

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

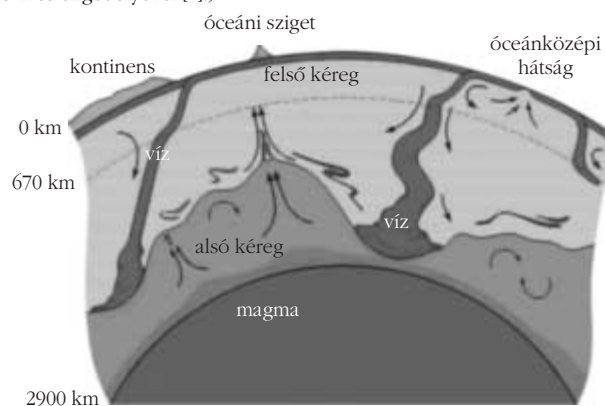
ELTE TTK, Anyagfizikai Tanszék

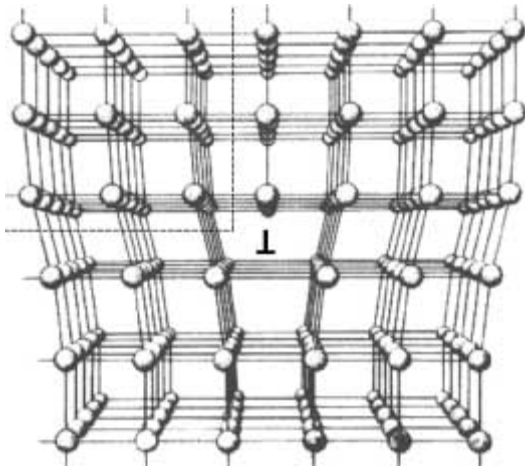
Földünk szilárd kérge a mai napig állandó mozgásban van. Ennek vagyunk nap mint nap szemtanúi, amikor egy-egy földrengésről vagy szökőárról kapunk tudósítást. A kövekről, sziklákról vagy a földkéreg lemezeiről azt gondolnánk, hogy azok rideg, képlékenyen aligha alakítható, kerámiaszerű anyagok. Csak 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 évmilliódokra van szükség. Dehát a hegyek nem sietnek. A földkéreg mozgásáról igen szemléletes pillanatfelvételt 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 vezérik 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 betölt atomsíkkal. A betölt 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 hőmérsékleteken 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 vizsgálni 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 perovszkitszerkezetben 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 perovszkitszerkezetben. A Bayerisches Geoinstitut nagynyomású geológiai laboratóriumában sikerült a 800 km körüli mélységben leginkább előforduló perovszkitot szintetikusán 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.

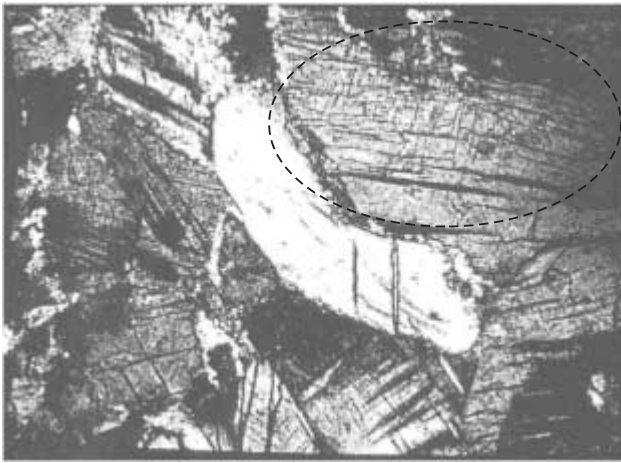
A képlékeny alakítás során oly fontos szerepet játszó diszlókációk vizsgálatának egyik alternatív módszere a röntgen vonalprofil-analízis (RVA) [2]. A tökéletes, hibátlan kristályok úgy szórják a röntgensugárzást, mint végtelen kiterjedésű háromdimenziós rácsok. A különböző irányba szórt sugárnyalábok szinte végtelen vékonyak, a detektorban észlelt lenyomataik, amelyeket diffrakciós maximumnak nevezünk, szinte végtelenül kicsiny kiterjedésű pontszerű foltok, amelyek intenzitáseloszlása delta-függvényhez 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 Polányi* 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 tolnunk 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 betölt „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 deltafüggvényszerű 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 maradva ez azt jelenti, hogy ha a röntgensugarakat, például, jobbról ejtjük a kristályra, és azok az erősen görbült atomsíkokon reflektálódnak, akkor a vonalkiszélesedés jelentős lesz. Ezzel szemben, ha fentről



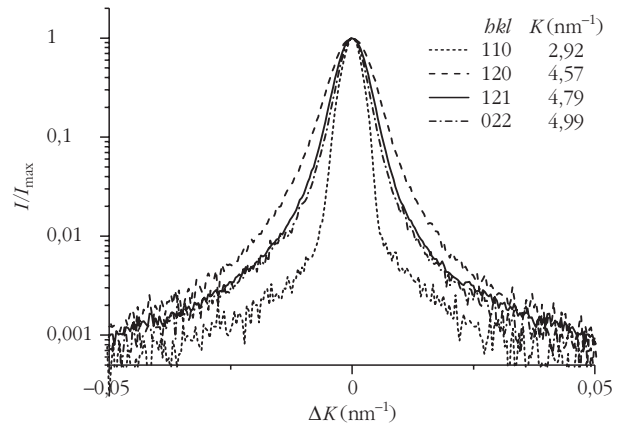
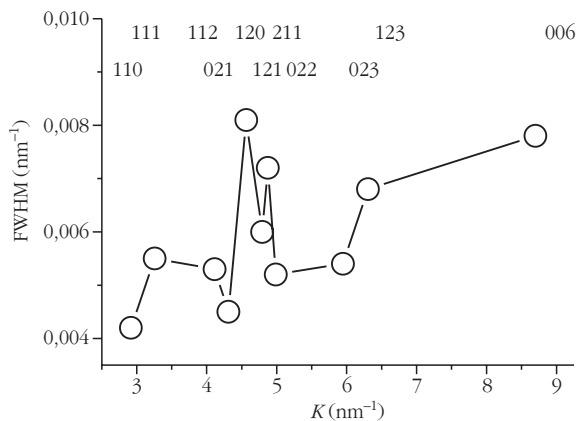
3. *ábra.* 23 GPa nyomáson és 1400 °C hőmérsékleten szintetikusán, a bayreuthi Bayerisches Geoinstitut nagynyomású geológiai laboratóriumában előállított MgSiO₃ perovszkit fénymikroszkópos képe. A szaggatott vonallal körülhatárolt rész az a kristály, amelyet a röntgen vonalprofil-analízis módszerével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

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

A vonalkiszéledést 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].

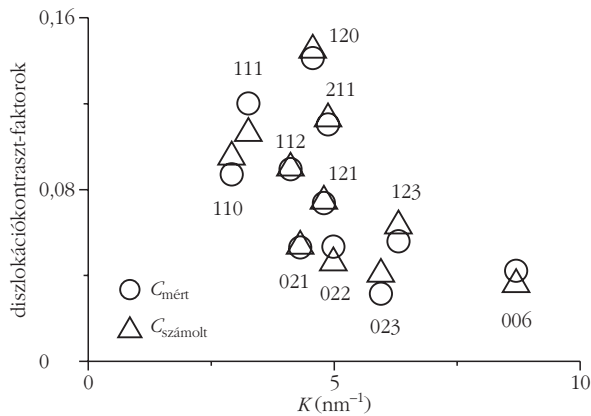
Az RVA-vizsgálatokhoz a Bayerisches Geoinstitut nagynyomású geológiai laboratóriumában 23 GPa nyomáson és 1400 °C hőmérsékleten előállított MgSiO₃ perovszkit optikai mikroszkópos képét a 3. *ábra* mutatja. Ezen jól látható, hogy a minta több nagyobb, mintegy 1/4 vagy 1/2 mm átmérőjű kristályból áll. 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 *bkl* 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.

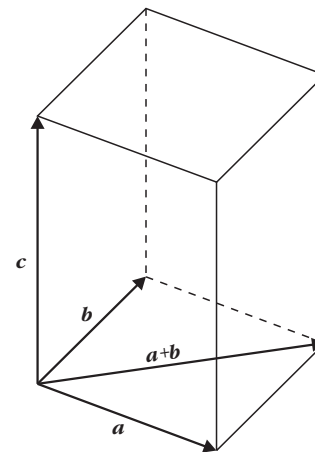
kristályokról szórt röntgensugarak összegződése révén, a diffrakciós vizsgálatokat lehetőleg egyetlen kristályon kell elvégezni. Az ehhez kiválasztott viszonylag nagyobb kristályt az ábrán szaggatott vonal jelöli. A röntgenszórési kísérletben ezt a kristályt egy igen kis keresztmetszetű röntgennyaláb 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 irányába mutatnak. A hármast-indexeket legnagyobb közös osztóikkal elosztva a Miller-indexeket kapjuk, amelyek egyúttal azon atomsíksíksereg normálvektorai, amelyeken az elhajlás bekövetkezett. Például a 022 hármast-indexnek megfelelő Miller-indexek: 0, 1 és 1, amelyek egyúttal a reflektáló atomsíksíksereg 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 kristályrác torzulásai igen jelentős mértékben irányfüggők, anizotrópok, amit csak jól meghatározott típusú és irányított diszlokációk okozhatnak.



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

A következő lépésben, az egyes elhajlási maximumok tüzetesebb vizsgálata alapján, minden egyes elhajlási irányhoz meghatározhatjuk a mért diszlokáció-kontraszt-faktorokat, 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 meszsziire vezetnének, az érdeklődő olvasó számára Kovács István és Zsoldos Lehel kitűnő könyvét ajánljuk [3]. Anynyit 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, kristályrác vektornyt) lépünk. Az ilyen körüljárás végén nem jutunk vissza a kiindulási pontba, hiszen a fordított T fölötti anyagrézbe 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 kristályrácvektor lehet. A kristályrác által diktált lehetőségek alapján kiszámíthatjuk az elvileg lehetséges diszlokáció-kontraszt-faktorokat, a $C_{számlolt}^*$ értékeket. A csillag azt kívánja itt érzékelteni, hogy ezek az értékek mindig egyetlen meghatározott diszlokációhoz tartoznak.

Az $MgSiO_3$ perovszkit-kristályszerkezete által megengedett lehetséges Burgers-vektorokat sematikusán a 7. ábra mutatja. Látható, hogy viszonylag nagyszámú kristályrácvektor – 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 $C_{számlolt}^*$ kontraszt-faktorérték tartozik. Az adott kristályban természetesen több diszlokációtípus, különböző irányítottsággal is előfordulhat. Ezt úgy veszik figyelembe, hogy megengedik az egyes diszlokációkhoz tartozó $C_{számlolt}^*$ kontraszt-faktorértékek súlyozott lineáris kombinációját. Az ilyen súlyozott lineáris kombinációkból állítják elő a $C_{számlolt}$ értékeket, amelyek közül a legkisebb négyzetek módszerével választják ki



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

azokat, amelyek a $C_{mért}$ értékekkel a legjobban megegyeznek. A numerikus analízis eredményeként csak az a és b rácsvektorok, illetve azok 50–50 százalékos lineáris kombinációja teljesíti azt a követelményt, hogy az ezeknek megfelelő $C_{számlolt}$ és $C_{mért}$ kontraszt-faktorértékek a mérési hibán belül megegyeznek egymással. Az így kapott kontraszt-faktorértékeket 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 kristályrácvektorok 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 földkéregrétegek 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.