

Эрдэнэт үйлдвэрийн хүдэр болон зэс, молибдений баяжмалын рентген дифракцын судалгаа

Л.Ням-Очир^{1*}, Ч.Дашжаргал¹, Р.Галбадрах¹, Н.Цогбадрах¹, Ц.Даржаа², Д.Дорж²

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

²Монгол Улс, Улаанбаатар-210646, Монгол Улсын Их Сургууль, Хими Хими Инженерчлэлийн Сургууль,
Ерөнхий аналитик химийн тэнхим
*Э-шуудан nyam_ochir@yahoo.com

Эрдэнэт үйлдвэрийн баяжуулалтын процессийн шат дамжлагуудаас авсан хатуу дээжүүдэд рентген дифракцын аргаар чанарын фазын анализ хийж зэс, молибден агуулсан нэгдлүүдийн кристалл бүтцийг тодорхойлон торын параметруудийг тооцов. Зэс агуулсан нэгдэл CuFeS_2 халькопиритийн эгэл тор нь тетрагональ сингонийн огторгуйн симметрийн $I-4 2 d$ групптэй ба торын параметрууд нь: $a=5.289(1) \text{ \AA}$, $c=10.423(1) \text{ \AA}$, молибден агуулсан нэгдэл MoS_2 молибденитийн эгэл тор нь гексагональ, ба симметрийн огторгуйн групп нь: $P 63/m m c$, торын параметр нь $a=3.14(1) \text{ \AA}$, $c=12.53(1) \text{ \AA}$ болохыг өгөгдлийн сан ашиглан тодорхойлов. Баяжмал дахь MoS_2 , CuFeS_2 нэгдлүүдийн агууламж 5,6-р саруудад буурсан байгааг дифрактограмм дахь эрчмийн уналтаар тооцсон бөгөөд баяжуулах технологид сонирхож буй нэгдлүүдийн бүтцийн өөрчлөлттэй холбоотой нөлөө байхгүй гэдэг дүгнэлтийг гаргав.

Түлхүүр үг: рентген дифракц, кристалл фазын чанарын анализ

I. ОРШИЛ

Эрдэнэт үйлдвэрийн баяжуулах процессийн явцад улирлын чанартай гардаг үр дүнгийн өөрчлөлтөнд зэс болон молибден агуулсан нэгдлүүдийн кристалл бүтцийн өөрчлөлт онолын үүднээс нөлөө үзүүлэх боломжтой юм. Иймээс тус асуудлыг туршлагаар шалгаж дүгнэлт өгөх нь тус ажлын зорилго байсан бөгөөд судалгаандаа 2011 оны 3-аас 10-р саруудад үйлдвэрийн шат дамжлагуудаас дээж авч ажилласан.

Бодисын кристалл бүтцийг тодорхойлохдоо нунтаг дээжийн рентген дифракцын аргаар [1,2] судалсан бөгөөд үр дүнг PDF-2 өгөгдлийн сан[3] ашиглаж торын симметр, параметруудийг тодорхойллоо.

II. ХЭМЖИЛТ БА ФАЗЫН АНАЛИЗ

Рентген дифракцын аргаар Эрдэнэт үйлдвэрийн шат дамжлагуудаас авсан дээжүүдийг судлахдаа МУИС-ийн ФЭС дэхь PW1800 нунтаг дээжийн дифрактометр[4] хэмжилтийг 5^0 - 60^0 өнцөгийн хооронд 0.03^0 алхамтайгаар гүйцэтгэв.

Хэмжилтэнд ирсэн Эрдэнэт үйлдвэрийн дээжүүд үйлдвэрийн баяжуулах шатлалын дагуу дараах байдлаар нэрлэгдсэн байна. Үүнд:

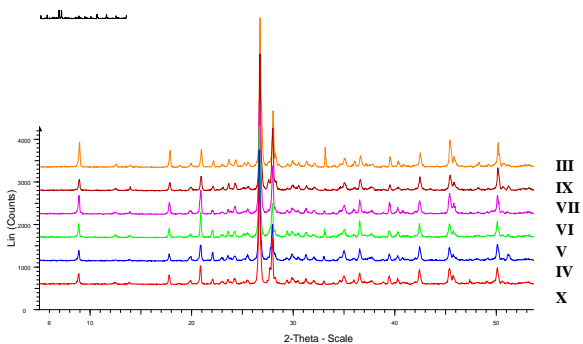
- Питани –хүдэр
- Коллек концентрат – хам баяжмал
- Си–Мо концентрат – Си-Мо баяжмал
- Мо концентрат – молибдениг баяжмал
- Си концентрат - зэсийн баяжмал

Эрдэнэт үйлдвэрийн 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10-р саруудын хатуу дээжүүдэд гүйцэтгэсэн рентген дифракцын хэмжилтүүд болон тэдгээрт хийсэн чанарын фазын анализын үр дүнг дээр дурьдсан нэрсийн дарааллаар авч үзье.

A. Хүдэр

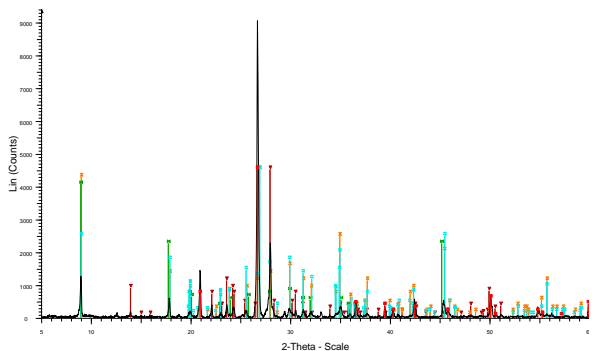
Эрдэнэт үйлдвэрийн 3, 4, 5, 6, 7, 9, 10 саруудын хүдрийн хэмжилтийн спектруудийг харьцуулан үзэхэд (зураг 1) пикүүдийн байрлал нь ижил байгаа тул аль нэг сарын дээжийг сонгон фазын анализ хийхэд хангалттай. Харин пикүүдийн эрчим нь ялгаатай байна.

Хүдэрт хийгдсэн фазын анализаас үзэхэд



Зураг 1 Хүдрийн рентгенидифракцын спектрууд. Хэвтээ тэнхлэгийн дагуу сарнилын өнцөг, босоо тэнхлэгийн дагуу эрчим. Ромбо тоогоор дээж авсан саруудыг тэмдэглэв.

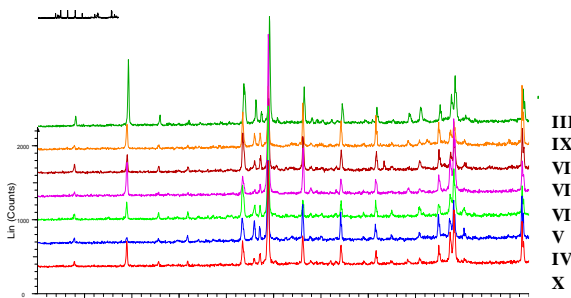
(зураг 2) кварц, албит, мусковит, иллит зэрэг кристаллууд давамгайлах агууламжтайгаар илрэв.



Зураг 2 Хүдрийн фазын чанарын анализын дүн. Кварц (SiO_2), албит ($NaAlSi_3O_8$), мусковит ($KAl_2(Si_3Al)O_{10}(OH,F)_2$), иллит ($(K,H_3O)Al_2Si_3AlO_{10}(OH)_2$) зэрэг кристалл бүтцүүд давамгайлах концентрацитайгаар илрэв.

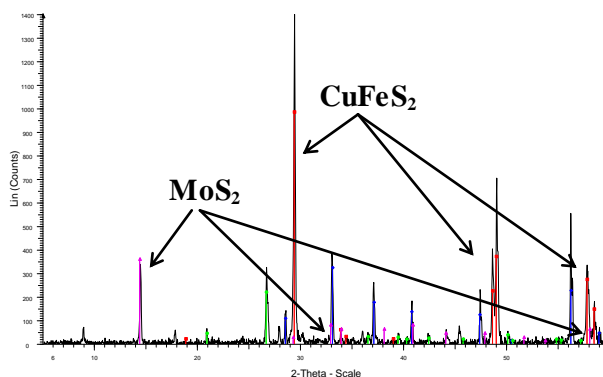
Б. Хам баяжмал

Эрдэнэт үйлдвэрийн 3-10 сарын хам баяжмалын хэмжилтийн спектруудийг



Зураг 3. Хам баяжмалын рентгенидифракцын спектрууд. Хэвтээ тэнхлэгийн дагуу сарнилын өнцөг, босоо тэнхлэгийн дагуу эрчим. Ромбо тоогоор дээж авсан саруудыг тэмдэглэв.

харьцуулан үзэхэд (зураг 3) пикүүдийн байрлал нь ижил байгаа тул аль нэг сарын дээжийг сонгон фазын анализ хийхэд бусад сарын дээжүүд мөн тайлбарлагдана.

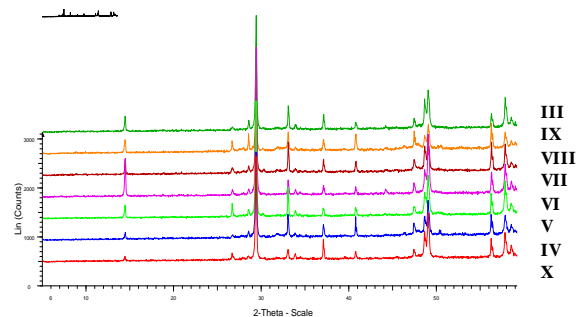


Зураг 4. Хам баяжмалын фазын чанарын анализын дүн. Халькопирит ($CuFeS_2$), Пирит (FeS_2), Кварц (SiO_2), Молибдений сульфид (MoS_2) зэрэг кристалл бүтцүүд илрэв.

Хам баяжмалд хийгдсэн чанарын фазын анализын дүнг үзэхэд (зураг 4) халькопирит, пирит, кварц, молибдений сульфид гэх бүтцүүд илрэв.

В. Си-Мо баяжмал

Эрдэнэт үйлдвэрийн 3-10 сарын Си-Мо баяжмалын хэмжилтийн спектруудийг

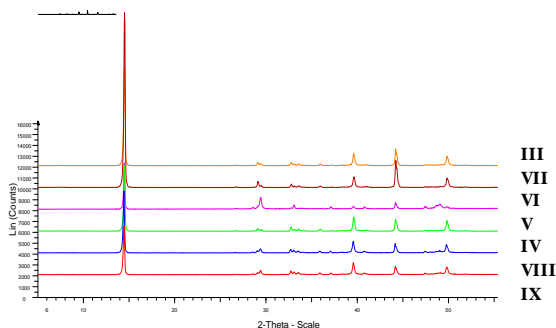


Зураг 5. Си-Мо баяжмалын рентгенидифракцын спектрууд. Хэвтээ тэнхлэгийн дагуу сарнилын өнцөг, босоо тэнхлэгийн дагуу эрчим. Ромбо тоогоор дээж авсан саруудыг тэмдэглэв.

харьцуулан үзэхэд (зураг 5) пикүүдийн байрлал нь ижил байгаа тул аль нэг сарын дээжийг сонгон фазын анализ хийхэд бусад сарын дээжүүд мөн тайлбарлагдана. Си-Мо баяжмалд хийсэн фазын чанарын анализын дүнд Халькопирит, Пирит, Кварц, Молибдений сульфид зэрэг кристалл бүтцүүд илрэв.

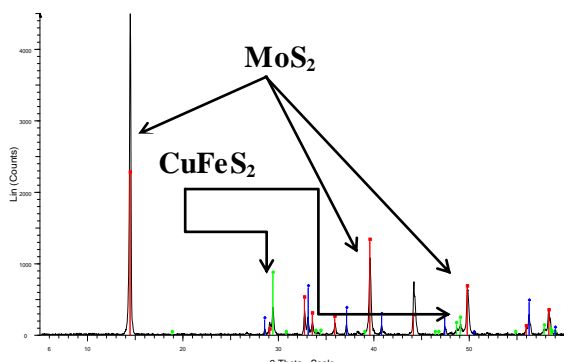
Г. Молибдений баяжмал

Эрдэнэт үйлдвэрийн 3, 4, 5, 6, 7, 8 ба 9 саруудын молибдений баяжмалын хэмжилтийн спектруудийг харьцуулан үзэхэд (зураг 6) пикүүдийн байрлал нь ижил байгаа тул аль нэг сарын дээжийг сонгон фазын анализ хийхэд бусад сарын дээжүүд мөн тайлбарлагдана. Молибдений баяжмалын фазын чанарын анализын дүнд (зураг 7) Молибденитын



Зураг.6 Молибдений баяжмалын рентгендифракцын спектрууд. Хэвтээ тэнхлэгийн дагуу сарнилын өнцөг, босоо тэнхлэгийн дагуу эрчим. Ромбо тоогоор дээж авсан саруудыг тэмдэглэв.

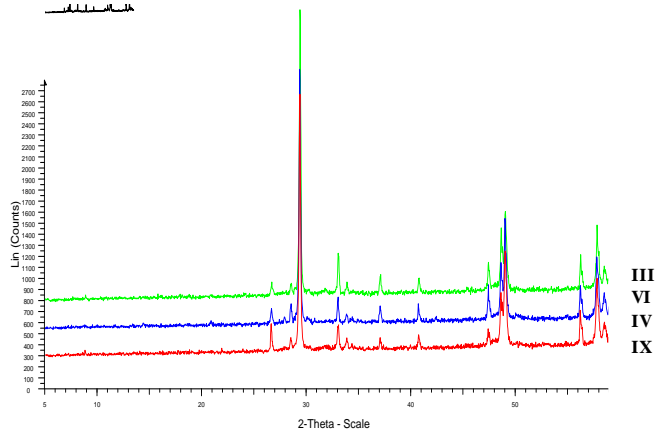
кристал бүтцийн эзлэх хувь их байгаа нь харагдаж байна.



Зураг 7. Молибдений баяжмалын хийсэн фазын чанарын анализын дүн. Молибденит (MoS_2), Халькопирит ($CuFeS_2$), Пирит (FeS_2) зэрэг кристалл бүтцүүд илрэв.

Д. Зэсийн баяжмал

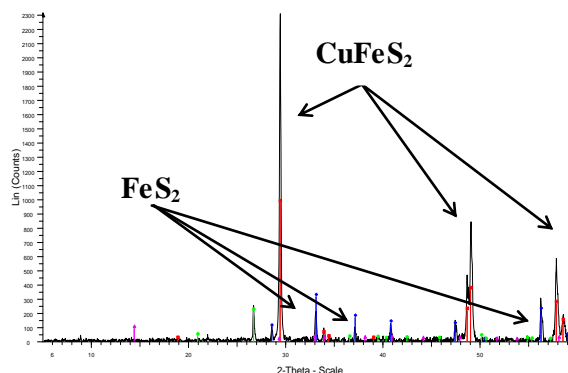
Эрдэнэт үйлдвэрийн 3, 4, 6 ба 9 саруудын зэсийн баяжмалын хэмжилтийн спектруудийг зураг 8-д харьцуулан үзүүлэв. Энд мөн л



Зураг 8. Зэсийн баяжмалын рентгендифракцын спектрууд. Хэвтээ тэнхлэгийн дагуу сарнилын өнцөг, босоо тэнхлэгийн дагуу эрчим. Ромбо тоогоор дээж авсан саруудыг тэмдэглэв.

пикүүдийн байрлал нь ижил байгаа тул нэг сарын дээжийг сонгон фазын анализ хийв.

Cu концентрат дээжид хийсэн фазын чанарын анализын дүнд (зураг 9) Халькопирит, Пирит, болон Кварц илрэв.



Зураг 9. Зэсийн баяжмал фазын чанарын анализын дүн. Халькопирит ($CuFeS_2$), Пирит (FeS_2), Кварц (SiO_2), зэрэг кристалл бүтцүүд илрэв.

III. ҮР ДҮН ХЭЛЭЛЦҮҮЛЭГ

Эрдэнэт үйлдвэрийн шат дамжлагууд дахь сар бүрийн дээжүүдийн рентген спектрээс үзэхэд зэс агуулсан Халькопирит $CuFeS_2$, молибден агуулсан Молибденит MoS_2 нэгдлүүд голлон илэрч байна.

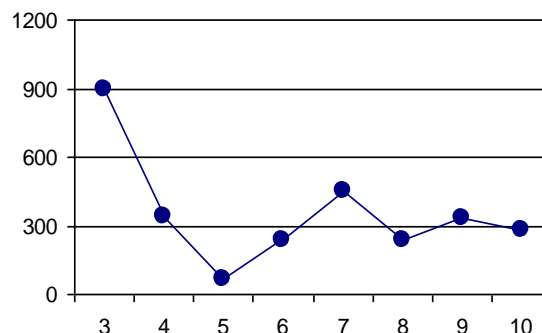
Халькопирит $CuFeS_2$ -ийн кристалл бүтэц:
Тетрагональ, симметрийн огторгуйн групп нь: $I-42d$, торын параметрууд нь: $a = 5.289(1) \text{ \AA}$, $b = 5.289(1) \text{ \AA}$, $c = 10.423(1) \text{ \AA}$, $\alpha = 90^\circ$, $\beta = 90^\circ$, $\gamma = 90^\circ$
Молибденит MoS_2 -ийн кристалл бүтэц:
Гексагональ, симметрийн огторгуйн групп нь: $P63/m\ 3c$, торын параметр нь $a = 3.14 \text{ \AA}$, $b = 3.14 \text{ \AA}$, $c = 12.53 \text{ \AA}$, $\alpha = 90^\circ$, $\beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$.

Хүснэгт 1. Рентген дифракцын фазын анализын дун

№	Дээж	Кристалл фаз	Торын сингони
1	Хүдэр	Кварц SiO_2	Гексагональ
		Альбит $\text{NaAlSi}_3\text{O}_8$	Триклин
		Мусковит $\text{KAl}_2(\text{Si}_3\text{Al})\text{O}_{10}(\text{OH},\text{F})_2$	Моноклин
		Иллит $(\text{K},\text{H}_3\text{O})\text{Al}_2\text{Si}_3\text{AlO}_{10}(\text{OH})_2$	Моноклин
		$\text{K}(\text{Mg},\text{Al})_{2.04}(\text{Si}_{3.34}\text{Al}_{0.66})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	Моноклин
		бусад	
2	Хам баяжмал	Халькопирит CuFeS_2	Тетрагональ
		Пирит FeS_2	Куб
		Кварц SiO_2	Гексагональ
		Молебденит MoS_2	Гексагональ
		$\text{K}(\text{Mg},\text{Al})_{2.04}(\text{Si}_{3.34}\text{Al}_{0.66})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	Моноклин
3	Си-Мо баяжмал	Халькопирит CuFeS_2	Тетрагональ
		Пирит FeS_2	Куб
		Кварц SiO_2	Гексагональ
		Молебденит MoS_2	Гексагональ
4	Зэсийн баяжмал	Халькопирит CuFeS_2	Тетрагональ
		Пирит FeS_2	Куб
		Кварц SiO_2	Гексагональ
5	Молибдений баяжмал	Молебденит MoS_2	Гексагональ
		Пирит FeS_2	Куб
		Халькопирит CuFeS_2	Тетрагональ

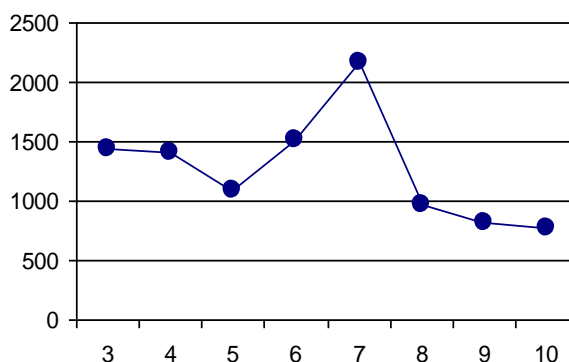
Эдгээр нэгдлүүдийн кристалл бүтцийг өгөгдлийн сантай[5] харьцуулан тодорхойлсонийг хүснэгт 1-ээр үзүүлэв.

Эдгээрээс өөр зэс, молибден агуулсан кристалл бүтэц илрээгүй бөгөөд харин сар бүрийн дээжүүдэд эрчмийн өөрчлөлт бүртгэгдсэн. Уг



Зураг 10 Хам баяжмал дахь MoS_2 -ийн дифракцын үндсэн пикийн абсолют эрчмийн өөрчлөлт. Хэвтээ тэнхлэг дагуусарууд, босоо тэнхлэг дагуу абсолют эрчим

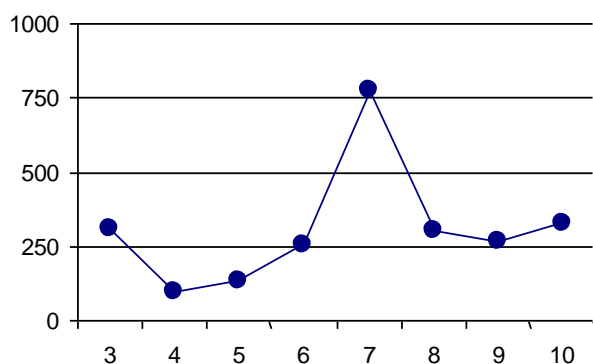
эрчмийн өөрчлөлт нь тухайн сарын дээж дэх агуулга, концентрацитай шууд пропорциональ юм. Зураг 10, 11-оос үзвэл халькопирит болон



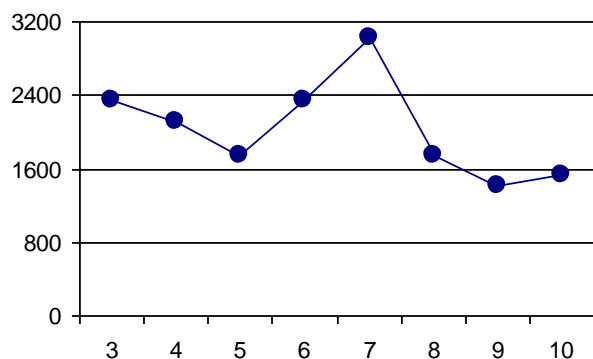
Зураг 11 Хам баяжмал дахь CuFeS_2 -ийн дифракцын үндсэн пикийн абсолют эрчмийн өөрчлөлт. Хэвтээ тэнхлэг дагуу сарууд, босоо тэнхлэг дагуу абсолют эрчим

молибденитийн агуулга 5-р сард багасч байгаа бөгөөд 7-р сард эргэж ихэссэн гэсэн дүгнэлтийг хийж болох ба өөрчлөлтийн хувиар авч үзвэл MoS_2 -ийн агуулгын хэлбэлзэл нэлээд их байна. Харин бүх саруудын рентген дифракцын спектрт пикийн байрлалын өөрчлөлт болон пикийн өргөсөлт ажиглагдахгүй байгаа нь кристалл бүтцийн симметр, параметрийн болон холбоосын өөрчлөлт байхгүй байгааг илэрхийлж байна.

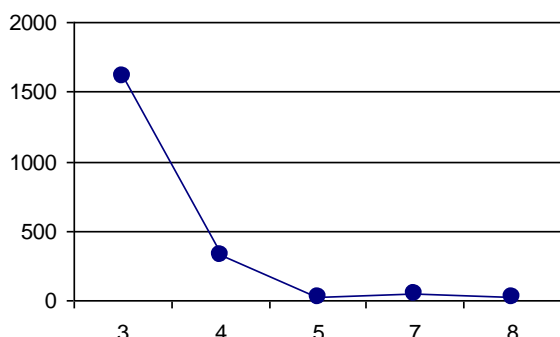
Дифракцын спектр дэхь абсолют эрчмийн сарын өөрчлөлтүүд MoS_2 , CuFeS_2 нэгдлүүдийн хувьд ямар байгааг дараах зургуудад үзүүлээ.



Зураг 12 Си-Мо баяжмал дахь MoS₂-ийн дифракцын үндсэн пикийн абсолют эрчмийн өөрчлөлт. Хэвтээ тэнхлэг дагуу сарууд, босоо тэнхлэг дагуу абсолют эрчим



Зураг 13 Си-Мо баяжмал дахь дэхь CuFeS₂-ийн дифракцын үндсэн пикийн абсолют эрчмийн өөрчлөлт. Хэвтээ тэнхлэг дагуу сарууд, босоо тэнхлэг дагуу абсолют эрчим



Зураг 14 Молибдений баяжмал дахь MoS₂-ийн дифракцын үндсэн пикийн абсолют эрчмийн өөрчлөлт. Хэвтээ тэнхлэг дагуу сарууд, босоо тэнхлэг дагуу абсолют эрчим

IV. ДҮГНЭЛТ

Эрдэнэт үйлдвэрийн шат дамжлагуудын хатуу дээжүүдэд хийсэн рентген дифракцын фазын анализын үр дүнгээс үзэхэд зэс болон молибден агуулсан гол кристалл бүтцүүд нь CuFeS₂, MoS₂ байна. Эдгээрээс өөр зэс болон молибден агуулсан кристалл бүтэц эдгээр дээжүүдэд илэрсэнгүй.

Харин дифрактограмм дахь эрчмийн өөрчлөлтүүд ажиглагдсан бөгөөд энэ нь тухайн кристалл бүтцийн агуулгыг илэрхийлдэг тул

MoS₂, CuFeS₂ кристаллуудын агуулга 5, 6-р саруудад буурсан үр дүн гарч байна. CuFeS₂-ийн кристалл бүтэц нь тетрагональ симметргэй бол MoS₂-ийн кристалл нь гексагональ эгэл тортой байгааг хэмжилтийн үр дүнг PDF-2 өгөгдлийн сантай[3] харьцуулан тодорхойллоо.

Сар бүрийн хатуу дээжүүд нь кристалл бүтцийн агуулгын хувьд хоорондоо ижил бөгөөд кристалл бүтцийн симметр, параметрийн болон холбоосын өөрчлөлт байхгүй байна. Иймээс баяжуулах технологийн үр дүнд зэс, молибден агуулсан нэгдлийн бүтцийн өөрчлөлттэй холбоотой нөлөөлөл байхгүй байна гэж дүгнэж байна.

НОМ ЗҮЙ

1. V.K. Pecharsky, Fundamentals of Powder Diffraction and Structural Characterization of Materials, Second edition, Springer, 2009
2. A. Clearfield et al, Principles and Applications of Powder Diffraction, Wiley, 2008
3. Powder diffraction database PDF-2, 2001. www.icdd.com
4. Philips users guide for PW1800 x-ray diffractometer 1999. Germany
5. Theo Hahn: International Table for Crystallography, Vol. A, Springer, 2005