds.*

ОБТЕКАНИЕ ПРЕПЯТСТВИЙ ПОТОКОМ ТЯЖЕЛОЙ НЕСЖИМАЕМОЙ ЖИДКОСТИ

ЖАМБАА СОНИНБАЯР

Department of Applied Mathematics, School of Engineering and Applied Sciences, National University of Mongolia, MONGOLIA

E-mail address: jsoninbayar@yahoo.com, soninbayar@seas.num.edu.mn

Численное конформное отображение, с применением метода Куфарева, позволяет получить линии тока при обтекании различного рода препятствий [3]. Этот же способ можно применить и к не менее интересному случаю, когда поток воды глубины h движется по неровному дну со скоростью C . Свободная поверхность жидкости в случае такого потока представляет собой неизвестную кривую линию, вид которой нужно найти при условии, что давление на ней постоянно. В качестве практического приложения можно рассматривать течения воды, например, в реке текущей по камням и перекатам. Мы, конечно, не имеем возможности решить такую задачу точно, так как это трудная математическая проблема о струйном течении под влиянием силы тяжести. Она до сих пор еще не решена, хотя было много попыток ее решить, в том числе и великими математиками, такими например как Стокс, Релей, Леви-Чивита, Струик, Некрасов, Жуковский [2], и др. Изложение многих интересных способов решения можно найти в книге Л.Н. Сретенского [2].

Математическая постановка задачи состоит в определении потенциала скорости $\Phi(x,y)$, который удовлетворяет уравнению Лапласа $\Phi_{xx} + \Phi_{yy} = 0$ в горизонтальной полосе, ограниченной нижним и верхним краями. Нижний край соответствует неровному дну потока, и на нем должно выполняться условие не протекания: $\Phi_n = 0$. На верхнем крае полосы течения должно выполняться условие постоянства давления, которое имеет более сложный вид. Чтобы найти приближенное решение мы, как обычно применяем постулаты линейной теории волн [1], согласно которым граничное условие на верхней (свободной) границе полосы имеет вид:

$$\left. \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{g}{C^2} \frac{\partial \Phi}{\partial y} \right|_{y=h} = 0. \quad (1)$$

Литература

3. Сретенский Л.Е. Теория волновых движений жидкости. М.: Наука, ФМ, —1977, 816 с.
4. Жуковский Н.Е. Определение движения жидкости при каком-нибудь условии, данном на линии тока. // статья в книге Собрание сочинений Том II, Гидродинамика. М.: НАУКА, ФМ, — 1949, – 760 с.
5. Жамбаа Сонинбаяр, Касаткина Т.В., Бубенчиков А.М. Об определении констант в интеграле Кристоффеля-Шварца по методу П.П. Куфарева, Вестник ТГУ, Математика и Механика, УДК 512.541, №5(43), - С.21-27, г.Томск, РФ, - 2016г.

<http://www.math.nsc.ru/conference/ds/2020/>

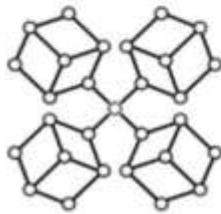
ХАВСРАЛТ 9

s — t — e — m — m Global

The Book of Abstracts

**3rd SmartNanomaterials: Advances, Innovations and
Applications Online Conference
8-11 December 2020**

*This book includes only the abstracts presented
at the Online SNAIA2020 Conference*



SNAIA

XABCPAJT 9

Hydrogen isotope separation via carbon nitride bi-layer membrane

Valentina A. Poteryaeva¹, Alexey M. Bubenchikov¹,
Michael A. Bubenchikov¹ and Soninbayar Jambaa²

¹National Research Tomsk State University, Russia

²National University of Mongolia, Mongolia

Email – bubenchikov_am@mail.ru

The technology of the hydrogen isotope extraction out of the H₂, D₂, T₂, HD mixture was considered. The extraction of rare components from a mixture of isotopes is an extremely difficult process due to the similar properties of the considered components and the same values of the interaction parameters [1]. However, quantum tunneling [2,3], as a process that depends on the mass of particles, shows differences in their passage through monoatomic membranes. These differences multiply if we consider membranes consisting of two layers. In this case, resonance modes of motion of isotopes [4,5] take place. The resulting degree of separation of the components makes it possible to use the compound membranes on an industrial scale.

Membranes suitable for light elements isotope separation are compound membranes of porous graphene, graphynes (GYs), carbon nitride [6,7], boron nitride, etc. The bi-layer membrane of carbon nitride g-C₃N₄ was investigated in this work. The potential energy of interaction of a membrane with a moving particle is built on the basis of the modified Lennard-Jones pair potential.

The permeability of the membrane and the isotope separation degree were determined using the method of "matching" the solutions of the Schroedinger equation at the ends of the considered segment with asymptotic conditions. Calculations of the bi-layer g-C₃N₄ membrane permeability for hydrogen isotopes H₂, D₂, T₂ and HD for the temperature T in the range from 30 to 50 K were performed. The simulation showed that the best results are observed in the extraction of protium. The degree of separation of protium from hydrogen deuteride and from tritium reaches the order of 10⁴. The degree of separation of the H₂/D₂ mixture is slightly inferior to the previously described components. After the separation of protium, the separation of deuterium is expedient. This process is very convenient since the degree of separation for all components reaches its maximum under the same conditions. Then tritium is extracted. The separation of hydrogen deuteride of a mixture of isotopes is ineffective in comparison with other components.

References

- [1] J. Perez-Carbajo, J. B. Parra, C. O. Ania, P. J. Merklung, S. Calero Jr., *ACS Appl. Mater. Interfaces* **11** (2019) 18833–40
- [2] A. Gij'on, J. Campos-Martinez, M.I. Hernandez Jr., *J. Phys. Chem. C* **121** (2017) 19751–57
- [3] J. Schrier Jr., *J. Phys. Chem. Lett.* **1** (2010) 2284–87
- [4] V. A. Poteryaeva, M. A. Bubenchikov, S. Jambaa, D. Gankhuyag Jr., *J. Phys.: Conf. Ser.* **1537** (2019) 012008
- [5] S. Mandra, J. Schrier, M. Ceotto Jr., *J. Phys. Chem. A* **118** (2014) 6457–65
- [6] F. Li, Y. Qu, M. Zhao Jr., *Carbon* **95** (2015) 51–57
- [7] Y. Qu Jr., *Sci. Rep.* **6** (2016) 19952

ХАВСРАЛТ 10



[Print this Page for Your Records](#)

[Close Window](#)

Control/Tracking Number: 23-FP-AM-6111-INFORMS
Activity: Flash Paper Submission (5-minute presentation)
Current Date/Time: 4/21/2023 2:53:07 AM

Dynamics Of Inverse Vertex Images In The Schwarz-christoffel Integral: Kufarev's Differential Equations And Initial Conditions

Author Block: Soninbayar Jambaa, National University of Mongolia, Ulaanbaatar, Mongolia. Contact: soninbayar@seas.num.edu.mn

Abstract:

The practical use of the well-known Schwarz-Christoffel integral formula is complicated by the determination of the inverse images of the vertices of a polygon that correspond to given side lengths. This work presents a method for determining these inverse images for rectilinear polygons, as well as a procedure for transforming the system of Kufarev ordinary differential equations that describe the movement of these inverse images into a form suitable for numerical analysis. The resulting dynamic system is then solved numerically, and the algorithm's effectiveness is demonstrated by its ability to preserve distances between the vertices during the cut. The article references the original method presented by Jambaa et al. in the Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics, Vol. 5, No. 43 (2016).

Topic (Complete): Computing Society ; Aviation Applications ; ENRE: Natural Resources

Additional Information (Complete):

- Select: No
- Select: No
- Select: Academics

Acknowledgments (Complete):

I acknowledge that presenters are required to register and make payment by June 29, 2022. : True

Currently Editing: Flash Paper Submission (5-minute presentation), Control # 23-FP-AM-6111-INFORMS

STEP 4: ABSTRACT

Warning: The maximum character limit is 790, excluding spaces.

- Letters, numbers, and *math symbols accepted.
- Abstracts will be published exactly as entered if accepted.
- Review your abstract and check for typographical and spelling errors, and scientific sense.

*Please note: Use "text pad" when entering math symbols, or [click here](#) to include special characters.

Warning: iDASIS has detected possible author data. This data is collected in other steps and should not be included here. If this submission does contain the author list, please use the Enter/Edt Abstract Text link (below) to delete this information. If the information is not author data, please ignore this warning and continue with your submission.

Abstract Body:

The practical use of the well-known Schwarz-Christoffel integral formula is complicated by the determination of the inverse images of the vertices of a polygon that correspond to given side lengths. This work presents a method for determining these inverse images for rectilinear polygons, as well as a procedure for transforming the system of Kufarev ordinary differential equations that describe the movement of these inverse images into a form suitable for numerical analysis. The resulting dynamic system is then solved numerically, and the algorithm's effectiveness is demonstrated by its ability to preserve distances between the vertices during the cut. The article references the original method presented by Jambaa et al. in the Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics, Vol. 5, No. 43 (2016).

[Edit Abstract Text](#)

Abstract Word Count: 154
Abstract Character Count: 698

XABCPAJT 10

[Letter of Invitation] 2023 INFORMS Annual Meeting

From: Kyle Jordan, INFORMS Director of Meetings (informs@informs.org)
To: soninbayar@seas.nuim.edu.mn
Date: Wednesday, April 26, 2023 at 12:28 PM GMT+8

[View in browser](#)



Soninbayar Jambaa
National university of mongolia
Ulaanbaatar, Sukhbaatar district, Mongolia

Dear Soninbayar Jambaa,

On behalf of the Institute for Operations Research and the Management Sciences (INFORMS), we cordially invite you to attend the [2023 INFORMS Annual Meeting](#), which will be held October 15-18, 2023, in Phoenix, Arizona. All participants, including speakers and delegates, must register and pay the appropriate registration fees to attend the meeting.

With over 11,000 members from around the globe, INFORMS is the leading international association for professionals in operations research, analytics, management science, economics, behavioral science, statistics, artificial intelligence, data science, applied mathematics, and other relevant fields.

Your participation in the 2023 INFORMS Annual Meeting will help promote best practices and advances in operations research, management science, and analytics to improve operational processes, decision-making, and outcomes through an array of highly cited publications, conferences, competitions, networking communities, and professional development services.

We look forward to having you join us in Phoenix!

Sincerely,

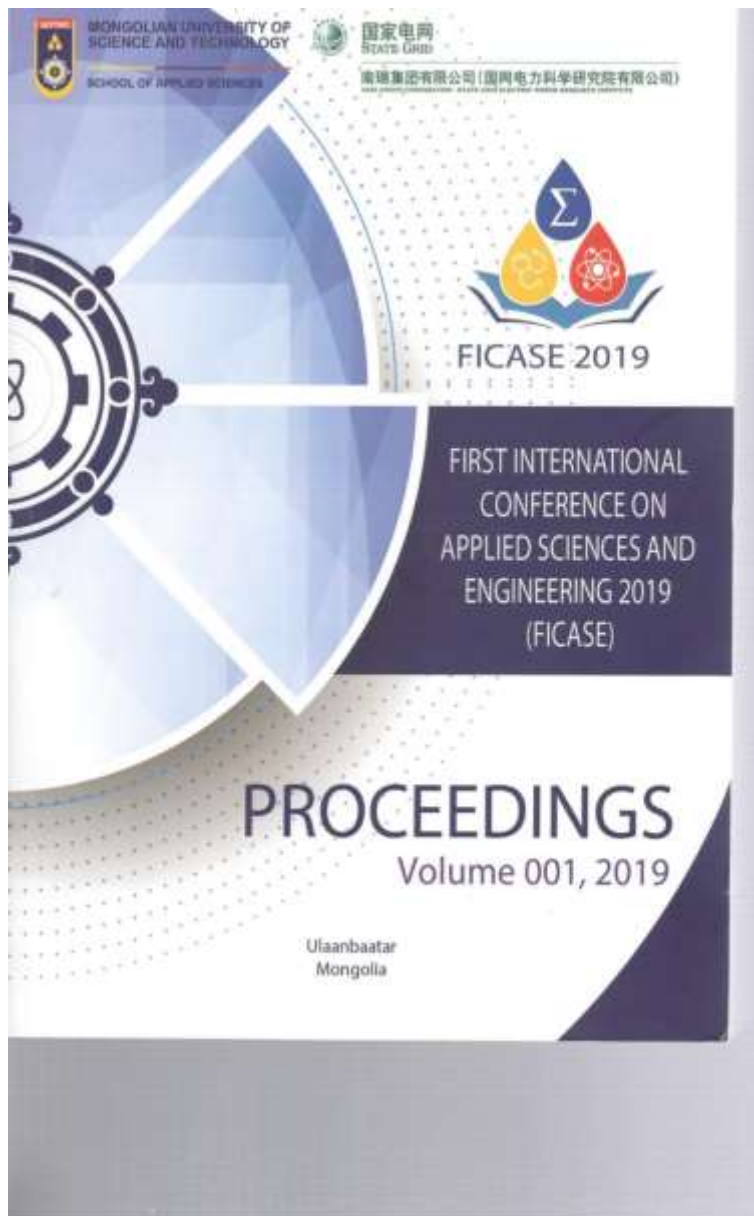
A handwritten signature in black ink that reads "Kyle F. Jordan".

about:blank

1/2

Kyle Jordan, Ed.M, MS, CAE
Director of Meetings
INFORMS
Tel: [+1-443-757-3533](tel:+14437573533)
Email: kjordan@informs.org

INFORMS, 8521 Research Park Drive, Suite 200, Catonsville, Maryland 21228 United States
443-757-3530 | [University Manager Professor](#)



ХАВСРАЛТ 11

MC2024. SIMULATION BASED INVENTORY MANAGEMENT: PETROLEUM IMPORT IN MONGOLIA <i>DEMCHIGSUREN BYAMBAJAV, Mend-Amar Mojig</i>	156
MC2025. SOME CHARACTERISTICS OF FUZZY NUMBERS <i>Ser-Od B, Naranchimeg Ch, DELGERSAIKHAN U and Dalaisaikhan N</i>	161
MC2026. FLOW MODIFICATION BY SETTLING PARTICLES IN A DIFFERENTIALLY HEATED CUBIC CAVITY <i>BATTSETNEG GERELTYAMBA, Changhoon Lee</i>	165
MC2027. EXACT FINITE DIFFERENCE SCHEME FOR THE HELMHOLTZ EQUATION WITH HIGH WAVENUMBERS <i>Zhanlav T, Chuluunbaatar O and ULZIIBAYAR V</i>	169
MC2028. APPLICATIONS OF THE KUFAREV METHOD TO A CONFORMAL MAPPING USING THE CHRISTOFFEL-SCHWARTZ INTEGRAL <i>SONINBAYAR JAMBAA</i>	171
MC2029. MATHEMATICAL MODELING AND VERIFICATION OF LI-ION ACTIVE MATERIALS CAPACITIES <i>Sarantuya Tsedenlamba, Anton Momchilov, TODOR PETKOV</i>	176
MC2030. A DYNAMICS ON A ONE NONLINEAR TRAFFIC MODEL <i>GANZORIG D</i>	181
MC2031. OPTIMIZATION OF RELIABILITY FOR RADIO COMMUNICATION NETWORKS IN UNDERGROUND MINING <i>BATZORIG BAZARGUR, Oigonbayar Bataa and Uuganbayar Budjav</i>	187
MC2032. THE ALBERTSON INDEX OF TREES AND UNICYCLIC GRAPHS <i>SHIKHAR DORJEMBE, Lkhagva Buyantogtokh and Batmend Horoldagva</i>	193
MC2033. VIRTUAL CARDIOVASCULAR SYSTEM MODEL BASED ON MATHEMATICAL MODEL <i>BATTULGA S, Ulziibayar V, Uuganbayar B, Khajidsuren N and Odbileg D</i>	194
MC2034. OPTIMIZATION THEORY AND QUALITY IN HIGHER EDUCATION INSTITUTE <i>DANZAN GANKHUYAG, Demberel Boltogtokh and Balt Badankhuu</i>	198
MC2035. THE WIND FIELD SIMULATION OF ULAANBAATAR CITY FOR AIR POLLUTION DISPERSION FROM THE SOIL <i>Munkherdene Ts, BULGANSAIKHAN B and Ulziibayar V</i>	203
MC2036. NEW CRITERIA OF ASYMPTOTIC STABILITY OF SYSTEM DIFFERENTIAL EQUATIONS WITH DIAGONAL PERIODIC COEFFICIENTS <i>BATZUL TUMUR</i>	209
MC2037. SOME ISSUES ON MODELING OF REGIONAL DEVELOPMENT IN MONGOLIA <i>Uuganbayar B, ARIUN-ERDENE D And Gankhuyag D</i>	215
MC2038. NON-DESTRUCTIVE EVALUATION OF THE SURFACE PLATE METAL: ACOUSTIC EMISSION DETECTION <i>Barsbaatar Ts, Munkherdene Ts and UUGANTUYA KH</i>	219
MC2039. SOME ISSUES ON MODELING OF REGIONAL DEVELOPMENT IN MONGOLIA <i>Gankhuyag D, KHAJIDSUREN N</i>	226
MC2040. HYPOTHESIS TESTING OF AGRICULTURAL DATA <i>ZOLZAYAG G, Usukhbayar B</i>	229

APPLICATIONS OF THE KUFAREV METHOD TO A CONFORMAL MAPPING USING THE CHRISTOFFEL-SCHWARTZ INTEGRAL

SONINBAYAR JAMBAA

DEPARTMENT OF APPLIED MATHEMATICS, SCHOOL OF ENGINEERING AND APPLIED SCIENCES, NATIONAL UNIVERSITY OF MONGOLIA, MONGOLIA

E-mail address: soninbayar@seas.nuim.edu.mn

ABSTRACT. In this work, we consider a new technique of converting the system of Kufarev's ordinary differential equations describing the motion of the pre-images of the vertices, to a more convenient form for numerical analysis. The method determines the reverse images of the vertices of rectilinear polygons and we discuss some of its applications to the practical conformal mapping. Numerical experiments have been conducted and the results show the effectiveness of the algorithm as it maintains the distances between the vertices in the process of making the cut which is one of the main properties of the Kufarev's method.

1. INTRODUCTION

It is well known fact that using the Christoffel-Schwarz integral

$$Z(W) = \int_0^W (w - a_1)^{\alpha_1} (w - a_2)^{\alpha_2} (w - \lambda) (w - a_4)^{\alpha_4} (w - a_5)^{\alpha_5} dw, \quad (1.1)$$

where $\alpha = \frac{\varphi}{\pi} - 1$ and φ is an interior angle of the polygon, one can map points of the upper half-plane W to the region Z , which is the same half-plane, but with two cuts included as shown in Figure 1.



FIGURE 1. Mapping of the upper half plane on the polygon exterior

The integrand in such integrals consists of the product of factors with known exponents α_k . But the values of the prototypes of the vertices a_k are not known in advance, and they must be selected so that they correspond to the lengths of the edges of the polygon in the region Z [1]. The main problem using the integral form (1.1) in practical applications is successfully solving it using the Kufarev method [1], which focuses on finding these pre-images of vertices. As for the calculation of the Christoffel-Schwarz integral, we must know the exponents in the integral form (1), as well as the pre-images of the vertices of the polygon.

Key words and phrases. conformal mapping of rectilinear polygons, direct images and counter images of vertices, numerical applications.

APPLICATIONS OF THE KUFAREV METHOD TO A CONFORMAL MAPPING USING THE CHRISTOFFEL-SCHWARTZ INTEGRAL

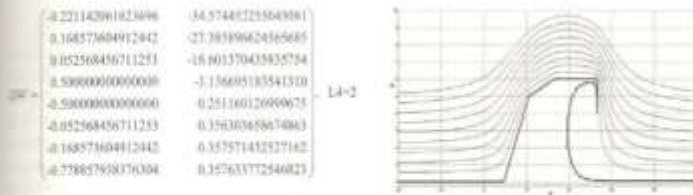


Figure 4. The current line after the release of the fourth cut.

4. CONCLUSION

The Kufarev method allows high-precision determination of the inverse images of the vertices of the displayed polygons having the form of cuts, and therefore, it significantly expands the field of application of the Christoffel-Schwartz integral. With the help of the numerical implementation of the Kufarev method, its effectiveness was studied using a number of examples of mapping of the given polygons to the outer and inner parts. Testing of the required software blocks was performed by comparing with known analytical solutions [5,6].

A feature of the Kufarev method is particularly useful - to maintain the distance between the vertices. It makes it possible to introduce additional fictitious pre-images for carrying out future cuts through them. Applications of the Kufarev method allows to solve various scientific problems of practical importance, such as the flow of groundwater [6], or the problem of forced convection.

REFERENCES

- [1] Kufarev P.P., *A method for determining the parameters of the Schwarz - Christoffel integral*, Dokl. Akad. Nauk SSSR, 57 (1947), pp. 535-537.
- [2] Gutlyanski V.Y., *On conformal mapping of polygonal regions*, Ukrainian Mathematical Journal, Vol. 45, No 11 (1993), p. 1669-1680.
- [3] N.Nakipov, *Parametric method for finding accessory parameters in generalized Christoffel - Schwarz integrals*, Scientific notes of Kazan University: Series Physics and Mathematics, V. 158, No. 2. (2016.), p. 202-229.
- [4] Kolesnikov I.A., *Definition of accessory parameters for mapping to a rectangle*, Tomsk State University Bulletin, Mathematics and mechanics, Vol. 2, No 28 (2016.), p. 18-28.
- [5] Jambaa S., Kasatkina T.V., Bubenchikov A.M., *On the determination of constants in the Schwarz - Christoffel integral by P.P.Kufarev's method*, Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics, Vol 5, No 43 (2010), p. 21-27.
- [6] Jambaa S., Kasatkina T.V., Bubenchikov A.M., *Application of Kufarev method to problem of sub-soil water movement under hydraulic engineering constructions*, Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics, No 47, (2017) p. 15-21.



UNIVERSITY
OF THE
HUMANITIES



**THE 6th INTERNATIONAL CONFERENCE
ON OPTIMIZATION, SIMULATION AND
CONTROL (COSC 2019)**



PROGRAM AND ABSTRACTS



**June 21-23, 2019
Ulaanbaatar, Mongolia**

ХАВСРАЛТ 12

Local Organizing Committee

Conference secretary

N. Tungalag (National University of Mongolia)

Members

S. Bathileg (National University of Mongolia)
J. Enkhbayar (National University of Mongolia)
J. Davaadulam (National University of Mongolia)
B. Barsbold (National University of Mongolia)
D. Bayanjargal (National University of Mongolia)
M. Mend-Amar (National University of Mongolia)
G. Battur (National University of Mongolia)
D. Buyantogtokh (Mongolian University of Science and Technology)
B. Ser-Od (Mongolian University of Science and Technology)
T. Bayartugs (Mongolian University of Science and Technology)
D. Tsendenbayar (Mongolian University of Science and Technology)
Ts. Batsukh (University of Finance and Economics)
Ch. Naranchimeg (University of Finance and Economics)
T. Dultuya (National University of Mongolia)
A. Enkhbolor (National University of Mongolia)
A. Bayarbaatar (National University of Mongolia)
J. Soninbayar (National University of Mongolia)
Ch. Ankhbayar (National University of Mongolia)

	Well-Posedness of Some Evolutionary Problems	M. Mend-Amar
	D.Bayanjargal and B.Yerkyebulan <i>School of Applied Science and Engineering, National University of Mongolia and New Mongol College of Technology</i>	
16:00-16:15	An Extension of Optimal Growth Model	
	Uranchimeg Sangas <i>Mongolian University Science and Technology, Mongolia</i>	
16:15-16:30	Regularized Least Square Method	
	Soninbayar Jambaa <i>National University of Mongolia, Mongolia</i>	
16:30-16:45	Kufarev's method for conformal mapping with the schwarz-christoffel integral in some practical problems	
	Batbileg Sukhee and Altangoo W <i>National University of Mongolia</i>	
16:45-17:00	D.C. Programming Approach to Non Zero Sum Three Person Game	
	Rentsen Enkhbat <i>Institute of Mathematics, National University of Mongolia</i>	
17:00-17:15	Global Optimization Formulation of General Sphere Packing Problem	

The purpose of economic growth is to increase living standards and decrease poverty and in the bigger picture the quality of life will improve. If macroeconomic indicators are rising, then the income distribution of the population is unprepared, the unemployment and poverty are increasingly degraded, the development agenda does not justify the goal but the negative results.

ASSESSING STUDENTS' KNOWLEDGE AND ABILITY

Buyantogtokh, D and Tungalag, B

Mongolian University of Science and Technology, Mongolia

e-mail address: buyad@must.edu.mn, tungalag.b@must.edu.mn

Abstract: In this article we have presented the issue of how to assess and evaluate learners objectively. The reason is that a problem about student's assessment and evaluation has been the most conflictive so far. As well as there are not few incidents, when teachers overestimate or underestimate students too much or they misjudge their students. We think, this is due to the fact that the assessment is caused by the personality of individuals. In some ways it shows that the subjectivism affects to the assessment or evaluation of students.

Traditionally, the standard and nonstandard assessment principles were followed and we consider that they are unilateral and insufficient techniques to properly assess and evaluate students. At present the students' knowledge and ability are evaluated by the principle of knowledge- acquired habit (cum-savvy) - attitude and formation. Our research goal is to establish advantages of this principle of assessing individual's value.

Key words: assessment, knowledge, acquired habit, attitude and formation.

KUFAREV'S METHOD FOR CONFORMAL MAPPING WITH THE SCHWARZ-CHRISTOFFEL INTEGRAL IN SOME PRACTICAL PROBLEMS

Sominbayar Jambaa

National University of Mongolia, Mongolia

email address: soninbayar@seas.num.edu.mn

Abstract: The Schwarz - Christoffel integral has successfully been used in various problems related to hydrodynamics, electrodynamics, and elasticity theory. The main difficulty of its practical application is to find the parameters included in the integral. In this work, we study the Kufarev's method established in 1947 to avoid such difficulties. We reduced the problem of parameter determining to an easier problem which is the numerical integration of a system of ordinary differential equations. The equations here represent the motion of the desired parameters. To show the practical effectiveness of the method, we conducted some numerical experiments.

Keywords: Schwarz - Christoffel integral, conformal mapping of rectilinear polygons, images of sides and vertices, streamlines.

CLIQUE SEARCH BASED APPROACH FOR IDENTIFICATION OF CANCER-ACTIVATED MODULES

A. Bayarbaatar and E. Binderiya

National University of Mongolia

e-mail: bayarbaatar@seas.num.edu.mn

Abstract: Cancer related activation of biomolecular networks are often represented as a graph structure. Densely connected parts of the responsive network represents the condition-specific activation of biological processes in cancer. The identification of such activation is a challenging problem in computational biology since it is difficult to distinguish condition specific changes from random events under cancer.

The problem of finding the highest-scoring modules (subnetwork) in a responsive network is in generally formulated as a combinatorial optimization problem. However, molecular networks are normally large in scale. It is impossible to solve such a large scale optimization problem within a reasonable time.

In this study, we propose a Clique search based approach method to reveal condition-specific changes which are so-called cancer activated modules in the responsive network. First, we applied a partial covariance selection model to



**The 7th International Conference on Optimization,
Simulation and Control**

PROGRAM

*June 20-22, 2022
Ulaanbaatar, Mongolia*



ХАВСРАЛТ 13

Richard Vogel (Farmingdale State College, USA)
Kok Lay Teo (Sunway University, Malaysia)
Saheya Barintag (Inner Mongolia Normal University, China)
Jirimutu (Inner Mongolia University for the Nationalities, China)
Hsiao-Fan Wang (National Tsing Hua University, China)
Gerhard-Wilhelm Weber (Middle East Technical University, Turkey)
Sheng Bau (University of the Witwaterstand, South Africa)
Milagros Baldemor (Don Mariano Marcos Memorial State University, Philippines)

Conference Secretary:

Tungalag Natsagdorj (National University of Mongolia)

Local Committee:

D. Uganbaatar (Mongolian Academy of Sciences)
B. Batgerel (Mongolian Academy of Sciences)
E. Enktsolmon (Mongolian Academy of Sciences)
B. Otgonsuvd (Mongolian Academy of Sciences)
S. Batbileg (National University of Mongolia)
J. Enkhbayar (National University of Mongolia)
J. Davaadulam (National University of Mongolia)
B. Barsbold (National University of Mongolia)
D. Bayanjargal (National University of Mongolia)
M. Mend-Amar (National University of Mongolia)
G. Battur (National University of Mongolia)
B. Bolormaa (National University of Mongolia)
D. Nyamsuren (Mongolian University of Science and Technology)
B. Ser-Od (Mongolian University of Science and Technology)
T. Bayartugs (Mongolian University of Science and Technology)
D. Tsendenbayar (Mongolian University of Science and Technology)
Ts. Batsukh (University of Finance and Economics)
Ch. Naranchimeg (University of Finance and Economics)
T. Dultuya (National University of Mongolia)
A. Enkhbolor (National University of Mongolia)
J. Soninbayar (National University of Mongolia)
Ch. Ankhbayar (National University of Mongolia)
D. Tseveennamjil (Mongolian University of Life Sciences)

ХАВСРАЛТ 13

11	MATHEMATICAL MODEL OF VEGETATION COVER CHANGE IN OGII LAKE BASIN <i>Tamjav Bayartugs, Damdinsuren Nomindari, Sanjaa Tuva</i> <i>Mongolian University of Science and Technology</i>
12	ADOPTION OF ARTIFICIAL INTELLIGENCE IN BANKING SECTOR: EVIDENCE FROM MONGOLIA <i>Oyundari Byambaa, Chimedtsogzol Yondon, Bayanjargal Darkhijav</i> <i>National University of Mongolia, Mongolia</i>
13	BLOCK METHODS FOR THE NUMERICAL SOLUTION OF THE VOLTERRA INTEGRAL EQUATION OF THE FIRST KIND <i>Mikhail Bulatov¹, Ekaterina Antipina², Vitaly Biryukov³</i> ¹ <i>Matrosov Institute for System Dynamics and Control Theory of Siberian Branch of Russian Academy of Sciences, Russia</i> ² <i>Melentiev Energy Systems Institute of Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Russia</i> ³ <i>Irkutsk State University, Russia</i>
14	ON THE MINIMIZATION PROBLEM OF THE SUM OF RATIO <i>Davaajargal Jargalsaikhan¹, Bayanjargal Darhijav², Iderbayar Shiilegbat²</i> ¹ <i>Mongolian Academy of Sciences</i> ² <i>National University of Mongolia</i>
15	IDENTIFICATION OF QUADRATIC VOLTERRA POLYNOMIALS USING PIECEWISE LINEAR TEST SIGNALS <i>Svetlana Solodusha</i> <i>Melentiev Energy Systems Institute of Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Russia</i>
16	ESTIMATION OF DISTRIBUTION FOR LIVING TIME FOR CENSORED DATA <i>Tserenbat Oirov¹, Gereltuya Terbish², Narangoo Ganbaatar¹</i> ¹ <i>National University of Mongolia</i> ² <i>Mongolian University of Science and Technology</i>
17	STOCHASTIC OPTIMAL CONTROL PROBLEM OF CONSUMPTION AND PENSION INSURANCE PURCHASE WITH UNCERTAIN LIFETIME <i>Batsukh Tserendorj¹, Tserenbat Oirov², Gereltuya Terbish³, Nyamsuren Dorj³</i> ¹ <i>University of Finance and Economics, Mongolia</i> ² <i>National University of Mongolia</i> ³ <i>Mongolian University of Science and Technology</i>
18	CONFORMAL MAPPING USING THE CHRISTOFFEL-SCHWARTZ INTEGRAL, TRANSFORMATIONS AND APPLICATIONS <i>Soninbayar Jambaa</i> <i>National University of Mongolia, Mongolia</i>

1. ABSTRACT. In this work, we consider a method that determines the inverse images of the vertices of rectilinear polygons, the method of transforming the system of Kufarev ordinary differential equations describing the movement of the inverse images of the vertices, to a form more convenient for numerical analysis.

Numerical experiments have been carried out, and the results show the effectiveness of the algorithm, since it preserves the distances between the vertices during the cut, which is one of the main properties of the Kufarev method.

2. Introduction

Numerical conformal mapping, using the Kufarev method is a dynamical system.

It is well known fact that using the Christoffel-Schwarz integral

$$Z(W) = \int_0^W (w - a_1)^{\alpha_1} (w - a_2)^{\alpha_2} (w - \lambda) (w - a_4)^{\alpha_4} (w - a_5)^{\alpha_5} dw, \quad (1.1)$$

where $\alpha = \frac{\varphi}{\pi} - 1$ and φ is an interior angle of the polygon, one can map points of the upper half-plane W to the region Z , which is the same half-plane, but with two cuts excluded as shown in Figure 1.

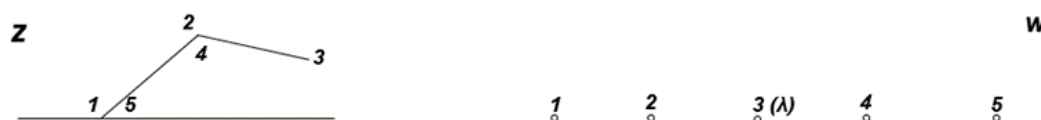


Figure 1. Mapping of the upper half plane on the polygon exterior

The integrand in such integrals consists of the product of factors with known exponents α_k . But the values of the prototypes of the vertices a_k are not known in advance, and they must be selected so that they correspond to the lengths of the edges of the polygon in the region Z [1].

6. REFERENCES

- [1] Kufarev P.P., A method for determining the parameters of the Schwarz – Christoffel integral, .Dokl. Akad. Nauk SSSR. 57 (1947). pp. 535–537.
- [2] Gutlyanskii V.Y., On conformal mapping of polygonal regions, Ukrainian Mathematical Journal, Vol. 45, No 11 (1993.), p. 1669–1680.
- [3] N.Nakipov, Parametric method for finding accessory parameters in generalized Christoffel – Schwarz integrals, Scientific notes of Kazan University, Series Physics and Mathematics, V. 158, No. 2. (2016.), p. 202–220.
- [4] Kolesnikov I.A., Definition of accessory parameters for mapping to a rectangle, Tomsk State University Bulletin, Mathematics and mechanics. Vol. 2, No 28 (2016.), p. 18–28.
- [5] Jambaa S., Kasatkina T.V., Bubenchikov A.M., On the determination of constants in the Schwartz – Christoffel integral by P.P.Kufarev’s method, Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics. Vol 5, No 43 (2016). p. 21–27.
- [6] Jambaa S., Kasatkina T.V., Bubenchikov A.M., Application of Kufarev method to problem of sub-soil water movement under hydraulic engineering constructions, Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics, No 47, (2017) p. 15–21.



Агуули	
Хөвөн байгуулалт байгуулалт	2
Хөвөн байгуулалт үзүүлэлт	2
Хүртэглэлтэй үзүүлэлт	3
ХҮРЭГНИЙ ХӨНӨГӨӨ	3
Уламжлал	7
Дифференциал тэгшитгэл, системийн салбар тусламж	7
Тэгшитгэлтэй системийн салбар тусламж	8
Тэгшитгэл	10
ДИФФЕРЕНЦИАЛ ТЭГШИТГЭЛЭЙН ЭДИЙН ЗАСГИЙН ХӨНӨГӨӨ	12
Уламжлал	12
PROXIMAL SPLITTING METHODS IN IMAGE PROCESSING	12
Сэтгэл Зөв Төлөг	12
МОНГОЛ ОРНЫ УУР АМСТ АЛЫН ОЙРОЛГОТ, АСААГ МАГДАЛГААР БҮҮХЭЙНИЙ ХАРИУУЛАГА	13
И. Ганболдсүм, Э.Нарансүм	13
BEHAVIOR OF INERTIAL PARTICLES IN A DIFFERENTIALLY TREATED CUBIC CAVITY	13
Виталий Геворкянцян and Чамгунан Лу	13
СӨВӨЛӨГ-ӨНӨРНИЙ ОЮУНЫ БАГААЛГАЙН ЗАРИМ АСУУДАЛ	14
Ж.Дамсүрэн, А.Аюулбаяр	14
ЦУНГИ ОЮУНДООС ОНЦГОЙ ДЭГНИЙ ИЛЭХ ЗУЙЛГААНЫ СУУРИНГААР АРТА	14
В.Аюулбаяр, А.Дамсүрэн, Х.Нарансүм	14
ON SOLUTIONS OF CONVECTION-DIFFUSION EQUATION	15
J.Дарамбаев, D.Кунгунан	15
THE USEFULNESS OF MERT FOR EIT	15
С.Урианза	15
A CURRENCY EXCHANGE RATE ALERT SYSTEM FOR MNT AND USD WITH MACHINE LEARNING APPROACHES	16
Г.Мунгаа, Ш.Нарансүм	16
БҮТЭРХЭЙН ТЭГШИТГЭЛЭЙН ДИФФЕРЕНЦИАЛ ТЭГШИТГЭЛЭЙН ДИ СИММЕТРИ АНАЛИЗ	16
Д.Нарансүм, У.Урианза	16
МОНГОЛ УЛСЫН БУСГА АНХАГААНЫ ТЭГШИТГЭЛЭЙН ТУХАЙ	16
Ш.Нарансүм	16
МАТЕМАТИКНИЙ НӨЛӨГТӨӨД ОЙРОЛГОТ, ОЙРОЛГОТ, МАГСААНИ	17
С.Нарансүм	17
ШААРД БИРХЭМЭЛЭЙНИЙ ИНТЕГРАЛААР ИНОМОРМ БҮТЭГЭЛТ ХИЙХ, ЗАРИМ ХӨНӨГӨӨ	18
Ж.Сүхбаатар	18

ШВАРЦ-КРИСТОФФЕЛИЙН ИНТЕГРАЛААР КОНФОРМ БУУЛГАЛТ ХИЙХ, ЗАРИМ ХЭРЭГЛЭЭ

Ж.Сонинбаяр
МУИС-ХШУИС
jsoninbayar@yahoo.com

Комплексе хагас хантгай Z дэх олон өнцөгтийн оройнуудын эх дүрийг W комплекс хагас хантгайд тодорхойлох тоон аргыг авч үзэх ба зарим практик конформ буулгалтад түүнийг хэрэглэх.

ДЭЛХИЙН ШИЛДЭГ ИХ СУРГУУЛИУДЫН ЧАНСААГ ҮНЭЛЭХ ТОГТОЛЦОО, АРГАЧЛАЛЫН ТУХАЙ АСУУДАЛД

А.Батсэнгэл
МУИС-ХШУИС
battsengel@seas.mum.edu.mn

Энэхүү ажилд дэлхийн шилдэг их сургуулиудыг ямар шалгуур үзүүлэлтүүдээр эрэмбэлдэг вэ? Эсвэл өөрийн орны их сургуулиудыг ямар шалгуур эрэмбэ тогтоож үнэлж дүгнэхэд ямар арга? Гэхэд асуудал дэвшүүлэхийг зорьсон байна.

Түүхээр үг: Шилдэг их сургуулиудын чансаа(Rank), шалгуур үзүүлт, шилдэг их сургуулиудыг жагсаалт.

БАЙЕСИЙН РЕГРЕССИЙН ЗАРИМ ӨРГӨТГӨЛ

Ч.Сумъяацзорж, Б.Жамъяншарва, О.Цэрэнбат
МУИС-ХШУИС
ch.samyajorj@gmail.com

Байесийн регресс нь өмнө өгөгдөлтэй регрессийн загварт шингэлддэг, загварын параметрийн приор буюу анхны магадлал өгөгдсөн байх үед постериор тархалтыг гаргаж ирэхээр регрессийн параметрийн тархалтыг тодорхойлдог. Бидний судалж байгаа загварын хэлбэр нь $L1$ болон $L2$ нормуудыг холбосон алданы тархалттай байхаар эластик нэт регрестэй нэгтэй хэлбэрийн туншиг альфа параметртай байхаар авч үзсэн. Байесийн регрессийн тусламжтайгаар загварын туншиг параметрийн приор болон постериор тархалтуудыг гаргаж ирсэн.



МОНГОЛ УЛСЫН АС СУГУУЛЬ
ХАРИУЦЛАГААНЫ ГЭРЭГЭЙН ХАМГААГАХ УЛАСЫН АЖААХЭРЭГЛЭЛИЙН СУГУУЛЬ



МОНГОЛ УЛСЫН АЖААХЭРЭГЛЭЛИЙН СУГУУЛЬ
МАТЕМАТИК, ТООНИ ТЭХНОЛОГИЙН ХҮҮРЭЭГЭЙН

ХЭРЭГЛЭЭНИЙ МАТЕМАТИК 2020 Илтгэлийн хураангуй



УЛААНБААТАР
2021-05-15

ХАВСРАЛТ 15

Конформ буулгалтад Куфаренын аргыг хэрэглэн саадыг тойрох шингэний урсгалын шугамуудыг тодорхойлох

Ж.Солтбаар^{1,2}

¹МОНС, ХШУТИС, Хэрэгслэлийн математикийн тэнхим
²Director Centre for Fundamental Research of Mongolian University of Science and Technology

Конформ буулгалтад Куфаренын аргыг хэрэглэн нь динамик системийн бодлого үүсгэж байгаа гэдэг юм. Үг аргаар чулуун сааднуудыг тойрох голын урсгалыг илч үзэж болно. Конформ буулгалтад Куфаренын аргыг хэрэглэн нь илч бүрийн саадыг тойрон өнгөрөх (тоглох) урсгалын шугамуудыг гаргаж авах боломжтой юм.

Хэрэв усны Г гүнтэй урсгал тэгш биш ёрролтой тазармаг ү хурцтай хэллэж байвал энэ аргыг хэрэглэж болно юм. Гэхдээ урсгал нь дээрхөөх төстөөх даралттай байх юм биш шингэний гадаргуу болно үл зөвхөндөг шугамуудын хялбар, дүрсийг олж болно. Дээд ба доод аргачаар хялбарчарсан хэргээ туузан дараа Лаплас тэгшитгэлийг хангасан хурцны потенциалыг тодорхойлох автоматичийн бодлого юм.

Түлхүүр үгс: Конформ буулгалт, Куфаренын арга, динамик систем

Ашигласан материал

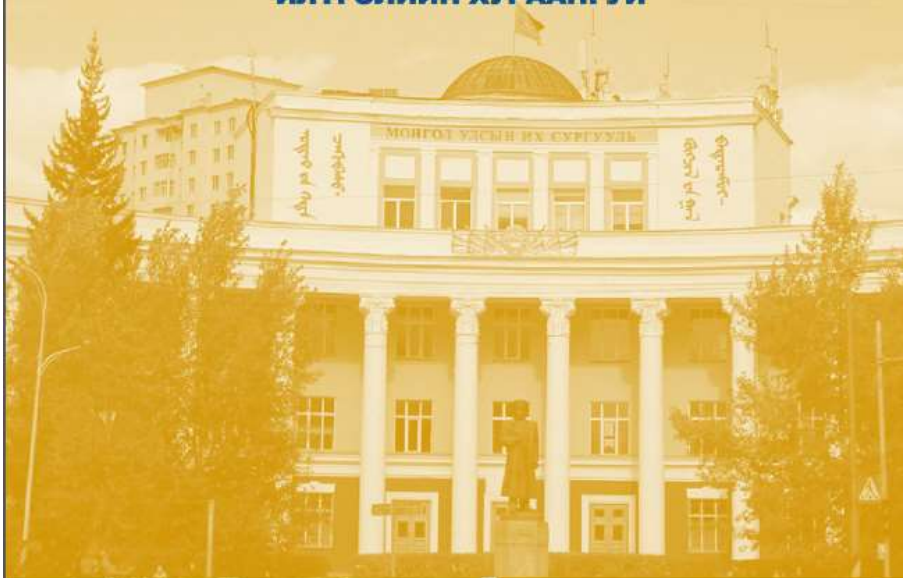
- [1] Жамба Солтбаар, Касаткина Т.В., Вубенчиков А.М., Об определении констант и интеграла Кристоффеля-Шварца по методу П.П. Куфарова, Вестник ТГУ, Математика и Механика, УДК 512.511, №5(43), - С.21-27, г.Томск, РФ, -2016г.
[2] Сренечский Л.Е. Теория потенциальных движений жидкости. М.: Наука, ФМ, 1977, 816 с



МОНГОЛ УЛСЫН ИХ СУРГУУЛЬ
ХЭРЭГЛЭЭНИЙ ШИНЖЛЭХ УХААН, ИНЖЕНЕРЧЛЭЛИЙН СУРГУУЛЬ

**ТАВ ДАХЬ УДААГИЙН
ЭРДЭМ ШИНЖИЛГЭЭНИЙ ХУРАЛ**

**ХЭРЭГЛЭЭНИЙ МАТЕМАТИК 2021
ИЛТГЭЛИЙН ХУРААНГУЙ**



**УЛААНБААТАР
2022-01-24**

ХАВСРАЛТ 16

Хуралдааны дарга: Г.Баттөр

15:50– 16:05	Г.Баттулга (МУИС, ХШУИС) Шаардаж буй өгөөжийн үнэлгээ
16:05– 16:20	Khulan Myagmar (МУИС), Batkhuyag Ganbaatar (СЭЗИС), Evan J.Douglas (Queensland University of Technology) Using a complex measure of Product Innovativeness to explain Abnormal Financial Returns
16:20– 16:35	Ч.Лхагвадулам (ХААИС, ЭЗБС), Д.Цэвээннамжил (ХААИС, ЭЗБС), Б.Барсболд (МУИС, ХШУИС) Солоугийн загварын параметрийн сайжруулалт
16:35– 16:50	Т.Цэрэннадмид, Т.Дэлтуяа, А.Энхболор (МУИС, ХШУИС) Noisy translation, rotation and scale stabilization of image sequences

9

16:50– 17:05	Ж.Сонинбаяр (МУИС, ХШУИС) Relationship between ergodicity and mixing in the ergodic theory of dynamical systems
17:05– 17:20	Г.Зоригт, Ч.Алдармаа, Л.Хэнмэдэх (ШУТИС, ФТ) Дискрет хувьсагчийн аргаар долгион функцийг тооцоолох
18:30	Оройн зоог

ХАВСРАЛТ 16

Хуралдааны дарга: Г.Баттөр

15:50– 16:05	Г.Баттулга (МУИС, ХШУИС) Шаардаж буй өгөөжийн үнэлгээ
16:05– 16:20	Khulan Myagmar (МУИС), Batkhuyag Ganbaatar (СЭЗИС), Evan J.Douglas (Queensland University of Technology) Using a complex measure of Product Innovativeness to explain Abnormal Financial Returns
16:20– 16:35	Ч.Лхагвадулам (ХААИС, ЭЗБС), Д.Цэвээннамжил (ХААИС, ЭЗБС), Б.Барсболд (МУИС, ХШУИС) Солоугийн загварын параметрийн сайжруулалт
16:35– 16:50	Т.Цэрэннадмид, Т.Дэлтуяа, А.Энхболор (МУИС, ХШУИС) Noisy translation, rotation and scale stabilization of image sequences

9

16:50– 17:05	Ж.Сонинбаяр (МУИС, ХШУИС) Relationship between ergodicity and mixing in the ergodic theory of dynamical systems
17:05– 17:20	Г.Зоригт, Ч.Алдармаа, Л.Хэнмэдэх (ШУТИС, ФТ) Дискрет хувьсагчийн аргаар долгион функцийг тооцоолох
18:30	Оройн зоог

ХАВСРАЛТ 16

Relationship between ergodicity and mixing in the ergodic theory of dynamical systems

Жамбаа Сонинбаяр

МУИС, ХШУИС, Хэрэглээний математикийн тэнхим

Some sequential theorems and properties of a measure-preserving transformation of dynamical systems are considered, some generalization of such important properties of dynamical systems as ergodicity, mixing and their interrelation is made in the work

Түлхүүр үгс: successive theorems and properties of a measure-preserving transformation of dynamical systems.

Ашигласан материал

- [1] I.P. Kornfeld, Y.G. Sinai, S.V. Fomin, Ergodic theory. -M.: Science, 1980. - p.30.
- [2] Anzai H, Ergodic skew product transformation on the torus.- Osaka. Math. Journ., 1951, v. 3, N 1, - p. 83-99.
- [3] A.B. Katok, Hasselblatt B. Introduction to the modern theory of dynamical systems. -M.: Factorial 1999. - P.156.



МОНГОЛ УЛСЫН ИХ СУРГУУЛИЙН
ХЭРЭГЛЭЭНИЙ ШИНЖЛЭХ УХААН
ИНЖЕНЕРЧЛЭЛИЙН СУРГУУЛЬ
ЭРДМИЙН ЗӨВЛӨЛИЙН ХУРЛЫН ТЭМДЭГЭЭЛ

2023 оны 05 сарын 15 өдөр

Дугаар 0203

Үндэсний мөхлөг

Хурлын тэмдэглэл

ХШУИС-ийн эрдмийн зөвлөлийн хурал 2023 оны 5-р сарын 15-ны 16.00 цагаас 19.00 цагийн хооронд МУИС-ийн хөгжлийн 3-р байрны 221 тоот өрөөнд зохион байгуулагдсан.

Хуралдаанд ЭЗ-ийн дарга дэд профессор Д.Бямбажав, Эрдмийн зөвлөлийн гишүүд: профессор Ж.Батхүү, Д.Бансаяаргал, Б.Ганбат, Ч.Ганзориг, Ч.Сономдагва, А.Энхбаяр, Д.Эрдэнэчимэг дэд профессор Р.Чинзориг, Ц.Соёл-Эрдэнэ, С.Батбилэг, Г.Баттөр, Х.Тэгшжаргал, нарийн бичгийн дарга профессор Н.Оюун-Эрдэнэ нар оролцон.

Хэлэлцсэн асуудал №1. Төсөл хэлэлцүүлж дүгнэлт гаргах тухай

ХМТ-ийн дэд профессор Л.Жамбажамц танилцуулсан: МУИС-ийн судалгааны санхүүжилтийн журмаар санхүүжсэн Р2019-3744 дугаартай, Үүдний эволюц хөгжилд хамааралтай тропосферийн үе давхаргын зарим термодинамикийн үзүүлэлтүүдийн олон жилийн хэлбэлзэл сэдэвт залуу судлаачийн төсөл, Нэг эрдэм шинжилгээний өгүүлэл хүлээн зөвшөөрөгдөөд хэлэлцэгд, хоёр дахь өгүүллийн хариу хүлээж байгаа. Гэрээгээр хүлээсэн үүргээ биелүүлсэн тул миний удирдсан Р2019-3744 дотоод төслийг хаахыг дэмжинэ өгнө үү!

Шийдвэрлэсэн нь: ХМТ-ийн дэд профессор Л.Жамбажамцын удирдсан Р2019-3744 дугаартай, Үүдний эволюц хөгжилд хамааралтай тропосферийн үе давхаргын зарим термодинамикийн үзүүлэлтүүдийн олон жилийн хэлбэлзэл сэдэвт залуу судлаачийн төслийг гэрээгээр хүлээсэн үүргээ биелүүлсэн гэж үзэж хаахыг дэмжинэ.

Хэлэлцсэн асуудал №2. Б цагт тооцоулах

ХМТ-ийн дэд профессор Л.Жамбажамц танилцуулсан: "Ус хөгжлийн түлхүүр" үндэсний хурлын эмхэтгэлийн хянан ажигласан. "Ус хөгжлийн түлхүүр" үндэсний хурлын эмхэтгэлийн хянан ажигласан Л. Жамбажамц, З. Мөнххүсэг, Ш. Отгонсүрэн, Б. Ганболд нарт Б* дээр 1 кр тооцохыг зөвшөөрнө үү!

Шийдвэрлэсэн нь: "Ус хөгжлийн түлхүүр" үндэсний хурлын эмхэтгэлийн хянан ажигласан Л. Жамбажамц, З. Мөнххүсэг, Ш. Отгонсүрэн, Б. Ганболд нарт В цаг дээр кредит тооцох нь зүйтэй гэж үзэв.

Хэлэлцсэн асуудал №3. МУИС-д эрдэм шинжилгээний сэтгүүл бүртгүүлэх

ХАВСРАЛТ 17

ХМТ-ийн дэд профессор Л.Жамбалын танилцуулга: The Environment сэтгүүлийг МУИС-ийн сэтгүүлийн жагсаалтад оруулах

Шийдвэрлэсэн нь: “The Environment” сэтгүүлийг МУИС-д бүртгэгдэж сэтгүүлд танигдах шаардлага хангасан тохиолдолд (Судалгаа, шинэчлэл бодлогын гэрчээр шалгуулах) МУИС-д бүртгэгдэж сэтгүүлийн жагсаалтад оруулахыг дэмжин.

Хэлэлцсэн асуудал №4. Төсөл хэлэлцүүлж дүгнэлт гаргах тухай

ХМТ –ийн зөвлөх дэд профессор Ж.Сонинбаяр танилцуулсан нь:

Шинжлэх Ухаан, Технологийн Салбарын Гаднагай хөтөлгөөн (ШУГ) /ОХУ–2019/01-хэрэвний дугаартай) “Хэт бага температурт энергийн саадан резонансын системийг тунгуй маягийн замаар дамжин өнгөрөх изоляцуудын хяналт шилжилтийн математикийн загварчлал” 2019-2021 оны төсөл. Төслийн гүйцэтгэгч байгууллага нь МУИС-ийн ХШУИС, удирдагч нар нь шиний бие. ХШУИС –ийн зөвлөх дэдпрофессор Ж.Сонинбаяр ажиллаж төслийн 100 хувийн биелэлтийг тайлжээ. 2022ын, 2023 оны 1-р сарын 26-нд МУИС дээр ирэн ШУТ Салбарын төлөөлөгчид тавьсан. (2019-2021 төслүүдийг covid19 -оолбоотой 1 жилээр зүгжсэн юм) Уг төсөл нь МУИС-д орлого оруулах, Шинжлэх Ухаан, Технологийн Салбар: Тэжээлээ мөн ХШУИС –ийн Эрлийн зөвлөхөөр хэлэлцүүлсэн байх, мөн хамтрагч ОХУ-ын талын төсөл амжилттай дууссан талаар дүгнэлт ирүүлэх шаардлагуудыг тэмцэн. Иймд ХШУИС-ийн эрдмийн зөвлөлийн эрхэм гишүүдэд: Шинжлэх Ухаан, Технологийн Салбарын Гаднагай хөтөлгөөн (ШУГ) /ОХУ–2019/01-хэрэвний дугаартай) “Хэт бага температурт энергийн саадан резонансын системийг тунгуй маягийн замаар дамжин өнгөрөх изоляцуудын хяналт шилжилтийн математикийн загварчлал” 2019-2021 төслийн тайланг хэлэлцэж дүгнэлт гаргах өгнө үү?

Шийдвэрлэсэн нь: ХМТ –ийн зөвлөх дэд профессор Ж.Сонинбаярын удирдсан, ИШУЯ, ШУТСалбарын гаднагай хөтөлгөөн (ШУГ) /ОХУ–2019/01-хэрэвний дугаартай) “Хэт бага температурт энергийн саадан резонансын системийг тунгуй маягийн замаар дамжин өнгөрөх изоляцуудын хяналт шилжилтийн математикийн загварчлал” төслийн гэрчээр хүлээсэн үүрэг биелүүлсэн гэж үзэхээсээг эрдмийн зөвлөлийн гишүүдийн 100% санхээр дэмжин.

Хэлэлцсэн асуудал №5. Төсөл хэлэлцүүлж дүгнэлт гаргах тухай

ХБНТ-ийн профессор Ж.Батхүү МУИС-ийн судалгааны сонгохуйн журмыг сонхуулсан Р2021-4170 дугаартай, Нүүдэлчин монголчуудын уламжлалт өвдөгт тулгуурлан бэлгэсрийн тэмдгийн хэрэг ургамлыг зүй зохиостой ашиглах нь сэтгэл өртөг хувицлах төслийн тайланг танилцуулах.

Шийдвэрлэсэн нь: ХБНТ-ийн профессор Ж.Батхүүтэй удирдсан, Р2021-4170 дугаартай, Нүүдэлчин монголчуудын уламжлалт өвдөгт тулгуурлан бэлгэсрийн тэмдгийн хэрэг ургамлыг зүй зохиостой ашиглах нь сэтгэл өртөг хувицлах төсөл нь сэтгэл өртөг хүлээсэн үүрэг биелүүлсэн гэж үзэх хяналт эрдмийн зөвлөлийн гишүүдийн 100% санхээр дэмжин.

Хэлэлцсэн асуудал №6. Төсөл хэлэлцүүлж дүгнэлт гаргах тухай

ХБНТ-ийн дэд профессор Х.Тэгшжаргал танилцуулсан нь: 2018-2019 оны хооронд хэрэгжсэн ШУТСангийн төслийн тайланг хэлэлцүүлж хаалгах. Гэрээний дагуу JCR индексийг 1 өгүүдэл хэвүүлж байсан нь хүлээгдэж байгаад өнгөрсөн 3 сард хэвлэгдсэн.

Шийдвэрлэсэн нь: ШУТСангийн "Байгалийн гэрэлтэй эх үүсвэрээс гаргив авсан гидроксил ашигт-полимер композит материалыг 3D принтерийн хэлэлцэлийн түүхий эд болгон ашиглах" [ШуСс-2018/48] сэдэвт төслийг гэрээгээр хүлээсэн үүргээ биелүүдсэн гэж үзэж хаахыг эрдмийн зөвлөлийн гишүүдийн 100% санхуар дэмжсэн.

Хэлэлцсэн асуудал №7. Төсөл хэрэгжүүлэх тухай

МКУТ-ийн дэд профессор Б.Сувдаа танилцуулсан нь: ШУТСан (Монгол) болон Шинжлэх Ухаан Технологийн Үндэсний Зөвлөл (Тайвань) байгуулсан саамж бичгийн дагуу Монгол-Тайваний 2024 оноос хэрэгжих хамтарсан төслийн мэдүүдэгт ЭХНТ-ийн дэд профессор С.Отгонцэдэгийн "Гүн сургалтын арга болон VR технологи ашигласан дохионы хэлний хөрвүүлэлт" судалгааны төслийг оруулж байна.

Шийдвэрлэсэн нь: ШУТСан (Монгол) болон Шинжлэх Ухаан Технологийн Үндэсний Зөвлөл (Тайвань) байгуулсан саамж бичгийн дагуу Монгол-Тайваний 2024 оноос хэрэгжих хамтарсан төслийн мэдүүдэгт ЭХНТ-ийн дэд профессор С.Отгонцэдэгийн "Гүн сургалтын арга болон VR технологи ашигласан дохионы хэлний хөрвүүлэлт" судалгааны төслийг дэмжжээ.

Хэлэлцсэн асуудал №8. Гараны компаний үйл ажиллагааны явц

ХМТ –ийн зөвлөх профессор А.Энхбаяр танилцуулсан нь: Гараны дижитал солионис компанийн үйл ажиллагааны явцыг танилцуулав.

Шийдвэрлэсэн нь: МУИС-ийн дэргэдэх Гараны дижитал солионис компанийн үйл ажиллагаа хэвийн явагдаж байна гэж дүгтэв.

Хэлэлцсэн асуудал №9. Докторын дараах тэтгэлэгт хөтөлбөрийн тайланг хэлэлцүүлэх

ХБНТ-ийн эрхлэгч Н.Эрдэнэ Гэрлийн эффектний аргаар алт болон мөнгөнхий нанопартиклийг өөрөө эрэмбэлэгдэх нимгэн үе (Self assembled monolayer) дээр ургуулж хавдрын сенсор бэлтгэх нь сэдэвт докторын дараах тэтгэлэгт хөтөлбөрийн тайланг хэлэлцүүдэв.

Шийдвэрлэсэн нь: ХБНТ-ийн эрхлэгч Н.Эрдэнийн Гэрлийн эффектний аргаар алт болон мөнгөнхий нанопартиклийг өөрөө эрэмбэлэгдэх нимгэн үе (Self assembled monolayer) дээр ургуулж хавдрын сенсор бэлтгэх нь сэдэвт докторын дараах тэтгэлэгт хөтөлбөр тайланг ШУТСанд хүлээлгэн өгөхийг эрдмийн зөвлөлийн гишүүдийн 100% санхуар дэмжжээ.

Хэлэлцсэн асуудал №10. МУИС-д эрдэм шинжилгээний сэтгүүл бүртгүүлэх

ХБООНТ-ийн дэд профессор Ц.Сойл-Эрдэнэ танилцуулсан нь: ШУТИС-ийн эрдэм шинжилгээний бичиг сэтгүүлийг МУИС-г бүртгэлтэй сэтгүүлийн жагсаалтад оруулах

ХАВСРАЛТ 17

Шийдвэрлэсэн нь: "ШУТИС-ийн ЭШ бичиг" сэтгүүлийг МУИС-д бүртгэлтэй сэтгүүлд тавигдах шаардлага хангасан тохиолдолд (Судалгаа, инновацын бодлогын газраар шалгуулах) МУИС-д бүртгэлтэй сэтгүүлийн жагсаалтад оруулахыг дэмжив.

Хэлэлцсэн асуудал №11. Ном, сурах бичиг, гарын авлага

ХБОИТ-ийн дэд профессор Ц.Соёл-Эрдэнэ танилцуулсан нь: Хайтгал ус, ундны усны технологи, менежмент хичээлийн сурах бичиг "Усны чанар ба боловсруулах технологи" номыг ᠘3-рор хэлэлцүүлэх хүсэлтэй байна. Тэнхимийн хурлаар хэлэлцэж дэмжсэн. Мэргэжлийн шинэсэч тэмцүүлсэн.

Шийдвэрлэсэн нь: ХБОИТ-ийн дэд профессор Ц.Соёл-Эрдэний "Усны чанар ба боловсруулах технологи" номыг хайтгал ус, ундны усны технологи, менежмент хичээлийн сурах бичгээр шилжих, Б цагт тооцохыг тус тус дэмжив.

Хэлэлцсэн асуудал №12. Ном, сурах бичиг, гарын авлага

ХМТ-ийн багш Б.Жамьяншарав танилцуулсан нь: ХМТ-ийн багш Б.Жамьяншаравын бичсэн Математик статистик, ХМТ-ийн зөвлөх профессор О.Цэрэнбатын бичсэн Магдалланы онол номуудыг МУИС-и санхүүжилтээр ном сурах бичиг бичин зохиогчийн эрхийг шилжүүлэх гэрээгээр бичсэн. 3 сард хүлээлгэн өсөх хугацаа хэтэрсэн аж байгаа. МУИС-и сурах бичигт тавигдах шаардлагыг хангасан болохыг тодорхойлж өгнө үү!

Шийдвэрлэсэн нь: МУИС-ийн захиалгат төсөл хэрэгжүүлэх, санхүүжүүлэх гэрээгээр санхүүжсэн, Магдалланы онол, математик статистик сэдэвт сурах бичиг зохиох төслийг гэрээгээр хүлээсэн үүргээ биелүүлсэн гэж үзэж хаахыг дэмжив.

Хэлэлцсэн асуудал №13. Ном, сурах бичиг, гарын авлага

ХБИТ-ийн эхлэх багш Ж.Болдбаатар Нанобүтцэт материал (NANO305) хичээлийн лабораторийн гарын авлага 10 хэвцэлийн хуудас бүтээлийг хэлэлцүүлэв.

Шийдвэрлэсэн нь: Ц.Номин, Ж.Болдбаатар, Н.Эрдэнэ, Ч.Гэнзориг нарын зохиогчтой Нанобүтцэт материал (NANO305) хичээлийн лабораторийн гарын авлагыг сургалтад ашиглаж болохыг дэмжив. Зохиогчид тэгш оролцоотойгоор Б цагт кредит тооцохыг дэмжив.

Хэлэлцсэн асуудал №14. Ном, сурах бичиг, гарын авлага

ХБИТ-ийн дэд профессор Г.Тамираа CHEN307 "Химийн инженерчлэлийн лаборатори - Г" хичээлийн гарын авлагыг танилцуулав.

Шийдвэрлэсэн нь: CHEN307 "Химийн инженерчлэлийн лаборатори - Г" хичээлийн гарын авлагыг сургалтад хэрэглэхийг зөвшөөрөн, Б цагт кредит тооцуулахыг дэмжив. Зохиогчид: Г.Тамираа, А.Дэлгэржаргал, Б.Амгалан, Б.Өчирхүүт.

Хэлэлцсэн асуудал №15. Ном, сурах бичиг, гарын авлага

ХБООИТ-ийн дэд профессор Ц.Батчулуун танилцуулсан нь:

Ойн шинжлэх ухааны чиглэлээр судалгаа хийдэг Их Сургууль, Хүрээлэнгүүдийн эрдэмтэн судлаачдын судалгааны бүтээлийг сургалт судалгаа, ойн үйлдвэрлэл, практикт нэвтрүүлэх зорилгоор "Ой тарьж ургуулах тухай" сурах бичгийг эмхэтгэн редакторлон гарган, Ач холбогдол: Ой тарьж ургуулах шинжлэх ухааны үндэстэй арга барил тээмших, Ойг ургуулах талаарх нийгэмийн мэдлэгийг дээшлүүлэх, ойн үйлдвэрлэлийн төсөл тооцоо хийх аргачлал тээмших зэрэг болно. Энэхүү сурах бичиг нь 7 бүлэгтэй, 534 хуудастай, цавсны хэмжээ 172*245, Хэвлэлийн хуудас 56хх, ISBN 978-9919-504-87-8 Ойн аж ахуйн хөтөлбөр болон бусад хөтөлбөрийн холбогдох хичээлүүдэд ашиглах боломжтой тул мэргэжлийн сурах бичгээр батлах, редакторласан багш нарт цаг тооцох боломжтой.

Шийдвэрлэсэн нь: "Ой тарьж ургуулах тухай" сурах бичгийг ойн аж ахуйн хөтөлбөр болон бусад хөтөлбөрийн холбогдох хичээлүүдэд ашиглах боломжтой тул мэргэжлийн сурах бичгээр ашиглаж болохыг дэмжив. Б.Шат зохиогчдын оролцоог харгалзан кредит тооцохыг дэмжив.

Хэлэлцсэн асуудал №16. Төсөл хэрэгжүүлэх тухай

ХБООИТ-ийн дэд профессор Ц.Батчулуун танилцуулсан нь: Инженерчлэлийн судалгааны арга зүй 2001 номоо шинэчлэн сайжруулж бичгээр танилцуулж буй бөгөөд төсөл бичиж, сэлжүүлэлт авах хүсэлтэй байна. Дэмшиж өгнө үү!

Шийдвэрлэсэн нь: Инженерчлэлийн судалгааны арга зүй 2001 номоо шинэчлэн сайжруулж, төсөл мэдүүлэхийг дэмжив.

Хэлэлцсэн асуудал №17. Ном, сурах бичиг, гарын авлага

МКУТ-ийн дэд профессор Б.Сувдаа танилцуулсан нь:

Компьютерийн хэрэгтэй үндсэн ойлголт номын 3 дахь хэвлэлийг гарын авлага гэж тооцуулан Б.Шат тооцуулахтар оруулан байна. Зохиогчид Б.Сувдаа, Э.Шүрэнцэцэг, Г.Ууганбаяр, редактор Ж.Пүрэв, Б.Сувдаа, "Компьютерийн Хэрэгтэй Үндсэн Ойлголтууд" гарын авлагын агуулгыг шинэчлэн бичив. Энэхүү гарын авлага нь компьютерийн үндсэн ойлголт, интернэт ба сүлжээ, Word 2021, Excel 2021 ба PowerPoint 2021 гэсэн үндсэн таван бүлэгтэй. Гарын авлагад орсон өөрчлөлт нь бүлэг 1-ийг Windows 8" агуулгыг "Windows 10"-ын агуулгаар шинэчилж, системийн тохиргоо, аюулгүй байдлын талаар нэмж,Бүлэг 2-ийг "Интернэт ба сүлжээ" бүлэгийн агуулгыг шинэчилж гүүгчийн боломжууд болон ChatGPT-ийн талаар нэмж, Бүлэг 3, 4 ба 5-ийг Microsoft Office 2010 программын талаарх агуулгыг Microsoft Office 2021-ээр шинэчилсэн. Ингэхдээ бүлэг бүрийн үзэсний зургуудыг шинэчилсэн ба нэмэгдсэн хэсгүүдийг тайлбарлан оруулсан. Өмнөх хэвлэлийн 308 ширхэг зурга 335 болж, хуудасны тоо өмнө нь 158 байснаас 167 болсон. ISBN дугаар 978-9919-0-0990-8, хэвлэлийн хуудас 21. Уг гарын авлагыг МУИС-ийн ерөнхий суурийн Мэдээллийн технологийн үндэс, Компьютер тооцооллын үндэс, Мэдээлэл харилцаа холбооны технологийн үндэс зэрэг хичээлүүдийн семинарын хичээлд ашиглах боломжтой. Мөн компьютерийн хэрэгтэнд суралцаж буй олон нийтэд гарын авлага болон хэрэгтэй.

Шийдвэрлэсэн нь: Б.Сүхдаг, Э.Шүрэнцэцэг, Г.Ууганшар зохиогчтой, Ж.Пүрэв, Б.Сүхдаг редактортой “Компьютерийн хэрэгсэл үндсэн ойлголт” номын Зөвхөн хэвлэлийг гарын авлага гэж тооцон Б шат (зохиогчдын оролцоог харгалзан Б.Сүхдаг-И-4хх, Э.Шүрэнцэцэг 1хх, Г.Ууганшар 0.6хх) кредит тооцохыг дэмжих.

Хэлэлцсэн асуудал №18. Ном, сурах бичиг, гарын авлага

ХНУИС-ийн Эрлийн зөвлөлийн нарийн бичгийн дарга Н.Оюун-Эрдэнэ танилцуулсан нь: ХБООНТ-ийн профессор О.Алтантүхч Хүрээлэн буй орчин судлалын нэр томьёоны Англи – Монгол тайлбар тома, Монгол – Англи толь бичиг” номыг МУИС-ийн сургалтат шилжих тухай, Б шат тооцуулах боломжтой эсэхээр эрдэмийн зөвлөлд асуудал оруулах хүсэлтийг ирүүлсэн байна.

Шийдвэрлэсэн нь: МУИС-ийн профессор О.Алтантүхчийн оруулсан зөмхөгчтэй “Хүрээлэн буй орчин судлалын нэр томьёоны Англи – Монгол тайлбар тома, Монгол – Англи толь бичиг” номыг эрдэмийн зөвлөлөөр хэлэлцүүлэхэд зохиогч нь өөрөө танилцуулах нь зүйтэй гэж үзэв.

Хэлэлцсэн асуудал № 19. ЭЦШ-ийн сэтгүүл МУИС-г бүртгэлтэй сэтгүүлийн жагсаалтад оруулах тухай

ХБНТ-ийн дэд профессор Ц.Тогтоо танилцуулсан нь: ШУТИС-ийн ХШУС, Монголын химийн шинжлэлтэй хамтран жил бүр эрхэлж гаргадаг “ШАМ-ын химь, боловсруулалт ба экологийн асуудлууд” эрдэм шинжилгээний сэтгүүлийг МУИС-г бүртгэлтэй сэтгүүлийн жагсаалтад оруулж өгнө үү. Уг сэтгүүл нь одоогийн байдлаар 10-н дугаар хэвлэгдэн гарсан байна бөгөөд бүх дугаар нь МУИС-ийн номын санга байдаг, Catalog.mnu.edu.mn хаягаар орж хараж болноор байна.

Шийдвэрлэсэн нь: “ШАМ-ын химь, боловсруулалт ба экологийн асуудлууд” эрдэм шинжилгээний сэтгүүлийг МУИС-д бүртгэлтэй сэтгүүлд тавигдах шаардлага хангасан тохиолдолд (Судалгаа, итгэмжлэл бодлогын өгөрлөр шилжүүлэх) МУИС-д бүртгэлтэй сэтгүүлийн жагсаалтад оруулахыг дэмжих.

Хэлэлцсэн асуудал №20. Бүтээлийн чөлөө хүсэх тухай

ХМТ-ийн дэд профессор Э.Мөнххандог танилцуулсан нь: 2023 оны 9-р сарын 1-ээс 2024 оны 8-р сарын 10 хүртэлх хугацаанд Япон улсын Нагояа, Чую их сургуульд “Монголын шар шороон шуурганы уур амьсгалын нөхцлийн судалгаа” буюу шароон шуурганы чиглэлээр судалгааны ажил гүйцэтгэхээр болсон тул МУИС-ийн Хөдөлмөрийн дотоод журмын 4.3.6, 4.4.10, 7.1.1, 7.1.3, 7.1.6, 7.4.1, 7.4.3.1 заалтуудыг үндэслэн 2023-2024 оны нэгдлийн жилд 12 сарын хугацаатай бүтээлийн чөлөө олгохыг зөвшөөрч өгнө үү.

Шийдвэрлэсэн нь: ХМТ-ийн дэд профессор Э.Мөнххандогт 12 сарын хугацаатай бүтээлийн чөлөө олгохыг дэмжих.

Хэлэлцсэн асуудал №21. Ном, сурах бичиг, гарын авлага

ХМТ-ийн дэд профессор Э.Мөнхцэнэг танилцуулсан нь: ХААНУ номын эрдмийн анхдөрвөр оруулан Б цагт тооцуулсан /270 хуудсаар, тэгмэ-д хурлын шийдвэр болоод 2022 онд тооцуулсан номын хуудсны баримтыг хявсаргалаа/, 2022-2023 оны хичээлийн жилд номын хондлогчийн шүүгчид үргэлжлүүлэн номын редактораар ажигласан бөгөөд 2023 онд редакторын санлаар нэмэлт засвар хийснээр, хуудасны тоо нэмэгдсэн /340 хуудас, редакторын 2 эргэлтэй удаагийн санал шүүмжийн хэлтэс хамаргив/, Нэмэлт 70 нүүр хуудсанд Б кредит тооцуулах хүсэлтэй байна.

Шийдвэрлэсэн нь: ХМТ-ийн дэд профессор Э.Мөнхцэнэгийн номын нэмэлт 70 нүүр хуудсанд Б цаг тооцохыг дэмжлэг.

Хэлэлцсэн асуудал №23. Ном, сурал бичиг, гарын ачлагч

ХБНТ-ийн дэд профессор О.Одгэрал Хэрэглээний генетик хичээлийн гарын ачлагч танилцуулав.

Шийдвэрлэсэн нь: Хэрэглээний генетик хичээлийн гарын ачлагч сурвалтад шилжих, Б цаг тооцохыг дэмжлэг.

Тэмдэгтэд зөтөлсөн:

ХШУИС-ийн эрдмийн зөвлөлийн нарийн бичиг Профессор, Н.Оюул-Эрдэнэ

Хянасан: ХШУИС-ийн эрдмийн зөвлөлийн дарга *Х.Бямбажав* Профессор, Д.Бямбажав



ХАВСРАЛТ 18

Отзыв о совместной работе по Монголо-Российскому проекту 2019-2021 гг.

РФФИ № 19-51-44002

для Фонда науки и технологии Монголии

Название проекта (на русском языке):

Математическое моделирование квантового просеивания изотопов посредством туннельного прохождения через резонансную систему энергетических барьеров при сверхнизких температурах

Название проекта (на английском языке):

Mathematical modeling of quantum sieving due to tunneling through the resonant system of energy barriers at ultra-low temperatures

Название проекта (на монгольском языке):

Хэт бага температурт энергийн саадын резонансын системийг туннелийн маягийн замаар дамжин өнгөрөх изотопуудын квантын шигшилтийн математик загварчлал

Разделение изотопов, т.е. частиц с очень близкими свойствами, оказалось возможным лишь с применением резонансного эффекта. Поэтому эта сложная задача была разделена руководителем совместного международного проекта на две части. Эти части выполнялись Российской группой под руководством д.ф.-м.н. М.А. Бубенчиков и Монгольской группой под руководством к.ф.-м.н. Жамбаа Сонинбаяра. Объединенными усилиями были получены важные результаты по квантовому просеиванию изотопов гелия. Считаю, что Монгольская сторона успешно выполнила свою работу в срок и в полном объеме.

Руководитель Российской группы проекта
д.ф.-м.н., доцент кафедры теоретической механики,
в.н.с. регионального научно-образовательного
математического центра
Национального исследовательского
Томского государственного университета



М. А. Бубенчиков



Подпись удостоверяю
Ведущий документовед
Андреев И. В.



ХАВСРАЛТ 19

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



СВИДЕТЕЛЬСТВО

о государственной регистрации программы для ЭВМ

№ 2021680468

Quantum sieving 2.0: Моделирование квантового просеивания изотопов через двухслойные мембраны методом сшивки

Правообладатель: *Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» (RU)*

Авторы: *Потерьева Валентина Александровна (RU), Бубенчиков Михаил Алексеевич (RU)*

Заявка № 2021669508

Дата поступления 02 декабря 2021 г.

Дата государственной регистрации

в Реестре программы для ЭВМ 10 декабря 2021 г.



Руководитель Федеральной службы
по интеллектуальной собственности

Г.П. Илларионов
Г.П. Илларионов

ХАВСРАЛТ 20

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



СВИДЕТЕЛЬСТВО

о государственной регистрации программы для ЭВМ

№ 2021680775

Quantum sieving 1.0: Моделирование квантового просеивания изотопов через двухслойные мембраны

Присобладатель: *Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» (RU)*

Авторы: *Потеряева Валентина Александровна (RU), Бубенчиков Михаил Алексеевич (RU)*



Заявка № 2021669466

Дата поступления 02 декабря 2021 г.

Дата государственной регистрации

в Реестре программ для ЭВМ 14 декабря 2021 г.

Руководитель Федеральной службы
по интеллектуальной собственности

 Г.Л. Пospelov

ХАВСРАЛТ 21

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



СВИДЕТЕЛЬСТВО

о государственной регистрации программы для ЭВМ

№ 2021680776

Quantum sieving 3.0: Моделирование квантового просеивания изотопов через двухслойные мембраны с использованием полиномов Эрмита

Привладелец: *Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» (RU)*

Авторы: *Потеряева Валентина Александровна (RU), Бубенчиков Михаил Алексеевич (RU)*



Заявка № 2021669467

Дата поступления 02 декабря 2021 г.

Дата государственной регистрации

в Реестре программ для ЭВМ 14 декабря 2021 г.

Руководитель Федеральной службы
по интеллектуальной собственности

Г. П. Волков Г. П. Волков

ХАВСРАЛТ 22

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



СВИДЕТЕЛЬСТВО

о государственной регистрации программы для ЭВМ

№ 2021666869

Contact

Правообладатель: *Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Бурятский государственный университет имени Доржи Банзарова» (RU)*

Авторы: *Цыдыпов Севан Гуро-Цыренович (RU), Бубенчиков Михаил Алексеевич (RU)*

Заявка № 2021660944

Дата поступления 09 июля 2021 г.

Дата государственной регистрации

в Реестре программ для ЭВМ 21 октября 2021 г.



Руководитель Федеральной службы
по интеллектуальной собственности

Г.П. Израиль

ХАВСРАЛТ 23

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



СВИДЕТЕЛЬСТВО

о государственной регистрации программы для ЭВМ

№ 2021666867

Plast

Правообладатель: *Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Бурятский государственный университет имени Доржи Банзарова» (RU)*

Авторы: *Цыдыпов Севан Гуро-Цыренович (RU), Бубенчиков Михаил Алексеевич (RU)*

Заявка № 2021660943

Дата поступления 09 июля 2021 г.

Дата государственной регистрации
в Реестре программ для ЭВМ 21 октября 2021 г.



Руководитель Федеральной службы
по интеллектуальной собственности

 Г.П. Павлов

ХАВСРАЛТ 24

List of Publications of Dr. Jambaa Soninbayar

/12.06.2023/

Papers

1. Battsuren S., Jambaa S. Optimal control of the movement of vehicles, Annals of the Mongolian Institute of Mathematics, Mongolian Academy of Sciences, Ulaanbaatar, Mongolia, No. 7, p. 62-68, 1987.
2. Jambaa S. Some spectral properties in the Ergodic theory of dynamical systems, Annals of the Mongolian Institute of Mathematics, National University of Mongolia, Ulaanbaatar, Mongolia, ISBN 99929-5-587-2, No. 8 (186), p. 119-121, 2001.
3. Shetstobitov A.A, Jambaa S., Usenko O.V, Tserenova V.B., Firsov D.K., Interaction of molecules with a system of nanoparticles, Izvestiya Vuzov Fizika (Russian Physics Journal), Russia, №8 / 2, p. 210-214, 2014.
<https://persona.tsu.ru/Publications/Info/6201?publicationId=113399>
4. Bubenchikov A.M. , Bubenchikov M.A., Potekaev A.I., Usenko O.V., Jambaa S., Kulagina V.V. The Effect of Graphene Shape on its Ability to Separate Gases, Russian Physics Journal, Volume 58, Issue 12, p. 1711–1719, 2016.
<http://link.springer.com/article/10.1007/s11182-016-0706-y>
5. Bubenchikov A.M. , Bubenchikov M.A, Potekayev A.I, Usenko OV, Jambaa S., Kulagina V.V. Influence of the shape of graphene on its ability to separate gases, Izvestiya Vuzov Fizika (Russian Physics Journal), Russia, №12. p. 39-45, 2015.
<http://elibrary.ru/item.asp?id=25360600>
6. Jambaa S., Kasatkina T.V., Bubenchikov A.M. On the determination of the constants in the Christoffel-Schwartz integral by the method of Kufarev, Vestnik TSU, Mathematics and Mechanics, Tomsk, Russia, №5 (43), p. 21-27, 2016.
http://www.mathnet.ru/php/archive.phtml?wshow=paper&jrnid=vtgu&paperid=545&option_lang=rus
7. Bubenchikov M.A., Bubenchikov A.M., Usenko O.V., Poteryaeva V.A., Jambaa S. Separation of gases using ultra-thin porous layers of monodisperse nanoparticles, EPJ Web of Conferences 110,01014 (2016).
http://www.epj-conferences.org/articles/epjconf/abs/2016/05/epjconf_toet2016_01014/epjconf_toet2016_01014.html

8. Jambaa S., Some classical theorems, properties and examples of ergodic theory of dynamical systems, Vestnik of BSU, Mathematics, Computer Science, UDC 517.9, №2, p. 3-7, Ulan-Ude, Russia, 2017.
9. Jambaa S., Kasatkina T.V., Bubenchikov A.M., Application of the method of P.P. Kufarev to the solution of the problem of groundwater movement under hydraulic engineering structures, Vestnik TSU, Mathematics and Mechanics, UDC 517.54, №47, pp 15-21, Tomsk, Russia, -2017.
10. Dashdondog Ts., Jambaa S. The classical techniques for the Volterra operators, Studia Math. Poland, 2017. (submitted)
11. Bubenchikov M.A., Ukolov A.V., Ukolov R.Yu., Jambaa S. On the selective properties of nanoscale bifurcation, Tomsk State University, Journal of Mathematics and Mechanics, UDC 531.351, №51, pp.104-116, Tomsk, Russia, February 2018.
12. V A Poteryaeva , M A Bubenchikov, S Jambaa , D Gankhuyag, D Tsedenbayar, Quantum tunneling of molecules through compound barriers, Journal of Physics: Conference Series, 1537 012008, 22 June 2020.
<https://iopscience.iop.org/issue/1742-6596/1537/1>
13. Alexey Mikhailovich Bubenchikov, Mikhail Alekseevich Bubenchikov, Soninbayar Jambaa, Aleksandr Viktorovich Lun-Fu, and Anna Sergeevna Chelnokova, Low-temperature separation of helium-helion mixture, Reviews on Advanced Materials Science, volume 59; Issue 1, 361-370, 10 Aug 2020.
<https://www.degruyter.com/view/journals/rams/59/1/article-p361.xml>
14. Bubenchikov M.A., Bubenchikov A.M., Jambaa S., Lun-Fu A.V., Chelnokova A.S., ANALYTICAL SOLUTION OF THE SCHRÖDINGER INTEGRAL EQUATION, Tomsk State University, Journal of Mathematics and Mechanics, №67, - pp.5-17, DOI: 10.17223/19988621/67/1, Tomsk, Russia, -2020.
http://journals.tsu.ru/mathematics/&journal_page=archive&id=2030
15. Lun-Fu A.V., Bubenchikov M.A., Jambaa S., Tsydypov S.G.-Ts. Determining frequencies of transverse vibrations for crossovers and dead ends of gas pipelines, Tomsk State University, Journal of Mathematics and Mechanics, №68, - pp.95-105, DOI 10.17223/19988621/68/9, Tomsk, Russia, -2020.
16. Alexey Mikhailovich Bubenchikov, Mikhail Alekseevich Bubenchikov, Anna Sergeevna Chelnokova ,* and Soninbayar Jambaa, An Analytical Solution to the Problem of Hydrogen Isotope Passage through Composite Membranes Made from 2D Materials, Mathematics 2021, 9(19), 2353, 22 September 2021.
<https://doi.org/10.3390/math9192353>
17. Valentina A Poteryaeva¹, Alexey M Bubenchikov^{1,2}, Michael A Bubenchikov^{1,3}, Alexandr V Lun-Fu⁴ and Soninbayar Jambaa⁴, Helium isotope separation by bi-layer membranes of g-C₃N₄, Published 22 December 2021 • © 2021 Vietnam Academy of

Conferences

1. Jambaa S. Some ergodic properties of group transformations, International Conference on Mathematics, Institute of Mathematics, National University of Mongolia, Ulaanbaatar, Mongolia, 2001.
2. Jambaa S. Isomorphism and the spectral isomorphism of an invertible measure-preserving transformation in ergodic theory, National Conference for the Mongolian Mathematics Day, Institute of Mathematics, National University of Mongolia, Ulaanbaatar, Mongolia, 24/X, 2003.
3. Jambaa S. Some classical properties of the ergodic theory of dynamical systems on examples and their proofs, The 5th International Conference for Young Scholars, Students and Aspirants, Problems of Natural Mathematics Education, Solikamsk, Russia, 15-16/IV, 2011.
4. Jambaa S. Dynamical systems with the property of mixing and ergodicity of examples, The 4th International Conference on Optimization, Simulation and Control, Ulaanbaatar, Mongolia, 1-4/VII, 2013.
5. Jambaa S. The problem of the motion of sand waves, Conference for Mathematics: Theoretical and Applied Mathematics, and Mathematics Education, Institute of Mathematics, National University of Mongolia, Ulaanbaatar, Mongolia, 14/V, 2015.
6. Jambaa S. Determining the Christoffel-Schwartz constant and Kufarev's method, The 8th International Conference for Laurentian Readings on Mathematics, Mechanics and Physics, Novosibirsk, Russia, 2015.
7. Bubenchikov M.A., Bubenchikov A.M., Usenko O.V., Poteryaeva V.A., Jambaa S. Separation of gases using ultra-thin porous layers of monodisperse nanoparticles, The 6th All Russian Scientific Conference with Foreign Participants, Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russia, 13-15/X, 2015.
8. Jambaa S. Some basic properties and examples in the theory of dynamical systems, The 10th International Conference on Optimization: Techniques and Applications, Ulaanbaatar, Mongolia, 23-26/VII, 2016.
9. Jambaa S. Applications of the Kufarev method to a conformal mapping using the Christoffel-Schwartz integral, First International Conference on Applied Science and Engineering-Proceeding 2019, Mongolian University of science and technology, Ulaanbaatar, Mongolia, 05-06/IV, 2019.
10. Jambaa S. Kufarev's method for conformal mapping with the Schwarz-Chisoffel integral in some practical problems, the 6th International Conference on Optimization, simulation and control (COSC 2019), program and abstracts, pp.64-65, 21-23/06.2019, Ulaanbaatar, Mongolia.
11. Jambaa S. Conformal mapping by the Schwarz-Christoffel integral, some applications, Scientific conference "Applied Mathematics 2019", NUM, 23/XI 2019, Ulaanbaatar, Mongolia.

12. Jambaa S. Потоки тяжелой несжимаемой жидкости, Международная конференция «Декабрьские чтения в Томске», 10-15/XII, 2019, г.Томск , РФ.
13. Jambaa S. Обтекание препятствий потоком тяжелой несжимаемой жидкости, the International Conference "Dynamics in Siberia", February 24-29, 2020, Novosibirsk, Russia.
14. Valentina A. Poteryaeva, Alexey M. Bubenchikov, Michael A. Bubenchikov and Soninbayar Jambaa. Hydrogen isotope separation via carbon nitride bi-layer membrane, the 3rd International SNAIA2020 Conference- Smart Nanomaterials: Advances, Innovations and Applications, Online Conference, the Book of Abstracts pp 116, 8-11 December 2020, Paris, France.
15. Jambaa S., Determining fluid flow lines around obstacles using Kufarev's method in conformal descent, , "Applied Matheematics 2020" academic conference, NUM, MUST, 15/05 2021, Ulaanbaatar, Mongolia.
16. Jambaa Soninbayar. Relationship between ergodicity and mixing in the ergodic theory of dynamical systems, "Applied Matheematics 2021" academic conference, NUN, MUST, 24/01 2022, Ulaanbaatar, Mongolia.
17. Jambaa S., Conformal mapping using the Christoffel-Schwartz integtal, **transformations and appications**, "The 7th International Conference on Optimization, Simulation and Control · June 20-22, 2022 | Ulaanbaatar, Mongolia.

PROJECT

1. ШУТ-ийн сангаас санхүүжүүлж байгаа “Операторын онол, хэрэглээ” төсөлд Ж.Сонинбаяр гүйцэтгэгчээр. Хугцаа:2017.06-2019.12. Хэрэгжүүлэгчээр МУИС-ийн Математикийн Хүрээлэн. Удирдагч: ШУТИС-ийн доктор, профессор Д.Цэдэнбаяр.

2. ШУТ сангийн Монгол-Оросын хамтарсан 2019.06-2022.12 "Хэт бага температурт энергийн саадын резонансын системийг туннел маягийн замаар дамжин өнгөрөх изотопуудын квант шигшилтийн математик загварчлал" төсөлд Монголын талын удирдагч: МУИС-ийн ХШУИС-ийн ХМТ-ийн доктор, дэдпрофессор Ж.Сонинбаяр.

Written by

/Dr. Jambaa Soninbayar /