УДК 548.735.6 : 552.112

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕКСТУРООБРАЗОВАНИЯ В ОЛИВИНОСОДЕРЖАЩИХ ПОРОДАХ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

Колесников В. И.[1]***, Чекасина И. И.***[2]***, Бардушкин В. В.***[3]***, Сычёв А. П.***[4]***, Яковлев В. Б.***[5]

MODELING OF CRYSTALLOGRAPHIC TEXTURE IN OLIVINE ROCK AT HIGH PRESSURES

Kolesnikov V. I., Chekasina I. I., Bardushkin V. V., Sychev A. P., Yakovlev V. B.

Numerical modeling of crystallographic texture formation in a polycrystalline olivine under the external hydrostatic pressure is carried out. The modeling method is based on the analysis of local strain energy density. Primary crystallite orientations, which define the crystallographic texture of a material, are calculated. The comparative analysis of the modeling results is conducted. The modeling is carried out based on the data acquired during a neutronographic experiment aimed to identify crystallographic texture in olivine rocks.

Keywords: polycrystals, texture, crystallites, orientation distribution function, local mechanical energy.

Изучение напряжённо-деформированного состояния массивов горных пород и коры Земли по всей её глубине имеет важное научное и практическое значение. Одним из актуальных направлений в науках о Земле является разработка физических моделей геологических материалов с учётом их неоднородности, наличия кристаллографических и механических текстур, микро-, макродефектов и т. п. Подобные модели могут привести к более глубокому и реалистичному пониманию природы геодинамических и сейсмических эффектов, а также способствуют решению актуальных экологических проблем, связанных, например, с захоронением радиоактивных отходов на различных глубинах земной коры. Данная задача включает глубокое и всестороннее исследование физико-механических свойств горных пород, представляющих собой многокомпонентные поликристаллические системы [1, 2]. Сведения о текстурном строении горных пород служат основой для решения многих геологических и геофизических задач. К ним можно отнести, например, исследования сейсмологических процессов, позволяющие ставить вопрос о долгосрочных прогнозах землетрясений, или задачи реконструкции тектонических напряжений и деформаций в блоках и массивах земной коры. В ряде работ (например, [3–5]) было отмечено, что такие естественные поликристаллы, как оливиновые ксенолиты и дуниты, являются одними из основных источников сведений о составе, состоянии и свойствах глубинных зон литосферы Земли. Эти исследования показали, что кристаллографическая текстура оливина, концентрация которого в ксенолитах и дунитах достигает 94 %, является основным фактором, определяющим многие физико-механические, в том числе упругие, свойства оливиносодержащих горных пород (оливинитов).

В условиях приложенного внешнего воздействия в оливинитах возникают внутренние, отличающиеся от одного кристаллита

[1]Колесников Владимир Иванович, академик РАН, д-р техн. наук, ректор Ростовского государственного университета путей сообщения.

[2]Чекасина Ирина Игоревна, аспирант кафедры «Высшая математика №2» Московского государственного института электронной техники (технический университет).

[3]Бардушкин Владимир Валентинович, канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры «Высшая математика №2» Московского государственного института электронной техники (технический университет).

[4]Сычёв Александр Павлович, канд. физ.-мат. наук, зав. лаб. транспорта, энергетики и новых композиционных материалов Южного научного центра РАН; e-mail: sap@rgups.ru.

[5]Яковлев Виктор Борисович, д-р физ.-мат. наук, профессор кафедры «Высшая математика №2» Московского государственного института электронной техники (технический университет).

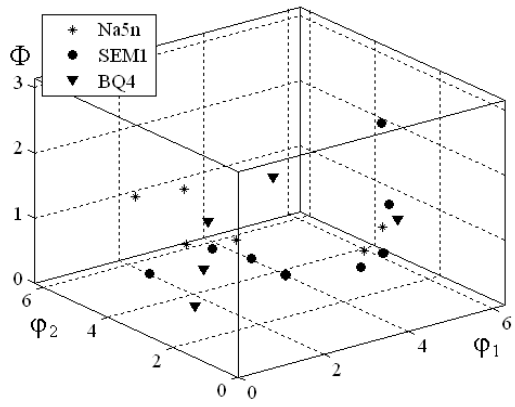


Рис. 1. Расположение в эйлеровом пространстве основных ориентаций кристаллографических осей кристаллитов, определяющих текстуру оливинитов

к другому, напряжения и деформации, которые определяют изменения их локальной энергии. Это во многом обусловлено различием ориентаций кристаллографических осей кристаллитов (зёрен неоднородности) друг относительно друга. Указанные отличия вызывают неоднородность протекания структурных изменений в поликристаллических материалах, приводящих к формированию новой кристаллографической текстуры образцов. Вследствие неоднородности распределения полей напряжений и деформаций в объёме поликристалла, процессы изменения кристаллографической текстуры также будут происходить неоднородно. Особенно важными оказываются при этом не значения самих локальных напряжений или деформаций, а величина дополнительной (по сравнению со средней по поликристаллу) энергии, являющейся вкладом локального перераспределения внешних механических воздействий. Бóльшая, по сравнению со средней, энергия интенсифицирует процесс изменения текстуры, а мéньшая приводит к торможению этого процесса. Поэтому теоретические модели перестройки структуры при различных внешних воздействиях, основанные на оценке локальной энергии актуальны. Построение подобных моделей позволяет приблизиться к решению проблемы текстурообразования в поликристаллических средах. Опираясь на результаты такого моделирования, можно выдвигать обоснованные предположения о внешних условиях и факторах, при которых происходило формирование текстуры реальных поликристаллических материалов.

Исследование текстур реальных поликристаллов, включающее определение размеров и взаимной ориентации зёрен неоднородности, осуществляется различными способами. Однако для получения информации о текстуре массивных образцов в последнее время широко применяется нейтронографический метод [3]. В результате экспериментов по рассеиванию нейтронов на импульсном реакторе ИБР-2 (пучок № 7а) в Объединённом институте ядерных исследований г. Дубны над оливинитами, отобранными из базальтовых лав горных массивов Европы, были получены данные по текстуре образцов (таблица). В графе «Концентрация» таблицы для каждого из исследуемых материалов указаны объёмные доли кристаллитов, ориентированных своей главной осью в направлении индексированного пика интенсивности рефлекса в эйлеровом пространстве.

На рис. 1 показано расположение индексированных пиков интенсивности рефлексов исследуемых материалов в эйлеровом пространстве.

Анализ рис. 1 показывает, что ориентации кристаллографических осей кристаллитов сосредоточены в определённой области. Это позволяет выдвинуть предположение о том, что структуры этих образцов формировались в литосфере Земли в схожих условиях. Как показывают исследования [4, 5], основным видом внешнего воздействия на оливиносодержащие горные породы в период их формирования в литосфере Земли являлось высокое всестороннее давление. Поэтому дальнейшие модельные расчёты проводились для случая объёмного сжатия.

Концентрация и основные направления ориентации кристаллитов в образцах оливинитов

№ пика	Концентрация	Координаты пика в эйлеровом пространстве (в радианах)		
		φ_1	Φ	φ_2
Оливинит Na5n (Норвегия)				
1	0,11168	3,4830	0,8582	6,1980
2	0,21115	3,4495	1,6830	0,0471
3	0,12987	3,3756	1,2278	0,5302
4	0,09033	3,5362	0,0007	6,2034
5	0,03513	2,8650	0,7252	3,8111
6	0,08058	0,4168	1,8418	3,7132
Оливинит SEM1 (Богемский массив, г. Железный Брод, Чехия)				
1	0,06623	3,9780	1,8247	0,5468
2	0,06195	3,2306	1,0217	0,4459
3	0,04199	2,3304	0,7943	1,5830
4	0,04783	4,0148	1,0201	0,7550
5	0,03692	5,1983	2,4487	2,3702
6	0,03885	0,0346	0,9556	2,7655
7	0,02976	2,4007	0,7796	2,7232
8	0,00635	2,5007	0,6013	4,0708
Оливинит BQ4 (Албанская мирдитовая зона, массив Кукес)				
1	0,15254	0,4760	0,5660	1,9396
2	0,09221	5,8085	0,7917	2,6733
3	0,10488	0,6343	1,1133	1,9014
4	0,22925	2,0495	1,1992	3,6052
5	0,03846	3,4200	1,6944	3,4015

В работе [6] был предложен подход к моделированию изменения текстуры поликристаллов в условиях внешнего приложенного механического напряжения $\langle\sigma_{ij}\rangle$, согласно которому каждый кристаллит стремится уменьшать свою энергию, изменяя ориентацию собственных кристаллографических осей относительно осей системы в целом. Эта ориентация может быть определена при помощи вектора вращений $\mathbf{q} = \{\varphi_1, \Phi, \varphi_2\}$. Каждое подобное вращение задаётся углами Эйлера $\{\varphi_1, \Phi, \varphi_2\}$ ($0 \leqslant \varphi_1,\ \varphi_2 < 2\pi$, $0 \leqslant \Phi \leqslant \pi$). Модель текстурообразования основывается на рассмотрении локальной энергии деформации (объёмной плотности энергии деформации)

$$E(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}\varepsilon_{ij}(\mathbf{r})\,\sigma_{ij}(\mathbf{r}),$$

где $\mathbf{r}$ — радиус-вектор случайной точки среды. В данном выражении произведение тензоров напряжений $\sigma_{ij}(\mathbf{r})$ и деформаций $\varepsilon_{ij}(\mathbf{r})$ следует понимать как свёртку по соответствующим индексам. В предположении, что в пределах зерна неоднородности механическая энергия и другие величины постоянны, зависимость энергии кристаллитов от радиус-вектора будет определяться координатами эйлерового пространства $E(\mathbf{r}) = E(\mathbf{q})$, и для её оценки в однофазном поликристаллическом материале можно воспользоваться приближением Фойгта [6]

$$E(\mathbf{q}) = \frac{1}{2}s_{ijkl}(\mathbf{q})c_{kl\varsigma\xi}(\mathbf{q})\langle c_{\varsigma\xi pr}\rangle^{-1}\times \\ \times\, c_{ij\mu\nu}(\mathbf{q})\langle c_{\mu\nu mn}\rangle^{-1}\langle\sigma_{pr}\rangle\langle\sigma_{mn}\rangle. \quad (1)$$

Здесь $s_{ijkl}(\mathbf{q})$ и $c_{ijkl}(\mathbf{q})$ — тензоры податливости и упругости соответственно в эйлеровом пространстве, а процедура усреднения для тензора упругости сводится к интегрированию по всевозможным углам Эйлера

$$\langle c_{ijkl}\rangle = \\ = \frac{1}{8\pi^2}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\int_0^{2\pi} f(\varphi_1,\Phi,\varphi_2)c_{ijkl}(\varphi_1,\Phi,\varphi_2)\times \\ \times \sin\Phi d\Phi d\varphi_1 d\varphi_2,$$

где $f(\varphi_1, \Phi, \varphi_2)$ — функция распределения кристаллитов по ориентациям их кристаллографических осей (ФРО) [7].

Для численного анализа изменения энергии кристаллитов при различных ориента-

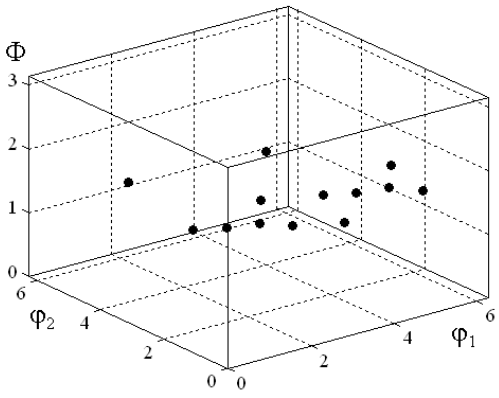


Рис. 2. Расположение в эйлеровом пространстве преимущественных ориентаций зёрен неоднородности поликристаллического оливина в результате моделирования объёмного сжатия (после восьми итераций)

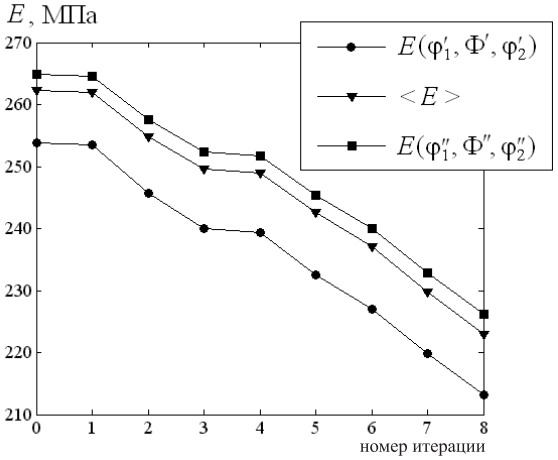


Рис. 3. Изменение локальной $E(\mathbf{q})$ (в направлениях $\{\varphi_1', \Phi', \varphi_2'\}$ и $\{\varphi_1'', \Phi'', \varphi_2''\}$) и средней $\langle E \rangle$ энергии при моделировании формировании текстуры в поликристаллическом оливине

циях своих кристаллографических осей вводится кубическая сетка, разбивающая всё эйлерово пространство на равные кубические области, в центре каждой из которых находится узел сетки. В рассматриваемой модели предполагается, что кристаллиты могут иметь только те ориентации, которые соответствуют узлам сетки. При этом значения ФРО и других величин во всех точках кубической области считаются приближённо равными соответствующим значениям в узле, расположенном в центре данной области. Тогда изменения ориентаций осей будут равносильны «перемещениям» кристаллитов в эйлеровом пространстве по узлам введённой сетки следующим образом: каждый из них стремится переместиться из узла сетки, в котором находится, в тот из ближайших узлов (включая и текущий), в котором значение его энергии (1) будет наименьшим. Моделирование перемещения кристаллитов по узлам сетки представляет собой итерационный процесс, на каждом шаге которого любой из них может совершить только одно перемещение в соседний узел. Под соседними понимаются все узлы, смещённые относительно текущего не более чем на один шаг сетки по каждой из осей. В начальный момент моделирования всегда рассматривается нетекстурированный поликристалл, т. е. ФРО $f(\varphi_1, \Phi, \varphi_2) = 1$ во всех точках эйлерова пространства [8].

Поликристаллический оливин, как указывалось выше, является основным минералом, определяющим упругие свойства оливиносодержащих горных пород. Поэтому в настоящей работе с помощью описанного метода было проведено моделирование начальных стадий изменения текстуры именно в поликристалле оливина. Фактором внешнего воздействия являлось высокое всестороннее давление

$$\langle \sigma \rangle = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 400 & 0 & 0 \\ 0 & 400 & 0 \\ 0 & 0 & 400 \end{pmatrix} \text{ МПа.}$$

При этом были взяты следующие значения отличных от нуля компонент тензора модулей упругости $c = \|c_{ij}\|$, ГПа, $i, j = 1, 2, \ldots, 6$, для монокристалла оливина в матричной форме: $c_{11} = 324,0$, $c_{22} = 198,0$, $c_{33} = 249,0$, $c_{44} = 66,7$, $c_{55} = 81,0$, $c_{66} = 79,3$, $c_{12} = c_{21} = 59,0$, $c_{13} = c_{31} = 79,0$, $c_{23} = c_{32} = 78,0$. Шаг сетки был выбран равным $\frac{\pi}{24}$. Для микронеоднородного поликристалла оливина, состоящего из кристаллитов одинакового размера (малого по сравнению с объёмом всего материала), были проведены расчёты возникающих преимущественных ориентаций зёрен неоднородности, которые и определяют новую кристаллографическую текстуру материала (рис. 2).

Анализ рис. 2 показывает, что преимущественные ориентации кристаллитов в поликристаллической системе оливина после нескольких итераций моделирования в условиях всестороннего объёмного сжатия лока-

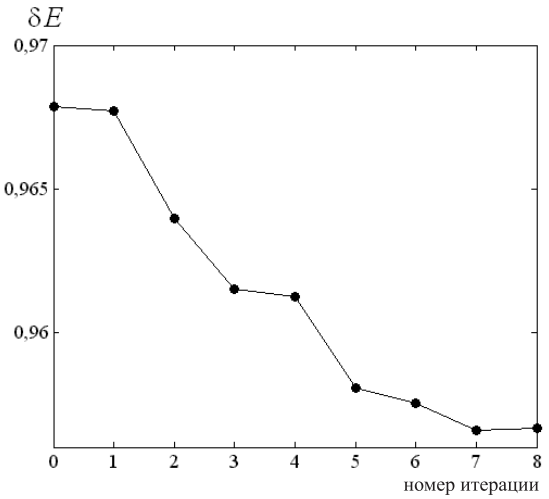


Рис. 4. Изменение относительной локальной энергии δE в выделенном направлении $\{\varphi_1', \Phi', \varphi_2'\}$ при моделировании формировании текстуры в поликристаллическом оливине

лизуются в определённой области эйлерова пространства. Сравнение результатов численных расчётов и экспериментальных данных (рис. 1) по образцам оливинитов Na5n, SEM1 и BQ4 указывает на адекватность предложенного энергетического метода моделирования текстурообразования в реальных поликристаллических системах при высоких давлениях.

Также в работе были проведены исследования изменения локальной $E(\mathbf{q})$, средней $\langle E\rangle$ и относительной локальной $\delta E = \frac{E(\mathbf{q})}{\langle E\rangle}$ энергии в результате моделирования объёмного сжатия. Локальные значения энергии вычислялись для нескольких «выделенных» направлений $\mathbf{q} = \{\varphi_1, \Phi, \varphi_2\}$, соответствующих преимущественным ориентациям кристаллитов в поликристалле оливина, а также для нескольких «невыделенных» направлений, ФРО в которых оказалась равной нулю после восьми итераций. Расчёты показали, что на каждом шаге моделирования для всех исследованных выделенных направлений $\mathbf{q}$ значения локальной энергии $E(\mathbf{q})$ меньше значений средней энергии $\langle E\rangle$, причём $E(\mathbf{q})$ между собой незначительно отличаются только по величине (характер же этих изменений является похожим). Аналогичный вывод можно сделать относительно всех исследованных невыделенных направлений (с той лишь разницей, что локальная энергия в них больше средней). На рис. 3 показаны изменения в процессе моделирования локальной энергии $E(\mathbf{q})$ в одном из выделенных направлений $\{\varphi_1', \Phi', \varphi_2'\}$, где $\varphi_1' = 1,3090$, $\Phi' = 1,5708$, $\varphi_2' = 4,8433$, в одном из невыделенных направлений $\{\varphi_1'', \Phi'', \varphi_2''\}$, где $\varphi_1'' = 0,1309$, $\Phi'' = 0,9163$, $\varphi_2'' = 6,0214$, а также изменение средней энергии $\langle E\rangle$. Из проведённых расчётов видно, что при текстурообразовании в условиях объёмного сжатия значения средней и локальной энергии уменьшаются на каждой новой итерации.

Наибольший интерес представляет исследование относительной локальной энергии для преимущественных ориентаций кристаллитов. Расчёты показали, что δE для всех проанализированных выделенных направлений имеет тенденцию к уменьшению на каждой новой итерации моделирования с сохранением характера изменения (поэтому на рис. 4 приведена расчётная зависимость δE только в выделенном направлении $\{\varphi_1', \Phi', \varphi_2'\}$).

Необходимо отметить также, что для различных невыделенных направлений относительная локальная энергия может с каждым новым шагом моделирования как уменьшаться, так и возрастать.

Литература

1. *Шерман С. И., Днепровский Ю. И.* Поля напряжений земной коры и геолого-структурные методы их изучения. Новосибирск: Наука, 1989. 148 с.
2. *Александров К. С., Продайвода Г. Т.* Анизотропия упругих свойств минералов и горных пород. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2000. 354 с.

3. *Соболев Г. А., Никитин А. Н.* Нейтронография в геофизике // Физика элементарных частиц и атомного ядра. 2001. Т. 32. Вып. 6. С. 1359–1404.
4. *Соболев Г. А., Никитин А. Н., Савёлова Т. И., Яковлев В. Б.* Теоретико-экспериментальный подход к исследованию микро- и макросвойств и состояния горных пород (возможное направление развития моделей очага землетрясений) // Физика Земли. 2001. № 1. С. 6–15.
5. *Никитин А. Н., Иванкина Т. И., Бурилличев Д. Е., Клима К., Локаичек Т., Прос З.* Анизотропия и текстура оливиносодержащих мантийных пород при высоких давлениях // Физика Земли. 2001. № 1. С. 64–78.
6. *Колесников В. И., Бардушкин В. В., Булах И. И., Сычёв А. П., Яковлев В. Б.* О методе моделирования текстурообразования в поликристаллах при различных внешних напряжениях // Экологический вестник научных центров Черноморского экономического сотрудничества. 2006. № 2. С. 33–36.
7. *Шермергор Т. Д.* Теория упругости микронеоднородных сред. М.: Наука, 1977. 399 с.
8. *Колесников В. И., Чекасина И. И., Бардушкин В. В., Сычёв А. П., Яковлев В. Б.* Энергетический подход при моделировании формирования текстуры в поликристаллах под влиянием внешних напряжений // Вестник Южного научного центра РАН. 2008. Т. 4. № 3. С. 3–8.

Ключевые слова: поликристаллы, текстура, кристаллиты, функция распределения ориентаций, локальная механическая энергия

Статья поступила 7 июля 2008 г.
Ростовский государственный университет путей сообщения, г. Ростов-на-Дону
Московский государственный институт электронной техники (технический университет), г. Москва
Южный научный центр РАН, г. Ростов-на-Дону
© Колесников В. И., Чекасина И. И., Бардушкин В. В., Сычёв А. П., Яковлев В. Б., 2008