

Халтмар эрдсийн рентген дифракц ба молекулын хэлбэлзлийн спектрийн судалгаа

Л.Алтайбаатар, Л.Ням-Очир*, Ш.Мөнхжаргал

Монгол Улс, Улаанбаатар-210646, Монгол Улсын Их Сургууль, Физик Электроникийн Сургууль,
Ерөнхий Физикийн Тэнхим

*Э-уудан: nyam_ochir@yahoo.com

Ховд аймгийн Булган сумын нутгийн турмалин буюу халтмар эрдсийг нунтаг дээжийн рентген дифракцийн арга ба молекулын нил улаан туяаны спектрийн аргуудар судалж, $\text{NaFe}_3\text{Al}_6(\text{BO}_3)_3\text{Si}_6\text{O}_{18}(\text{OH})_4$ нэгдэл агуулсан *short tourmaline* төрлийн халтмар болохыг тодорхойлсон ба OH, BO_3 , Si_6O_{18} , Si-O, Fe-O, O-Al-O холбоосуудын хэлбэлзэлд харгалзах шингээлтийн спектрийн 3547.09cm^{-1} ; 1271.09cm^{-1} ; 975.98cm^{-1} , 715.59cm^{-1} , 613.36cm^{-1} , 491.85cm^{-1} давтамжийн утгууд бүртгэгдсэн нь бусад судлаачдын ажлын үр дүнтэй тохирч байна.

I. ОРШИЛ

Халтмар буюу турмалин гэж нэрлэгдсэн эрдсийн пьезо ба пироцахилгаан шинж чанар нь сүүлийн үед материалын судалгаа ба эмчилгээ сувилгаа, барилгын материал, электроник, ус боловсруулах, гоёл чимэглэл зэрэгт өргөн ашиглагдах болжээ. Байгаль дээр халтмарын олон төрлийн эрдсүүд талст хэлбэрээр тархсан байдаг ба манай улсын Ховд, Баян-Өлгий, Дундговь, Төв зэрэг аймгийн нутагт энэхүү эрдсийн илрэлүүд бий.

Эдгээрээс Ховд аймгийн Булган сумын нутгийн олдвор болох турмалин буюу халтмар эрдсийг сонгон авч судаллаа. Учир нь тус эрдсийн усны бүтцэд нөлөөлөх асуудлыг цаашид судлахаар төлөвлөж байгаа юм. Бид сонгож авсан халтмар эрдсээ рентген дифракцийн арга, нил улаан туяаны ба раманы спектрийн аргуудаар судалж кристалл бүтэц болон молекулуудын шингээлтийн спектрийн давтамжуудыг судалсан.

II. ТУРШИЛТ

Халтмар эрдсийн химийн ерөнхий томъёо нь $\text{XY}_3\text{Z}_6(\text{BO}_3)_3\text{Si}_6\text{O}_{18}\text{W}_4$ үүний $\text{X}=\text{Na}$, Ca , K ба $\text{Y}=\text{Mg}$, Fe , Mn , Li , Cr^{+3} , V^{+3} , Ti , Al , $\text{Z}=\text{Al}$, Mg , Fe , V^{+3} , Cr^{+3} зэрэг элементүүд суусан байдаг байна. Халтмарын кристаллын симметрийн огторгуйн групп нь R3m , кристалл бүтцийн хувьд Y элемент дээр

оройтой 3 том октаэдр ба Z элемент дээр оройтой 6 жижиг октаэдр агуулсан хэлбэртэй байдаг[1,2]. Халтмар эрдсийн хувьд Si_6O_{18} -ийн тетраэдр бүхий гексагональ цагирагууд нь BO_3 -ийн 3 гурвалжинтай холбогддог ба Al, Fe, Mn-ийн катионууд Si_6O_{18} цагирагуудтай холбогдоно. Тус октаэдрууд болон холбоосын хэлбэрүүд, агуулсан элементүүдээс хамаарч нил улаан туяаны спектрийн шинж чанар өөрчлөгддөг. Халтмар эрдсийн бүтцэнд усны бүтцийн судалгаанд чухал нөлөө үзүүлэх гидроксильн бүлэг OH нь агуулагддаг ба хоёр өөр байрлалд оршдог байна [2]. Иймээс усны бүтцэд үзүүлэх нөлөөг судлахын өмнө кристалл дахь гидроксильн бүлгийн талаар судлах нь чухал ач холбогдолтой юм.

Сонгон авсан Ховд аймгийн Булган сумын нутгаас олдсон турмалин буюу халтмар эрдсийн дээжийг судлахдаа 1~10 мкм хэмжээтэй болтол нунтаглан бэлтгэж рентген дифракцийн ба молекулын спектрийн хэмжилтүүдийг гүйцэтгэв.

Рентген дифракцийн хэмжилтийг МУИС-ийн ФЭС дэхь нунтаг дээжийн рентген дифрактометр PW1800 төхөөрөмжөөр хийхдээ хэмжилтийн нөхцлийг эхлэх өнцөг 5° , дуусах өнцөг 60° , алхам 0.05° байхаар сонгосон. Чанарын фазын анализыг PDF-2 өгөгдлийн сан ашиглаж гүйцэтгэн кристалл бүтцийг DIAMOND 2.0 программаар байгуулав.

Нил улаан туяаны спектрийг IR Prestige 21 спектрометрээр хэмжиж спектрийн

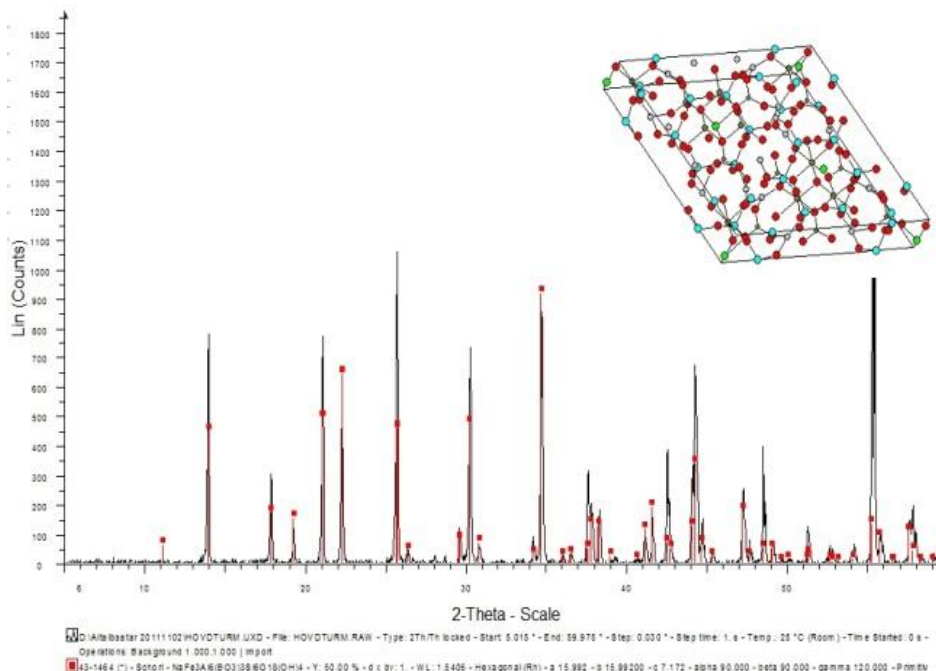
боловруулалтыг IR Solution программ ашиглан хийсэн. Тус төхөөрөмж нь 4000 см^{-1} мужид 400 см^{-1} ялгах чадвартай юм.

Ш. ҮР ДҮН, ХЭЛЭЛЦҮҮЛЭГ

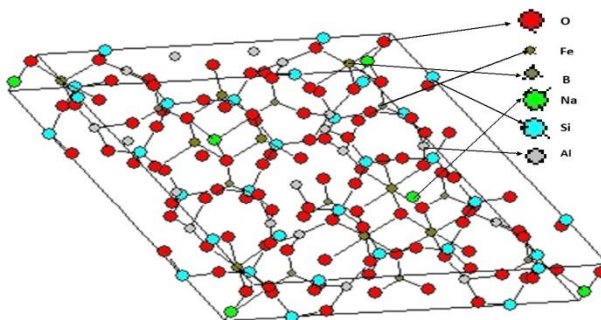
Нунтаг дээжийн рентген дифракцын хэмжилтийн үр дүнд чанарын фазын анализ хийсэн үр дүнг Зураг 1-д үзүүлэв. Рентген дифракцийн спекрт чанарын фазын анализ хийхэд $\text{NaFe}_3\text{Al}_6(\text{BO}_3)_3\text{Si}_6\text{O}_{18}(\text{OH})_4$ бүхий химийн элементүүд агуулсан, кристалл бүтэцтэй хар халтмар (short tourmaline)

болох нь илрэв. Өөр ямар нэг кристалл бүтэц давхар илрээгүй нь тус сонгож авсан дээжийн фазын цэвэр байдлыг тодорхойлж байна.

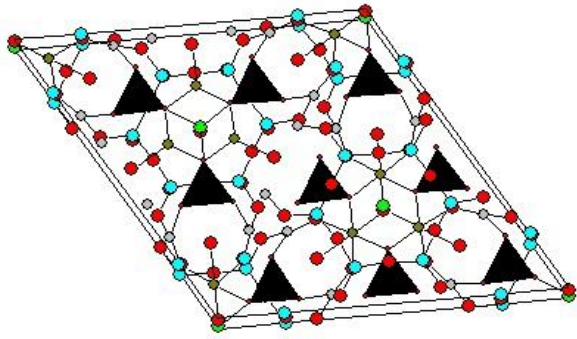
Тус фазын анализын дүнд үндэслэн бүтцийн өгөгдлүүдийг тодорхойлон ICSD өгөгдлийн сан ашиглаж кристалл бүтцийг дүрсэлснийг Зураг 2-т үзүүлээ. Кристалл бүтэц дэх BO_3 болон Si_6O_{18} гурвалжингуудыг бүтцээс ялган дүрсэлснийг Зураг 3, 4-т үзүүлэв. Халтмар эрдсийн нил улаан туяаны шингээлтийн спектрийг Зураг 5-д үзүүлэв.



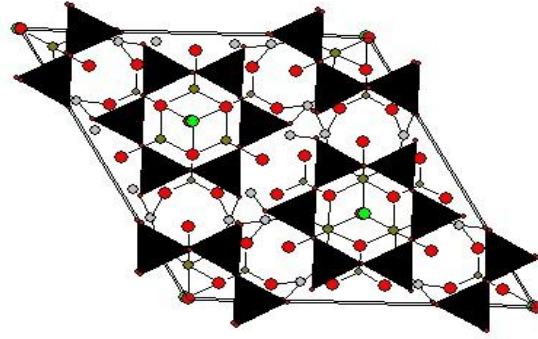
Зураг 1. Халтмар эрдсийн рентген дифракцын спектрийн чанарын фазын анализ



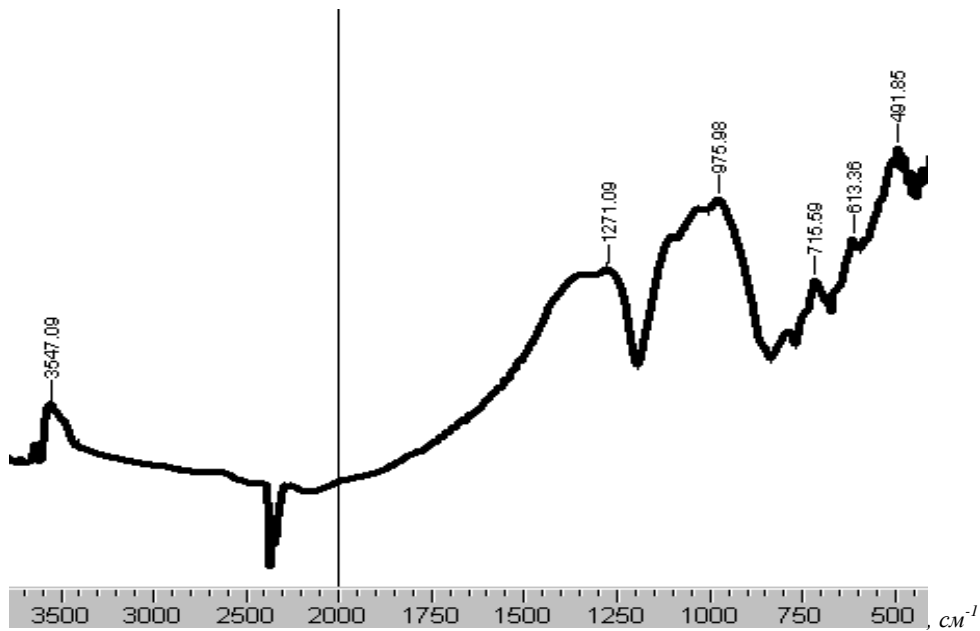
Зураг 2. кристаллын эгэл тор Улаан өнгөтэй дугуйгаар - O, ногоон - Na, жижиг саарал- B, хар ногоон- Fe, Саарал- Al, Цэнхэр - Si.



3-р зураг BO_3 (хар өнгийн гуралжин нь BO_3)



4-р зураг. BO_3 (цагаан өнгийн гуралжин дүрс нь Si_6O_{18})



5-р зураг. Халтмар эрдсийн молекулын нил улаан туяаны шингээлтийн спектр

1-р хүснэгт. Халтмар эрдсийн дээжийн нил улаан туяаны ба раманы спектрийн шингээлтийн спектрийн тайлбар

	Нил улаан туяаны спектр дэх долгион тооны утга	Раманы спектр дэх долгион тооны утга [5]	Тайлбар [6] холбоосын агшилт ба суналтын хэлбэлзэл
Долгион тоо, cm^{-1}	3547.09	3565.0	ОН, ОН-Fe
	1271.09	1340.0	(BO_3)
	975.98	1047.2	Si_6O_{18}

	715.59	772.9	Si-O ба Si-O-Si
	613.36	547.0	Fe-O
	491.85	382.2	O-Al-O

Халтмарын шёрл ба дравит эрдсүүдэд гочлон $3560-3500\text{ см}^{-1}$ мужид шингээлтийн спектр өгдөг нь ОН хэлбэлзлийн давтамжийг үзүүлэх ба $Z = \text{Al, Fe, Mn, Mg}$ –тай холбогддог байна[1,3]. Судалгаанд авсан дээжийн хувьд 3547.09 см^{-1} давтамжинд ОН хэлбэлзэл илэрч байна (Зураг 5).

Мөн дээжийн спектр дэхь 3547.09 см^{-1} давтамжийн утга ОН - Fe холбоост харгалзана [4]. 1300 см^{-1} орчмын зурвас нь VO_3 -ийн бүлэгт[4], 1000 см^{-1} орчмын зурвас нь Si_6O_{18} цагирагийн агшиж сунах хэлбэлзэлд харгалзаж буйг 1-р хүснэгтэнд үзүүлсэн нил улаан туяаны болон раманы спектрийн [5] давтамжийн утгууд харуулж байна.

IV. ДҮГНЭЛТ

Ховд аймгийн Булган сумын халтмар эрдсийн бүтцийг нунтгийн рентген дифракцийн аргаар, шингээлтийн спектрийг нил улаан туяаныг спектрийн аргуудаар тус тус судлалаа. Тус эрдэс нь $\text{NaFe}_3\text{Al}_6(\text{VO}_3)_3\text{Si}_6\text{O}_{18}(\text{OH})_4$ бүхий химийн элементүүд агуулсан, $R3m$ огторгуйн групптэй, $a=15.992\text{ б}, b=15.992\text{ б}, c=7.172\text{ б}$, $\alpha=90^\circ$, $\beta=90^\circ$, $\gamma=120^\circ$ торын параметртэй кристалл бүтэцтэй хар халтмар (schorl tourmaline) болохыг тодорхойллоо.

Халтмар эрдсийн $\text{NaFe}_3\text{Al}_6(\text{VO}_3)_3\text{Si}_6\text{O}_{18}(\text{OH})_4$ томъёо бүхий дээжийн нил улаан туяаны спектрт ОН, $(\text{VO}_3)_3$, Si_3O_{18} , Si-O, Si-O-Si Fe-O, VO_3 , O-Al-O зэрэг холбоосын суналт ба агшилтын хэлбэлзлийн давтамжинд харгалзах шингээлтийн спектрийн дээрх утгууд бүртгэгдэж байна.

Ховд аймгийн Булган сумаас авсан Турмалин эрдсийн дээжийн нил улаан туяаны спектрийн давтамжуудыг түүний Раманы спектрийн дүнтэй харьцуулан үзэхэд шингээлтийн давтамжийн утгууд бусад бүтээлд дурдсантай тохирч байна[1,2,4,6]. Бид цаашид тус судалгааны үр дүнд

тулгуурлан манай эх орны бусад нутгаас олдсан турмалин эрдсийн төрлүүдийн бүтэц ба тэдгээрийн устай харилцан үйлчлэх үйлчлэлийг судлах тул эдгээр үр дүнгүүд нь чухал ач холбогдолтой болсон гэж дүгнэж байна.

Талархал

Нил улаан туяаны спектрийг хэмжихэд гүн туслалцаа үзүүлсэн ШУА-ийн БНШНЛ-ийн эрдэм шинжилгээний ажилтан, доктор А.Чимэдцогзолд талархал илэрхийлье.

АШИГЛАСАН МАТЕРИАЛ

- [1] Jagannadha Reddy, Ray L. Frost, Wayne N. Martens, *Vibrational Spectroscopy* 44 (2007) 42-49
- [2] T. Gonzalez-Carreno, M. Fernandez and J. Sanz, *Phys Chem Minerals* (1988) 15 : 452-460
- [3] J.D. Grice, T.S. Erict, *NeuesJahrh. Miner.Abh.* 165 (1993) 245
- [4] David A. McKeown, *Phys. Chem. Minerals.* 35 (2008) 259-270
- [5] G.Buyantsetseg, P.Daniel, R.Galbadrakh, L.Enkhtur, Sh.Munkhjargal, *Proceedings of 1st Franco-Mongolia Workshop on Material Science: Theoretical and Experimental Aspects*, Редактор Н.Цогбадрах, p.124-127, (2010)
- [6] V.C. Farmer, *The Infrared Spectra of Minerals*, Monograph 4, Mineral Society, (1974), p.235