

**СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА**

В 165

18-87-291

**К. Вальтер, Л. П. Дрекслер, К. Фельдманн,
А. Фришбуттер*, Л. Фуэнтес**

**НЕЙТРОНОГРАФИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ
СТРОЕНИЯ КВАРЦА
В СТЕБЕЛЬЧАТОМ ГНЕЙСЕ
ОРТОГНЕЙСОВОЙ СТРУКТУРЫ РЕЙТЦЕНГАЙНА
(РУДНЫЕ ГОРЫ, ЮГ ГДР)**

*Центральный институт физики Земли АН ГДР,
г. Потсдам

ВВЕДЕНИЕ

Распределение ориентировок кристаллических зерен в горных породах и минералах содержит ценную информацию о тектонических процессах, происходивших в земной коре миллионы лет тому назад. Сравнение преимущественных ориентаций в естественно и экспериментально деформированных горных породах, а также моделирование самого деформационного процесса на ЭВМ позволяет оценить условия во время образования данного минерала, такие, как температура, напряжение деформации. Это значит, что полное и точное описание текстуры в геологическом образце может дать важную информацию для структурной геологии. При решении задач такого рода определение функции распределения ориентаций /ФРО/ является более информативным методом исследования, чем измерение распределения оптически активных осей в кварце. ФРО содержит полную информацию о текстуре данного материала. Она определяется из полюсных фигур, измеренных с помощью нейтронной или рентгеновской дифракции. За последние годы число работ по исследованию преимущественных ориентаций в различных геологических материалах заметно возросло. /см., например, '1-4' /.

В данной работе было исследовано строение кварца в стебельчатом гнейсе Рудных гор /юг ГДР/. Полюсные фигуры были измерены с помощью нейтронной дифракции по времени пролета на импульсном реакторе ИБР-2 '5,6'. Этот метод позволяет исследовать низкосимметричные кристаллические системы, такие, как кварц, с достаточной точностью даже в естественных многофазных материалах '7'. Математический текстурный анализ проводится с использованием анализа по сферическим функциям '8,9'.

ГЕОЛОГИЧЕСКИЕ ДАННЫЕ ИССЛЕДОВАННЫХ ГОРНЫХ ПОРОД

В данной работе изучаются преимущественные ориентации кварца в стебельчатом гнейсе из комплекса складчатости, типичной для верхней части земной коры /глубина < 5 км/. Со структурно-геологической точки зрения эта деформация происходила в экстремально-асимметричной складчатости в + параллельной системе плоскостей /кристаллизационная сланцеватость sk_1 /. Результатом

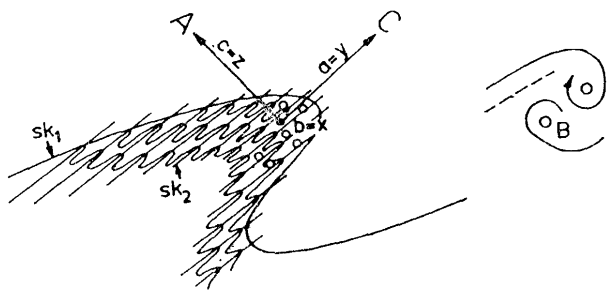


Рис. 1. Структурно-геологическое положение исследованного образца.

образования этой складчатости явилась молодая кристаллизационная сланцеватость (sk_2), которая формировалась почти параллельно аксиальной плоскости складчатости, связанной с "мелкой складчатостью" древней сланцеватости (sk_1) вблизи гребня складки, имеющей стебельчатую структуру /b-тектоника/, рис. 1.

Вместе с образованием изоклиальной структуры складки ориентация молодой кристаллизационной сланцеватости (sk_2) становилась все более аксиальной. Очевидно, что склоны /лимбы/ складки древней и молодой сформировавшейся кристаллизационной сланцеватости приблизительно параллельны. Вблизи гребня складки угол пересечения обеих складчатостей увеличивается и достигает 90 градусов на самом гребне. Гребень можно охарактеризовать морфологическим преобладанием плоскостей sk_2 и вытягиванием в $b = x$ /стебельчатая структура/ в сочетании с вращением вокруг $b = x$. Такие деформационные процессы в широких пределах не зависят от типов горных пород, от химического состава, а также от регионального геологического расположения. В данном случае благодаря наличию критических минералов система плоскостей деформации sk_2 соответствует кристаллизационной сланцеватости, сформированной при региональном метаморфизме в условиях: $p > 4 \div 5$ кбар, $T > 400 \div 500^\circ C$. Подобный или даже более слабый метаморфизм следует из рассмотрения образования молодой кристаллизационной сланцеватости sk_2 . Эти данные установлены из существования молодого биотита вдоль sk_2 -плоскости.

Исследованный образец - стебельчатый гнейс из самого гребня асимметрично лежащей складки с половиной длины волны порядка 1 км /рис. 1/. Он был взят из карьера в 1,5 км южнее г. Ештадт в непосредственной близости от границы с ЧССР. Геологическая система - это ортогнейсовый комплекс /внутренний красный гнейс/ антиклинали Рудных гор, называемый рейтценгайнской структурой красных гнейсов /10/. Образец представлял собой пластину толщиной 1 см параллельно оси $c = z$ и площадью порядка 15×20 см² в $ab = xy$ плоскости. С помощью рентгеновского структурного анализа в сочетании с микроскопическим анализом основных минералов был исследован состав образца стебельчатого гнейса: кварц 35%, плагиоклаз 35%, полевошпат 15%, мусковит 10%, биотит 5%.

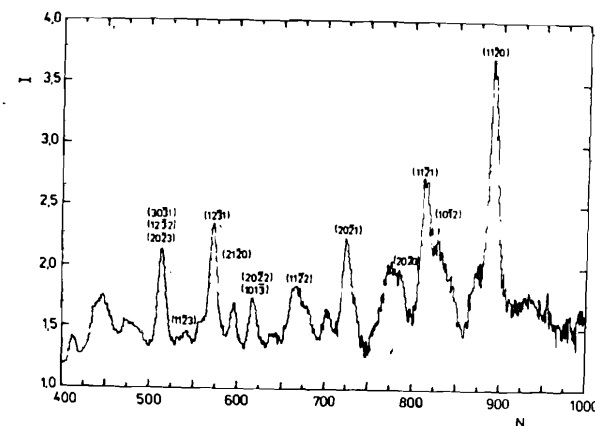
ЭКСПЕРИМЕНТ

Текстуальный анализ кварца данного образца гнейса проводился с помощью нейтронной дифракции по времени пролета. Для измерения использовался спектрометр НСВР /11/ на импульсном реакторе ИБР-2. В табл. 1 приводятся некоторые важные параметры эксперимента.

Таблица 1.

Общая пролетная база $L_1 + L_2$	34,2 м
Углы рассеяния при геометрии пропускания:	
$2\theta_1$	80°
$2\theta_2$	100°
геометрии отражения:	
$2\theta_1$	140°
$2\theta_2$	100°
Диаметр пучка	5 см
Размер образца	20x10x1 см ³
Длительность съемки одного спектра	2 ч
Ширина временных каналов	32 мкс

На рис. 2 показан время-пролетный спектр гнейса, нормированный на падающий поток нейтронов. Интегральные интенсивности дифракционных пиков пропорциональны полюсной плотности в соответствующей полюсной фигуре. Вращение образца относительно вектора рассеяния, необходимое для полного перекрытия полюсной фигуры, осуществлялось текстуальным гониометром. При этом все анализируемые полюсные фигуры измеряются одновременно. Координатная система образца выбрана так, чтобы кварцевые "нити" были параллельны оси x /или b в тектоническом представлении/. Ось z /с в тектоническом представлении/



ная система образца выбрана так, чтобы кварцевые "нити" были параллельны оси x /или b в тектоническом представлении/. Ось z /с в тектоническом представлении/

Рис. 2. Время-пролетный спектр дифракции стебельчатого гнейса / $2\theta = 100^\circ$ /.

совпадает с нормалью образца, а направление оси y / a в тектоническом представлении / определено осями x и z . Экспериментальные точки в центрах полюсных фигур получаются в том случае, если ось z параллельна вектору рассеяния, т.е. измерение проводится в геометрии отражения. Если ось x или ось y совпадает с вектором рассеяния, то определяются точки на экваторах полюсных фигур /см. рис. 3/. В этом случае имеет место геометрия пропускания. Следовательно, полные полюсные фигуры определяются только с помощью комбинации измерений на пропускание и на отражение. В рамках настоящей работы измерялись "разбавленные" полюсные фигуры по концентрическим кругам при постоянном угле ϑ . Плотность экспериментальных точек на отдельных кругах меняется от одного круга к другому /см. табл. 2/. Угловые шаги по ϑ являются постоянными $\Delta\vartheta = 10^\circ$. Самые маленькие угловые расстояния по азимуту ψ находятся на экваторе $\Delta\psi = 10^\circ$.

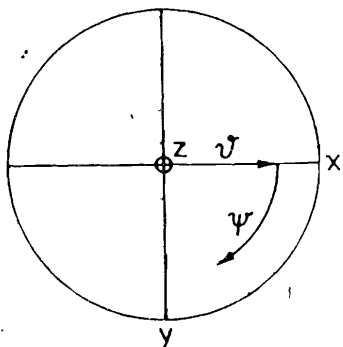


Рис. 3. Углы полюсной фигуры.

Таблица 2.

ϑ	0°	10°	20°	30°	40°	50°	60°	70°	80°	90°
$\Delta\psi$	36°	30°	36°	30°	24°	20°	18°	15°	10°	10°

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПОЛЮСНЫХ ФИГУР

Как упоминалось выше, значения точек в полюсной фигуре пропорциональны интенсивности соответствующего дифракционного пика при данном положении образца. Интегральные интенсивности определяются с помощью программы подгонки. В настоящей работе обсуждается только кварц как составная часть гнейса. Время-пространственный дифракционный спектр состоит из большого числа брэгговских рефлексов, так как исследуемое вещество состоит из нескольких фаз, имеющих низкую симметрию кристаллической решетки. Это ведет к многочисленным перекрытиям и совпадениям отдельных отражений, а в дальнейшем - к серьезным проблемам в подгоночной процедуре:

- с увеличением числа подгоняемых пиков счетное время на ЭВМ быстро растет. Поэтому анализируется не больше чем 5 пиков одновременно;
- в спектрах, состоящих из множества рефлексов, трудно найти участки спектра для надежного вычета фона. Это приводит к соответствующим ошибкам, выражающимся в неправильной нормировке полюсных фигур и приводящим обычно к излишне резким текстуррам;
- очень сильно перекрывающиеся и совпадающие отражения не разделяются с помощью программы подгонки. В результате нужно ожидать вклада других фаз в вычисленные интегральные интенсивности отдельных пиков. На основе ориентировочного фазового анализа /компоненты $\geq 5\%$ / можно моделировать время-пространственные спектры отдельных составных частей на ЭВМ и выбирать относительно "чистые" рефлексы для дальнейшего анализа. В настоящем текстурном анализе кварцевой части гнейса выбирались только те отражения, где содержание других фаз не превысило 30%. Если текстура всех компонентов слабая, то можно ожидать, что возникающие ошибки будут незначительны.

ОСНОВЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО ТЕКСТУРНОГО АНАЛИЗА

При математическом анализе текстур связь между координатными системами образца и монокристаллических зерен в образце описывается функцией распределения ориентаций $f(g)$ /ФРО/. Она содержит полную информацию о текстуре данного образца. В общем случае ФРО определяется из экспериментальных полюсных фигур. Наиболее распространенным методом восстановления $f(g)$ является разложение ее в ряд по обобщенным сферическим функциям [8]:

$$f(g) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{\mu=1}^{M(\ell)} \sum_{\nu=1}^{N(\ell)} C_{\ell}^{\mu\nu} T_{\ell}^{\mu\nu}(g^{-1}). \quad /1/$$

Полюсные фигуры являются двумерными проекциями ФРО. Их можно разлагать в ряд по сферическим функциям, причем коэффициенты разложения такие же, как и в ур. /1/:

$$P_{h_i}(\vec{y}) = 4\pi \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{\mu=1}^{M(\ell)} \sum_{\nu=1}^{N(\ell)} \frac{C_{\ell}^{\mu\nu}}{2\ell+1} k_{\ell}^{\mu}(h_i) k_{\ell}^{\nu}(\vec{y}). \quad /2/$$

где $M(\ell)$ и $N(\ell)$ - число линейно независимых функций степени ℓ системы решетки и образца, а $h_i = (hk\ell)$ - направление норма-

ли исследуемой плоскости решетки в кристаллической координатной системе и \vec{y} - направление в координатной системе образца. Коэффициенты $C_{\ell}^{\mu\nu}$ связывают полюсные фигуры и ФРО. Принципиальные трудности возникают при измерении полюсных фигур с помощью дифракционных методов. Закон Фриделя позволяет определить только коэффициенты $C_{\ell}^{\mu\nu}$ с четными степенями разложения ℓ . Пренебрежение нечетными ℓ ведет к возникновению "духов", т.е. ложных пиков, в ФРО [9]. В настоящей работе эта проблема подробно не обсуждается. При определении полюсных фигур во всем диапазоне используется ортогональность сферических функций. С помощью интегрирования

$$F_{\ell}^{\nu}(\vec{h}_i) = 4\pi \frac{\oint P_{\vec{h}_i}^{\mu\nu}(\vec{y}) k_{\ell}^{\nu*}(\vec{y}) d\vec{y}}{\oint P_{\vec{h}_i}^{\mu\nu}(\vec{y}) d\vec{y}} \quad /3/$$

снимается связь между индексами ℓ , μ и ν в большой системе уравнений /2/. Знаменатель в ур./3/ является фактором нормировки полюсной фигуры. Полученная система уравнений

$$F_{\ell}^{\nu}(\vec{h}_i) = \frac{4\pi}{2\ell+1} \sum_{\mu=1}^{M(\ell)} C_{\ell}^{\mu\nu} k_{\ell}^{\mu}(\vec{h}_i), \quad /4/$$

решается с помощью метода наименьших квадратов отдельно для каждого ℓ и ν до $\ell = \ell_{\max}$. Если коэффициенты $C_{\ell}^{\mu\nu}$ известны, то можно вычислить ФРО с помощью ур./1/ и любые полюсные фигуры на основе ур./2/. С фиксированным направлением \vec{y}_j вместо \vec{h}_i определяется обратная полюсная фигура

$$R_{\vec{y}_j}(\vec{h}) = 4\pi \sum_{\ell=0(2)}^{\infty} \sum_{\mu=0}^{M(\ell)} \sum_{\nu=1}^{N(\ell)} \frac{C_{\ell}^{\mu\nu}}{2\ell+1} k_{\ell}^{\mu}(\vec{h}) k_{\ell}^{\nu}(\vec{y}_j), \quad /5/$$

относящаяся к направлению \vec{y}_j .

КОНТРОЛЬ КАЧЕСТВА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ПОЛЮСНЫХ ФИГУР

Качество и взаимная согласованность экспериментальных полюсных фигур обязательно проверяются до проведения полного математического текстурного анализа. В настоящее время пользуются следующими критериями [7]:

- экспериментальные и соответствующие пересчитанные полюсные фигуры должны совпадать /взаимная согласованность/;

- для степени разложения $\ell = 2$ есть $M(\ell) = 1$, т.е. $C_{\ell}^{\mu\nu}$ можно вычислить отдельно для каждой фигуры. В случае безошибочной работы все $C_{\ell}^{\mu\nu}(\vec{h}_i)$ должны быть равны независимо от данной полюсной фигуры. Взаимные отклонения являются критерием качества;
- в любых пересчитанных полюсных фигурах и обратных полюсных фигурах диапазоны отрицательных значений указывают на неправильную нормировку экспериментальных данных. Нарушение перечисленных условий можно в какой-то мере исправить путем добавления постоянного фона к отдельным некорректным полюсным фигурам.

РЕЗУЛЬТАТЫ

Из спектров дифракции образца стебельчатого гнейса определены 6 полюсных фигур /рис. 4/ и выбраны для последующей обработки методом, описанным в предыдущем параграфе. Координатная система образца выбрана так, чтобы "стебель" кварца в гнейсе, представляющий направление тектонической b -оси, был параллелен x -оси образца. Приближенную орторомбическую симметрию полюсных фигур можно получить вращением координатной сис-

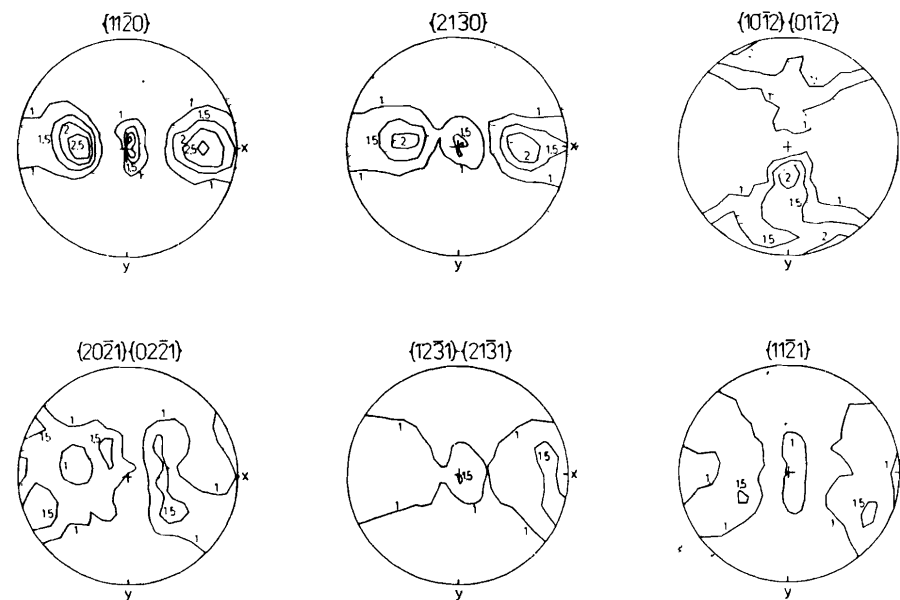


Рис. 4. Экспериментальные полюсные фигуры.

темы образца вокруг оси z на 20 градусов и вокруг оси y на 8 градусов. Расхождение между тектонической и первоначальной координатной системой образца можно объяснить неточностью в изготовлении образца, а также его установкой в гониометре.

Первоначальный набор полюсных фигур был пересчитан из $C_{\rho}^{\mu\nu}$ - коэффициентов /рис. 5/. Различие текстурных компонент в экспериментальных и пересчитанных полюсных фигурах составляет меньше 10% полюсной плотности. Кроме того, были пересчитаны полюсные фигуры основных морфологических форм кварца /рис. 6/. Полюсная фигура базисной плоскости $\{0001\}$ обладает интенсивным максимумом при $a = y$ и имеет тенденцию к образованию пояса от $a = y$ к $c = z$.

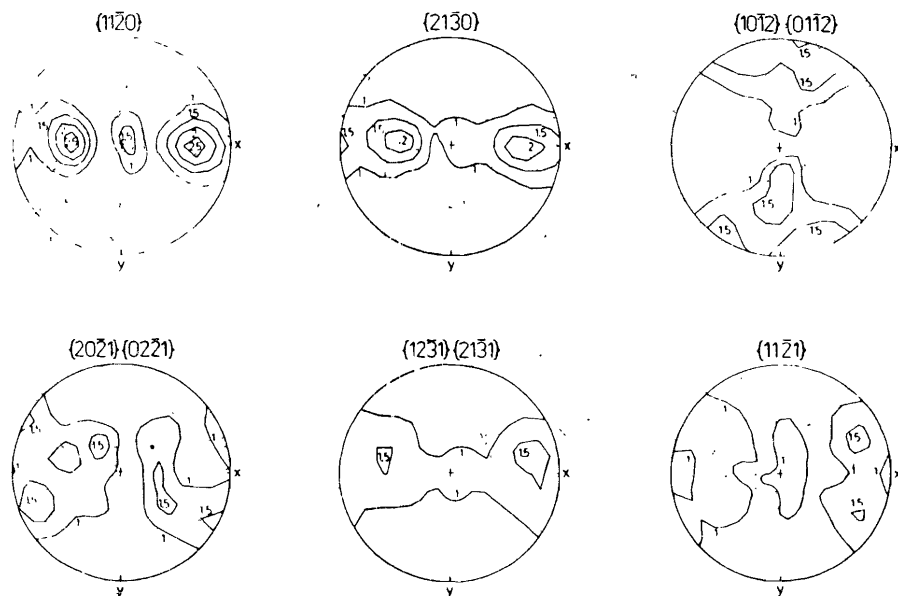


Рис. 5. Обратные пересчитанные полюсные фигуры /первоначальный набор/.

Эти результаты сравнивались со структурной диаграммой кварцевых осей, определенной из оптических измерений /200 осей в сечении $a-c$ /, рис. 6. Согласование этих результатов удовлетворительное. Однако структурная диаграмма, определенная из оптических измерений, не имеет тенденции к образованию пояса. Отсутствие пояса можно объяснить рассмотрением кварцевых зерен только в стебле гнейса. В дифракционном эксперименте кварцевые зерна матрицы, имеющие малые размеры, также вносят свой вклад в по-

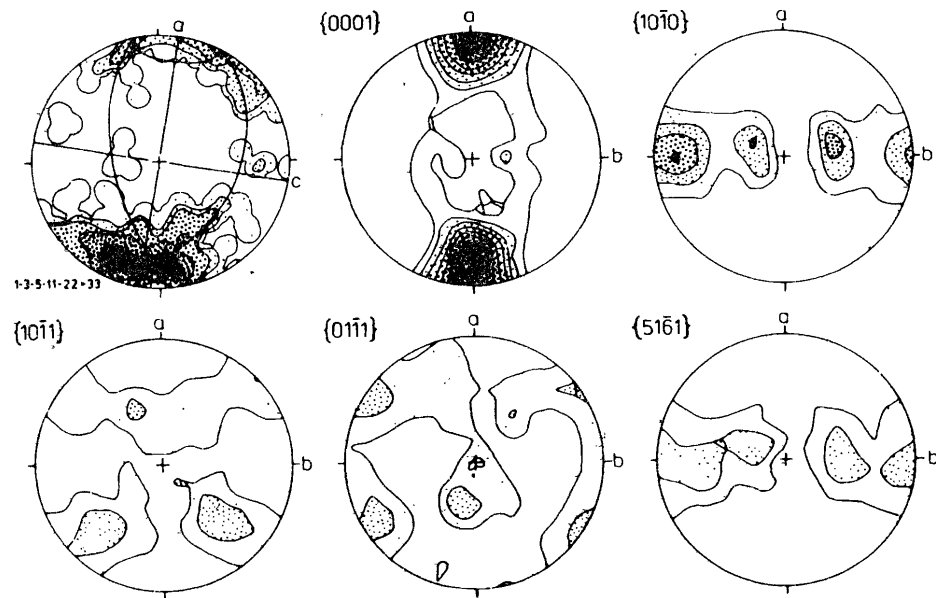


Рис. 6. Структурная диаграмма кварцевых осей /200 осей/ слева и пересчитанные полюсные фигуры морфологических форм.

люсную фигуру. С другой стороны, разделение максимума при $a = y$ на два, имеющих угловое расстояние порядка 20 градусов, на структурной диаграмме не наблюдается в полюсной фигуре $\{0001\}$. Это может быть связано со сглаживанием полюсных плотностей вследствие относительно низких степеней разложения и выбором полюсной плотности в экспериментальных полюсных фигурах.

На рис. 7 представлены обратные полюсные фигуры для координатных осей образца. Кроме максимума при $\{0001\}$, в y -направ-

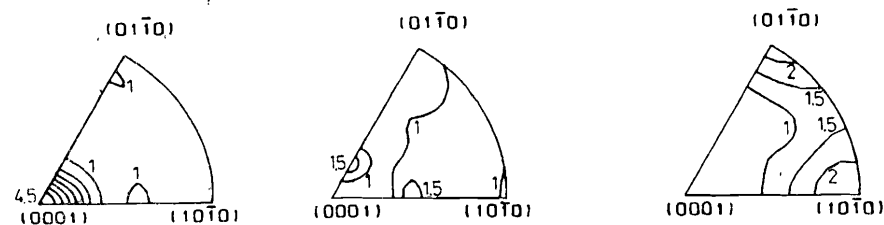


Рис. 7. Обратные полюсные фигуры координатных осей образца / z -, x -, y -ось с левой стороны/.

лении не наблюдается каких-либо заметных текстурных компонент. Существует только одна хорошо выраженная компонента в соответствующей функции распределения ориентаций /ФРО/, изображенная на рис. 8. Два максимума при $\pm \gamma$ в полюсной фигуре {0001}

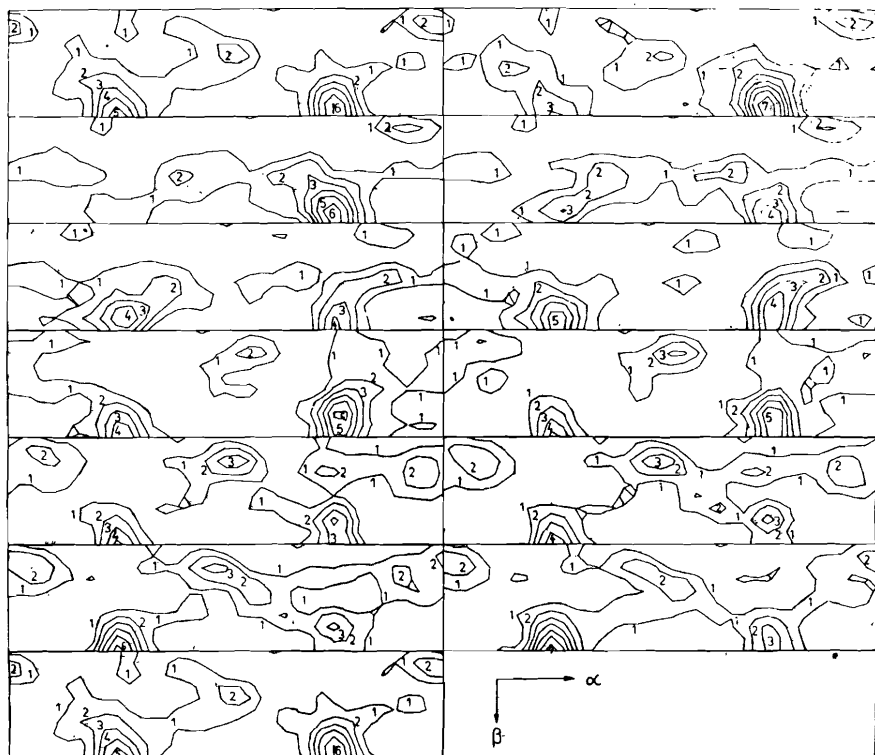


Рис. 8. ФРО кварца в стебельчатом гнейсе.

проявляются в высокой интенсивности в ФРО при $\beta = \alpha_1 = 90^\circ$ и $\alpha_2 = 270^\circ$ соответственно. На рис. 9 показаны скелетные линии обеих компонент в зависимости от угла Эйлера γ . Каждая линия имеет два максимума с расстоянием

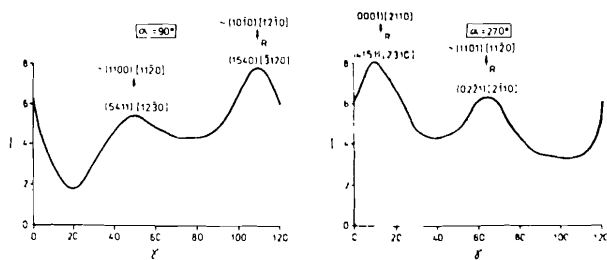


Рис. 9. Скелетные линии ФРО максимумов в зависимости от γ .

в 60 градусов. Скелетные линии приведены для максимальных величин соответствующих компонент ФРО, даже если β стремится к малым углам, особенно вблизи 60 градусов. Флуктуации в β связаны с неполной орторомбической симметрией полюсных фигур.

ИНТЕРПРЕТАЦИЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ

Полюсные фигуры основных морфологических форм кварца /базис, призма I и II, ромбоэдр, тригональная дигипрама, трапецоэдр/ были определены для координатной системы со следующим соотношением осей $a = y$, $b = x$, $c = z$. Путем вращения координатной системы образца в положение $a = z$, $b = x$, $c = -y$ максимум полюсной фигуры можно сравнить с кристаллографической стереограммой "правого" кварца /правый и левый кварц нельзя различить в дифракционном эксперименте/. Соответствие неплохое /рис. 10/, что говорит об удовлетворительной экспериментальной точности. Различие между экспериментальными и стереографическими точками около 10 градусов, что объясняется неполной симметрией

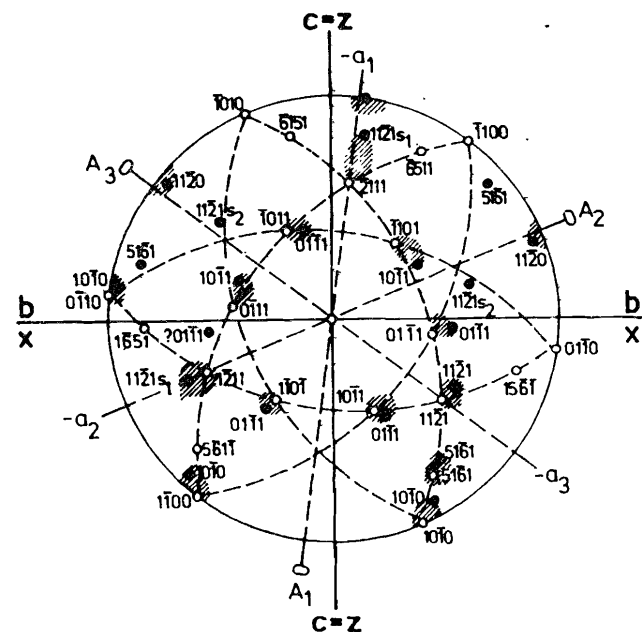


Рис. 10. Сравнение экспериментальных текстурных компонент с точками на стереограмме для правого кварца. Темная площадь показывает отклонения.

полюсных фигур. Предполагается, что некоторые ориентации, отличные от стереограмм, соответствуют слабому $ac = yz$ поясу в полюсной фигуре $\{0001\}$. Структурный тип кварцевой фазы соответствует максимуму 1 преимущественных ориентаций по Сандеру^{12/} в сочетании с тенденцией к образованию ac -пояса. Хофманн^{13/} описывает такого рода ориентации иерархией эволюции парциальной структуры кварца в антиклинали Рудных гор, характерной для верхней коры региона. Базисное скольжение, сопровождающееся внешним вращением оси c в направлении σ_1 , приводит к c -максимуму, параллельному σ_1 при температуре ниже 800°C и при скоростях деформации $\dot{\epsilon} = 10^{-5} \text{c}^{-1}$, другие эквивалентные значения ($T, \dot{\epsilon}$) можно получить из рис. 11^{14/}.

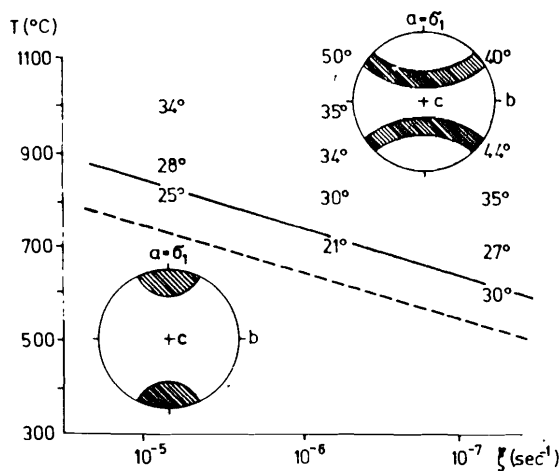


Рис. 11. Изменения преимущественных ориентаций с оси кварца с температурой и скоростью деформации в кварците. Числа показывают среднее значение половины угла открытия пояса.

тия пояса. Сравнение обнаруженных типов структуры с экспериментально деформированным кварцитом приводит к следующим условиям деформации: относительно низкие температуры $< 500^\circ\text{C}$, но высокие скорости деформации $\dot{\epsilon} \leq 10^{-4} \text{c}^{-1}$ ^{11/}. Как следует из модельных расчетов по Тейлору-Башону-Хиллу^{15/}, исследованные текстурные компоненты соответствуют типу "Модель кварцита А" в области между аксиальным растяжением и сглаживанием, где доминирующей системой скольжения является $\{0001\}[a]$, рис. 12. Кроме того, необходимо учитывать влияние воды, содержащейся в кварце, на его поведение при деформации. Это следует из работы^{14/}, в которой кристаллы синтетического кварца, содержащие молекулы воды $8,8 \cdot 10^{-3} \text{H/Si}$, подвергались деформации при критической температуре 380°C при напряжениях, в 10 и 20

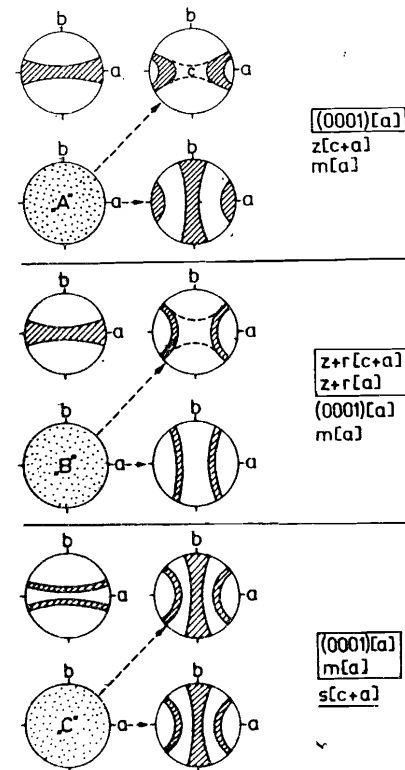


Рис. 12. Результаты расчетов по Тейлору для различных моделей, характеризующихся разными системами скольжения, активированными в процессах деформации^{15/}. Вертикальное направление соответствует аксиальному растяжению, горизонтальное характеризует аксиальное укорочение и диагональное сглаживание.

раз меньших, чем обычные "перенасыщенные" кристаллы. Такое гидролитическое ослабление связано с увеличением подвижности дислокаций при гидролизе имеющихся ковалентных связей.

ЛИТЕРАТУРА

1. Wenk H.R. Preferred Orientations in Deformed Metals and Rocks: An Introduction to Modern Texture Analysis, Orlando: Academic Press, 1985.
2. Bunge H.J., Wenk H.R. - Tectonophysics, 1977, Vol. 40, p. 257.
3. Backwitz P. et al. - In: Proc. VII Int. Conf. on Textures of Materials (ICOTOM7), Noordwijkerhout, 1984, p. 473.
4. Wagner F. et al. - Contrib. Mineral. Petrol., 1982, Vol. 80, p. 132.
5. Betzl M. et al. - In: Proc. VII Conf. on Textures of Materials (ICOTOM7), Noordwijkerhout, 1984, p. 753.
6. Feldmann K. JINR Preprint E14-85-284, Dubna, 1985.
7. Feldmann K. et al. JINR Preprint E14-86-360, Dubna, 1986.
8. Bunge H.J. Texture Analysis in Materials Science, Mathematical Methods, London: Butterworth, 1982.
9. Matthies S. ZfK Preprint ZfK-480, Rossendorf, 1982.
10. Frischbutter A. - Freib. Forsch. H., 1985, Vol. C390, p. 29,

11. Ананьев Б.Н. и др. Сообщение ОИЯИ Р14-84-827, Дубна, 1984.
12. Sander B. An Introduction to the Study of Fabrics of Geological Bodies, Oxford: Pergamon Press, 1970.
13. Hofmann J. - Z.geol.Wiss., 1975, Vol.3, p.333.
14. Nicholas A., Poirier J.P. Crystalline Plasticity and Solid State Flow in Metamorphic Rocks, London: John Wiley & Sons, 1976.
15. Lister G.S., Hobbs B.E. - J.Struct.Geol., 1980, Vol.2, p.355.

**ТЕМАТИЧЕСКИЕ КАТЕГОРИИ ПУБЛИКАЦИЙ
ОБЪЕДИНЕННОГО ИНСТИТУТА ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ**

Индекс	Тематика
1.	Экспериментальная физика высоких энергий
2.	Теоретическая физика высоких энергий
3.	Экспериментальная нейтронная физика
4.	Теоретическая физика низких энергий
5.	Математика
6.	Ядерная спектроскопия и радиохимия
7.	Физика тяжелых ионов
8.	Криогеника
9.	Ускорители
10.	Автоматизация обработки экспериментальных данных
11.	Вычислительная математика и техника
12.	Химия
13.	Техника физического эксперимента
14.	Исследования твердых тел и жидкостей ядерными методами
15.	Экспериментальная физика ядерных реакций при низких энергиях
16.	Дозиметрия и физика защиты
17.	Теория конденсированного состояния
18.	Использование результатов и методов фундаментальных физических исследований в смежных областях науки и техники.
19.	Биофизика

Рукопись поступила в издательский отдел
27 апреля 1987 года.