

## Нунтаг дээжийн рентген дифрактометр D500 төхөөрөмжөөр усны бүтцийг судлах боломж

Л.Ням-Очир<sup>1\*</sup>, Л.Алтайбаатар<sup>1</sup>, Ч.Дашжаргал<sup>1</sup>, Н.Цогбадрах<sup>2</sup>, Д.Сангаа<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Монгол Улс, Улаанбаатар-210646, Их сургуулийн гудамж-1, Монгол Улсын Их Сургууль, Физик Электроникийн Сургууль, Ерөнхий физикийн тэнхим

<sup>2</sup>Монгол Улс, Улаанбаатар-210646, Их сургуулийн гудамж-1, Монгол Улсын Их Сургууль, Физик Электроникийн Сургууль, Онолын физикийн тэнхим

<sup>3</sup>ОХУ, Дубна, Цөмийн Шинжилгээний нэгдсэн институт, И.М. Франкийн нэрэмжит нейтроны физикийн лаборатори

\*Э-шуудан нум\_ochir@num.edu.mn

Хатуу биеийн кристалл бүтцийг судлахад зориулагдсан нунтаг дээжийн рентген дифрактометр D500 төхөөрөмжөөр усны бүтцийг судлахын тулд шинээр шингэн дээж хэмжих дээжийн тавиур болон нимгэн хальс бэлтгэж, усны хэд хэдэн дээжийг тусгай горимын дагуу хэмжсэн ба рентген дифракцын спектрууд дэх зөрөөнд үндэслэн усны бүтцэд орсон өөрчлөлтийг тодорхой процессийн явцад судлах бололцоотой болохыг үзүүлэв. Хэмжсэн спектруудад ойрын эрэмбэд харгалзах гурван пик бүртгэгдсэн нь хавтгай хоорондын зайн  $4.8 \pm 0.2 \text{ \AA}$ ,  $3.2 \pm 0.3 \text{ \AA}$ ,  $2.2 \pm 0.4 \text{ \AA}$  утгуудад харгалзаж байв.

### I. ОРШИЛ

Усны бүтцийн судалгаа нь орчин үед нэлээд чухал судалгааны чиглэл болж байгаа бөгөөд тухайн үзэгдэл, гадны үйлчлэлийн үед усны шинж чанар өөрчлөгдөж байгааг түүний бүтцийн өөрчлөлттэй холбон тайлбарладаг [1]. Бодисын дотоод бүтэц нь түүний физик шинж чанарыг тодорхойлох ба усны хувьд маш олон төрлийн хачирхалтай шинж чанарууд бүртгэгдсэн байдаг нь усны бүтцийн судалгаа чухал ач холбогдолтой болохыг илтгэж байгаа юм.

Бодисын бүтцийн судалгааны гол арга болох рентген дифракцын аргыг шингэн төлөвт байгаа бодист хэрэглэх талаар сүүлийн үед бусад эрдэмтдийн ажлын үр дүнгүүд гарч эхэлсэн билээ [2-4].

Бид энэ ажлаар МУИС-ийн ФЭС-ийн Рентген бүтцийн судалгааны лаборатори дахь тоног төхөөрөмжийг ашиглан усны бүтцийг судлах боломжийн талаар авч үзсэн юм.

### II. ХЭМЖИХ АРГАЧЛАЛ

МУИС-ийн ФЭС-ийн Рентген бүтцийн судалгааны лаборатори нь PW1800 болон D500 маркийн хоёр дифрактометртэй бөгөөд усны хэмжилтэнд D500

дифрактометрийг ашиглалаа. Siemens D500 дифрактометр нь нунтагласан хатуу дээжийн кристалл бүтцийг судлах зориулалттай бөгөөд гониометрийн хэсэг нь дээжийг гараар байрлуулах бололцоотой учир тус ажилд ашиглагдсан юм [5].

Бүтцийн судалгааны хэмжилтийн явцад Брэггийн өнцгөөс хамааран дээжийн байрлал хэвтээ тэнхлэгт  $45^\circ$  хүртэлх өнцгөөр хазайдаг учир усыг хэмжихэд асгахгүй байх үүднээс тусгай тавиур шаардлагатай. Мөн шингэн бодисын хувьд шингээлтийн фактор өндөр утгатай учир хэмжилтийн нөхцөл ба дээжийн хэмжээг хатуу дээжийнхээс өөрөөр тохируулан сонгох шаардлага үүсч байгаа юм.

Иймээс усны дээжийг рентген дифрактометрт хэмжихэд зориулан  $50\text{мм} \times 50\text{мм} \times 9\text{мм}$  хэмжээтэй бэлдцэнд  $27\text{мм}$  диаметртэй,  $7\text{мм}$  гүн бүхий нүх ухаж дээд талдаа  $10 \text{ мкм}$  зузаантай нимгэн хальстай тусгай дээжийн тавиур бэлтгэсэн. Тус нимгэн хальс нь рентген туяаны дифракцын спектрт ямар нэг нөлөө үзүүлэхгүй болохыг хэмжилтээр туршиж баталсан. Бэлтгэсэн тавиурыг ашиглан хэмжилт гүйцэтгэхэд нэг удаа  $4 \text{ гр}$  усны дээж шаардагдсан. Нийт дээжийн рентген дифракцын спектрийг Cu

анодтой рентген хоолойн хувьд Брэггийн өнцгийн  $5^\circ$ -аас  $60^\circ$  мужид  $0.01^\circ$  алхамтайгаар бүртгэв.

### III. РЕНТГЕН ДИФРАКТОМЕТР D500 ТӨХӨӨРӨМЖӨӨР ХЭМЖСЭН УСНЫ СПЕКТР

Рентген дифрактометр D500 төхөөрөмжид хэд хэдэн төрлийн усны дээжийг хэмжихдээ тэдгээрийн спектрийг харьцуулах үүднээс нэрмэл ус болон Эрдэнэтийн Уулын Баяжуулах Үйлдвэр (УБҮ)-ийн баяжуулах процессийн шат дамжлагуудаас авсан усны дээжүүдийг сонгосон юм. Эдгээр усны дээжүүд нь баяжуулах процессийн явцад өөр өөр үйлчлэлд орсны улмаас бүтцийн өөрчлөлт бий болсон байх магадлалтай билээ. Бүх дээжийг ижил нөхцлөөр хэмжсэн бөгөөд тэдгээрийн рентген дифракцын спектруудийг харьцуулсныг 1,2-р зурагт үзүүлэв.

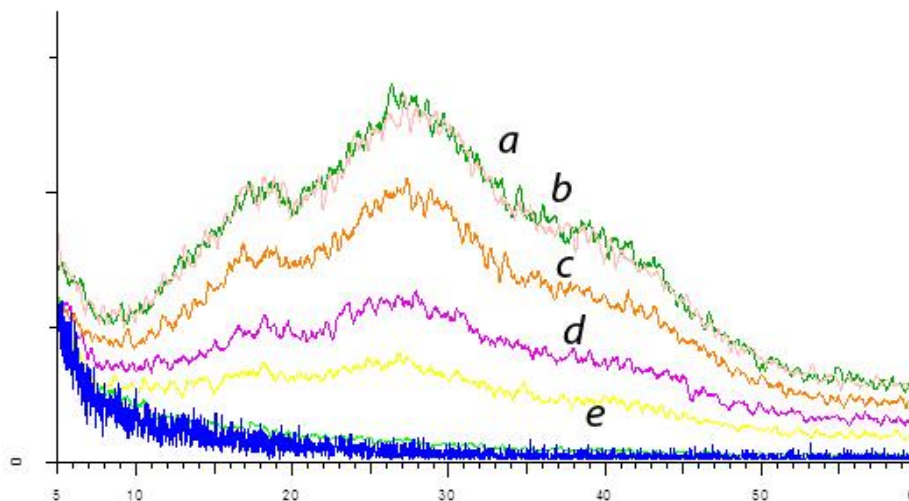
Нэрмэл усны болон Эрдэнэт үйлдвэрийн баяжуулах процессийн шат дамжлагууд дахь усны дээжүүдийн спектрийг харьцуулан авч үзэхэд Брэггийн өнцгийн  $15^\circ$ - $20^\circ$ ,  $22^\circ$ - $33^\circ$ ,  $36^\circ$ - $50^\circ$  мужуудад бүтцийн симметрийн ойрын эрэмбэд харгалзах пикүүд бүртгэгдсэн байгаагийн зэрэгцээ эрчмийн

өөрчлөлтүүд тодоор илрэн гарсан байна. Уг үр дүн нь бидний бэлтгэсэн хэмжилтийн нөхцөл, горим нь усны бүтцийн судалгаанд ашиглаж болохуйц гэдгийг баталж байгаа юм. Спектрт бүртгэгдсэн ойрын эрэмбийг илэрхийлэх пикүүд болон эрчмийн өөрчлөлтүүд нь усны бүтэц дэхь өөрчлөлтүүдтэй холбоотой бөгөөд усанд тодорхой үйлчлэл үзүүлсний дүнд үүсэх нөлөөллийг тус үр дүнд үндэслэн судлах бололцоотой юм.

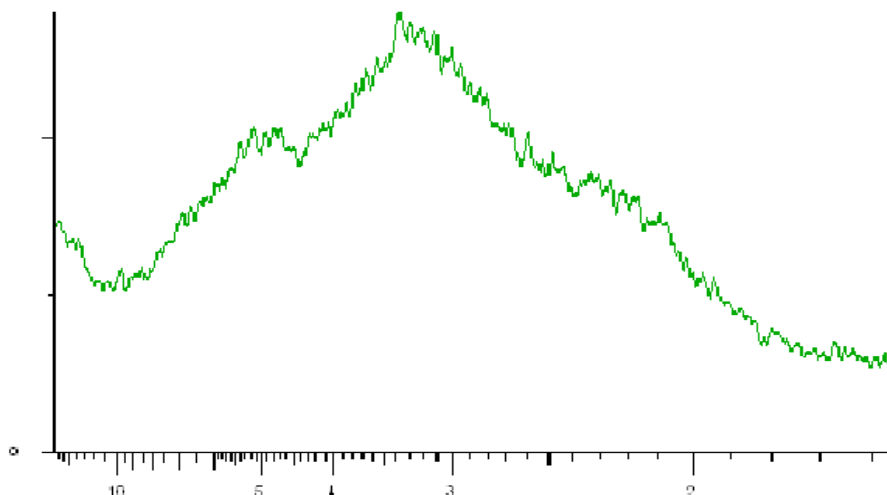
Усны рентген дифракцын спектр дэхь харьцангуй өргөн пикүүдийн байрлал нь хавтгай хоорондын зайн  $8-4.4 \text{ \AA}$ ,  $4.3 \pm 2.6 \text{ \AA}$ ,  $2.5 \pm 1.9 \text{ \AA}$  утгуудад харгалзаж байгаа нь гадаадын эрдэмтдийн дээрх чиглэлээр хийсэн хэмжилт, судалгааны үр дүнтэй тохирч байгаа юм [2-3].

### IV. ДҮГНЭЛТ

Нунтаг хатуу дээжийн кристалл бүтцийг судлахад зориулсан рентген дифрактометр Siemens D500 төхөөрөмжид шингэн төлөвт байгаа дээжийг хэмжихэд зориулсан дээжийн тавиур шинээр бэлдэж, хэмжилтийн аргачлал боловсруулав.



**Зураг 1.** Нэрмэл ус болон Эрдэнэт үйлдвэрийн баяжуулах процессийн шат дамжлагуудаас авсан усны дээжүүдийн рентген дифракцын спектруудийг харьцуулсан байдал. Босоо тэнхлэгийн дагуу эрчим, хэвтээ тэнхлэгийн дагуу Брэггийн өнцөг. a-8 сарын эргэлтийн ус, b-10 сарын эргэлтийн ус, c-Сэлэнгийн ус, d-5 сарын шүүрлийн ус, e-8 сарын шүүрлийн ус, бусад-5 сарын шүүрлийн, хүдрийн, эргэлтийн усны спектрууд



Зураг 2. Нэрмэл усны рентген дифракцын спектр. Хэвтээ тэнхлэгийн дагуу хавтгай хоорондын зай  $d$  [Å], босоо тэнхлэгийн дагуу эрчим.

Уг аргачлалын дагуу хэмжсэн усны хэд хэдэн төрлийн дээжийн рентген дифракцын спектрт  $8 \pm 4.4$  Å,  $4.3 \pm 2.6$  Å,  $2.5 \pm 1.9$  Å утгуудад харгалзах бүтцийн симметрийн ойрын эрэмбийн давтагдалтын пикүүд бүртгэгдэв. Эдгээр пикүүд нь усны өөр өөр дээжийн хувьд эрчмийн зөрөөтэй байгаа нь гадны үйлчлэлд орсны дараах бүтцийн өөрчлөлтийг илэрхийлнэ. Иймээс эдгээр пикийн эрчмийн өөрчлөлт болон байрлалаар тодорхой процессийн явц дахь усны бүтцийн өөрчлөлтийг судлах бололцоотой гэсэн дүгнэлтийг хийж байна.

#### АШИГЛАСАН НОМ, ХЭВЛЭЛ

1. J. L Finney, *Phil. Trans. R. Soc. Lond. B.*, Vol.359, p.1145-1165, (2004)
2. Tetsuro Yokono *et al.*, *Japanese Journal of Applied Physics*, Vol.43, p.L1436-L1438 (2004)
3. Shigezo Shimokawa *et al.*, *Japanese Journal of Applied Physics*, Vol.46, p.333-335, (2007)
4. C.Guse *et al.*, *J.Phys.: Condens.Matter*, Vol. 22, p.325105, (2010)
5. Technical description D500, Siemens, Geratewerk Karlsruhe. 1995

### X-ray Diffraction Measurement to Study Water Structure at Room Temperature

L.Nyam-Ochir<sup>1</sup>, L.Aлтаibaatar<sup>1</sup>, Ch.Dashjargal<sup>1</sup>, N.Tsogbadrakh<sup>2</sup>, D.Sangaa<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Department of General Physics, School of Physics and Electronics, National University of Mongolia, University Street-1, Ulaanbaatar-210646, Mongolia

<sup>2</sup>Department of Theoretical Physics, School of Physics and Electronics,

National University of Mongolia, University Street-1, Ulaanbaatar-210646, Mongolia

<sup>3</sup>Frank Laboratory of Neutron Physics, Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia

The special sample holder with cling film was prepared to study water structure by x-ray diffractometer D500 for solid samples and some water samples were measured at room temperature. Three peaks were collected on the diffraction patterns in the range  $4.8 \pm 0.2$  Å,  $3.2 \pm 0.3$  Å,  $2.2 \pm 0.4$  Å and their intensity differences can give information about water structure during the environmental change.