

# Даралтын нөлөөнд чулуулаг дээжний кристалл бүтцэд үүсэх үлдэгдэл хэв гажилт болон текстур бүтцийг нисэлтийн хугацааны нейтрон дифракцын аргаар судалсан үр дүн

А.Бадмаарга<sup>a,b,\*</sup>, К.Шеффцюк<sup>b,c</sup>, Д.Сангаа<sup>a</sup>, Б.Миоллер<sup>c</sup>, Ф.Шиллинг<sup>c</sup>, Л.Энхтөр<sup>d</sup>

<sup>a</sup> ШУА, Физик технологийн хүрээлэн, Улаанбаатар хот, Монгол Улс,

<sup>b</sup> ЦШНИ, Нейтроны физикийн лаборатори, Дубна хот, ОХУ,

<sup>c</sup> Карлсруэ-гийн технологийн хүрээлэн, Карлсруэ хот, ХБНГУ,

<sup>d</sup> МУИС-ийн ШУС-ийн Физикийн тэнхим, Улаанбаатар хот, Монгол Улс

Газрын гүний байгууламжийн эргэн тойронд үүсч буй механик хүч, температур зэрэг байгалын хүчин зүйлсийн нөлөөнд орж, кристалл бүтцийн эгэл тордоо эвдрэл, хэв гажилт үүссэн поликристалл метаморф хувьрал бүхий чулуулаг дээжний бүтцийн текстур шинж чанар болон хэв гажилтын судалгааг нисэлтийн хугацааны (TOF) нейтрон дифракцын аргаар судалсан болно. Туршилтыг ОХУ-ын Дубна хот дахь ЦШНИ-ийн ИБР-2М импульст нейтроны үүсгүүрийн 7-р сувагт байрлах SKAT-EPSILON нейтрон дифрактометрүүд болон тэдгээрийн дагалдах нэмэлт төхөөрөмжүүдийг ашиглан гүйцэтгэв.

Эгэл торын хэв гажилтыг тодорхойлохын тулд нэг тэнхлэгийн дагуу 53 МПа хүртэл даралтын нөлөөлөл үүсгэн тухайн даралтын чиглэлийн дагуу 10 мм-ийн алхамтайгаар шилжүүлэн хэмжсэн хэмжилтийн үр дүнд поликристалл дээжний хамгийн өндөр хэв гажилтанд орж буй кварц фазын үлдэгдэл хэв гажилт нь суналтын мужид хамгийн багадаа  $-1.6 \cdot 10^{-3}$  ба түүнд перпендикуляр чиглэл дэх шахалтын мужид хамгийн ихдээ  $1.2 \cdot 10^{-3}$  байгааг тодорхойлов.

Түлхүүр үгс: метаторфик, нисэлтийн хугацааны нейтрон, дифракц, текстур анализ, хэв гажилт, Ритвелд анализ

## I. Оршил

Судалгааны метаморф чулуулаг (физик болон механик шинж чанар нь хувьсан өөрчлөгдсөн чулуулаг) нь метаморфизмын үр дүнд, ө.х. дэлхийн царцдасын гүнд өндөр температур, өндөр даралтын нөлөөгөөр анхны хэлбэр, шинж чанар нь өөрчлөгдсөн чулуулаг юм. Метаморф чулуулгийн найрлага нь олон янз байдаг бөгөөд эдгээр нь кварц (кварцит) эсвэл кальцит (гантиг) гэх мэт ганц эрдсээс болон бусад олон найрлагат силикатуудаас бүрддэг ба метаморф чулуулгийн үүсэх механизмыг уг эрдсийн кристалл бүтцийн болон текстур судалгаанд үндэслэн тогтоодог [1, 2].

Метаморф чулуулаг дээжин дэх хэв гажилтын төлөв байдлын талаархи ойлголт нь геодинамикийн процессыг тайлбарлах, уулуурхай, газрын гүний үйл ажиллагаа явуулах зэрэг геотехникийн хэрэглээнд чухал ач холбогдолтой юм. Сүүлийн үед газрын гүний ус болон дулаан ашиглах, гүний уурхай, станцуудын үйл ажиллагаа нь газрын гүнд явагдаж буй процессуудтай (газар хөдлөл буюу механик хүч, температур г. м.) шууд

хамааралтай байна. Ердийн судалгааны лабораторид см-ээс м хүртэлх мужид макрокристалл бүтцийн хэв гажилтыг тодорхойлох боломжийг олгож байна. Иймээс судалгааны рентген болон нейтрон дифракцын аргыг ашиглан кристалл бүтцийн эгэл торын хэв гажилтыг микро хэмжээсээс нано хэмжээс хүртэл тодорхойлж болдог. Учир нь материал дахь металл болон эрдсүүд нь нейтроны шингээлт харьцангуй бага байдгаас олон фаз бүхий дээжнүүдийн эгэл тор дахь хэв гажилтыг тодорхойлоход үр дүнтэй байдаг [3, 4].

Олон фаз бүхий нарийн бүтэцтэй геологийн дээжийг судлахад нэвтрэх чадвар болон нарийвчлал өндөртэй ( $\Delta d/d$ ) учир геологийн материалын кристалл бүтцийн хэв гажилт болон кристаллографийн давамгайлсан чиглэлийг Ритвелд текстур анализын аргыг хэрэглэн судлахад бөөмлөг болон долгиолог хосолсон шинж чанар бүхий нейтрон дифракц нь өндөр үр дүнтэйн дээр нарийвчлал өндөртэй байдаг [5, 6].

Судалгааны ажлын гол зорилго нь деформацид орсон чулуулаг материалын хэв гажилтын процессийг ойлгох, ялангуяа дэлхийн

\* Electronic address: badmaarag@jinr.ru

гүний царцдасын нөлөөний дараагаар үүссэн уян харимхай шинж чанарыг судлах явдал юм.

## II. Арга зүй ба судалгааны дээж

Рентген, нейтрон гэх мэт дифракцын аргыг хэрэглэх нь кристаллографын хавтгай хоорондын зайнаас хамааруулан кристаллын эгэл торын хэв гажилтыг тодорхойлох боломжийг олгодог. Цаашилбал, эдгээр аргууд нь дээжинд агуулагдаж буй эрдэс минералуудын фаз тус бүрийн эгэл торын хэв гажилтыг тодорхойлох боломжтой. Дифракцын арга зүй нь Брэггийн хуулинд захирагддаг.

$$2d_{hkl}\sin\theta = n\lambda \quad (1)$$

Энд:  $d_{hkl}$  - эгэл торын хавтгай хоорондын зай (м),  $\theta$  – Брэггийн өнцөг ( $^\circ$ ),  $\lambda$  – долгионы урт (м) ба  $n \in N\{0\}$ .

Импульст нейтроны үүсгүүрийн нисэлтийн хугацааны нейтрон дифракцын арга нь эгэл торын хавтгай хоорондын зайг судлах боломжийг олгодог

$$d_{hkl} = \frac{h}{2m_n L \sin\theta} \cdot t \quad (2)$$

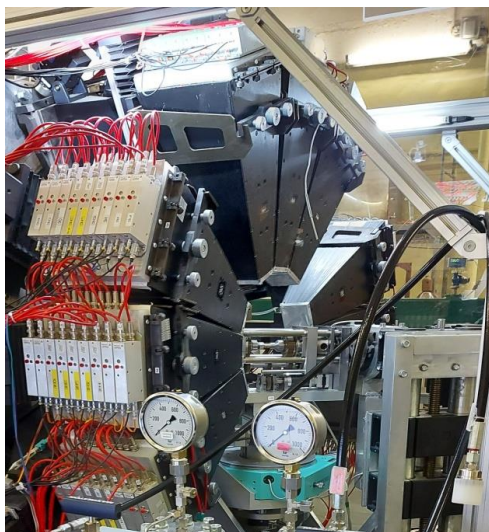
Энд:  $h$  – Планкын тогтмол,  $m_n$  – нейтроны масс (кг),  $L$  – нейтроны нисэлтийн нийт зай (м),  $t$  – нисэлтийн хугацаа (сек).

Эгэл торын хэв гажилтыг дараах томъёоны тусламжтайгаар тооцоолдог:

$$\langle \varepsilon_{hkl} \rangle = \frac{\langle d_{hkl} \rangle - d_{hkl}^0}{d_{hkl}^0} \quad (3)$$

Энд:  $\varepsilon_{hkl}$  – дээжний  $[hkl]$  чиглэл дэх хэв гажилт,  $d_{hkl}$  - хэв гажилтанд орсон эгэл торын хавтгай хоорондын зай (м),  $d_{hkl}^0$  – хэв гажилтанд ороогүй эгэл торын хавтгай хоорондын зай (м).

Нисэлтийн хугацааны ЭПСИЛОН/СКАТ нейтрон дифрактометрүүд нь нэг тэнхлэгийн дагуу 100 кН хүртэл хүчээр даралтын нөлөөнд оруулах чадамж бүхий даралтын төхөөрөмж,  $0,01^\circ$  - ийн өнцөг алхамтайгаар эргүүлэх гониометрээр тоноглогдсон бөгөөд нунтаг болон янз бүрийн хэмжээтэй шинэ материал, геологийн дээжний фаз тус бүрийн хувьд кристалл бүтцийн макро болон микро хэв гажилт, текстур бүтцийн судалгаанд зориулан загварчилсан. Уг дифрактометрүүд нь 103 – аас 107 метр орчим урт нейтроны нисэлтийн зайтай тул энэ нь өндөр нарийвчлалтай хэмжилтийн үр дүн, олон фаз бүхий материалыг судлах, бага тэгш хэмтэй фазуудыг судлах боломжийг олгодог. Учир нь өргөн долгионы уртын муж нь ( $\lambda = 7.8 \text{ \AA}$ ) эгэл торын хавтгай хоорондын зай  $d = 5.3 \text{ \AA}$  хүртэлх хэмжээтэйг судлах боломжийг өгдөг байна. ЭПСИЛОН ба СКАТ дифрактометрүүдийг зураг 1 – т үзүүлэв[7, 8].



а)



б)

Зураг 1. Нисэлтийн хугацааны нейтрон дифрактометрүүд. а) Кристалл бүтэц бүхий дээжний эгэл торын хэв гажилтын судалгааны ЭПСИЛОН дифрактометр нь 9 багц детектортой бөгөөд сарнилын өнцөг нь  $2\theta = 90^\circ$ , б) Материалын текстур бүтцийн судалгааны СКАТ дифрактометр нь 19 детектортой бөгөөд тэдгээр нь тодорхой координатын дагуу байрласан байдаг.

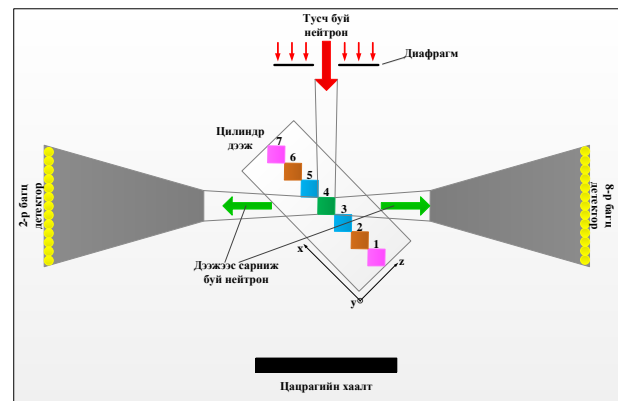
### Ш. Хэмжилтийн үйл явц ба үр дүн

#### 3.1. Кристалл бүтцийн судалгаа

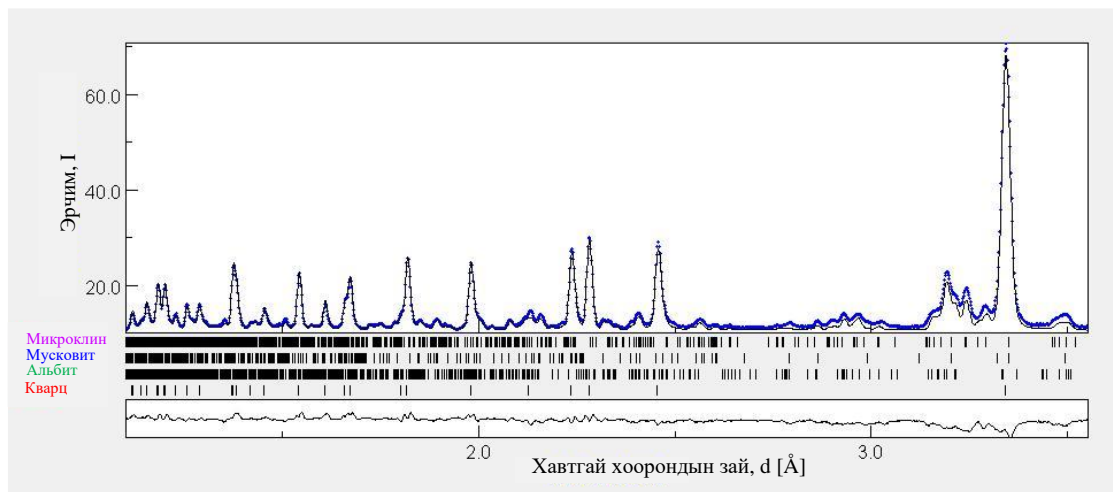
Кристалл бүтцийн эгэл торын хэв гажилтын хэмжилтийг ЭПСИЛОН дифрактометрийн гониометрийн [z] тэнхлэг, тусч буй цацрагийн хоорондох өнцөг 45° байхаар сонгов. Тиймээс дифрактометрийн [z] – тэнхлэг нь 8-р багц детекторуудтай параллель, 2-р багц детекторуудтай перпендикуляр байрлалд дээжний хэв гажилтанд орсон эгэл тороос сарниж буй нейтронуудыг бүртгэдэг (Зураг 2).

Текстур анализын хэмжилтийг 5° - ын өнцөг алхамтайгаар өндөр нарийвчлал бүхий SKAT нейтрон дифрактометрийн тусламжтайгаар гүйцэтгэж (Зураг 3) [9], хэмжилтийн үр дүнг

MAUD программын тусламжтайгаар тооцоолон гаргасан.



Зураг 2. Энд дээжний хэв гажилтыг сканердан хэмжсэн хэмжилтийн 10мм алхамтай, 2см<sup>2</sup> эзэлхүүн бүхий схем.



Зураг 3. G01, G02 дээжнүүдийн нормчилсон нейтрон дифракцын зураг. Энд Ритвельдийн анализийн үр дүн ( $R=5.02$ ,  $\chi=1.82$ ) болон фазуудыг харуулав. Ритвельд текстур анализыг  $d$  – зайн 1.1 – ээс 3.55 Å хүртэлх зайд гүйцэтгэв.

Ритвельдийн анализын үр дүнгээс үзэхэд 1-р дээжид кварц – 56%, альбит – 20%, микроклин – 13%, мусковит – 10% ба бусад нь 1% агуулагдаж байна.

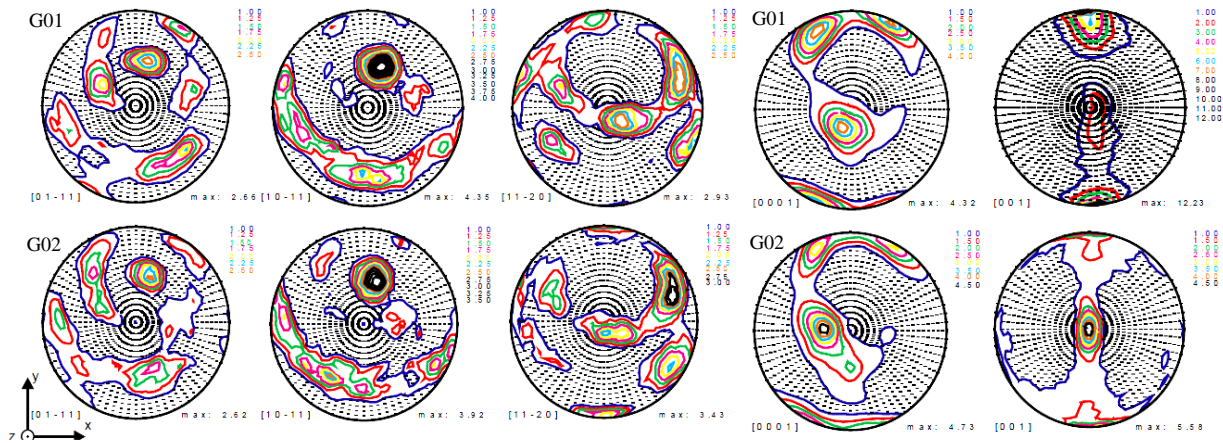
Хүснэгт 1. Чулуулаг дээжний фаз тус бүрийн эзлэх хувийг [%] Ритвельд текстур анализ болон нисэлтийн хугацааны нейтрон дифракцын хэмжилтээс тодорхойлсон. F2 нь текстур шинж чанар буюу фазын түгэлтийг илэрхийлсэн индекс юм.

	Кварц	Альбит	Мусковит	Микроклин
Go1: фазуудын эзлэх хувь	65,4	18,9	5,8	9,9
Go2: фазуудын эзлэх хувь	42,4	15,1	8,0	34,5
G1:F2(текстур параметр)	2,87	1,06	2,23	1,20
G2:F2(текстур параметр)	2,70	1,04	1,35	1,32

#### 3.2. Текстур анализ

Кварц фаз нь SKAT дифрактометрийн 90° - ын өнцгийн байрлалд нэг цагирагийн координатад орших олон детектор системийн тусламжтайгаар [10] хэмжхэд хоёр дээжинд хамгийн ихээр агуулагдах бөгөөд тодорхой давамгайлсан чиглэлийг харуулж байгаа ба энэ нь 2.87 (G01) ба 2.70 (G02) – ийн F2 индексийг илтгэж байна. Кинематик ач холбогдол бүхий (0001) түгэлт нь G01 ба G02 дээжинд эрчмийн түгэлтийн хувьд гурвалсан хамгийн их түгэлтийг харуулж байна.

Мусковитийн (001) хавтгай нь тодорхой давамгайлсан чиглэлийг (G01: F2 = 2.23, G02: F2 = 1.35) харуулж байгаа боловч эрчмийн түгэлтийн хувьд ялгаатай байна (Зураг 4).



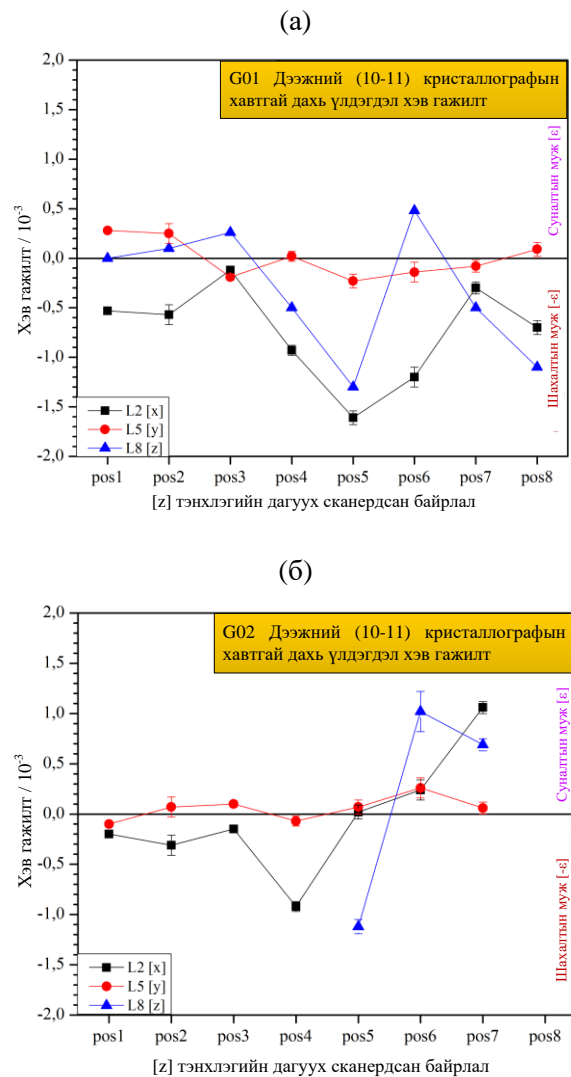
Зураг 4. G01, G02 дээжнүүдийн туйлын дүрсүүдийг кварц (011̄1), (101̄1), (112̄0) болон мусковить (001) кристаллографын тэнцүү талбай бүхий хавтгайнуудын хувьд тооцоолов. Хамгийн өндөр эрчим бүхий хавтгайг баруун доод талд харуулав.

G01 дээжний хувьд хамгийн их түгэлт нь [y] тэнхлэгтэй параллель, хамгийн сул түгэлт нь [z] тэнхлэгтэй параллель байгаа бол G02 дээжний хувьд [z] тэнхлэгийн дагуух түгэлт нь нэмэгдсэн бол [y] тэнхлэгийн дагуух түгэлт нь сул байна. Мөн микроклиний эгэл торын чиглэлүүд нь ялгаатай эрчмүүдийг харуулж байна (G01: F2 = 1.2, G02: F2 = 1.32). Эсрэгээр нь альбит фазын үүсгэж байгаа кристаллографын давамгайлсан чиглэлүүд нь маш сул (G01: F2 = 1.06, G02: F2 = 1.04) байгаа бөгөөд үүнийг тайлбарлах боломжгүй юм.

**3.3. Үлдэгдэл хэв гажилт**

Кварц фаз давамгайлсан материал нь эзэлхүүний хувь өндөр ба дифракцын спектрийн сарнилын эрчим мөн өндөр байдаг (Зураг 3). Хоорондоо давхацхааргүй байрлал бүхий 7 кристаллографын хавтгайнуудын (011̄1)/(101̄1), (112̄0), (112̄1), (011̄2)/(101̄2), (022̄1)/(202̄1), (112̄2) болон (123̄1)/(213̄1) хувьд эгэл торын хэв гажилтыг томъёо (3) – ын тусламжтайгаар тодорхойлсон бөгөөд (101̄1) хавтгайн хувьд бусад хавтгайнуудтай төсөөтэй түгэлт үүсгэж байгааг тодорхойлов (Зураг 5). Үлдэгдэл хэв гажилтыг сканердахад хэв гажилтын түгэлт нь [z] тэнхлэгийн дагуу нэгэн төрлийн бус байна. G01 дээжний хэв гажилтын хэмжээ нь [x] тэнхлэгийн дагуух чиглэлд (011̄1)/(101̄1) хавтгайн хувьд  $\epsilon = -1.7 \cdot 10^{-3}$ , (112̄1) хавтгайн хувьд  $\epsilon = 1.2 \cdot 10^{-3}$ . Мөн (011̄1)/(101̄1) хавтгайнуудын хувьд хэв гажилтын төсөөтэй байдлыг илтгэж байгаа боловч [z] тэнхлэгийн дагуух чиглэл дэх хэв

гажилт нь  $\epsilon = 0.5 \cdot 10^{-3}$  хэмжээтэйгээр шахалтын хэв гажилтыг харуулж байна [11].

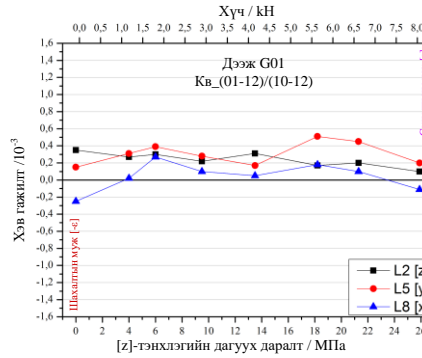
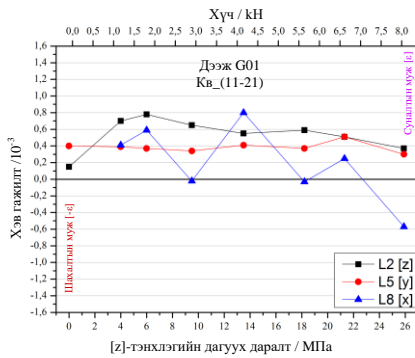
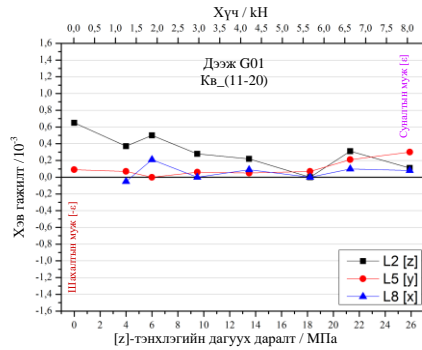
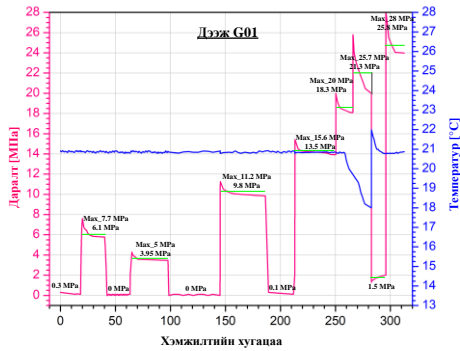


Зураг 5. Үлдэгдэл хэв гажилтыг тооцоолсон үр дүн. а) G01, б) G02. Уг графикт L2 нь [x] тэнхлэгийн дагуу, L5 нь [y] тэнхлэгийн дагуу харин L8 нь [z] тэнхлэгийн дагуу шилжилтийг тооцоолсон үр дүнг үзүүлэв.

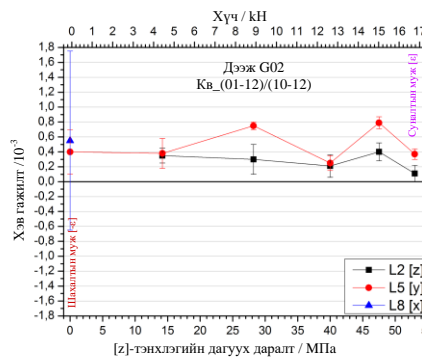
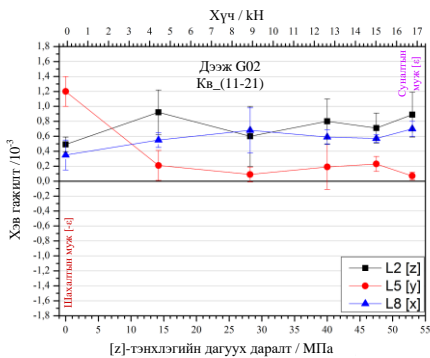
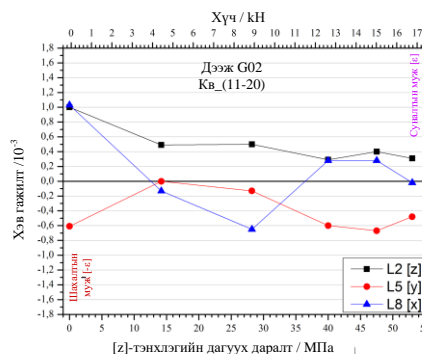
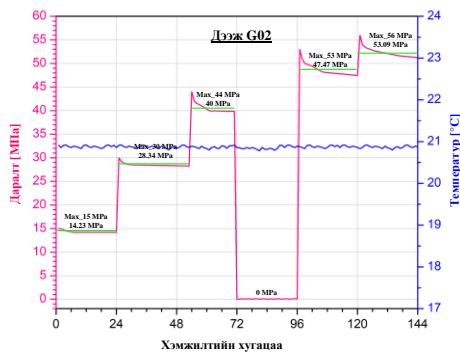
Үүнтэй төсөөтэй хэв гажилт (011̄2)/(101̄2) ба (111̄1) хавтгайнуудад ч мөн үүссэн байна. G02 дээжний хэв гажилтын хэмжээ нь (01-11)/(10-11) хавтгайн хувьд  $\varepsilon = -1.1 \cdot 10^{-3}$ , [z] тэнхлэгийн дагуух чиглэлд (112̄1) хавтгайн хувьд  $\varepsilon = 1.7 \cdot$

$10^{-3}$ . Мөн уг дээжний хамгийн их хэмжээтэйгээр хэв гажилтанд орж буй кварц фазын үлдэгдэл хэв гажилт нь суналтын мужид хамгийн багадаа  $-1.6 \cdot 10^{-3}$  ба шахалтын мужид хамгийн ихдээ  $1.2 \cdot 10^{-3}$  байна.

G01 дээж:



G02 дээж:



Зураг 6. Нэмэлтээр даралт учруулахад үүссэн хэв гажилтыг тооцоолсон үр дү. Энд дээжнүүдийн кристалл бүтцэд учруулсан даралтын муруй болон кварц фазын сонгосон кристаллографын хавтгайнуудын хэв гажилтын муруйнуудыг харуулав.

### 3.4. Даралтын нөлөөн дэх хэв гажилт

Нэмэлтээр G01 дээжийг долоон өөр (6.1; 3.8; 9.6; 13.5; 18.3; 21.3 болон 25.8 МПа), харин G02 дээжийг таван өөр (14.2; 28.3; 40.0; 47.5 болон 53.1 МПа) даралтын нөлөөнд оруулан эгэл торд үүсч буй хэв гажилтыг хэмжихдээ орчны температурыг  $\sim 21^\circ\text{C}$  – д тогтворжуулан дээжний эгэл торын дулаан тэлэлтээс зайлсхийсэн. G01 дээжний эгэл торын (11 $\bar{2}$ 1) хавтгай нь агших хэв гажилтанд орж байгаа бол бусад (11 $\bar{2}$ 0) ба (01 $\bar{1}$ 2)/(10 $\bar{1}$ 2) хавтгайнууд нь даралтын нөлөөнд орохгүй байна. Харин G02 дээжний хувьд [x] тэнхлэгийн дагуух чиглэлд (11 $\bar{2}$ 1) хавтгайд 28.3 МПа хүртэл агшилт үүссэн бөгөөд өндөр даралтын нөлөөнд сунаж эхэлсэн. Харин [z] тэнхлэгийн дагуух чиглэлд бага зэрэгийн агшилт үүссэн бол эгэл торын бусад чиглэлүүдэд нь хэв гажилт маш багаар үүссэн байна (Зураг 6).

### IV. Дүгнэлт болон хэлэлцүүлэг

Текстурын хэмжилтийн үр дүнгээс үзэхэд эдгээр хоёр дээжийн кристаллографын давамгайлсан чиглэл нь [z] тэнхлэгт перпедикуляр, өөрөөр хэлбэл [x], [y] тэнхлэгтэй параллель чиглэлтэй үелсэн байна. Кристаллын фазуудын давамгайлсан чиглэлүүдийг тодорхойлоноор мусковит фазын (001) хавтгайн үүсгэж буй туйлын дүрс нь эдгээр метаморф чулуулагт байгаа бүх үелсэн давхрагуудыг илэрхийлж байгааг тодорхойлов. Тиймээс мусковитийн (001) хавтгайн туйлын дүрс нь дээрх өөр өөр эрчим бүхий фазуудын тархалттай чулуулгуудийн давхаргын хэлбэлзлийг илэрхийлж байна.

Үлдэгдэл хэв гажилтын судалгаанаас нэгэн төрлийн бус хэв гажилтын түгэлт байгааг тодорхойлов. Mohr – ын (Mohr's circle) тойргийн тооцоололын тусламжтайгаар сонгосон нэмэлтээр учруулсан даралт нь эгэл торыг хэв гажилтанд оруулахгүй, өөрөө хэлбэл кварц фазын хэв гажилт нь даралт ихсэх тусам уян харимхай шинж чанар агуулж байна.

Мөн үелсэн давхрагууд нь тодорхой хэмжээний механик даралтыг даах чадвартай байдаг. Тиймээс олон фаз бүхий чулуулаг материалын хэв гажилтын түгэлтийн судалгаа нь нарийн төвөгтэй байдаг ба нарийвчлан системчилсэн бидний судалгаанаас харагдаж байна. Ялангуяа

олон фаз бүхий геологийн дээжнүүдийн хэв гажилтын түгэлт, бичил эвдрэлийн судалгааг оптик ба электрон микроскоп, нейтрон ба рентген дифракц, хэмжилтийн үед акустик дууны долгионыг бүртгэх нь хэв гажилт үүсэх болон тухайн үеийн процессыг улам бүр сайн ойлгоход чухал хувь нэмэр оруулах болно.

### АШИГЛАСАН МАТЕРИАЛ

- [1] Mueller B. “EPSILON @ JINR: reducing the risk of subsidence and induced seismicity through gas production” Proceedings of the International Conference “Condensed Matter Research at the IBR-2”, Dubna, Russia.
- [2] H.-R. Wenk, L. Lutterotti & S. Vogel (2010): Rietveld texture analysis from TOF neutron diffraction data. Powder Diffraction 25 (3), 283-296. [doi: 10.1154/1.3479004]
- [3] Song Shuguang, and Cao Yi. (2021) Textures and Structures of Metamorphic Rocks. In: Alderton, David; Elias, Scott A. (eds.) Encyclopedia of Geology, 2nd edition. vol. 2, pp. 375-388.
- [4] Håkon Austrheim, Kristina G. Dunkel, Oliver Plümper, Benoit Ildefonse, Yang Liu and Bjørn Jamtveit, Fragmentation of wall rock garnets during deep crustal earthquakes, *Science Advances*, 2017: Vol. 3, no. 2, e1602067, DOI: 10.1126/sciadv.1602067
- [5] H.M. Rietveld (1969): A profile refinement method for nuclear and magnetic structures. J. Appl. Cryst. 2, 65-71.
- [6] S. Matthies, L. Lutterotti & H.-R. Wenk (1997): Advances in Texture Analysis from Diffraction Spectra. J. Appl. Cryst. 30, 31-42.
- [7] Christian Scheffzük, Birgit I.R. Müller, Simon Breuer, Badmaarag Altangerel, Frank R. Schilling “Applied Strain Investigation on a Sandstone Sample using Neutron Time-of-Flight Diffraction at the Strain Diffractometer EPSILON, IBR-2M Dubna”, Mongolian Journal of Physics.
- [8] K. Walther, C. Scheffzük & A. Frischbutter (2000): Neutron time-of-flight diffractometer epsilon for strain measurements: layout and first results. Physica B, Condensed Matter 276-278, 130-131.
- [9] L. Lutterotti, S. Matthies, H.-R. Wenk, A.J. Schultz & J.W. Richardson (1997): Combined texture and structure analysis of deformed limestone from time-of-flight neutron diffraction spectra. J. Appl. Physics 81, 594-600.
- [10] K. Ullemeyer, P. Spalthoff, J. Heinitz, N.N. Isakov, A.N. Nikitin & K. Weber (1998):

TheSKAT texture diffractometer at the pulsed reactor IBR-2 at Dubna: Experimental layout and first measurements. Nucl. Instr. & Meth. Phys. Res. A 412 (1), 80-88.

- [11] Ch. Scheffzik, K. Walther & A. Frischbutter (2001): Applied and residual strain/stress measurements on a dolomite rock sample using neutron time-of-flight diffraction. *J. NeutronRes.* 9 (2-4), 187-192.