

Fizikai Szemle

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A Matematikai és Természettudományi Értesítőt az Akadémia 1882-ben indította
A Matematikai és Physikai Lapokat Eötvös Loránd 1891-ben alapította

LVI. évfolyam

9. szám

2006. szeptember

DISZLOKÁCIÓK SEGÍTIK A FÖLDKÉREG MOZGÁSÁT

Ungár Tamás

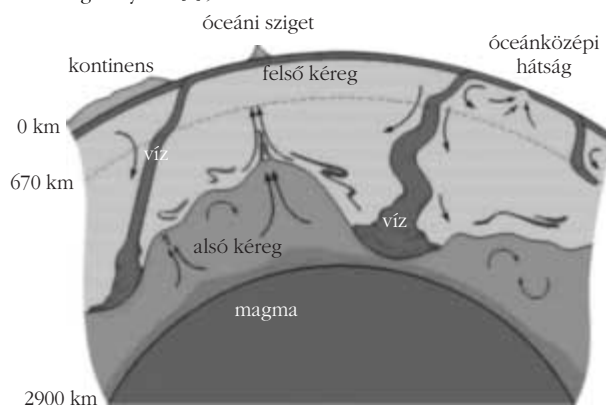
ELTE TTK, Anyagfizikai Tanszék

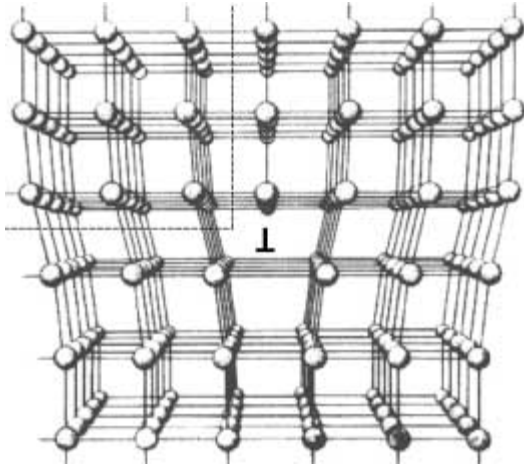
Földünk szilárd kérge a mai napig állandó mozgásban van. Ennek vagyunk nap mint nap szemtanúi, amikor egy-egy földrengésről vagy szökőárról kapunk tudósítást. A kövekről, sziklákról vagy a földkéreg lemezeiről azt gondolnánk, hogy azok rideg, képlékenyen aligha alakítható, kerámiaszerű anyagok. Csak amikor magas hegyvidéken, vagy annak közelében járunk, látjuk gyakran – némiképpen csodálkozva –, hogy a csupasz sziklafalak különösen görbült, lágyan, vagy akár élesebben meghajlított sziklalemezek keresztmetszetét mutatják. A kövek és sziklák ugyanúgy képlékenyen alakíthatók, mint az acél vagy alumínium, csak ehhez nem elegendő néhány másodperc vagy perc, hanem évmilliókra vagy évmilliárdokra van szükség. Dehát a hegyek nem sietnek. A földkéreg mozgásáról igen szemléletes pillanatképet mutat az 1. ábra, amely Földünk keresztmetszetének sematikus képét adja [1]. Látjuk, hogy a víz akár több ezer km mélységig behatolhat a Föld mélyébe. A lefelé vagy fölfelé irányított görbült nyilak pedig a különböző irányba mozgó földkéregdarabok mozgásirányait jelképezik. A leszakadó és mélyebbre kerülő, illetve az ezekkel helyet cserélő, mintegy „felúszó” kéregdarabok mozgásuk során jelentős képlékeny alakváltozást szenvednek, hiszen gigantikus méretű kőzetdarabok cserélnek ilyenkor helyet. A földfelszínen, vagy annak közelében található kőzetek képlékeny alakváltozási mechanizmusait valódi geológiai mintákon vizsgálhatjuk, illetve követhetjük nyomon. Azonban a mélyebben fekvő kőzetek esetében kénytelenek vagyunk megelégedni szintetikusan előállított kőzetminták tanulmányozásával. Mára a geológusok, hála a különféle hullámterjedési módok igen pontos ismeretének, pontosan feltérképezték mind a felső, mintegy 800 km vastag, mind az alsó, mintegy 2900 km mélységig terjedő földkéreg kémiai összetételét, valamint azt,

hogy az egyes kőzettípusok hogyan helyezkednek el. A felső földkéreg kőzeteinek fő összetevő elemei gyakorlatilag csak a magnézium, vas, alumínium, szilícium, kalcium és oxigén. A mélység változásakor, bár a nyomás növekedésével más és más kristályszerkezetben – ezek leggyakrabban a kvarc különböző módosulatai –, szinte ugyanazokat az elemeket találjuk.

A kéregdarabok mozgásának leírása és megértése érdekében először arra az alapkérdésre kell válaszolnunk, hogy milyen mechanizmusok vezérlik a képlékeny alakváltozást. Ezekhez a vizsgálatokhoz csak laboratóriumi körülmények között, szintetikusan előállított anyagminták állnak rendelkezésre, hiszen 100 vagy néhány 100 km mélységből ma még nem tudunk vizsgálati anyagot a felszínre hozni. A bayreuthi Bayerisches Geoinstitut nagynyomású geológiai laboratóriumában 28 GPa nyomásig és 2200 °C hőmérsékletig van lehetőség arra, hogy a felső földkéreg különböző rétegeire jellemző körülmé-

1. ábra. A földkéreg keresztmetszetének sematikus képe. A nyilak a kéregrészek mozgási irányait igyekeznek jelezni. (Louise H. Kellogg szíves engedélyével [1].)





2. ábra. Egyszerű kristályos anyag atomjainak sematikus képe egy többlet betolt atomsíkkal. A betolt atomsík határoló éle, amit a fordított T jelez, egy éldiszlókáció. A szaggatott vonallal jelölt bal felső rész hibátlan, tökéletes kristály.

nyek között állítsunk elő kőzetmintákat. A nem túlságosan nagy nyomáson, illetve nem túl magas hőmérsékleten előállított kőzetminták esetében a nyomás, illetve magas hőmérséklet megszüntetése után megmarad a bennük kialakult kristályszerkezet. Sőt, ezeket be is lehet helyezni a transzmissziós elektronmikroszkópba (TEM-be), és át lehet világítani anélkül, hogy az elektronsugár tönkretenné a vizsgálati anyagot. Ezekben az esetekben a TEM-vizsgálatok egyértelműen azt mutatják, hogy a képlékeny alakváltozás, hasonlóan a fémekhez, diszlókációk mozgása révén megy végbe. (A diszlókációk a képlékeny alakváltozás szempontjából alapvető fontosságú, vonalszerű kristályhibák. Részletesebb leírásukra a továbbiakban még visszatérünk.)

A felső földkéreg legalsó rétegében, tehát mintegy 800 km mélységben, a kéreg egyik fő alkotó része az MgSiO_3 kémiai összetételű kőzet, amely perovszkítszerkezetben kristályosodik. A perovszkit egy olyan ortorombos elemi cella, amelynek két alapéle, illetve magassága rendre: 0,477, 0,93, illetve 6,98 nm, a lapok hajlásszögei természetesen mind derékszögek, összesen 4 molekulát és ennek megfelelően 20 atomot tartalmaz. A földkéregnek ebben a mélységében a nyomás, illetve a hőmérséklet mintegy 20–25 GPa, illetve 1400–1800 °C. A MgSiO_3 molekula ilyen körülmények között kristályosodik az említett perovszkítszerkezetben. A Bayerisches Geoinstitut nagynyomású geológiai laboratóriumában sikerült a 800 km körüli mélységben leginkább előforduló perovszkitot szintetikus módon előállítani, és szerkezeti változás nélkül környezeti körülmények között, vagyis szobahőmérsékleten, atmoszférikus nyomáson, megtartani. Az első elektronmikroszkópos vizsgálatok során azonnal kiderült, hogy bár a perovszkitot meg lehet tartani környezeti körülmények között, ám az elektronsugár hatására az anyagminta azonnal amorfizálódik, és így a további vizsgálatok számára alkalmatlanná válik. Az elektronsugár hatására bekövetkező sugárzási károsodás közismert az elektronmikroszkópiában, és, sajnos ebben az esetben is ez okozza azt, hogy a perovszkit elektronmikroszkópos módszerrel nem vizsgálható.

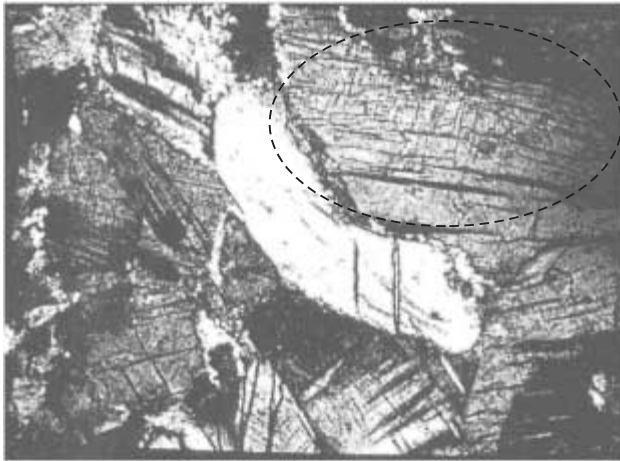
A képlékeny alakítás során oly fontos szerepet játszó diszlókációk vizsgálatának egyik alternatív módszere a röntgen vonalprofil-analízis (RVA) [2]. A tökéletes, hibátlan kristályok úgy szórják a röntgensugárzást, mint végtelen kiterjedésű háromdimenziós rácsok. A különböző irányba szórt sugárnyalábok szinte végtelen vékonyak, a detektorban észlelt lenyomataik, amelyeket diffrakciós maximumnak nevezünk, szinte végtelenül kicsiny kiterjedésű pontszerű foltok, amelyek intenzitáseloszlása deltafüggvényhez hasonlít. (A matematikai deltafüggvény egyaránt végtelenül keskeny és magas.)

Fémek, ötvözetek és, amint előbb említettük, kerámiák, köztük a kőzetek alakváltozása nyírási deformációval megy végbe. Nyírás közben az anyag egyes rétegei elcsúsznak egymáson. Ha egy egész anyagdarab egyszerre csúszna el a másik fölött, akkor ehhez az elcsúsztatáshoz acélok esetében mintegy 3–400 GPa feszültségre lenne szükség. Ezzel szemben a tapasztalat az, hogy ennek a feszültségnek durván az ezredrésze is elegendő a képlékeny alakváltozás megindításához. Ezt a nyilvánvaló ellentmondást 1934-ben három fizikus magyarázta meg, egymástól függetlenül, a diszlókáció fogalmának bevezetésével [3]. Megjegyzendő, hogy a három kutató, *Geoffrey Ingram Taylor*, *Egon Orowan* és *Michael Polanyi* közül a két utóbbi, vagyis Orowan Egon és Polányi Mihály, magyar származású.

A diszlókáció egyik legegyszerűbb típusát, az éldiszlókációt, úgy képzelhetjük el, hogy az anyagot bevágjuk az atomsíkokkal párhuzamosan egy él mentén, majd a bevágásba, a bevágás végéig egy további atomsíkot tolunk be. Ezt szemlélteti a 2. ábra, amelyen a bevágás a fordított T-ig terjed. Az ábra szaggatott vonalakkal határolt bal felső részén hibátlan kristály látható. Az is jól látszik, hogy a diszlókáció egy vonal mentén, a betolt „többlet” atomsík határvonala mentén húzódik. Ha az anyag felső és alsó részét nyíró erők alkalmazásával egymáson elcsúsztatjuk, elegendő, hogy a fordított T-vel jelölt atomsík fokozatosan úgy mozduljon el, hogy közben mindig csak egyetlen atomsíknyi nyírás következzen be. Ez a mechanizmus teszi lehetővé, hogy a nyírási deformáció 3–400 GPa helyett csupán 3–400 MPa feszültséget igényel.

A 2. ábrán jól látható, hogy a diszlókáció környezetében különösen a függőleges atomsíkok erőteljesen görbültek. A továbbiak szempontjából lényeges észrevennünk, hogy jelen esetben a vízszintes atomsíkokat ez a diszlókáció szinte érintetlenül hagyja. Azt mondhatjuk, hogy a diszlókáció egy extrém módon anizotróp kristályhiba.

A röntgensugarak elhajlását a kristályhibák, különösen a diszlókációk, jelentős mértékben megzavarják, ami elsősorban abban jelentkezik, hogy a deltafüggvényyszerű elhajlási maximumok erőteljesen kiszélesedett intenzitáseloszlást mutatnak. Azt mondjuk, hogy a diszlókációk vonalszélesedést okoznak. Ugyanakkor ez a vonalkiszélesedés híven követi a diszlókációk anizotrópiáját. A 2. ábra példájánál maradván az azt jelenti, hogy ha a röntgensugarakat, például, jobbról ejtjük a kristályra, és azok az erősen görbült atomsíkokon reflektálódnak, akkor az erősen görbült atomsíkokon reflektálódnak, akkor a vonalkiszélesedés jelentős lesz. Ezzel szemben, ha fentről



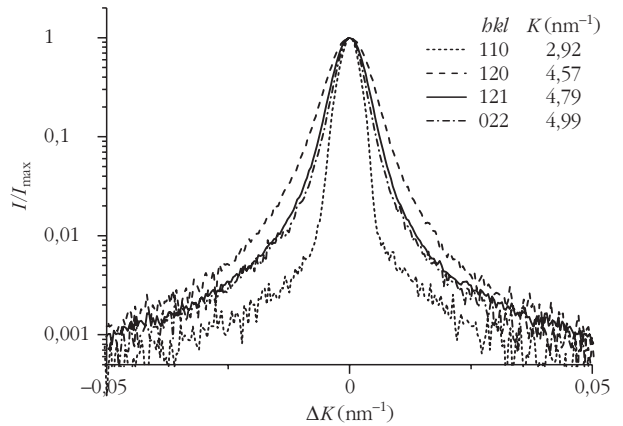
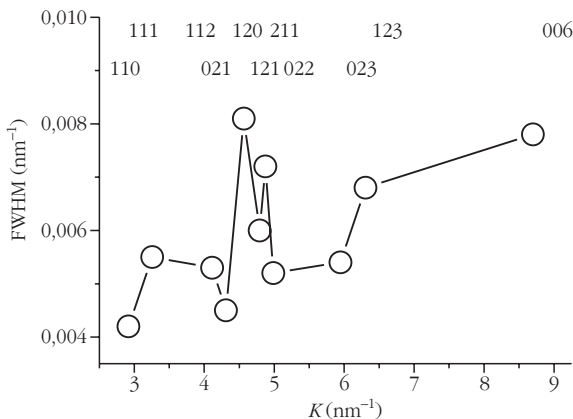
3. ábra. 23 GPa nyomáson és 1400 °C hőmérsékleten szintetikusán, a bayreuthi Bayerisches Geoinstitut nagynyomású geológiai laboratóriumában előállított MgSiO₃ perovszkit fénymikroszkópos képe. A szaggatott vonallal körülhatárolt rész az a kristály, amelyet a röntgen vonalprofil-analízis módszerével megvizsgáltunk [2].

ejtjük a röntgensugarakat a kristályra, akkor azok az érintetlen, tökéletes atomsíkokon reflektálódnak, és az ilyen elhajlási maximum változatlanul éles, deltafüggvényszerű intenzitáseloszlást mutat.

A vonalkiszélesedést a kontrasztfaktorokkal (ezeket a továbbiakban *C*-vel jelöljük) jellemezhetjük. *C* értékei nagyobbak, illetve kisebbek aszerint, hogy az adott elhajlási maximum jobban vagy kevésbé szélesedik ki a különböző módon és különböző sűrűséggel elhelyezkedő diszlokációk hatására. A *C* értékeinek kísérletes meghatározását a már említett röntgen vonalprofil-analízis (RVA) módszere teszi lehetővé [2].

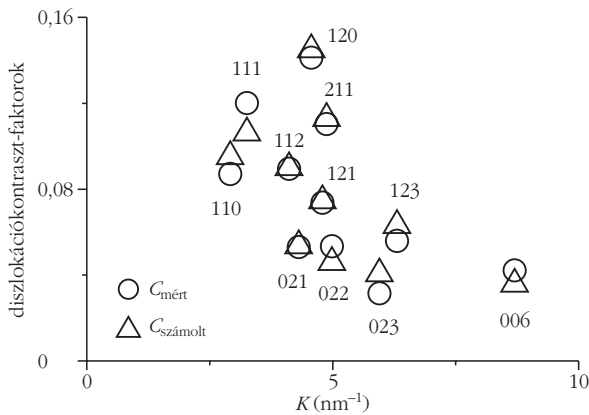
Az RVA-vizsgálatokhoz a Bayerisches Geoinstitut nagynyomású geológiai laboratóriumában 23 GPa nyomáson és 1400 °C hőmérsékleten előállított MgSiO₃ perovszkit optikai mikroszkópos képét a 3. ábra mutatja. Ezen jól látható, hogy a minta több nagyobb, mintegy 1/4 vagy 1/2 mm átmérőjű kristályból áll. Jól elkülönül, például, a kép közepén fehéren világító nagy, kifli alakú kristály. Ahhoz, hogy a diszlokációk jellemző anizotrópiája ne átlagolódjon ki a különbözőképpen irányított

5. ábra. Az elhajlási maximumok félérték szélessége (FWHM) *K* függvényében.



4. ábra. Négy kiragadott röntgen elhajlási maximum intenzitáseloszlása logaritmikus intenzitáskálán a maximumra normálva [2]. Az egyes elhajlási maximumok rendjét, illetve irányát a *hkl* indexek jelölik. Az elhajlás mértékét $K = 2 \sin \theta / \lambda$ -val jellemeztük, ahol 2θ az elhajlás szöge és λ a sugárzás hullámhossza. Az intenzitáseloszlást $\Delta K = (2 \cos \theta / \lambda) \Delta \theta$ függvényében adtuk meg.

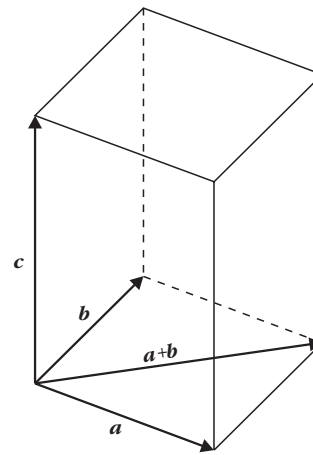
kristályokról szórt röntgensugarak összegződése révén, a diffrakciós vizsgálatokat lehetőleg egyetlen kristályon kell elvégezni. Az ehhez kiválasztott viszonylag nagyobb kristályt az ábrán szaggatott vonal jelöli. A röntgenszórási kísérletben ezt a kristályt egy igen kis keresztmetszetű röntgennyaláb világítja meg. A mintaterület kiválasztása és a röntgennyaláb pozicionálása a mintán egy speciális mikroszkóp és TV-monitor segítségével történik. Néhány tipikus elhajlási maximum intenzitáseloszlását láthatjuk a 4. ábrán. A logaritmikus intenzitáskála jól mutatja az igen jó jel/zaj értékeket. Azt is megfigyelhetjük, hogy jelentős különbség van a különböző elhajlási maximumok kiszélesedése között. A kiszélesedés kvalitatív mértékét jól szemléltethetjük, ha az intenzitás maximumának feléhez tartozó vonalszélességeket ábrázoljuk az elhajlás függvényében. Ezt láthatjuk az 5. ábrán. Az elhajlás mértékét az elhajlás szögértéke helyett a fizikailag sokkal megfelelőbb $K = 2 \sin \theta / \lambda$ mennyiséggel jellemezhetjük, ahol 2θ az elhajlás szöge és λ a sugárzás hullámhossza. Az ábrán jól megfigyelhetjük, hogy különböző irányokban a vonalkiszélesedés mennyire változatos, egyáltalán nem monoton az elhajlás függvényében. Az elhajlási irányokat hármast-indexekkel jellemezzük, hiszen a röntgensugarak háromdimenziós rácson hajlanak el. A hármast-indexek felfoghatók egy vektor három komponensének, ahol ezek a vektorok az elhajló röntgensugarak terjedési irányaiiba mutatnak. A hármast-indexeket legnagyobb közös osztóikkal elosztva a Miller-indexeket kapjuk, amelyek egyúttal azon atomsíksekerek normálvektorai, amelyekre az elhajlás bekövetkezett. Például a 022 hármast-indexnek megfelelő Miller-indexek: 0, 1 és 1, amelyek egyúttal a reflektáló atomsíksekerek normálvektorának a koordinátái. Az 5. ábrán látható, hogy vannak irányok, például az 120 és 211 indexűek, amelyekben a vonalkiszélesedés kiugróan nagy, ugyanakkor a 022 és 023 irányokban egészen kicsiny. Már ez a kvalitatív viselkedés is arra utal, hogy a kristályrács torzulásai igen jelentős mértékben irányfüggők, anizotrópok, amit csak jól meghatározott típusú és irányított diszlokációk okozhatnak.



6. ábra. A mért, $C_{mért}$ és számolt, $C_{számolt}$ diszlokáció-kontraszt-faktorok K függvényében.

A következő lépésben, az egyes elhajlási maximumok tüzetesebb vizsgálata alapján, minden egyes elhajlási irányhoz meghatározhatjuk a mért diszlokáció-kontrasztfaktorokat, a $C_{mért}$ értékeket. Ezeket a 6. ábrán nyitott körök jelölik a K elhajlási paraméter függvényében. Ezt követően számba kell venni a lehetséges diszlokációtípusokat és diszlokációirányokat, amelyeket a kristályszerkezet alapján jól meghatározott elvek segítségével kaphatunk meg. E megfontolások részletei megszire vezetnének, az érdeklődő olvasó számára Kovács István és Zsoldos Lehel kitűnő könyvét ajánljuk [3]. Any nyit érdemes itt megjegyezni, hogy a diszlokációk, többek között, az úgynevezett Burgers-vektorral jellemezhetők. A 2. ábrán látható diszlokáció Burgers-vektorát, például, úgy kaphatjuk meg, hogy valahonnan elindulva úgy járjuk körül a diszlokációt, vagyis a fordított T-vel jelölt papírra merőleges vonalat, hogy egy-egy adott kristálytani irányba mindig ugyanannyi atomtávolságnyt (pontosabban, kristályrács vektornyt) lépünk. Az ilyen körüljárás végén nem jutunk vissza a kiindulási pontba, hiszen a fordított T fölötti anyagrészbe betoltunk egy „többlet” atomsíkot. A körüljárás kezdő és végpontja közötti különbség az adott diszlokáció Burgers-vektora. Már ebből a definícióból is kitűnik, hogy Burgers-vektor csak kristályrácsvektor lehet. A kristályrács által diktált lehetőségek alapján kiszámíthatjuk az elvileg lehetséges diszlokáció-kontrasztfaktorokat, a $C_{számolt}^*$ értékeket. A csillag azt kívánja itt érzékeltetni, hogy ezek az értékek mindig egyetlen meghatározott diszlokációhoz tartoznak.

Az $MgSiO_3$ perovszkit-kristályszerkezete által megengedett lehetséges Burgers-vektorokat sematikusan a 7. ábra mutatja. Látható, hogy viszonylag nagyszámú kristályrácsvektor – a három alapvektor, a , b és c , valamint a $c+a$ rácsvektor – jön szóba, mint lehetséges Burgers-vektor. Az imént mondottaknak megfelelően minden Burgers-vektorhoz egy-egy $C_{számolt}^*$ kontrasztfaktorérték tartozik. Az adott kristályban természetesen több diszlokációtípus, különböző irányítottással is előfordulhat. Ezt úgy vesszük figyelembe, hogy megengedik az egyes diszlokációkhoz tartozó $C_{számolt}^*$ kontrasztfaktorértékek súlyozott lineáris kombinációját. Az ilyen súlyozott lineáris kombinációkból állítják elő a $C_{számolt}$ értékeket, amelyek közül a legkisebb négyzetek módszerével választják ki



7. ábra. Az ortorombos $MgSiO_3$ perovszkit-kristályszerkezete által megengedett diszlokáció Burgers-vektorok elhelyezkedése a perovszkit-kristályrács sematikus elemi cellájában.

azokat, amelyek a $C_{mért}$ értékekkel a legjobban megegyeznek. A numerikus analízis eredményeként csak a a és b rácsvektorok, illetve azok 50–50 százalékos lineáris kombinációja teljesíti azt a követelményt, hogy az ezeknek megfelelő $C_{számolt}^*$ és $C_{mért}$ kontrasztfaktorértékek a mérési hibán belül megegyezzen egymással. Az így kapott kontrasztfaktorértékeket a 6. ábrán nyitott háromszögek jelölik.

Az itt bemutatott vizsgálatok két dolgot bizonyítottak egyszerre. Egyrészt azt, hogy a 800 km-es mélységben uralkodó körülmények között is, vagyis 1400–1800 °C hőmérsékleten 20–25 GPa nyomás mellett, a földkéreg kőzeteinek képlékeny alakváltozása diszlokációmozgás révén megy végbe. Másrészt azt, hogy ebben a mélységben az $MgSiO_3$ kémiai összetételű perovszkitban csak és csakis az ortorombos elemi cella alapvektorai, azaz az a és b kristályrácsvektorok működnek mint Burgers-vektorok. A földkéreg tektonikus mozgásának leírásában mindkét megállapítás nagyban megkönnyíti a valóságnak megfelelő modellezést. Itt jegyezzük meg, hogy az elmúlt években sikerült meghatározni a még mélyebben fekvő földkéregretek kőzeteinek kristályszerkezetét. Az ugyanilyen kémiai összetételű molekula egy úgynevezett posztperovszkit-szerkezetben kristályosodik, amely a perovszkitnak egy kristálytani módosulata. A posztperovszkit-szerkezetet sikerült laboratóriumi körülmények között szintetizálni, azonban a kőzetnek ezt az állapotát már nem lehet környezeti körülmények közé feltárni. Ez azt jelenti, hogy a képlékeny alakítás mechanizmusainak vizsgálata a kőzet ezen állapotában csak in-situ módon, vagyis csak magas hőmérsékleten és nagy nyomáson végezhető el. A kihívás nagy, de a vizsgálatok végrehajtásának tervezése már elkezdődött, és remélhetőleg erről is hamarosan be tudunk számolni.

Irodalom

1. Az ábra Louise H. Kellogg munkája, a következő honlapon található: <http://www-geology.ucdavis.edu/~kellogg/#research>
2. P. CORDIER, T. UNGÁR, L. ZSOLDOS, G. TICHY: *Dislocations creep in MgSiO3 perovskite at conditions of the Earth's uppermost lower mantle* – Nature 428 (2004) 837–840
3. KOVÁCS I., ZSOLDOS L.: *Diszlokációk és képlékeny alakváltozás* – Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1965.