



Разориентации зерен, индикаторные для оливиновых ультрамафитов кумулятивного генезиса. Теоретический анализ

Шкурский Б.Б.

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, геологический факультет, Shkurskybb@yandex.ru

Прогнозированы два типа разориентаций решеток контактирующих зерен оливина, ожидаемые в структурно зрелых кумулятивных дунитах. Анализ разориентаций обоих типов осуществлен с использованием пространства Родригеса–Франка. При расчетах численных параметров разориентаций первого типа, отвечающих гранным контактам идиоморфных кристаллов, использованы новые формулы для композиций с участием бесконечных векторов Родригеса–Франка. Разориентации первого типа представлены в фундаментальной зоне пространства Родригеса–Франка отрезками прямых. Разориентации второго типа, связанные с контактами кристаллов ребром к грани, представлены в пространстве Родригеса–Франка фрагментами дважды линейчатых поверхностей второго порядка.

Ключевые слова: оливин, кумулаты, разориентация зерен, пространство Родригеса–Франка, EBSD.

Введение

Локализация оливиновых ультрамафитов в расслоенных массивах в большинстве случаев предопределяет их идентификацию в качестве кумулатов. При обнаружении таких пород в виде блоков в меланже или в виде ксенолитов в лавах основания, позволяющие делать надежные заключения об их кумулятивном генезисе, зачастую отсутствуют. Это касается в особенности структурно зрелых пород, относимых к т.н. кумулатам с замаскированными структурами (Хьюджес, 1988; Hunter, 1996). Такие породы трудноотличимы от реститогенных или метасоматических (Hunter, 1996). Автором проведен теоретический анализ ориентационных особенностей пространственного строения существенно оливиновых пород, способных указывать на их кумулятивное происхождение. Речь идет о локальных ориентационных признаках механического взаимодействия кристаллов, тесно контактировавших в кумулусе (Wheeler et al., 2001).

В последнее время вероятностные параметры

контактов зерен различных породообразующих минералов рассматриваются в качестве важной топологической характеристики структуры минеральных агрегатов (Бродская, Марин, 2011; Войтеховский, Захарова, 2021; Захарова, Войтеховский, 2022). Для анхимономинеральных оливиновых пород такого рода характеристики оказываются даже с учетом статистики чисел контактов, приходящихся в среднем на зерно, недостаточно информативными, если учитывать только сам факт наличия контакта, но не его характер и ориентационные взаимоотношения контактирующих зерен. Есть основания полагать, что большинство зерен оливина, специфическим образом контактировавших в кумулусе, сохраняют свои первоначальные контакты и взаимную ориентацию решеток в ходе структурного вызревания породы. Речь идет о наиболее тесных контактах, при которых кристаллы, поступившие в кумулус, касаются друг друга по граням. Внимания заслуживают также и менее тесные контакты с касанием грани одного

кристалла ребром другого. Все такие контакты в случае их сохранения допустимо рассматривать как реликтовые. Однако в структурно уравновешенных агрегатах они визуальнo практически неотличимы от изначально преобладавших случайных контактов, а также от новых, возникших в ходе адкумулусного роста, усадки кумулула и субсолидусной структурной эволюции породы.

В работе анализируются ориентационные параметры тесно контактирующих зерен, которые могли бы служить ключом к выявлению реликтовых контактов, индикаторных для кумулатов, при условии идиоморфизма поступавших в кумулул индивидов. Для диагностики оливиновых кумулятивных пород, не обладающих выраженной предпочтительной ориентацией решеток зерен, характеризующейся в отечественной литературе как «директивная текстура», а в англоязычной термином *Fabric*, традиционный анализ ориентационных аспектов текстуры может оказаться недостаточным. Кроме того, наблюдаемая предпочтительная ориентация решеток формируется и при пластическом течении богатых оливином пород, накладываясь на первоначальную и затеняя ее, если даже таковая имела место (Денисова, 1985; Добержинская, 1989; Holness et al., 2019). Было бы желательно иметь дополнительные петроструктурные критерии, позволяющие в затруднительных случаях делать надежные заключения о кумулятивном происхождении существенно оливиновых пород.

В этой работе рассматривается возможность использования в качестве такого критерия *разориентаций* (*misorientations*) – взаимных ориентаций решеток, характеризующих пары граничащих зерен. Внимание петрологов к межзеренным границам и разориентациям зерен в породах и их синтетических аналогах, в том числе и богатых оливином, за последние десятилетия заметно возросло (Faul & Fitz Gerald, 1999; Fliervoet et al., 1999; Wheeler et al., 2001; 2012; Marquardt et al., 2015; Thieme et al., 2018). Во многих случаях разориентации зерен, свойственные породам, сформированным в определенных условиях, обнаруживаются при статистическом анализе результатов инструментальных измерений, полученных с применением EBSD. В нашем случае, как станет очевидно из дальнейшего, представляющие интерес разориентации не являются единичными, но образуют своеобразные плотные множества. Выявлению таких индикаторных разориентаций должно предшествовать их теоретическое моделирование.

В данной статье показывается, что гранным и гранно-реберным контактам кристаллов отвечают два соподчиненных множества разориентаций их решеток. Предлагается оригинальная методика расчета параметров разориентаций, отвечаю-

щих гранным контактам кристаллов минералов, относящихся к ромбической голоэдрии. Рассчитываются параметры таких разориентаций для оливина. В общих чертах рассматриваются также разориентации, отвечающие контактам типа «ребро к грани». Предлагается способ количественной оценки величины отклонения «измеренных» разориентаций от прогнозированных индикаторных.

Индикаторные разориентации зерен в кумулатах: постановка задачи

При отсадке анизометричных кристаллов ранних ликвидусных минералов (пироксенов, амфиболов, иногда плагиоклазов) сложенный ими кумулул нередко приобретает директивную текстуру (Денисова, 1985; Holness et al., 2012, 2019). Кристаллы оливина в большинстве случаев субизометричны, поэтому в оливиновом кумулуле отчетливая директивная текстура формируется далеко не всегда (Yao et al., 2019). Однако в оливиновых кумулатах можно ожидать появления определенных локальных особенностей взаимной ориентации зерен. Речь идет о специфических разориентациях тесно контактирующих кристаллов. Идиоморфизм свойствен кристаллам, отсаженным на дно магматической камеры, при условии наличия значительной доли расплава в ней, в отличие от ситуаций, при которых кристаллизация осуществляется *in situ*, в условиях густой расплавно-кристаллической «каши» (Holness et al., 2019). Оливин во многих случаях оказывается на ликвидусе первым, поэтому присутствие его идиоморфных кристаллов в кумулуле не редкость. Соображения о том, что механическое взаимодействие тесно контактирующих в расплаве зерен особым образом влияет на их разориентации, высказаны в работе (Wheeler et al., 2001). Однако количественные параметры разориентаций, отвечающих подобным контактам идиоморфных кристаллов, насколько известно автору, с тех пор не обсуждались.

Поступающие в кумулул идиоморфные кристаллы различными способами контактируют с ранее осажденными. При наиболее благоприятных условиях осаждающийся кристалл в итоге соприкоснется с одним из нижележащих гранью к грани, при этом их взаимный разворот вокруг общей нормали к контактирующим граням будет случайным. В этой связи такие разориентации обладают одной степенью свободы. При менее благоприятных условиях контактируют грань одного кристалла и ребро другого, и такие контакты будут осуществляться чаще, чем гранные. Им отвечают две степени свободы в пространстве разориентаций. Чаще всего вершина одного из контактирующих кристаллов будет касаться грани другого или ребро одного – ребра другого, и такие точечные

контакты приведут уже к вполне случайным разориентациям, поскольку им присущи три степени свободы. Контактам двух кристаллов *гранью к грани* или *ребром к грани*, как будет показано ниже, отвечают два соподчиненных типа разориентаций, представленных в трехмерном пространстве всевозможных разориентаций многообразиями меньшей размерности. При усадке кумулула доля пар смежных кристаллов, контактирующих по граням, сохранится или даже возрастет. Адкумулятивный рост ведет к «заклиниванию» каркаса из контактирующих зерен, после чего их разориентации мало изменяются, чего нельзя сказать об их форме. Структурное вызревание ультрамафитов, сопровождаемое редукцией и миграцией межзеренных границ, приводит к появлению структур, сходных с гранобластовыми – форма зерен в них сильно отличается от первоначальной. Структурно зрелым кумулатам свойственны наблюдаемые в плоских сечениях прямолинейные границы зерен с тройными сочленениями, приближающимися к равновесным (Жабин, 1979; Хьюджес, 1988; Hunter, 1996; Holness et al., 2007). В подобных случаях морфология и характер контактов зерен оливина не позволяют визуально идентифицировать породу как кумулятивную. Однако межзеренные границы типа «грань к грани» относительно низкоэнергетические, т.к. обе контактирующие плоскости изначально имеют низкие индексы Миллера, что позволяет относить такие границы к числу специальных (Randle, 2006). Миграция специальных границ затруднена, поэтому соответствующие им разориентации в ходе структурного вызревания породы нарушатся в наименьшей степени. Отметим, что неожиданно высокая устойчивость разориентаций зерен наблюдалась и при некоторых видах медленной пластической деформации оливиновых агрегатов (Thieme et al., 2018).

Индикаторные для кумулатов разориентации, прежде всего – отвечающие гранным контактам зерен, можно попытаться выявить в оливиновых породах проблематичного генезиса методом EBSD или же с применением универсального федоровского столика. Границы и разориентации, связанные с контактами ребер и граней, не специальные, их сохранность вряд ли будет высокой, и поэтому об их индикаторном значении говорить преждевременно. Главное внимание в статье уделяется специальным разориентациям, отвечающим гранным контактам, которые предстоит выявлять на фоне случайных.

Оптимальная стратегия анализа микроструктуры может быть выражена так: «Для каждого зерна – ориентация, для каждой межзеренной границы – разориентация» (Wheeler et al., 2012, p. 64). Поскольку при отсадке субизометричных зерен возникновения отчетливой предпочтительной

ориентации их решеток ожидать не приходится, именно специальные разориентации смежных зерен оливина, связанные с их реликтовыми гранными контактами, могут стать ключом к решению вопроса о предполагаемой кумулятивной природе породы. В ряде случаев наличия данных о распределении углов разориентаций бывает достаточно для петрогенетических заключений (Weeler et al., 2012). В нашем случае потребуются исчерпывающие априорные сведения о множествах индикаторных разориентаций. В противном случае их обнаружение на фоне случайных разориентаций не представляется возможным. Возникает задача теоретического моделирования таких разориентаций, требующая для своего решения применения весьма специфических методов прикладной кристаллографии. Прежде чем осуществлять вывод и рассчитывать параметры прогнозируемых разориентаций, попытаемся предварительно оценить ожидаемые частоты их появления с учетом морфологии оливина, для чего обратимся к подходу, применявшемуся при анализе явления, сходного с обсуждаемым.

Предварительная оценка ожидаемых частот гранных контактов оливина

Контактирование кристаллов по граням с последующим их срастанием – синнезис – возможно и при свободном плавании зерен в расплаве. Синнезис рассматривался в качестве одного из механизмов двойникования минералов (Nespolo, Ferraris, 2004), в том числе и оливина (Shwindinger, 1999; Welsh et al., 2013). Роль синнезиса в образовании двойников, возможно, переоценена (Пунин, Штукенберг, 2008). Так, сравнение частот наблюдаемых контактов граней в двойниках плагиоклаза с частотами, ожидаемыми при случайном соприкосновении его кристаллов, оказалось не в пользу синнезиса (Dowty, 1980). Однако само это явление трудно отрицать, учитывая распространенность гранных контактов зерен минералов, в том числе и различных, в гломеропорфировых сростках. Такие сростки, поступая в кумулул, могут увеличивать в нем долю пар зерен, смежных по рациональным граням. В рамках решаемой задачи заслуживает внимания принцип, ранее использованный для оценки вероятностей гранных контактов кристаллов: частоты срастаний по наиболее развитым граням будут наибольшими (Dowty, 1980).

Примем допущение о пропорциональности вероятности контакта двух равных кристаллов по двум определенным граням произведению их площадей. Рассмотрим кристаллы оливина габитусного типа Засбах. Они огранены минимальным набором присутствующих на любых кристаллах оливина простых форм: $\{110\}$, $\{021\}$ и $\{010\}$, обозначаемых символами m , k и b и развитым в от-

ношениях $m \geq k \geq b$ (Бонштедт-Куплетская, 1972). Расчет проведем для контактов граней m , k , b и дополнительной $d - \{101\}$ (рис. 1). Допуская бесконечное число соприкосновений пары кристаллов по граням, перейдем к вероятностям. Если степень развития граней i -й простой формы охарактеризовать их суммарной площадью S_i , нормированной на площадь поверхности кристалла, то можно выразить вероятность срастания двух кристаллов одинаковой формы по паре граней i -й простой формы первого кристалла и j -й второго при условии, что гранное срастание осуществилось как произведение $P_{ij} = S_i S_j$. Суммирование $S_i S_j$ по индексам i и j , пробегаящим номера всех простых форм, даст 1. В случае пары идентичных кристаллов для их срастания по граням i -й и j -й простых форм вероятность при $i \neq j$ выразится как $P_{ij} = 2 S_i S_j$. Для срастания по граням одной i -й простой формы – $P_{ii} = S_i^2$. Результаты расчетов ожидаемых частот гранных контактов нескольких вариантов кристаллов типа Засбах (рис. 1) приведены в табл. 1. Наиболее ожидаемы контакты с участием призм m и k , при заметном развитии пинакоида b ожидаются контакты и с его участием, однако они менее вероятны. При этом контакты развитых в равной степени граней различных простых форм более вероятны, чем одноименных.

Таблица 1. Оценки ожидаемых частот гранных контактов кристаллов оливина с различным развитием простых форм m , k , b и d (рис. 1). Суммарные площади граней S_i i -х форм нормированы на площадь поверхности кристалла

№ на рис. 1:	1	2	3	4	
Площади граней	$Sm =$	0.09	0.10	0.11	0.12
	$Sk =$	0.09	0.10	0.11	0.12
	$Sb =$	0.09	0.05	0.02	0.02
	$Sd =$	0.02	0.02	0.02	0.00
Ожидаемые частоты гранных контактов					
Контакты граней	mm	0.1(4)	0.1(6)	0.1(9)	0.2(3)
	mk	0.2(7)	0.3(2)	0.3(9)	0.4(6)
	mb	0.1(4)	0.0(8)	0.0(4)	0.0(4)
	md	0.0(6)	0.0(7)	0.0(7)	0.00
	kk	0.1(4)	0.1(7)	0.1(9)	0.2(3)
	kb	0.1(4)	0.0(8)	0.0(4)	0.0(4)
	kd	0.0(6)	0.0(7)	0.0(7)	0.00
	bb	0.0(3)	0.0(1)	0.0(0)	0.00
	bd	0.0(3)	0.0(2)	0.0(1)	0.00
	dd	0.0(1)	0.0(1)	0.0(1)	0.00

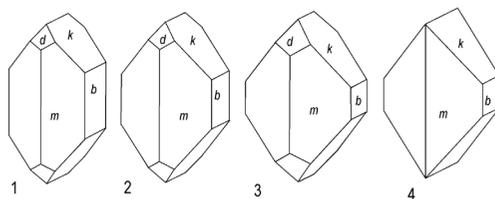


Рис. 1. Кристаллы оливина типа Засбах с различными степенями развития простых форм $m \{110\}$, $k \{021\}$, $b \{010\}$ и $d \{101\}$ (установка $Pbnm$).

Описание разориентаций в пространстве Родригеса–Франка

Разориентация – отвечающий определенным условиям собственный поворот в трехмерном пространстве, совмещающий оси координат, жестко связанные с одним объектом, с осями координат другого объекта, некоторым образом ориентированного относительно первого. Таким образом описывается актуальная ситуация, условно рассматриваемая как результат ориентационного расогласования двух объектов, первоначально пребывавших в параллельной ориентации. В случае симметрии объектов, отличной от триклинной, имеется несколько симметрично эквивалентных способов расположения осей координат в них, так что и число поворотов, описывающих относительно новую ориентацию объектов, превысит единицу. В таких случаях разориентацией считается поворот на минимальный угол. Параметры разориентации можно рассчитать в матричной форме по данным инструментального определения ориентаций решеток пары зерен относительно системы координат, связанной с образцом. Признаки локального взаимодействия зерен выявляются при отнесении разориентации к системе координат, связанной с решеткой одного из зерен. Матричный формализм, обеспечивающий такие расчеты, подробно изложен в работе (Wheeler et al., 2001).

Связь геометрии поворотов с ортогональными матрицами выражается довольно сложно, из девяти их элементов независимы лишь три. Это затрудняет вывод искомым разориентаций в матричной форме, а также их репрезентацию. Подходящий инструмент для решения таких задач, с точки зрения автора, – трехмерное параметрическое пространство Родригеса–Франка (ПРФ) (Morawiec, Field, 1996; Мэйсон, Шух, 2014). ПРФ напрямую связан с пространством, в котором размещены объекты. Конечные радиус-векторы точек в ПРФ взаимно-однозначно соответствуют практически любым собственным поворотам. Направление радиус-вектора в ПРФ совпадает с направлением оси поворота на угол $\omega < 180^\circ$ в положительном направлении, если смотреть от конца

вектора в направлении к началу координат. Длина радиус-вектора в ПРФ равна $\text{tg}(\omega/2)$ (Callahan et al., 2017). Тожественному повороту отвечает начало координат, а повороту на 180° – две точки, удаленные на бесконечность в обоих направлениях оси поворота (Morawiec, Field, 1996). Для пары симметричных объектов найдутся различные повороты, описывающие одну и ту же их взаимную ориентацию. Все такие повороты изображаются в ПРФ различными точками, но разориентации отвечает только одна из них – ближайшая к началу координат. Точки всевозможных разориентаций двух симметричных объектов лежат внутри или на границе компактной области в ПРФ – *фундаментальной зоны* (ФЗ) (Morawiec, Field, 1996). Форма и размеры ФЗ, содержащей начало координат и отграниченной от прочих частей ПРФ плоскостями, определяются симметрией объектов (Hea, Jonas, 2007). В случае кристаллов веществ, относящихся к ромбической голоэдри, ФЗ представлена кубом, грани которого отстоят на единицу от начала координат. Среди преимуществ ПРФ, кроме плоских ограничений ФЗ, следует упомянуть расположение на прямых линиях точек, отвечающих поворотам вокруг фиксированных осей (Morawiec, Field, 1996; Barton et al., 2002; Callahan et al., 2017).

Важнейшая операция, осуществляемая в ПРФ, – операторное произведение $\mathbf{r}_2 \circ \mathbf{r}_1$ пары его радиус-векторов, описывающее их композицию – последовательное выполнение отвечающих \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 поворотов, углы которых ω_1 и ω_2 оба меньше 180° . Радиус-вектор результирующего поворота \mathbf{r}_{12} следующим образом выражается через \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 (Мэйсон, Шух, 2014):

$$\mathbf{r}_{12} = \mathbf{r}_2 \circ \mathbf{r}_1 = \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2 + \mathbf{r}_2 \times \mathbf{r}_1}{(1 - \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2)}. \quad (1)$$

Среди недостатков ПРФ – затруднения при описании композиций с участием поворотов на 180° , т.к. последним отвечают бесконечные векторы. Операции, предусмотренные в (1), не могут быть напрямую проделаны над бесконечными векторами. В таких случаях исследователи, склонные использовать очевидные преимущества ПРФ, вынуждены прибегать к матричной (Hea, Jonas, 2007) или к кватернионной (Morawiec, Field, 1996) формам представления поворотов. Переходы к другим видам параметризации в нашем случае нежелательны. Возможность решения этой проблемы обеспечена справедливостью ассоциативного закона для операторных произведений, к числу которых относится (1).

Любой бесконечный радиус-вектор в ПРФ, отвечающий повороту на 180° вокруг оси с определенным направлением и далее обозначаемый сим-

волом π , можно представить в виде композиции (1) двух равных единичных векторов, отвечающей двум последовательным поворотам на 90° вокруг той же оси. Единичный вектор, обозначим его \mathbf{e} , может иметь любое из двух направлений оси поворота на 180° . Вычисляя $\mathbf{e} \circ \mathbf{e}$ согласно (1), получим бесконечный вектор. Однако, если $\mathbf{e} \circ \mathbf{e}$ войдет в композицию большего числа векторов, то результат в общем случае окажется конечным вектором. Лишь при условии перпендикулярности π и \mathbf{r} композиция $\pi \circ \mathbf{r}$ даст бесконечный вектор. Но даже в таком случае направление последнего будет определенным с точностью до множителя ± 1 , так что и его можно представить в виде $\mathbf{e} \circ \mathbf{e}$. Опуская промежуточные выкладки, приведем итоговые выражения для композиций конечного вектора \mathbf{r} и бесконечного π , полученные выполнением операций (1) в последовательности, определяемой расстановкой скобок:

$$\mathbf{r} \circ \pi = (\mathbf{r} \circ \mathbf{e}) \circ \mathbf{e} = \frac{\mathbf{e} \times \mathbf{r} - \mathbf{e}}{\mathbf{r} \mathbf{e}}, \quad (2a)$$

$$\pi \circ \mathbf{r} = \mathbf{e} \circ (\mathbf{e} \circ \mathbf{r}) = \frac{\mathbf{r} \times \mathbf{e} + \mathbf{e}}{\mathbf{r} \mathbf{e}}. \quad (2b)$$

Правые части (2) инвариантны к замене обоих \mathbf{e} на $-\mathbf{e}$, т. е. результат не зависит от выбора представления π . Возможна и запись композиции двух бесконечных радиус-векторов

$$\pi_2 \circ \pi_1 = (\mathbf{e}_2 \circ (\mathbf{e}_2 \circ \mathbf{e}_1)) \circ \mathbf{e}_1 = \frac{\mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2}{\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_2}. \quad (3)$$

Достигнутое расширение набора допустимых операций с радиус-векторами ПРФ облегчает теоретический вывод параметров искомым специальных разориентаций.

Разориентации, связанные с граничными контактами

Рассмотрим два полиэдра одинаковой формы, изначально находящиеся в параллельной ориентации (рис. 2а). Второй кристалл подвергается некоторому вращению и в итоге срастается своей j -й гранью с i -й гранью первого. Относя ориентирующий поворот к системе координат, связанной с первым кристаллом, его можно описать как композицию двух последовательных поворотов. Первый приводит внешнюю единичную нормаль \mathbf{n}_j к j -й грани подвижного кристалла в положение, антипараллельное внешней нормали \mathbf{n}_i к i -й грани неподвижного (рис. 2б). Второй – поворот подвижного кристалла на произвольный угол вокруг \mathbf{n}_i (рис. 2в).

Если нормали к граням рассматривать в ПРФ в качестве поворачиваемых объектов, то вектор

поворота $\mathbf{p}(j, i)$, приводящего \mathbf{n}_j в положение, параллельное \mathbf{n}_i , можно выразить посредством формулы Родригеса (Barton et al., 2002):

$$\mathbf{p}(j, i) = \frac{\mathbf{n}_j \times \mathbf{n}_i}{1 + \mathbf{n}_j \mathbf{n}_i}, \quad (4a)$$

Тогда вектор поворота $\mathbf{p}(j, -i)$, обеспечивающий ориентацию повернутой \mathbf{n}_j , антипараллельную \mathbf{n}_i , получим, изменив направление \mathbf{n}_i в (4a) на противоположное:

$$\mathbf{p}(j, -i) = \frac{\mathbf{n}_i \times \mathbf{n}_j}{1 - \mathbf{n}_j \mathbf{n}_i}. \quad (4б)$$

Вектор $\mathbf{p}(j, -i)$ в (4a) станет неопределенным по направлению и бесконечным по модулю при $i = j$, т.к. \mathbf{n}_i приводится в антипараллельное самой себе положение поворотом на 180° вокруг любой оси, нормальной к \mathbf{n}_i . Такие случаи потребуют отдельного рассмотрения.

Повороты вокруг нормали \mathbf{n}_i на произвольные углы изобразятся в ПРФ в виде плотного множества точек, лежащих на параллельной \mathbf{n}_i прямой, проходящей через начало координат. Такую прямую удобно описывать линейной векторной функцией $\mathbf{r}(i, D)$ с непрерывным скалярным параметром D , изменяющимся от $-\infty$ до $+\infty$:

$$\mathbf{r}(i, D) = D \mathbf{n}_i. \quad (5)$$

Композиция $\mathbf{r}(j, -i, D)$ радиус-вектора точки $\mathbf{p}(j, -i)$ с множеством точек $\mathbf{r}(i, D)$, лежащих на прямой, даст снова множество точек, лежащих на некоторой прямой (Barton et al., 2002). В нашем случае $\mathbf{r}(j, -i, D)$ выразится через (4б) и (5) так:

$$\begin{aligned} \mathbf{r}(j, -i, D) &= (D \mathbf{n}_i) \circ \mathbf{p}(j, -i) = \\ &= \mathbf{p}(j, -i) + \frac{D(\mathbf{n}_j - \mathbf{n}_i)}{1 - \mathbf{n}_j \mathbf{n}_i}. \end{aligned} \quad (6a)$$

Перестановка i и j в (6a) даст множество точек, отвечающих аналогичным поворотам при замене подвижного кристалла неподвижным и наоборот:

$$\begin{aligned} \mathbf{r}(i, -j, D) &= (D \mathbf{n}_j) \circ \mathbf{p}(i, -j) = \\ &= \mathbf{p}(i, -j) + \frac{D(\mathbf{n}_i - \mathbf{n}_j)}{1 - \mathbf{n}_j \mathbf{n}_i}. \end{aligned} \quad (6б)$$

Прямые (6a) и (6б) описывают ориентирующие повороты для пары идентичных кристаллов, поэтому итоговые взаимные ориентации двух кристаллов неотличимы. Центросимметричность разориентаций – характерная черта для случая двух идентичных объектов (Morawiec, Field, 1996). Постоянные векторы $\mathbf{p}(j, -i)$ в правых частях (6)

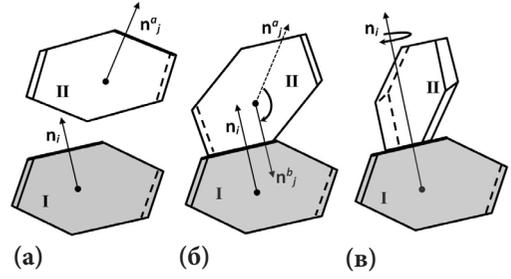


Рис. 2. Последовательность поворотов, обеспечивающих параллельные контакты j -й грани подвижного кристалла (II) с i -й гранью неподвижного (I): а – начальное положение, б – приведение нормалей к j -й и i -й граням в антипараллельную ориентацию, в – поворот подвижного кристалла вокруг нормали к i -й грани.

ведут в ближайшие к началу координат точки прямых, и эти векторы нормальны к умноженному на D направляющим векторам прямых. Выражения (6) приводятся в удобную форму нормировкой направляющих векторов прямых к единичным векторам \mathbf{t} , так что (6a), например, приобретает вид:

$$\mathbf{r}(j, -i, D) = \mathbf{p}(j, -i) + D\mathbf{t}(j, -i). \quad (7)$$

Для любой пары кристаллов, контактирующих по различным граням, точки ориентирующих поворотов в ПРФ лежат на прямой вида (6, 7), или пересекающих ФЗ, или не пересекающих ее. Чтобы выяснить, пересекается ли ФЗ прямой, например (6a), достаточно разрешить относительно D системы неравенств:

$$|\mathbf{e}_k \mathbf{r}(j, -i, D)| \leq 1, \quad (8)$$

Повороты вокруг любой из осей симметрии второго порядка представлены в ПРФ бесконечными радиус-векторами. Композиция описываемого в ПРФ вектором $\pi_k = \mathbf{e}_k \circ \mathbf{e}_k$ поворота вокруг оси второго порядка, параллельной k -й оси координат, со множеством ориентирующих поворотов $\mathbf{r}(j, -i, D)$, выраженных в виде уравнения прямой (7), образует их в множество $\mathbf{r}(j, -i, k, D)$ точек другой прямой:

$$\begin{aligned} \mathbf{r}(j, -i, k, D) &= \mathbf{r}(j, -i, D) \circ \pi_k = \\ &= (\mathbf{p}(j, -i) + D\mathbf{t}(j, -i)) \circ \mathbf{e}_k \circ \mathbf{e}_k. \end{aligned} \quad (9)$$

Опуская индексы i, j и k при $\mathbf{p}(j, -i)$, $\mathbf{t}(j, -i)$ и \mathbf{e}_k и применяя (2a), получаем

$$\begin{aligned} \mathbf{r}(j, -i, k, D) &= (\mathbf{p} + D\mathbf{t}) \circ \pi_k = \\ &= \frac{(\mathbf{e} \times \mathbf{p} - \mathbf{e}) + D(\mathbf{e} \times \mathbf{t})}{(\mathbf{e}\mathbf{p}) + D(\mathbf{e}\mathbf{t})}. \end{aligned} \quad (10)$$

Из вида (10) не явствует тот факт, что $\mathbf{r}(j, -i, k, D)$ – прямая линия, но переход от D к изменяющемуся в тех же пределах новому скалярному параметру

$$D_k = ((\mathbf{e}\mathbf{t})((\mathbf{e}\mathbf{p}) + D(\mathbf{e}\mathbf{t})))^{-1} \quad (11)$$

придаст уравнению прямой $\mathbf{r}(j, -i, k, D)$ более узнаваемый вид:

$$\begin{aligned} \mathbf{r}(j, -i, k, D_k) &= \frac{\mathbf{e} \times \mathbf{t}}{(\mathbf{e}\mathbf{t})} + \\ &+ D_k ((\mathbf{e}\mathbf{t})((\mathbf{e} \times \mathbf{p}) - \mathbf{e}) - (\mathbf{e}\mathbf{p})(\mathbf{e} \times \mathbf{t})) \\ &= \mathbf{a} + D_k \mathbf{b}. \quad (12) \end{aligned}$$

Постоянный вектор \mathbf{a} и переменный $D_k \mathbf{b}$ в уравнении прямой (12) таковы, что в общем случае $(\mathbf{a} \mathbf{b}) \neq 0$ и вектор \mathbf{b} не единичный. Замена постоянного вектора \mathbf{a} на постоянный $\mathbf{p}(j, -i, k)$, ведущий в ближайшую точку прямой, и нормировка \mathbf{b} к единичному $\mathbf{t}(j, -i, k)$ приведут уравнение прямой (12) к стандартному виду, подобному (7):

$$\mathbf{r}(j, -i, k, D') = \mathbf{p}(j, -i, k) + D' \mathbf{t}(j, -i, k). \quad (13)$$

Выражения для $\mathbf{p}(j, -i, k)$ и $\mathbf{t}(j, -i, k)$ в (12) через $\mathbf{p}(j, -i)$, $\mathbf{t}(j, -i)$ и \mathbf{e}_k (индексы при которых для краткости опускаются) следующие:

$$\mathbf{p}(j, -i, k) = \frac{(\mathbf{e}\mathbf{t})(1 + \mathbf{p}^2)(\mathbf{e} \times \mathbf{t}) + (\mathbf{e}\mathbf{p})((\mathbf{e} \times \mathbf{p}) - \mathbf{e})}{(\mathbf{e}\mathbf{p})^2 + (\mathbf{e}\mathbf{t})^2(1 + \mathbf{p}^2)}, \quad (14a)$$

$$\mathbf{t}(j, -i, k) = \frac{(\mathbf{e}\mathbf{t})((\mathbf{e} \times \mathbf{p}) - \mathbf{e}) - (\mathbf{e}\mathbf{p})(\mathbf{e} \times \mathbf{t})}{((\mathbf{e}\mathbf{p})^2 + (\mathbf{e}\mathbf{t})^2(1 + \mathbf{p}^2))^{1/2}}. \quad (14b)$$

Композиции любых прямых с векторами π_k , как это видно, в частности, из (12), – разрывные преобразования, переводящие прямые линии в прямые, но не сохраняющие при этом расстояния между точками. Поэтому скалярный параметр D' в (13) не связан линейно с D в (9) и (10), хотя и изменяется в тех же пределах.

Необходимо отметить, что (12) при условии $\mathbf{e} \mathbf{t} = 0$ не дает приемлемого результата, тогда как формула (13) при подстановке в нее (14) дает. Если $\mathbf{e}_k \mathbf{p}(j, -i) = 0$ и $\mathbf{e}_k \mathbf{t}(j, -i) = 0$ одновременно, то все радиус-векторы множества $\mathbf{r}(j, -i, k, D)$ будут бесконечными и ни один из описываемых ими поворотов не будет разориентацией. При композиции $\mathbf{r}(j, -i, D)$ и π_k в другом порядке, как это следует из сравнения (2a) и (26), результат $\pi_k \circ \mathbf{r}(j, -i, D)$ будет отличаться от (13) лишь знаком, так что его соотношения с $\mathbf{r}(j, -i, D) \circ \pi_k$ будут такими же, как между (6b) и (6a). Точки пересечения прямых

$\mathbf{r}(j, -i, k, D)$ с границами ФЗ устанавливаются так же, как это делалось выше в отношении прямых $\mathbf{r}(j, -i, D)$ – путем решения систем неравенств, аналогичных (8).

Рассмотрим теперь разориентации для случая контактов по одинаковым граням. Повороты $\mathbf{p}(i, -i)$ на 180° , приводящие нормаль \mathbf{n}_i в антипараллельное самой себе положение, изобразятся в ПРФ всевозможными бесконечными радиус-векторами, нормальными к \mathbf{n}_i и объединяемыми по этому признаку в семейство $\pi(\perp i)$. Композиции вида (6) любого фиксированного $\mathbf{p}(i, -i)$ с множеством $\mathbf{r}(i, D)$ из (5), описывающим вращения вокруг \mathbf{n}_i , дадут совпадающее с семейством $\pi(\perp i)$ непрерывное множество $\mathbf{r}(i, -i, D)$ точек, лежащих на бесконечности в плоскости i -й грани. Любые точки $\mathbf{r}(i, -i, D)$ лежат вне ФЗ, но их отображения $\mathbf{r}(i, -i, k, D)$, полученные при композициях с векторами поворотов симметрии π_k , будут прямыми линиями, отрезки которых могут попасть в ФЗ:

$$\begin{aligned} \mathbf{r}(i, -i, k, D) &= (D\mathbf{n}_i) \circ (\mathbf{p}(i, -i) \circ \pi_k) = \\ &= (D\mathbf{n}_i) \circ \mathbf{p}(i, -i, k). \quad (15) \end{aligned}$$

Желательно получить $\mathbf{r}(i, -i, k, D)$ сразу в стандартном виде, аналогичном (7). Для этого в зависимости от k в качестве $\mathbf{p}(i, -i)$ в (15) из семейства $\pi(\perp i)$ выбирается вектор, компланарный k -й оси координат и нормали \mathbf{n}_i , обозначаемый далее $\pi(\perp i, k)$. Такой вектор образует с π_k наименьший угол. Для получения $\mathbf{r}(i, -i, k, D)$ требуется представление $\pi(\perp i, k) = \mathbf{e}(\perp i, k) \circ \mathbf{e}(\perp i, k)$, поэтому в дальнейшем предстоит использовать выражение

$$\mathbf{e}(\perp i, k) = \frac{(\mathbf{n}_i \times \mathbf{e}_k) \times \mathbf{n}_i}{|(\mathbf{n}_i \times \mathbf{e}_k) \times \mathbf{n}_i|}.$$

Тогда для $\mathbf{p}(i, -i, k)$ из правой части (15) получаем, используя (3),

$$\begin{aligned} \mathbf{p}(i, --i, k) &= \pi(\perp i, k) \circ \pi_k = \\ &= \frac{(\mathbf{n}_i \mathbf{e}_k)(\mathbf{n}_i \times \mathbf{e}_k)}{1 - (\mathbf{n}_i \mathbf{e}_k)^2}. \quad (16) \end{aligned}$$

Уравнение прямой $\mathbf{r}(i, -i, k, D)$ (15) теперь принимает стандартную форму

$$\begin{aligned} \mathbf{r}(i, -i, k, D') &= (D\mathbf{n}_i) \circ \mathbf{p}(i, --i, k) = \\ &= \mathbf{p}(i, --i, k) + \\ &+ \frac{D'(\mathbf{n}_i - (\mathbf{n}_i \mathbf{e}_k) \mathbf{e}_k)}{(1 - (\mathbf{n}_i \mathbf{e}_k)^2)^{1/2}}. \quad (17) \end{aligned}$$

Необходимо отметить, что действие осей второго порядка не связывает противоположные грани дипирамид. Внешние нормали к таким граням изначально антипараллельны, поэтому $\mathbf{p}(i, i) = 0$, и повороты $\mathbf{r}(i, i, D)$ описываются проходящими через начало координат прямыми, параллельными \mathbf{n}_i :

$$\mathbf{r}(i, i, D) = (D\mathbf{n}_i) \circ \mathbf{p}(i, i) = D\mathbf{n}_i.$$

Композиции $\mathbf{r}(i, i, D)$ с векторами \mathbf{p}_i , осуществляемые с использованием (2а), дадут еще три прямых линии $\mathbf{r}(i, i, k, D)$, некоторые из которых могут пересечь ФЗ. Учет таких прямых позволяет в совокупности с $\mathbf{r}(i, -i, k, D)$, полученными с применением (13), исчерпать все разориентации

для контактов граней любой дипирамиды. Противоположные грани призм и пинакоидов связаны поворотами точечной группы 222, так что разориентации для сростаний по ним будут исчерпаны пересечениями с ФЗ прямых $\mathbf{r}(i, -i, k, D)$ и их аналогами по операциям симметрии точечной группы mmm .

Рассчитанные вышеизложенным способом параметры разориентаций в ПРФ, отвечающих гранным контактам кристаллов типа Засбах для состава оливина Fo_{90} , приведены в табл. 2. Полный набор индикаторных разориентаций включает отрезки прямых, охарактеризованных в табл. 2, а также всех их симметричных аналогов по точечной группе mmm . На рис. 3 изображены отрезки прямых в ФЗ ПРФ для разориентаций,

Таблица 2. Рассчитанные параметры разориентаций, связанных с гранными контактами кристаллов оливина типа Засбах, установка $Pbnm$. В столбцах – компоненты векторов \mathbf{p} и \mathbf{t} уравнений вида (7) для прямых, пересекающих октант ФЗ с неотрицательными X , Y и Z

$m \{110\}$ и $m \{110\}$				$b \{010\}$ и $b \{010\}$	
\mathbf{p}	\mathbf{t}	\mathbf{p}	\mathbf{t}	\mathbf{p}	\mathbf{t}
0	1	0	0.907187(1)	0	0
0	0	0	0.420727(4)	0	1
0.463771(4)	0	0	0	0	0
$k \{021\}$ и $k \{021\}$				$b \{010\}$ и $k \{021\}$	
\mathbf{p}	\mathbf{t}	\mathbf{p}	\mathbf{t}	\mathbf{p}	\mathbf{t}
0	0	0.856659(4)	0	0.369765(6)	0
0	0.759437(9)	0	1	0	0.937933(4)
0	0.650579(7)	0	0	0	-0.346815(5)
$d \{101\}$ и $d \{101\}$				$b \{010\}$ и $m \{110\}$	
\mathbf{p}	\mathbf{t}	\mathbf{p}	\mathbf{t}	\mathbf{p}	\mathbf{t}
0	0.782931(4)	0	0	0	0.538178(7)
0	0	1.258513(4)	0	0	0.842830(8)
0	0.622108(1)	0	1	0.638537(1)	0
$m \{110\}$ и $k \{021\}$				$b \{010\}$ и $d \{101\}$	
\mathbf{p}	\mathbf{t}	\mathbf{p}	\mathbf{t}	\mathbf{p}	\mathbf{t}
0.402238(5)	0.777630(1)	0.207437(2)	-0.558437(4)	0.622108(1)	-0.553616(1)
0.867320(7)	0.290338(7)	0.447283(2)	0.7264746(9)	0	-0.707106(8)
1.012445(2)	-0.557669(2)	0.522124(9)	-0.400477(5)	0.782931(4)	0.439896(8)
$d \{101\}$ и $k \{021\}$				$d \{101\}$ и $m \{110\}$	
\mathbf{p}	\mathbf{t}	\mathbf{p}	\mathbf{t}	\mathbf{p}	\mathbf{t}
0.793678(9)	-0.717549(8)	0.336329(6)	-0.467102(4)	0.153039(4)	0.913840(5)
0.855678(9)	0.696018(3)	0.362602(7)	-0.453086(1)	0.329988(8)	-0.227485(7)
0.998855(5)	-0.026093(9)	0.423275(3)	0.759294(6)	0.192602(1)	-0.336371(4)

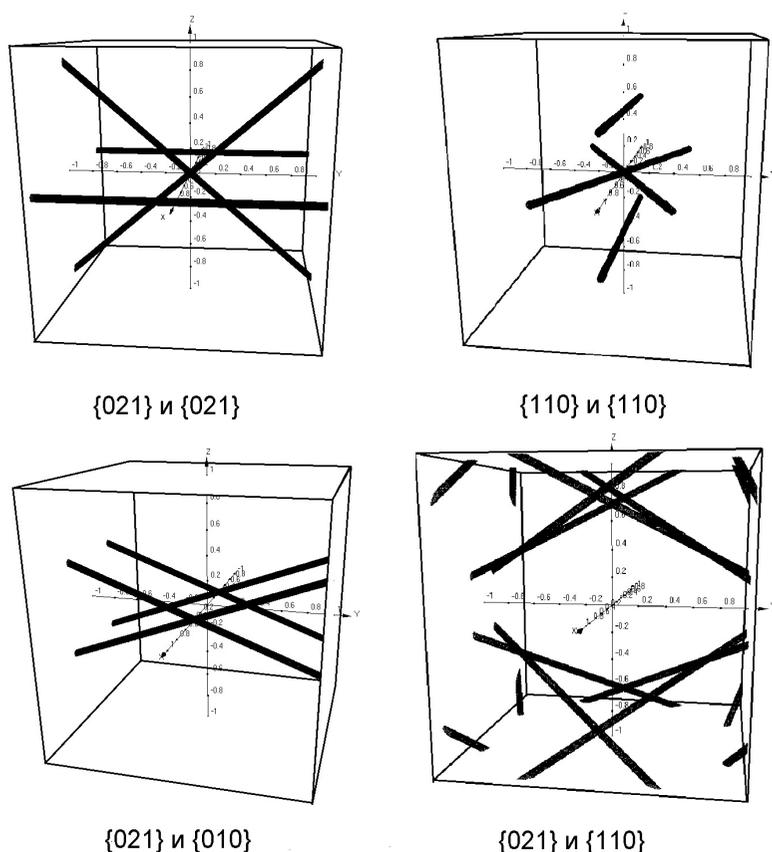


Рис. 3. Отрезки прямых, изображающие в ПРФ множества разориентаций, связанных с гранными контактами кристаллов оливина с присутствием форм m {110}, k {021} и b {010} (установка $Pbnm$).

отвечающих важнейшим гранным контактам таких кристаллов. Размещенные в ПРФ точки «измеренных» разориентаций, рассчитанных по данным инструментального определения ориентаций смежных зерен, при наличии гранных контактов покажут сгущение вблизи отрезков, описывающих индикаторные разориентации, по сравнению с распределением точек, отвечающих случайным разориентациям, связывающим пары несмежных зерен.

Разориентации, связанные с гранно-реберными контактами

Для выяснения общих черт локализации в ПРФ разориентаций, отвечающих гранно-реберным контактам, рассмотрим пару кристаллов с симметрией mmm , ограненных пинакоидами {100}, {010} и {001} (рис. 4). При непрерывном вращении подвижного кристалла вокруг оси Y – оси пояса [010] – все ребра этого пояса, а при некоторых углах поворота и его грани будут

поочередно приходить в параллельные контакты с каждой из граней этого же пояса неподвижного кристалла. Сосредоточимся на контактах ребер и граней пояса [010] с гранью (100) неподвижного кристалла. При любых углах поворота вокруг [010] в параллельном контакте с гранью (100) неподвижного кристалла будут те или иные ребра, а при некоторых углах – и грани пояса [010] подвижного кристалла (рис. 4а). В ПРФ множество точек, отвечающих непрерывному вращению вокруг направления [010], представлено прямой, описываемой по аналогии с (5) уравнением $r([010], D) = De_y$. Подвижный кристалл после произвольного поворота вокруг [010] и при последующем непрерывном его вращении вокруг нормали к грани (100), описываемом прямой $r((100), T) = Te_x$, где T – скалярный параметр, сохранит контакт некоторого ребра пояса [010] подвижного кристалла с гранью (100) неподвижного (рис. 4б).

Множество $r([010], (100), D, T)$ точек поворотов,

отвечающих всевозможным контактам ребер и граней пояса [010] с гранью (100), получим в виде композиции $r([010], D)$ и $r((100), T)$:

$$\begin{aligned} r([010], (100), D, T) &= (Te_x) \circ (De_y) = \\ &= Te_x + De_y + TDe_z. \end{aligned} \quad (18)$$

Скалярные параметры T и D и их произведение TD – коэффициенты при единичных координатных векторах e_k в (18) – являются текущими координатами (x, y, z) точек поверхности, задаваемой этим уравнением. При независимо изменяющихся x и y имеем

$$z(x, y) = xy. \quad (19)$$

После перехода к новой системе координат $X'Y'Z'$, повернутой относительно старой XYZ на 45° вокруг оси Z в положительном направлении, уравнение (19) преобразуется в

$$z' = \frac{x'^2}{2} - \frac{y'^2}{2}. \quad (20)$$

Уравнение (20) – каноническое уравнение гиперболического параболоида (рис. 5) – дважды линейчатой поверхности второго порядка (Корн, Корн, 1977). При фиксированном D_p , отвечающем контакту i -й грани пояса [010] с (100), вектор $D_i e_y$ в (18) будет постоянным и (18) станет уравнением прямой. Такие прямые, отвечающие параллельным контактам граней пояса [010] с (100), являются частными прямолинейными образующими поверхности (18). На рис. 5 изображен также параболоид $r((100), [010], D, T)$ – инвертированный аналог $r([010], (100), D, T)$, отвечающий аналогичным контактам при замене подвижного кристалла неподвижным и наоборот:

$$\begin{aligned} r((100), [010], D, T) &= (De_y) \circ (Te_x) = \\ &= Te_x + De_y - TDe_z. \end{aligned}$$

Рассмотрим теперь контакты грани (001) подвижного кристалла с ребрами пояса [001] неподвижного. Произведем вращение De_z подвижного кристалла из его начального положения (рис. 6а), совпадающего с положением неподвижного, вокруг нормали e_z к грани (001) на произвольный угол, зависящий от D . Далее производится поворот на 90° вокруг любой оси, лежащей в плоскости (001) неподвижного кристалла, пусть это будет ось X (рис. 6б). В результате нормаль к (001) подвижного кристалла станет перпендикулярной к оси пояса [001] неподвижного. Грань (001) станет при этом парал-

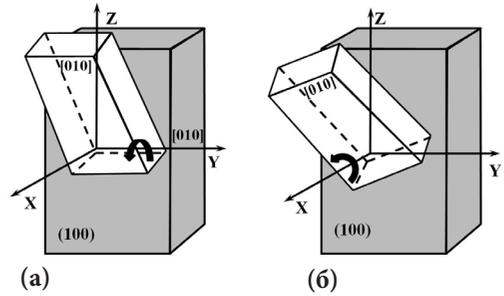


Рис. 4. Последовательность поворотов кристалла симметрии mmm , обеспечивающих контакты ребер [010] с гранью (100) неподвижного кристалла: а – поворот на произвольный угол вокруг [010], б – поворот на произвольный угол вокруг [100] неподвижного кристалла.

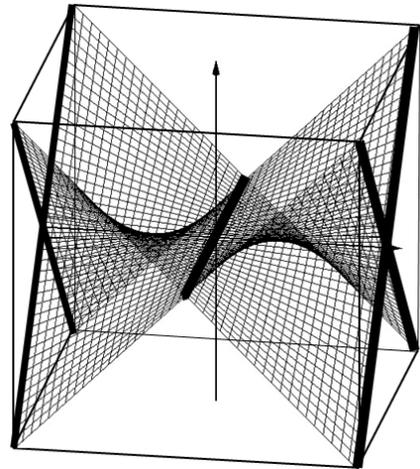


Рис. 5. Фрагменты гиперболических параболоидов, описывающие в ПРФ множество разориентаций, отвечающих контактам ребер [010] с гранью (100) для пары пинакоидальных кристаллов симметрии mmm . Показаны также отрезки, отвечающие контактам по граням {100}.

лельной ребрам пояса [001]. Дальнейшее вращение Te_z подвижного кристалла вокруг направления [001] неподвижного обеспечит непрерывный обход ребер пояса [001] гранью (001) подвижного кристалла, касающейся этих ребер (рис. 6в).

Множество $r((001), [001], D, T)$ искомым поворотов описывается композицией

$$\begin{aligned} r((001), [001], D, T) &= (Te_z) \circ e_x \circ (De_z) = \\ &= Te_z \circ (e_x + D(e_z - e_y)). \end{aligned} \quad (21)$$

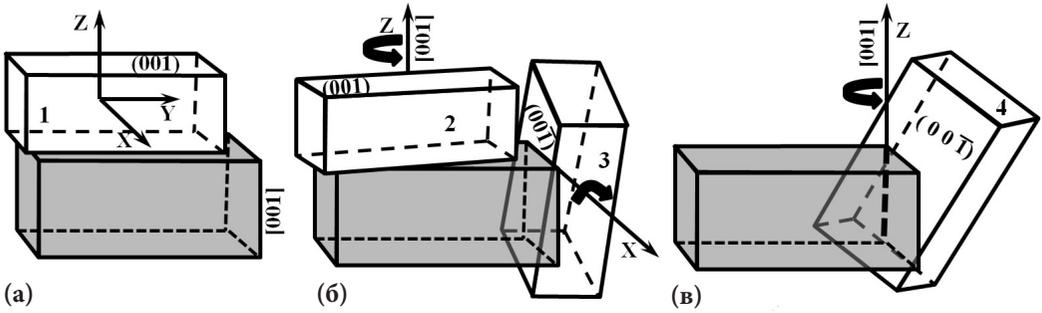


Рис. 6. Повороты, обеспечивающие контакты граней {001} подвижного кристалла симметрии *mmm* с ребрами зоны [001] неподвижного: а – исходное положение, б – поворот на произвольный угол вокруг [001] (в положение 2) с последующим поворотом на 90° вокруг [100] (в положение 3), в – поворот на произвольный угол вокруг [001] (в положение 4).

Раскрывая композицию векторов в правой части (21) согласно (1) и сгруппировав скалярные множители при единичных координатных векторах e_k , получим

$$\begin{aligned} r((001), [001], D, T) &= \\ &= \frac{(1 + TD)}{1 - TD} e_x + \frac{(T - D)}{1 - TD} e_y + \\ &+ \frac{(T + D)}{1 - TD} e_z. \end{aligned} \quad (22)$$

Зависящие от скалярных параметров D и T коэффициенты при e_k – текущие координаты (x, y, z) точек поверхности, описываемой уравнением (22). Можно убедиться, что (x, y, z) подчиняются каноническому уравнению гиперboloида вращения (Корн, Корн, 1977):

$$x^2 + y^2 - z^2 = 1. \quad (23)$$

Гиперboloид вращения (22, 23), как и гиперболический параболоид (20), – дважды линейчатая поверхность второго порядка, в каждой точке которой пересекаются по две прямолинейных образующих. Будучи центросимметричной, поверхность (22, 23), отвечающая поворотам $r((001), [001], D, T)$ (рис. 7), описывает также и разориентации для аналогичных контактов, образуемых при замене неподвижного кристалла подвижным и наоборот. Из рассмотренных примеров видно, что разориентации, отвечающие гранно-реберным контактам кристаллов, в ФЗ ПРФ представлены фрагментами дважды линейчатых поверхностей второго порядка, содержащих в качестве подмножеств отрезки прямых, отвечающих разориентациям, связанным с гранными контактами.

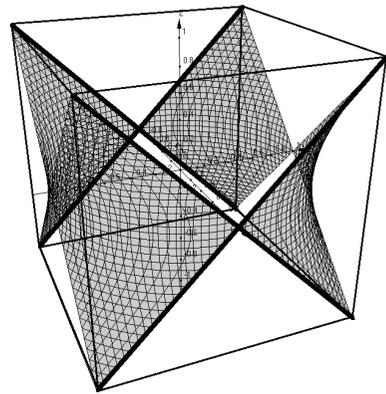


Рис. 7. Фрагменты гиперboloида вращения, представляющие в ПРФ множество разориентаций, связанных с контактами граней {001} подвижного кристалла симметрии *mmm* с ребрами зоны [001] неподвижного и наоборот. Показаны также отрезки, отвечающие контактам граней {001} и {100}.

Величина отклонения измеренных разориентаций от прогнозируемых

Разориентации, рассчитанные по данным об измеренных ориентациях зерен и рассматриваемые далее как измеренные, представлены в ПРФ точками. Подлежащие обнаружению специальные разориентации могут, как и измеренные, описываться в ПРФ точками в случаях, например, двойников (Шкурский, 2018). Множества разориентаций, отвечающих гранным контактам, в ПРФ представлены отрезками прямых. Ограничимся этими двумя случаями, не касаясь разориентаций для контактов типа «ребро–грань».

Величина отклонения измеренной разориентации, представленной в ПРФ точкой r , от прогнозируемой, представленной точкой m , должна

характеризовать угол малого дополнительного поворота, преобразующего измеренную разориентацию в прогнозируемую. Такой поворот изображается в ПРФ малым вектором $\boldsymbol{\varepsilon}$:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\varepsilon} \circ \mathbf{r} &= \mathbf{m}, \\ \boldsymbol{\varepsilon} &= \mathbf{m} \circ (-\mathbf{r}).\end{aligned}\quad (24)$$

Произведение (24), осуществленное согласно (1), позволяет вычислить квадрат и модуль $\boldsymbol{\varepsilon}$, а при необходимости и угол поворота $\omega(\boldsymbol{\varepsilon}) = 2 \operatorname{Arctg}(\boldsymbol{\varepsilon})$. Говоря далее о «расстоянии» между парой точек в ПРФ, будем иметь в виду модуль вектора $\boldsymbol{\varepsilon}$ из (24).

Если прогнозируемые разориентации принадлежат плотному множеству точек в ПРФ, то при фиксированном \mathbf{r} вектор $\boldsymbol{\varepsilon}$ будет зависеть от выбора точки \mathbf{m} этого множества. Найдем точку \mathbf{m}_p проходящей через начало координат прямой, ближайшую к точке \mathbf{r} в смысле минимума $\boldsymbol{\varepsilon}$. Уравнение такой прямой имеет вид

$$\mathbf{m}(T) = T\mathbf{t}, \quad (25)$$

где $\mathbf{t}^2 = 1$, T – скалярный параметр, изменяющийся от $-\infty$ до ∞ . Выражение, аналогичное (24), задает $\boldsymbol{\varepsilon}$ как функцию параметра T :

$$\boldsymbol{\varepsilon}(T) = (T\mathbf{t}) \circ (-\mathbf{r}) = \frac{T(\mathbf{t} + \mathbf{r} \times \mathbf{t}) - \mathbf{r}}{1 + T(\mathbf{r}\mathbf{t})}. \quad (26)$$

Правая часть произведения (26) раскрыта в соответствии с (1). Дифференцируя $\boldsymbol{\varepsilon}^2(T)$ по T и приравнявая производную к 0, получаем условие минимума квадрата модуля $\boldsymbol{\varepsilon}$: $T_p = (\mathbf{r}\mathbf{t})$. Ближайшая к точке \mathbf{r} по повороту $\boldsymbol{\varepsilon}$ точка \mathbf{m}_p прямой $\mathbf{m}(T) = T\mathbf{t}$ определяется выражением $\mathbf{m}_p = (\mathbf{r}\mathbf{t})\mathbf{t}$. Величина $\boldsymbol{\varepsilon}^2(T)$ при $T = (\mathbf{r}\mathbf{t})$ принимает наименьшее значение

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{\min}^2 = \frac{\mathbf{r}^2 - (\mathbf{r}\mathbf{t})^2}{1 + (\mathbf{r}\mathbf{t})^2}. \quad (27)$$

Итак, в случае прямой, проходящей через начало координат, ее точка, ближайшая к точке \mathbf{r} в смысле минимума $\boldsymbol{\varepsilon}^2$, судя по величине $T_p = (\mathbf{r}\mathbf{t})$, совпадает с ортогональной проекцией конца вектора \mathbf{r} на эту прямую. Точка \mathbf{m}_p в рассматриваемом случае оказывается точкой прямой, ближайшей к точке \mathbf{r} согласно евклидовой метрике.

Прямая, не проходящая через начало координат, описывается функцией $\mathbf{m}(D) = \mathbf{p} + D\mathbf{t}$, где \mathbf{p} – вектор, ведущий из начала координат в ее ближайшую точку, \mathbf{t} – единичный направляющий вектор прямой, нормальный к \mathbf{p} . Для $\boldsymbol{\varepsilon}$ имеем

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{m}(D) \circ (-\mathbf{r}) = (\mathbf{p} + D\mathbf{t}) \circ (-\mathbf{r}). \quad (28)$$

Осуществив композицию (1) прямой $\mathbf{m}(D)$ с вектором $-\mathbf{p}$, преобразуем ее в прямую $\mathbf{m}'(T)$, проходящую через начало координат:

$$\begin{aligned}\mathbf{m}(D) \circ (-\mathbf{p}) &= \frac{D(\mathbf{t} + \mathbf{p} \times \mathbf{t})}{1 + \mathbf{p}^2} = \mathbf{m}'(T), \\ \mathbf{m}'(T) &= \left(\frac{D}{(1 + \mathbf{p}^2)^{\frac{1}{2}}} \right) \left[\frac{(\mathbf{t} + \mathbf{p} \times \mathbf{t})}{(1 + \mathbf{p}^2)^{\frac{1}{2}}} \right] = T\mathbf{t}'.\end{aligned}\quad (29)$$

Вектор \mathbf{t}' в (29) – единичный, в средней части формулы он заключен в квадратные скобки. Теперь (28) можно переписать в виде

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\varepsilon} &= (\mathbf{m}(D) \circ (-\mathbf{p})) \circ (\mathbf{p} \circ (-\mathbf{r})) = \\ &= \mathbf{m}'(T) \circ (-\mathbf{r}').\end{aligned}\quad (30)$$

В правой части (30) стоят величины T и \mathbf{r}' , первая из которых – скалярный параметр, связанный с D , как это видно из (29), вторая – результат композиции векторов $-\mathbf{r}$ и \mathbf{p} :

$$T = \frac{D}{(1 + \mathbf{p}^2)^{\frac{1}{2}}}; \quad \mathbf{r}' = \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{p} \times \mathbf{r})}{1 + (\mathbf{r}\mathbf{p})}. \quad (31)$$

Правая часть (30) выражает вектор $\boldsymbol{\varepsilon}$ через T и \mathbf{r}' так же, как это имело место в (26), поэтому условия минимизации квадрата $\boldsymbol{\varepsilon}$ аналогичные: $T_p = (\mathbf{r}'\mathbf{t}')$. Используя описываемые формулами (31) связи T с D и \mathbf{p} и \mathbf{r}' с \mathbf{r} и \mathbf{p} , а также выражение \mathbf{t}' через \mathbf{t} и \mathbf{p} в (29), для значения D_p , доставляющего минимум квадрату $\boldsymbol{\varepsilon}$ из (28), получим:

$$D_p = \frac{(\mathbf{r}\mathbf{t})(1 + \mathbf{p}^2)}{1 + (\mathbf{r}\mathbf{p})}. \quad (32)$$

Подстановка D_p из (32) в (28) после возведения в квадрат и некоторых упрощений приводит к следующему выражению для квадрата минимального в смысле малости $\boldsymbol{\varepsilon}$ расстояния от точки \mathbf{r} до прямой $\mathbf{m}(D) = \mathbf{p} + D\mathbf{t}$:

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{\min}^2 = \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{p})^2 + (\mathbf{p} \times \mathbf{r})^2 - (\mathbf{r}\mathbf{t})^2(1 + \mathbf{p}^2)}{(1 + (\mathbf{r}\mathbf{p}))^2 + (\mathbf{r}\mathbf{t})^2(1 + \mathbf{p}^2)}. \quad (33)$$

При $\mathbf{p} = 0$ прямая $\mathbf{m}(D) = \mathbf{p} + D\mathbf{t}$ пройдет через начало координат и (33) перейдет в (27), как и должно быть. При $\mathbf{p} \neq 0$ точка прямой $\mathbf{m}(D) = \mathbf{p} + D\mathbf{t}$, ближайшая к \mathbf{r} в смысле минимума квадрата вектора $\boldsymbol{\varepsilon}$, не совпадает с точкой, ближайшей к \mathbf{r} согласно евклидовой метрике. Формула (33) дает корректную оценку минимального отклонения измеренной разориентации от множества прогнозируемых, отвечающих некоторому гранному контакту кристаллов. Нетрудно убедиться в том, что в пределах ФЗ ПРФ точки разориентаций, отклоняющиеся от прогнозируемых на величину, меньшую, чем некоторый фиксированный угол, заключены во внутренностях однополостных гиперблоидов.

Обсуждение результатов

Прогнозируемые разориентации, отвечающие гранным контактам кристаллов, могут быть индикаторными для структурно зрелых существенно оливиновых кумулатов. Проведенный расчет параметров таких разориентаций обеспечивает возможность их выявления на основе анализа данных EBSD или любого другого метода, допускающего определение ориентаций зерен в образце. Анализ разориентаций смежных зерен в структурно зрелых оливиновых породах, кумулятивное происхождение которых несомненно в силу их геологического положения, должен прояснить петрогенетическую информативность прогнозируемых разориентаций. После этого появятся основания для попыток выявления значимой доли таких разориентаций в оливиновых породах проблематичного генезиса. В обоих случаях каждая разориентация смежных зерен оливина с учетом ошибок измерения и шероховатости граней должна быть классифицирована или как индикаторная – при попадании в близкие окрестности прогнозируемых отрезков, или как случайная в противном случае. Предложенный способ оценки величины отклонения измеренных разориентаций от прогнозируемых будет способствовать реализации такой процедуры. Формирование в оливиновом кумулусе пар контактирующих зерен с прогнозируемыми разориентациями и их устойчивость при дальнейшей структурной эволюции кумулата наиболее вероятны при динамически относительно стабильной ситуации, исключающей субгоризонтальные течения смеси осажденных кристаллов с интеркумулусным расплавом (Holness et al., 2019). Однако и в подобных ситуациях частичное сохранение разориентаций, отвечающих реликтовым контактам идиоморфных кристаллов по граням, нельзя исключать полностью. Только анализ данных по разориентациям в образцах с очевидными текстур-

ными признаками сдвиговых деформаций сможет показать, фатальны ли подобные воздействия для сохранения возможности идентификации оливиновых кумулатов предложенным в статье способом.

Необходимо отметить, что малоугловые разориентации, свойственные субзернам, образовавшимся при деформациях изначально монокристаллических зерен, в силу близости отвечающих им точек в ПРФ к началу координат будут опознаваться как близкие к части прогнозируемых индикаторных разориентаций, а именно – к разориентациям, отвечающим контактам по граням одной простой формы, например $\{021\}$ или $\{110\}$ (рис. 3). Однако при наличии значимой доли разориентаций, отвечающих реальным контактам кристаллов по одноименным граням, как показали предварительные расчеты ожидаемых частот гранных контактов (табл. 1), следует ожидать также значимого числа контактов по граням различных форм, например $\{021\}$ и $\{110\}$, а множества точек разориентаций, отвечающих таким контактам, удалены от начала координат в ПРФ (рис. 3). Учет подобных корреляций поможет избежать получения ложноположительных результатов при опознании оливиновых ультрамафитов в качестве кумулатов.

Заключение

Возможность возникновения специфических разориентаций, связанных с контактным взаимодействием зерен, отмечалась ранее (Wheeler et al., 2001), однако способ расчета их характеристик впервые предложен, по всей видимости, в данной работе. Получение представленных в работе результатов потребовало выполнения операций с бесконечными векторами в ПРФ, что стало возможным с использованием предложенных автором новых формул (2, 3). Результаты представлены в относительно простой аналитической форме, вряд ли достижимой в рамках других способов описания разориентаций. Сопоставление измеренных в образцах разориентаций с прогнозируемыми теперь осуществимо на количественной основе, обеспеченной формулой (33). Предложенный подход пригоден для аналогичных расчетов в отношении гранных контактов любых минералов ромбической сингонии, например ортопироксенов.

Благодарности

Автор благодарен А.Л. Перчуку, Ю.Л. Вейтховскому, А.А. Арискину и С.Н. Соболеву за обсуждение отдельных аспектов исследования. Работа выполнена при поддержке гранта РФФ № 16-17-10129.

Список литературы:

- Бонштедт-Куплетская Э.М.* Оливин // Минералы (справочник). Т. 3. Вып. 1. М.: Наука, 1972. С. 172–98.
- Бродская Р.Л., Марин Ю.Б.* Факторы агрегации структурирования минерального вещества и генетическая интерпретация строения минеральных агрегатов // Вестник Ин-та Геологии Коми Научного Центра УрО РАН. 2011. № 5 (197). С. 2–6.
- Войтеховский Ю.Л., Захарова А.А.* Петрографические структуры: ийолиты и уртиты Хибин. Вестник МГТУ. 2021. Т. 24. № 2. С. 160–167. DOI: 10.21443/1560-9278-2021-24-2-160-167.
- Денисова А.Е.* История деформаций Нуралинского ультраосновного массива (Южный Урал) // Изв. АН СССР. Серия геологическая. 1985. №8. С. 25–38.
- Добржиницкая Л.Ф.* Деформации магматических пород в условиях глубинного тектогенеза. М.: Наука, 1989. – 288 с.
- Жабин А.Г.* Онтогенез минералов. Агрегаты. М.: Наука, 1979. – 276 с.
- Захарова А.А., Войтеховский Ю.Л.* Методика определения петрографических структур с использованием прибора МИУ-5М. Вестник МГТУ. 2022. Т. 25. № 1. С. 5–11. DOI: 10.21443/1560-9278-2022-5-11.
- Корн Г., Корн Т.* Справочник по математике (для научных работников и инженеров). М.: Наука, 1971. – 832 с.
- Мэйсон К.Д., Шух К.А.* Способы отображения текстуры // Метод дифракции отраженных электронов в материаловедении. Под ред. А. Шварца и др. М.: Техносфера, 2014. С. 75–102.
- Пунин Ю.О., Штукенберг А.Г.* Автодеформационные дефекты кристаллов. СПб.: Изд-во С.-Петербург. ун-та, 2008. – 318 с.
- Хьюдес Ч.* Петрология изверженных пород. М.: Недра, 1988. – 320 с.
- Шкурский Б.Б.* Теоретическое моделирование закономерных срастаний оливина в миметических параморфозах по рингвудиту и вадслеиту // Вестник Московского университета. Серия 4: Геология. 2018. № 4. С. 3–12.
- Barton N.R., Boyce D.E., Dawson P.R.* Pole figure inversion using finite elements over Rodrigues space // Textures and Microstructures. 2002. V. 35 (2). P. 113–144.
- Callahan P.G., Echlin M., Pollock T.M., Singh S., De Graef M.* Three-dimensional texture visualization approaches: theoretical analysis and examples // Journ. Appl. Cryst. 2017. V. 50. P. 430–440.
- Dowty E.* Synneis reconsidered // Contrib. Miner. Petrol. 1980. V. 74. P. 75–84.
- Faul U.H., Fitz Gerald J.D.* Grain misorientations in partially molten olivine aggregates: an electron backscatter diffraction study // Phys. Chem. Miner. 1999. V. 26. P. 187–197.
- Fliervoet T.F., Drury M.R., Chopra P.N.* Crystallographic preferred orientations and misorientations in some olivine rocks deformed by diffusion or dislocation creep // Tectonophysics. 1999. V. 303. № 1–4. P. 1–27.
- Hea Y., Jonas J.* Representation of orientation relationships in Rodrigues–Frank space for any two classes of lattice // Journ. Appl. Cryst. 2007. V. 40. P. 559–569.
- Hunter R.H.* Texture development in cumulate rocks // Cathorn R.G. (ed.) Layered Intrusions. Developments in Petrology. 1996. V. 15. P. 77–101.
- Holness M.B., Nielsen T.F.D., Tegner C.* Textural Maturity of Cumulates: a Record of Chamber Filling, Liquidus Assemblage, Cooling Rate and Large-scale Convection in Mafic Layered Intrusions // Journal of Petrology. 2007. V. 48. P. 141–157.
- Holness M.B., Sides R., Prior D.J. et al.* The peridotite plugs of Rum: Crystal settling and fabric development in magma conduits // Lithos. 2012. V. 134/135. P. 23–40.
- Holness M.B., Stock M.J., Geist D.* Magma chambers versus mush zones: constraining the architecture of subvolcanic plumbing systems from microstructural analysis of crystalline enclaves // Phil. Trans. R. Soc. 2019. A 377: 20180006.
- Marquardt K., Rohrer G.S., Morales L. et al.* The most frequent interfaces in olivine aggregates: the GBCD and its importance for grain boundary related processes // Contrib. Miner. Petrol. 2015. V. 170(4):40.
- Morawiec A., Field A.P.* Rodrigues parameterization for orientation and misorientation distributions // Phil. Mag. (A). 1996. V. 73. P. 1113–1130.
- Nespolo M., Ferraris G.* The oriented attachment mechanism in a formation of twins – a survey // Europ. Journ. Miner. 2004. V. 16. P. 401–406.
- Randle V.* Special boundaries and grain boundary plane engineering // Scripta Materialia. 2006. V. 54 (6). P. 1011–1015.
- Schwindinger K.* Particle dynamics and aggregation of crystals in a magma chamber with application to Kilauea Iki olivines // Journ. Volc. Geotherm. Res. 1999. V. 88. P. 29–38.
- Thieme V., Demouchy S., Mainprice D. et al.* Stress evolution and associated microstructure during transient creep of olivine at 1000–1200 °C // Phys. Earth Planet. Inter. 2018. V. 278. P. 34–46.
- Welsch B., Faure F., Famin V. et al.* Dendritic crystallization: A single process for all the textures of olivine in basalts? // Journ. Petrol. 2013. V. 54. № 3. P. 539–574.
- Wheeler J., Mariani E., Piazzolo S. et al.* Quantitative analysis of EBSD data in rocks and other crystalline materials: investigation of strain induced recrystallisation and growth of new phases // Materials Science Forum. 2012. V. 715/716. P. 62–71.
- Wheeler J., Prior D.J., Jiang Z. et al.* The petrological significance of misorientations between grains // Contrib. Miner. Petrol. 2001. V. 141. P. 109–124.
- Yao Z., Qin K., Wang Q., Xue S.* Weak B-Type Olivine Fabric Induced by Fast Compaction of Crystal Mush in a Crustal Magma Reservoir // Journ. Geophys. Res. Solid Earth. 2019. V. 124. Is. 4. P. 3530–3556.