

Кварц агуулсан чулуулаг дээжний даралтын нөлөөн дэх кристалл бүтцийн өөрчлөлт болон үлдэгдэл микро деформацийн судалгаа

А. Бадмаараг^{a,b,*}, К. Шеффцюк^{b,c}, Д. Сангаа^a, И. Хишигдэмбэрэл^a, Л. Энхтөр^d

^a ШУА, Физик технологийн хүрээлэн, Материал судлал нанотехнологийн салбар, Монгол.

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

^c Карсруэ-гийн технологийн хүрээлэн, Карсруэ, Герман.

^d Монгол Улсын Их Сургууль, Шинжлэн Ухааны Сургууль, Физикийн тэнхим, Улаанбаатар, Монгол.

Уг судалгааны ажлаар Монгол-Алтайн нурууны Онгон-Улаан уулны (43°28'30.9"N 99°18'40.8"E) кварц агуулсан поликристалл чулуун дээжний кристалл бүтцийг даралтаас хамааруулан судалсан. Монгол орны өмнөд хэсгээр хүчтэй тектоник мөргөлдөөний нөлөөнд орсон бөгөөд одоог хүртэл газар хөдлөлийн идэвхитэй бүс нутагт хамаардаг байна [1]. Иймээс уг судалгааны дээж нь кристалл бүтцийн хувьд хүчтэй деформацид орсон юм. Дээжний кристалл бүтцийн судалгааг рентген бүтцийн анализийн үр дүнд цахиурын давхар исэл (quartz-SiO₂), төмөр, магни, хөнгөн цагааны силикатын гидроксид (clinoclone 1-(Mg,Fe)₆(Si,Al)₄O₁₀(OH)₈), кали хөнгөн цагааны силикатын гидроксид (illite 2-(K,H₃O)Al₂Si₃AlO₁₀(OH)₂), натри, кальц, хөнгөн цагааны силикат (anorthite-(Na_{0.45}Ca_{0.55})(Al_{10.55}Si_{2.45}O₈)) хэмээн тодорхойлсон.

Судалгааны ажлын зорилго нь кристалл бүтцийн эгэл торд үүсч буй деформаци болон үлдэгдэл деформацийн судалгааг нейтрон сарнилын аргаар судлах бөгөөд энэ нь том ширхэглэг бүхий бүтэцтэй геологийн дээжний бүтэц дэх деформацийн хэмжээг тодорхойлоход үр дүнтэй, хүчтэй хэрэгсэл болж өгдөг байна [2]. Иймээс уг хэмжилтийг нисэлтийн хугацааны нейтрон сарнилын тусламжтайгаар өндөр нарийвчлалтай хэмждэг ба энэ нь нейтроны материалын гүнд нэвтрэх чадвар өндөртэйгөөс шалтгаалдаг. Кристалл бүтцийн эгэл торын хавтгай хоорондын зайн өөрчлөлт нь Брэггийн пикийн байрлалын шилжилтээр тодорхойлогддог [3, 4, 5].

Хэмжилтийг ОХУ-ын Дубна хот дахь Цөмийн Шинжилгээний Нэгдсэн Институтын Нейтроны Физикийн Лабораторын ИБР-2М импульст реакторын тусламжтайгаар ЭПСИЛОН нейтрон сарнилын дифрактометрээр гүйцэтгэсэн.

Чулуун дээжний (Ø=31 мм, l=60 мм) деформацийн хэмжилтэнд уг дифрактометрийн даралтын төхөөрөмжийг ашигласан бөгөөд дээжнийг нэг тэнхлэгийн дагуу 5, 10, 15, 25, 35 болон 45 МПа даралтын нөлөөнд оруулан кристалл бүтцийн деформацийн хэмжилтийг гүйцэтгэсэн бөгөөд даралтын нөлөө тус бүрийн дараах үлдэгдэл деформацийг дифракцын хэмжилтийг үр дүнгээр тодорхойлсон. Ритвельдийн анализаар [6, 7, 8] дифракцын үр дүнг боловсруулан, эгэл тор дахь даралтын нөлөөн дэх болон үлдэгдэл деформацийн хэмжээг кварц фазын кристаллографын таван өөр хавтгайн хувьд ((020), (101), (211), (131) болон (112)) тооцоолон гаргасан.

Түлхүүр үгс: Нейтрон дифракц, нисэлтийн хугацааны арга, үлдэгдэл деформаци, Ритвельд анализ.

1. ОРШИЛ

Материал болон уулын чулуулагуудын физик болон механик шинж чанарыг тодорхойлоход дифракцын арга зүйг өргөнөөр ашигладаг бөгөөд энэ арга нь маш өндөр үр дүнтэй байдаг. Газар хөдлөлийн хүчний нөлөөнөөс үүсч буй даралтын түгэлт нь газрын бүтэц, уулын чулуулаг болон чулуун давхрагын кристалл болон механик шинж чанараас хамаардаг [1, 2]. Кварц буюу кварц агуулсан чулуулаг нь газрын чулуулаг бүтцийн ихэнх буюу ойролцоогоор 60 хүртэлх хувийг бүрдүүлдэг учраас кварц болон кварц агуулсан эрдсийн кристалл бүтэц болон бүтцийн

өөрчлөлтийн судалгаа нь газар хөдлөлийн зарим үр нөлөөг тайлбарлахад чухал ач холбогдолтой байдаг [2]. Нейтрон нь рентген цацрагтай харьцуулахад масстай, нэвтрэх чадвар өндөр, тухайн бодисын атомын цөмөөс сарнидаг, дулааны нейтроны энергийн түгэлт нь тасралтгүй (Максвелл түгэлттэй) шинж чанартай зэрэг давуу талуудтай учир шинэ материал, геологийн дээжний гүн дэх кристалл бүтцийн мэдээлэлийг судалж болох өндөр ач холбогдолтой байдаг. Иймээс дулааны нейтроны өндөр нэвтрэх чадварын тусламжтайгаар тухайн материал болон геологийн дээжний нэгж эгэл тор дахь кристалл бүтцийн деформаци болон

* Electronic address: badmaarag@jinr.ru

учруулсан даралтын нөлөөний дараах үлдэгдэл деформацийн тархалтыг судалдаг [3].

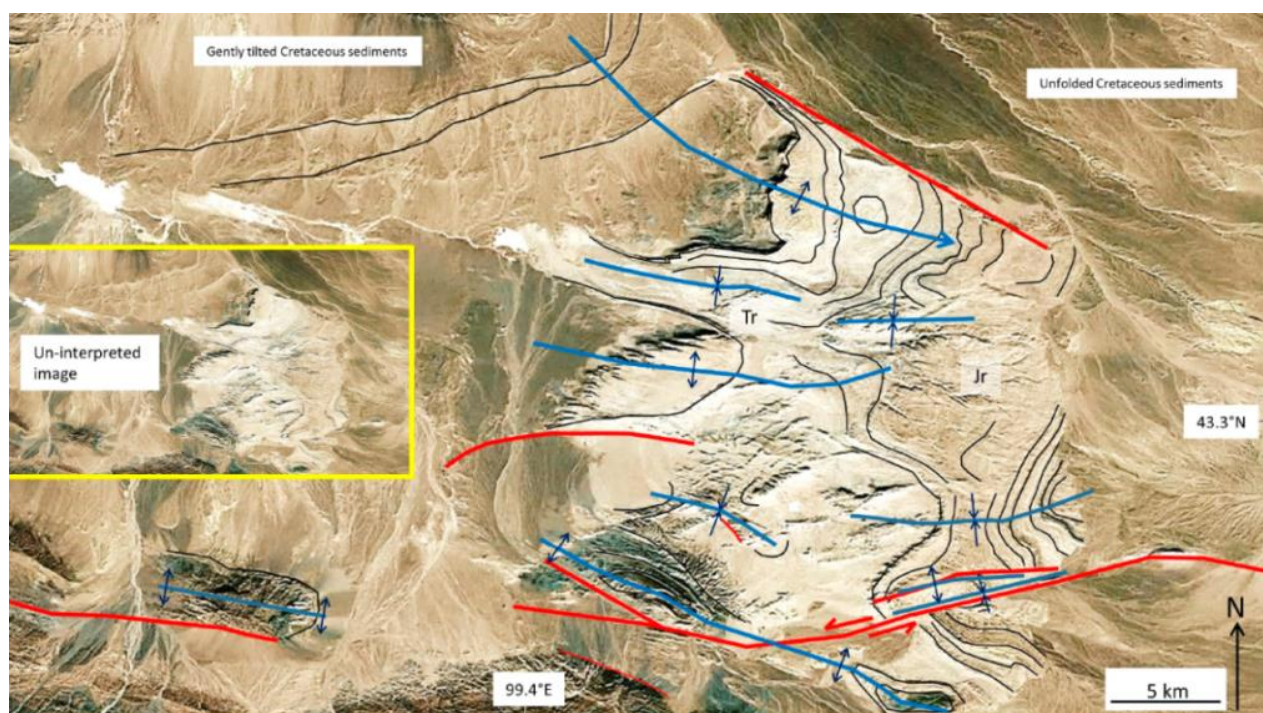
Газрын чулуулгийн механик болон кристалл бүтцийн өөрчлөлтийн түгэлт нь газрын тектоник хүчлэгийн түгэлттэй хамааралтай байдаг учир кристаллын фазын физик шинж чанарыг даралт, температур буюу термодинамик нөхцөлөөс хамааруулсан судалгаа нь ихээхэн ач холбогдолтой юм. Энэ ажлаар Онгон-Улаан уул ($43^{\circ}28'30.9''N$ $99^{\circ}18'40.8''E$) – аас 600 метрийн гүнээс өрөмдлөгийн аргаар гарган авсан кварц агуулсан чулуулаг дээжний кристалл бүтцэд механик даралтын нөлөөгөөр үүссэн микродеформац болон даралтын нөлөөнөөс үүссэн үлдэгдэл микродеформацыг ОХУ-ын Дубна хот дахь ЦШНИ-ийн ИБР - 2М импульст

реакторын ЭПСИЛОН нейтрон дифрактометр ашиглан тодорхойлов [4].

2. СУДАЛГААНЫ АРГА ЗҮЙ

2.1. Дээж бэлтгэх

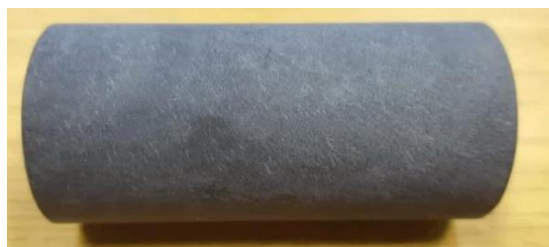
Монгол улсын өмнөд хэсгийн газрын бүтэц нь Юрийн галавын үеийн тектоникийн хүчтэй мөргөлдөөний үр нөлөөний улмаас өөрчлөгдсөн болох нь зарим судалгааны ажлуудаас [1, 2] болон хиймэл дагуулын зурагнаас ажиглагддаг бөгөөд одоог хүртэл газар хөдлөлийн идэвхитэй бүс нутагт хамаарагддаг байна. Өмнөговь аймаг, Говь - Алтай зэрэг аймгуудын нутагт орших Ноён уул [8], Онгон - Улаан уулнууд орчмын газрын гадаргын бүтэц нь энэ төрх байдлыг илтгэдэг (Зураг 1).



Зураг 1. Говь – Алтай аймаг, Онгон – Улаан уул орчмын газрын бүтэц. (хөх шугам – үелсэн давхрагууд, хар шугам – гол нугалаа буюу атираа, улаан шугам – хагарлууд).

Газар хөдлөлийн даралтын нөлөөний улмаас тухайн бодисын кристалл бүтэц ямар нэгэн байдлаар деформацид ордог бөгөөд эдгээр үйлчлэлүүдийн нөлөө буурах буюу зогссоны дараагаар кристалл бүтцийн атомуудын торын параметруудийн утга эргэж анхны төлөвтөө ордоггүй байна. Уг анхны утгаас хазайсан утгыг тухайн кристалл бүтцэд үүссэн үлдэгдэл деформац гэдэг [3]. Дээрх координат (Монгол Алтайн нуруу, Онгон - Улаан уул- $43^{\circ}28'30.9''N$ $99^{\circ}18'40.8''E$) – аас сонгосон тригонал кристалл

системтэй (огторгуйн групп нь $P3_1 2 1$ (№ 152)), кристалл бүтцийн эгэл тор нь $a, b = 4.9155 \text{ \AA}$; $c = 5.4126 \text{ \AA}$; $\alpha, \beta = 90^{\circ}$, $\gamma = 120^{\circ}$ параметрууд бүхий кварц агуулсан чулуулаг дээжийг нэмэлтээр даралт болон температурын нөлөө үүсгэлгүйгээр өрөмдлөгөөний аргаар цилиндр хэлбэртэйгээр (60 мм x 31 мм) хэмжилтэнд бэлтгэв (зураг 2).

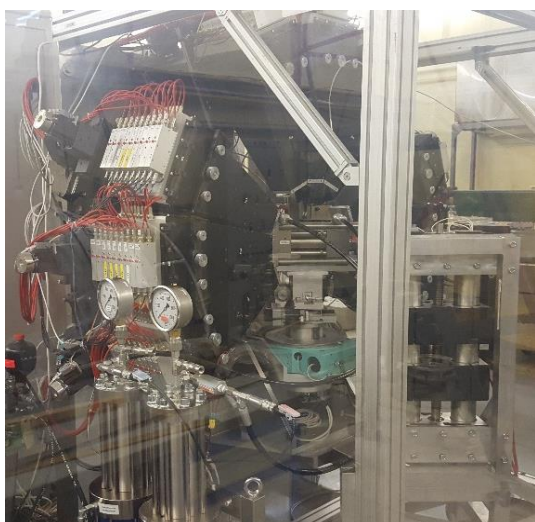


Зураг 2. Цилиндр хэлбэрт оруулан хэмжилтэнд бэлтгэсэн кварц агуулсан чулуулаг дээж.

2.2. Нейтрон дифракцын хэмжилтийн арга зүй

ЭПСИЛОН дифрактометрийн даралтын нөлөөн дэх хэмжилтийн үед дээж нь z тэнхлэгээрээ тусч буй нейтронтой 45° – ын өнцөг үүсгэн байрлах бөгөөд Брэггийн өнцөг тогтмол байна. Мөн дифрактометр нь нейтроны үүсгүүрээс тодорхой зайнд байрлах бөгөөд нейтрон нь тодорхой зайг тодорхой хугацаанд туулан, дээжнээс сарнин бүртгэгчид бүртгэгддэг. Иймээс кристаллын хавтгай хоорондын зайг Де-Бройллийн тэгшитгэлийг Вульф-Брэггийн тэгшитгэлд тооцоолон тодорхойлбол:

$$(d_{hkl})_i = \frac{h}{2m_n L \sin\theta} t_i = \frac{h}{2m_n (l_1 + l_2) \sin\theta} t_i. \quad (1)$$



Зураг 3. ЭПСИЛОН нейтрон дифрактометр болон кварц агуулсан чулуулаг дээжийг хэмжсэн хэмжилтийн бүдүүвч зураг.

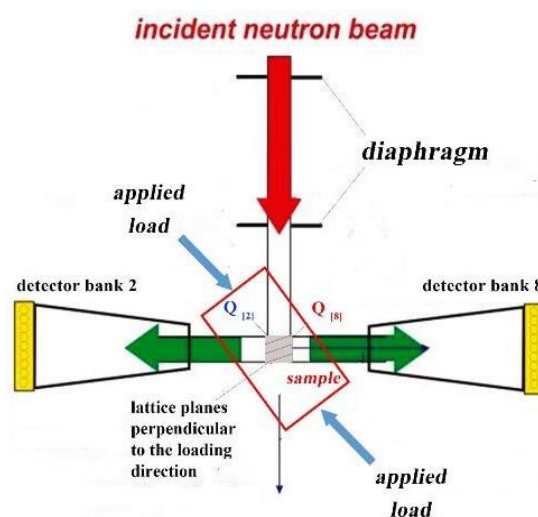
3. СУДАЛГААНЫ ҮР ДҮН

Уулын чулуулгууд ихэнхдээ поликристаллыг бүрдүүлэгч монокристалл үрлэн ширхэгүүдээс тогтдог учир кристалл бүтцийн микродеформацийг эдгээр монокристалл ширхгүүдээс хамаарч нэгэн төрлийн бус гэж үзэж болно. Энэ нэгэн төрлийн

Энд:

- L – нисэлтийн нийт зай (м), l_1 – үүсгүүрээс дээж хүртэлх зай, l_2 – дээжнээс детектор хүртэлх зай: 107,03 м;
- t – нисэлтийн хугацаа (сек);
- сарнилын өнцөг: $2\theta = 90^\circ$;
- ЭПСИЛОН дифрактометрийн хугацааны анализаторын хугацааны сувгийн өргөн: $\Delta t = 32$ мксек, 6144 хугацааны суваг [4], [5].

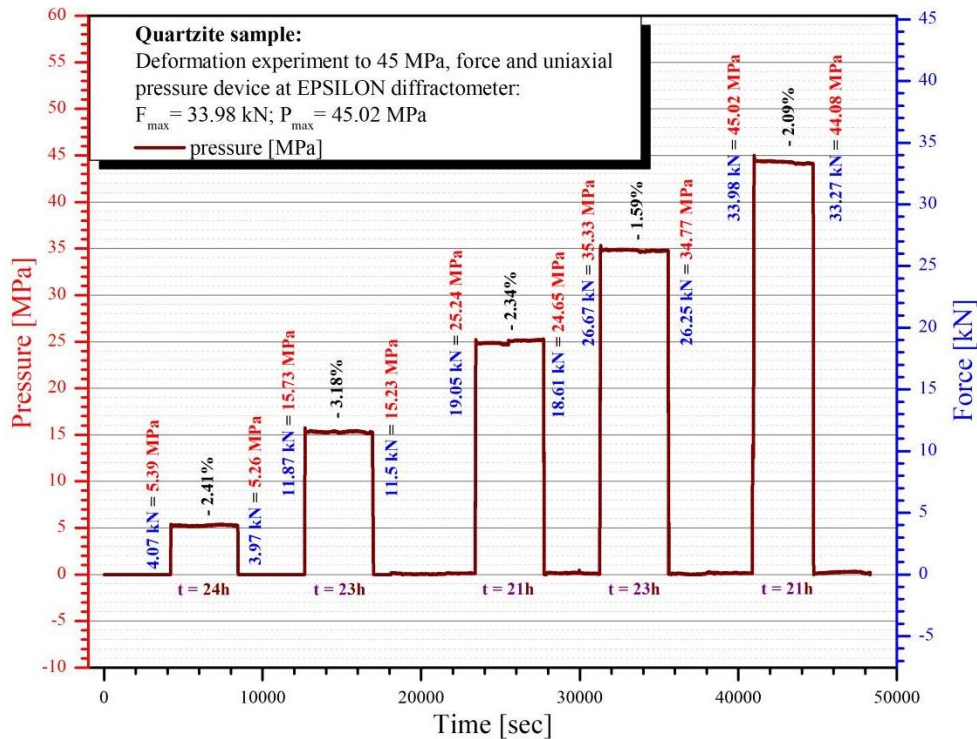
Дээрх тэгшитгэл нь тухайн нейтрон дифрактометрийн хувьд кристаллын хавтгай хоорондын зай нейтроны нисэлтийн хугацаанаас хамаарах хамаарлыг үзүүлэх ба дифрактометрийн ялгах чадварыг илэрхийлнэ. Тусч буй нейтроны хөндлөн огтлолын талбайг тусгай диафрагмын тусламжтайгаар 50 мм x 15 мм – ийн хэмжээтэй болгон өөрчилж, хэмжилтийг гүйцэтгэсэн бөгөөд даралтын нөлөөн дэх болон үлдэгдэл микродеформацийн хэмжилтийг ЭПСИЛОН нейтрон дифрактометрийн бүдүүвч зурган дээрх 2 болон 8 дугаар блок детекторын хэмжилтийн утгыг ашиглан тодорхойлов (Зураг 3).



бус микродеформац нь тухайн монокристалл ширхэгийн уян харимхай шинж чанар буюу Юнгийн модулаас (E) хамаарах ба нейтрон дифракцын пикийн хэлбэр дүрсийн өөрчлөлт, өргөсөлт, пикийн хамгийн их эрчмийн байрлалын шилжилт зэргээр тодорхойлогддог [7], [8].

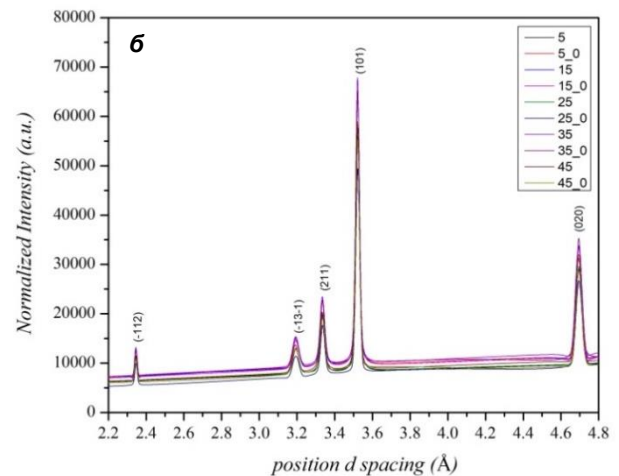
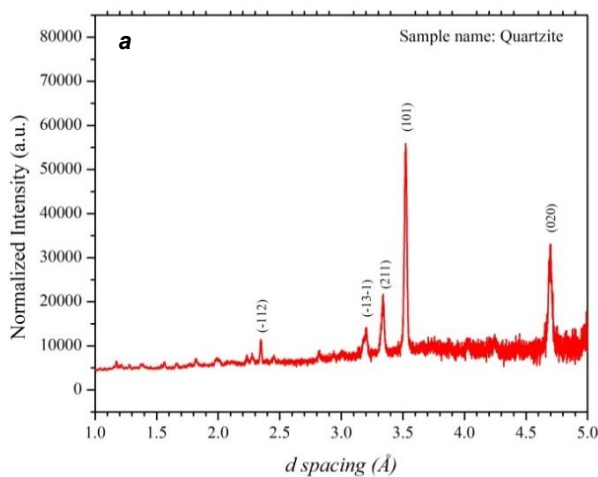
Судалгааны дээж болох 60 мм х 31 мм – ын харьцаатайгаар цилиндр хэлбэрт оруулан бэлтгэсэн кварц агуулсан чулуулаг дээжний кристалл бүтэц дэх микродеформацын хэмжилтийг тусч буй нейтронтой детекторын үүсгэх өнцөг тогтмол $2\theta = 90^\circ$ байх байрлалд тасалгааны температурт болон даралтын төхөөрөмж ашиглан 5, 15, 25, 35 болон 45 МПа хүртлэх янз бүрийн утга бүхий даралтаар

үйлчилж (зураг 4), тухайн цэг тус бүрт нисэлтийн хугацааны нейтрон сарнилын хэмжилтийг гүйцэтгэв. Мөн тухайн даралтын утгын тус бүрийн дараах кристалл бүтцэд үүссэн үлдэгдэл микродеформацын нисэлтийн хугацааны нейтрон сарнилын хэмжилтийг гүйцэтгэн, профайл анализийн үр дүнгээр пикуудийн шилжилтийг тодорхойлов (зураг 5б болон зураг 6).



Зураг 4. Кварц агуулсан чулуулаг дээжний кристалл бүтцэд учруулсан механик даралтын утгууд.

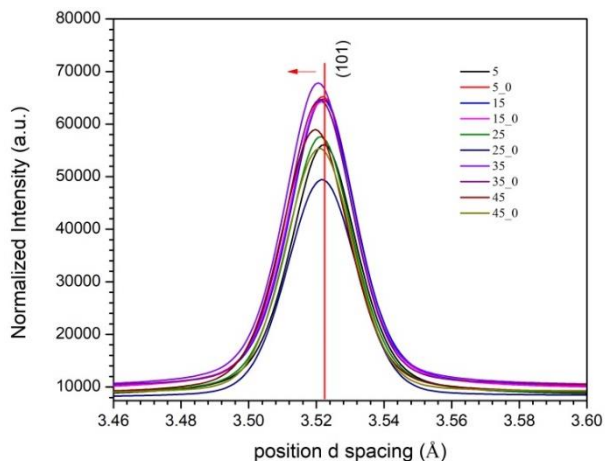
Кристалл бүтцийн эгэл торд учруулсан шахах үеийн даралтын нөлөөгөөр тухайн кристаллографын хавтгайгаас дифракцлагдаж байгаа пикийн Брэггийн байрлалууд болон эрчмийн өөрчлөлтөөр (зураг 6) эгэл торын деформацийн хэмжээг тооцоолон гаргасан.



Зураг 5. Кварц агуулсан чулуулаг дээжний нисэлтийн хугацааны нейтрон дифракцын зураг. а) Даралтын тэг утга дахь дифракцын зураг, б) Даралтын нөлөөн дэх болон даралтын дараах үлдэгдэл деформацийн үеийн боловсруулсан нейтрон дифракцын зураг.

Судалгааны кварц агуулсан чулуулаг дээжний үндсэн фазаас (кварц) дифракцлагдсан

буюу кристаллын эгэл торын хавтгай хоорондын зай $d = 3,52 \text{ \AA}$ бүхий кварцын пикийн хамгийн их эрчимтэй (101) рефлексийн эрчмийн утга болон байрлал нь даралтын өөр өөр утганаас хамаарч кристаллын эгэл торын хавтгай хоорондын зайн бага утгаруу шилжиж байв (Зураг 6.)



Зураг 6. Кварц агуулсан чулуулаг дээжний хавтгай хоорондын зай $d = 3,52 \text{ \AA}$ бүхий рефлексийн эрчим болон Брэггийн байрлалын шилжилт.

Иймээс үлдэгдэл микродеформацыг тодорхойлохын тулд кристаллын хавтгай хоорондын зайн анхны утга буюу d_0^{hkl} – ийг нунтаг кристалл дээжний хэмжилтийн үр дүнгээр, деформацид орсон үеийн буюу шилжилттэй гарсан хэмжилтийн үр дүнгээр d^{hkl} – ийг тус бүрт нь томъёо (1) – ийн тусламжтайгаар тодорхойлсоноор томъёо (2) – ыг ашиглан кристалл бүтцийн эгэл тор дахь микродеформацыг тооцоолон боддог.

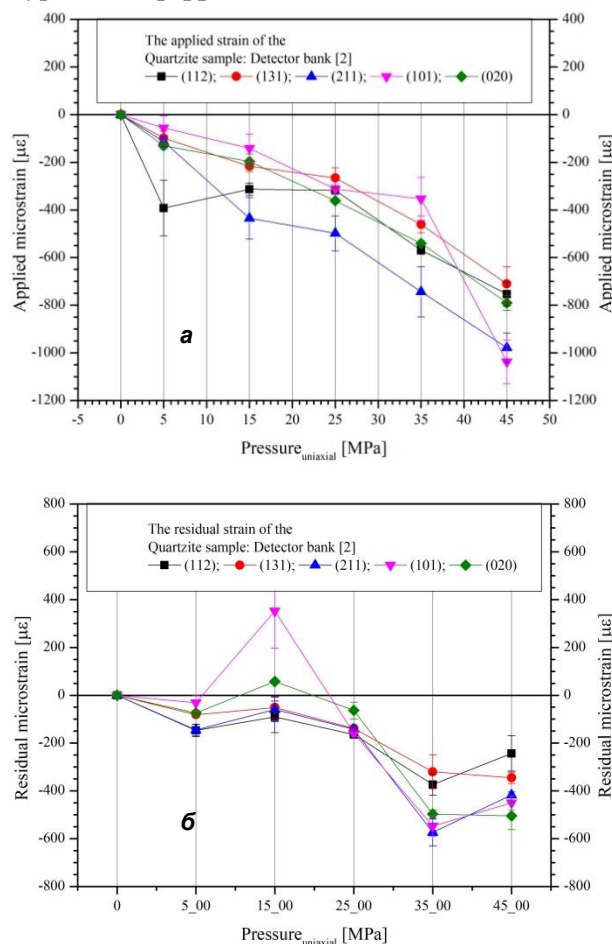
$$\varepsilon^{hkl} = \frac{d^{hkl} - d_0^{hkl}}{d_0^{hkl}} \quad (2)$$

Энд:

- ε^{hkl} – эгэл торын деформаци;
- d^{hkl} – кристалл хавтгай хоорондын өөрчлөгдсөн зай;
- d_0^{hkl} – кристалл хавтгай хоорондын зайн анхны утга (нунтаг дээжний).

Уг кристаллын пикүүдийн шилжилтээр илэрхийлэгдэж байгаа хавтгай хоорондын зайн өөрчлөлт нь эгэл торын микродеформацыг илтгэж байгаа бөгөөд эдгээрийг кристаллографын эгэл торын (020), (101), (211),

(131) болон (112) хавтгайнуудад томъёо (2) – ын тусламжтайгаар тооцоолон тодорхойлсоныг Зураг 7 – д үзүүлэв.



Зураг 7. Кварц агуулсан чулуулаг дээжний даралтын нөлөөнөөс хамааран кристалл бүтцэд үүссэн микродеформац болон даралтын нөлөөний дараах үлдэгдэл микродеформацыг кристаллографын таван өөр хавтгайн ((020), (101), (211), (131) болон (112)) хувьд тооцоолсон үр дүн. а) даралтын нөлөөний үед дэх микродеформац, б) үлдэгдэл микродеформац.

Дээрх кристалл бүтцийн эгэл торын микродеформацыг тодорхойлсон үр дүнгээр (зураг 7) нэмэлтээр 45 МПа хүртэл даралтын нөлөөнд оруулан шахахад:

- (112): $-313 \leq \mu\varepsilon \leq -753$;
- (131): $-98 \leq \mu\varepsilon \leq -710$;
- (211): $-112 \leq \mu\varepsilon \leq -978$;
- (101): $-56 \leq \mu\varepsilon \leq -1037$;
- (020): $-130 \leq \mu\varepsilon \leq -790$;

хүртэл хэмжээтэйгээр шахагдаж, деформацилагдсан бол эдгээрийн тус бүрийн дараах үлдэгдэл шахалтын микродеформац нь

- (112): $-90 \leq \mu\varepsilon \leq -373$;
- (131): $-51 \leq \mu\varepsilon \leq -345$;
- (211): $-59 \leq \mu\varepsilon \leq -573$;

- (101): $-31 \leq \mu\epsilon \leq -547$;
- (020): $-63 \leq \mu\epsilon \leq -504$;

хэмжээтэйгээр үүссэн байгаа бөгөөд үлдэгдэл суналтын микродеформац нь

- (101): 352,8 $\mu\epsilon$;
- (020): 57,53 $\mu\epsilon$

хэмжээтэй үүссэн байна.

ДҮГНЭЛТ

- Говь-Алтай аймгийн Онгон-Улаан уулны поликристалл бүхий кварц агуулсан чулуулаг дээжийг 5 МПа – аас 45МПа – ын завсарт 10МПа – ын алхамтайгаар даралтын нөлөөнд оруулан шахаж, тухайн даралтын утгын үйлчлэл тус бүрт нь нисэлтийн хугацааны нейтрон дифракцын хэмжилтийг хийж, Ритвельд болон профайл анализыг гүйцэтгэв.
- Нейтрон дифракцын хэмжилтийн үр дүнгээс Ритвельд болон профайл анализын тусламжтайгаар кристаллографын таван өөр хавтгайд ((020), (101), (211), (131) болон (112)) нэмэлтээр шахах үеийн даралт учруулахад (101) хавтгайн хувьд хамгийн их буюу -1037 $\mu\epsilon$ хүртэл деформацад орсон бол үлдэгдэл микродеформац нь суналтын мужид хамгийн ихдээ (101) хавтгайд 352 $\mu\epsilon$, шахалтын мужид хамгийн ихдээ (211) хавтгайд -573 $\mu\epsilon$ хүртэл үүссэн байна.
- Кристалл бүтцийн даралтын нөлөөн дэх деформацийн хэмжээ, тэдгээрийн нөлөөнөөс үүссэн үлдэгдэл деформацийг тодорхойлсоноор тухайн чулуулагийн оршин буй координатын хувьд газар хөдлөл, температурын өөрчлөлт зэргээс хамааран үүссэн нөлөөлөлүүдийг тайлбарлахын тулд урьдчилан таамаглал дэвшүүлэхэд чухал ач холбогдолтой байдаг байна.

ТАЛАРХАЛ

Дээж бэлтгэхэд туслалцаа үзүүлсэн Ж.Одбаяр (Геологийн төв Лаборатори), судалгааны ажлыг дэмжсэн Нейтроны Физикийн Лаборатори болон ШУА-ийн Физик технологийн хүрээлэнгийн Материал судлалын салбар, МУИС-ийн Физикийн тэнхимийн хамт олондоо талархал илэрхийлье.

АШИГЛАСАН МАТЕРИАЛ

- [1] Cunningham D. (2017), *Geosciences*. **7(1)**, 2; [doi:10.3390/geosciences7010002]
- [2] Genyao W. (2013) *J. Palaeogeography*. **2(3)**, 306-317. [doi:10.3724/SP.J.1261.2013.00033]
- [3] Taran Y.V., Balagurov A. M., Sabirov B., Davydov V. and Venter A. (2014), *Materials Science Forum*. **768-769**, 697-704
- [4] Scheffzük Ch., Müller B.I.R., Breuer S., Altangerel B. and Schilling F.R. (2016), *Mongolian Journal of Physics*. **2**, 433-441.
- [5] Scheffzuek Ch., Hempel H., Frischbutter A., Walther K., and Schilling F. R. (2012) *J. Phys. Conf. Ser.* **340** 012038 [doi:10.1088/1742-6596/340/1/012038]
- [6] Rietveld H.M., (1967), *Acta Cryst.***22**. 151.
- [7] Scheffzük Ch., Walther K. and Frischbutter A. (2014) *Materials Science Forum*. **777**, 136-141.
- [8] Badmaarag A., Scheffzük Ch., Sangaa D. (2016), *Mongolian Journal of Physics*. **2**, 442-448.