

О РАЗВИТИИ КОЛИЧЕСТВЕННОГО ТЕКСТУРНОГО АНАЛИЗА И ПРИМЕНЕНИИ ЕГО В РЕШЕНИИ ЗАДАЧ НАУК О ЗЕМЛЕ

*Т. И. Иванкина**, *З. Маттис*

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

ВВЕДЕНИЕ	665
ИСТОРИЯ СОЗДАНИЯ И РАЗВИТИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОГО АППАРАТА КОЛИЧЕСТВЕННОГО ТЕКСТУРНОГО АНАЛИЗА	667
Ориентации, G -пространство, текстурные компоненты, полюсные фигуры	667
ФРО — функция распределения ориентаций	670
Центральная проблема текстурного анализа	673
Эффект «призраков» и пути его коррекции	678
Графические представления ФРО	683
Стандартные распределения	687
Новые возможности определения ФРО по ориентациям отдельных зерен	690
Специфичность текстурного анализа, глобальные характеристики ФРО	697
Погрешности, новые разработки, программные системы	702
ПРИМЕНЕНИЕ ФРО ДЛЯ ОПИСАНИЯ СВОЙСТВ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ОБРАЗЦОВ И ИХ ИЗМЕНЕНИЙ	703
Классическая проблема — упругие свойства однофазного материала	704
Многофазные образцы	713
Анализ остаточных деформаций и напряжений	715
ПРИМЕНЕНИЕ НЕЙТРОНОГРАФИЧЕСКОГО ТЕКСТУРНОГО АНАЛИЗА В РЕШЕНИИ ЗАДАЧ ГЕОЛОГИИ И ГЕОФИЗИКИ	722
Экспериментальный текстурный анализ в геонауках	722
Связь между кристаллографическими текстурами и физическими свойствами горных пород мантии	726

*E-mail: iti@nf.jinr.ru

Типизация текстур кварца в образцах кварцсодержащих горных пород	732
Деформационные процессы и эволюция литосферы по данным о текстурах глубинных и приповерхностных горных пород	739
Кристаллографические текстуры горных пород как фактор, определяющий сейсмическую анизотропию, и источник сейсмической неоднородности литосферы	749
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	757
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	758

О РАЗВИТИИ КОЛИЧЕСТВЕННОГО ТЕКСТУРНОГО АНАЛИЗА И ПРИМЕНЕНИИ ЕГО В РЕШЕНИИ ЗАДАЧ НАУК О ЗЕМЛЕ

*Т. И. Иванкина**, *З. Маттис*

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

Показана история развития текстурного анализа (ТА), начиная с первых экспериментальных и теоретических попыток установления и характеристики преимущественных ориентаций кристаллических решеток зерен в реальных поликристаллических образцах. Рассматриваются этапы становления теоретического аппарата ТА, его основные элементы, а также применение его возможностей для количественного описания анизотропных свойств текстурированных образцов. Обращено внимание и на соответствующие реальные ограничения и затруднения. Применение аппарата количественного ТА демонстрируется на примере описания упругих свойств текстурированных материалов вплоть до многофазных образцов, содержащих поры и трещины. Широкий спектр ТА включает анализ на основе рассеяния нейтронов, который получил эффективное развитие в Лаборатории нейтронной физики им. И.М. Франка. С помощью современных нейтронных дифрактометров, к которым относится установка СКАТ на импульсном реакторе ИБР-2, существует практическая возможность определить объемные кристаллографические текстуры однофазных и многофазных материалов, что особенно актуально при исследовании образцов природных горных пород. Показаны примеры применения данных нейтронного рассеяния для количественного ТА в комплексе с другими физическими и петрологическими методами при решении фундаментальных проблем геологии и геофизики на основе анализа структуры и свойств вещества литосферы Земли. Статья содержит детальный перечень оригинальных работ по развитию ТА, публикаций и монографий обзорного характера, а также данные о наиболее распространенных системах компьютерных программ ТА.

The development of texture analysis (TA) is exhibited, starting with the first experimental and theoretical attempts to specify and to characterize the lattice preferred orientations of grains in real polycrystalline samples. The stages of the elaboration of the theoretical apparatus of TA are considered, as well as its basic elements and possibilities to describe the anisotropic properties of textured samples. The corresponding real limitations and difficulties are also mentioned. The application of the apparatus of quantitative TA is demonstrated by the example of the description of the elastic properties

*E-mail: iti@nf.jinr.ru

of textured materials, up to multiphase samples containing pores and cracks. The wide spectrum of TA includes the analysis on the basis of neutron scattering, which obtained an effective development in the Frank Laboratory of Neutron Physics as well. By means of modern neutron diffractometers, like the SKAT spectrometer at the pulsed reactor IBR-2, it is in practice possible to determine the bulk crystallographic textures of monophasic and multiphase materials, which is of special interest for the investigation of natural rock samples. By examples it is shown how results of quantitative TA based on neutron scattering were used in combination with some other physical and petrological methods in order to resolve some fundamental problems of geology and geophysics relying on the analysis of the structure and properties of the matter of the Earth lithosphere. The review contains a detailed list of references of original papers concerning the development of TA, as well as of review publications and monographs, and data on the most popular TA-related software.

PACS: 61.12; 91.35

Посвящается памяти профессора А. Н. Никитина

ВВЕДЕНИЕ

Текстурный анализ, возникший в начале XX в., имеет уже богатую историю и огромное поле применения в естественных и прикладных науках вплоть до использования его в промышленности в целях контроля качества продукции в автоматизированных производственных линиях. Активно занимающиеся текстурным анализом работники научных и инженерных направлений исчисляются уже сотнями. Они работают в университетских, государственных и крупных промышленных лабораториях. Имеются «текстурные» секции научных обществ, организующие национальные и международные конференции. Начиная с 60-х годов прошлого столетия каждые три года проводится центральная международная конференция (ICOTOM) по развитию и применению текстурного анализа с многотомной документацией представленных работ.

Первые статьи обзорного характера, в частности в ЭЧАЯ [1], о состоянии дел и результатах, полученных в российских научных институтах в данной области, относятся к 80–90-м годам XX в. За прошедшее время текстурный анализ получил свое развитие на основе эксперимента по нейтронному рассеянию. Особенно плодотворно нейтронографический текстурный анализ применялся в ОИЯИ для решения фундаментальных задач геологии и геофизики. Причем для анализа экспериментальных данных использовались современные алгоритмы и характеристики теоретического аппарата текстурного анализа.

Предлагаемый обзор, посвященный развитию текстурного анализа, может охватить только ограниченное число тем, выбор которых естественно

определяется задачей написания, практическим опытом и квалификацией авторов. К сожалению, основной «идейный лидер» и прекрасный организатор многочисленных направлений научного сотрудничества, которому посвящена данная статья, профессор А. Н. Никитин, возглавлявший в последние годы жизни группу нейтронных геофизических исследований в ЛНФ ОИЯИ, смог участвовать в этой работе лишь в начальной ее стадии. Лучшими качествами А. Н. Никитина как ученого являлись чувство ответственности и постоянный интерес к развитию текстурного анализа. Он умел формулировать качественно новые задачи перед «теоретиками», например, моделирование упругих свойств многофазных пористых текстурированных материалов. В то же время стремился к использованию новых экспериментальных возможностей, комбинируя нейтронную дифракцию с акустическими измерениями поликристаллических материалов в условиях высоких температур и давлений. Представляемый обзор является как обобщением тех результатов по применению текстурного анализа в науках о Земле, которые были получены под руководством А. Н. Никитина, так и данью его памяти.

Кажущаяся на первый взгляд слишком «неоднородной» структура обзора вполне оправданна.

Текстурный анализ на качественном уровне обладает относительной простотой и наглядностью и создает ценную дополнительную информацию в такой описательной области, как структурная геология. Но на этом уровне следует ограничить себя лишь качественными (относительными) сравнениями и оставаться в узких рамках однотипных материалов или процессов. Для простоты понимания можно привести сравнение с температурой. Если рассуждать о скорости реакции или интенсивности тепловыделения в двух похожих экспериментах, то знание абсолютного значения температуры (в любых единицах измерения) не требуется. Для сравнения достаточно использовать такие термины, как выше–ниже, скорее–медленнее, во столько-то раз.

В отличие от качественного текстурного анализа количественный текстурный анализ не отличается от привычных количественных теорий. Здесь имеются свои единицы измерения, «законы сохранения» и т. п. Описываемые величины имеют вероятностный характер, и связанные с текстурой ориентационные переменные относятся к пространству, отличающемуся от обычного окружающего нас мира. Поэтому математический аппарат текстурного анализа, включая оценки точности, весьма специфичен и непрост. Пренебрегая этим, полагаясь на обычный опыт, можно прийти к заключениям, довольно далеким от истины. С другой стороны, можно постараться представить все рассматриваемые количественные отношения в наглядном виде без использования изоощренных математических терминов и символических операций. В итоге вычислительные алгоритмы количественного текстурного анализа оперируют с вполне интерпретируемыми числами на входе и на выходе. Желая передать читателю именно эту сторону количественного текстурного

анализа и часть своего опыта, авторы выделили в статье самостоятельную теоретическую часть.

Что касается термина текстура, то следует заметить, что первоначально латинское слово *textura* употреблялось в XVIII в. в текстильной области для обозначения качества, тонкости или геометрических параметров ткани. В переносном смысле этот термин применяется сейчас в разных областях культуры, науки и техники, таких как музыка, графология, виноделие, древесная и бумажная промышленность, компьютерная графика, геология, почвоведение, кристаллография, психология и т. д.

В данном обзоре этот термин (точнее, кристаллографическая текстура) относится к поликристаллическим веществам и служит для описания ориентаций кристаллических решеток структурных элементов («зерен») относительно фиксированной координатной системы образца. Бестектурный случай соответствует равновероятному распределению зерен по всем возможным ориентациям. Соответственно, образец оказывается *текстурированным*, если его монокристаллические структурные элементы неравномерно ориентированы, т. е. наблюдается распределение *преимущественных* (preferred) ориентаций. К основным задачам текстурного анализа относятся экспериментальное определение, описание, анализ и интерпретация этого распределения, а также установление взаимосвязи между физическими свойствами кристаллитов, образующих текстурированный образец, и макроскопическими характеристиками образца.

Кристаллографическая текстура — это один из основополагающих факторов, влияющих на анизотропию физических свойств металлов и сплавов, керамик, современных композитных материалов, полимеров, а также горных пород. В предлагаемом обзоре основным объектом применения количественного текстурного анализа являются горные породы и породообразующие минералы. Показаны примеры использования данных нейтронографического текстурного анализа в комплексе с другими физическими и петрофизическими методами для решения фундаментальных проблем геологии и геофизики.

1. ИСТОРИЯ СОЗДАНИЯ И РАЗВИТИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОГО АППАРАТА КОЛИЧЕСТВЕННОГО ТЕКСТУРНОГО АНАЛИЗА

1.1. Ориентации, G -пространство, текстурные компоненты, полюсные фигуры. Основным элементом в текстурном анализе является понятие *ориентация*. Две координатные системы K_A и K_B (декартовы, правовинтовые, $\mathbf{X} \times \mathbf{Y} = \mathbf{Z}$) будут равноориентированными, если их оси параллельны, т. е. $(\mathbf{X}_A \parallel \mathbf{X}_B, \mathbf{Y}_A \parallel \mathbf{Y}_B, \mathbf{Z}_A \parallel \mathbf{Z}_B)$. В противном случае для того, чтобы K_A была параллельна K_B , K_A необходимо каким-то образом повернуть. В общем случае это можно делать однозначно тремя предписанными поворотами во-

круг координатных осей K_A (углы Эйлера $\{\alpha, \beta, \gamma\} \equiv g$; $0 \leq \alpha, \gamma \leq 2\pi$, $0 \leq \beta \leq \pi$) или одним поворотом K_A вокруг определенной оси \mathbf{n} , описываемой сферическими углами $\mathbf{n} = (\varphi, \vartheta)$, на угол ω : $[\mathbf{n}; \omega] = g$. В этом смысле K_B обладает ориентацией g по отношению к K_A . Поскольку рассматриваемые повороты цикличны (например, $\omega + 360^\circ \equiv \omega$), все возможные g лежат в конечном пространстве ориентаций, или G -пространстве ($g \in G$). Кроме своей конечности G -пространство обладает нетривиальной неевклидовой метрикой:

$$\frac{1}{8\pi^2} \int_G dg = 1, \quad dg = d\alpha \sin \beta d\beta d\gamma = 4 \sin \vartheta d\vartheta d\varphi \sin^2 \frac{\omega}{2} d\omega. \quad (1)$$

Уже из этого следует, что математический аппарат и работа с понятиями, связанными с ориентациями, могут существенно отличаться от привычной практики описания объектов и явлений в бесконечном евклидовом пространстве.

Начиная с Эйлера (теория волчков), и далее в девятнадцатом столетии теоретический аппарат для работы в G -пространстве был развит математиками довольно обстоятельно (например, сферические функции $Y_{l,m}(\mathbf{n})$ и обобщенные сферические функции $D_{m,n}^l(g)$). Большой скачок в развитии и применении этого аппарата произошел в первой половине двадцатого века с появлением квантовой механики и с описанием объектов атомной и ядерной физики и их ориентационных свойств [2, 3].

В текстурном анализе в роли K_B выступает *кристаллическая* координатная система, соотнесенная по определенному правилу с кристаллической решеткой монокристалла (зерна) данной фазы. K_A представляет собой *координатную систему образца*, прикрепленную по усмотрению аналитика к поликристаллическому образцу с учетом, например, геометрии изготовления, координат места отбора образца или ориентировки его по отношению к данному спектрометру.

На пороге XX в. появились первые экспериментальные работы по определению ориентаций зерен в шлифах горных пород оптико-поляризационными методами [4, 5]. При анализе набора ориентаций g_n ($n = 1, 2, \dots, N$) были обнаружены области в G -пространстве с гораздо большим числом попаданий, чем в остальных областях. Существование таких *преимущественных ориентаций* характеризовалось словом *текстура*.

Задавая характерное направление \mathbf{y}_j в системе координат образца K_A и измеряя распределение ориентировок кристаллических направлений $\mathbf{h}_i = (hkl)_i$ на (*полюсной*) поверхности единичной сферы вокруг K_A , можно построить *полюсные фигуры* $P_{\mathbf{h}_i}(\mathbf{y}_j) \rightarrow P_{\mathbf{h}_i}(\mathbf{y})$. Они являются наиболее употребляемым инструментом первичного качественного анализа текстурированного образца. Области большей концентрации ориентаций в G -пространстве ото-

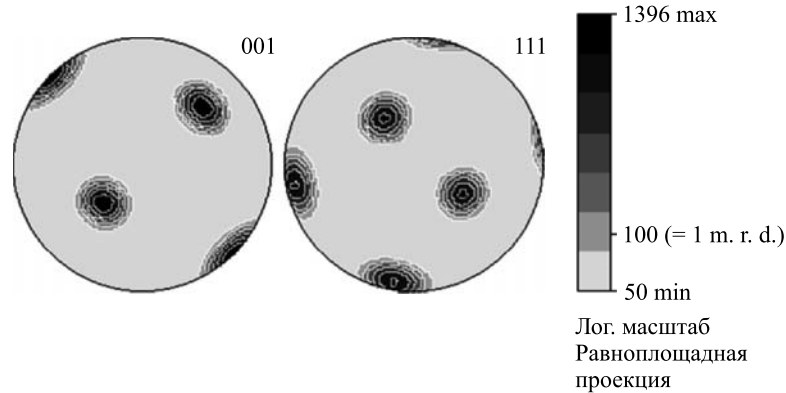


Рис. 1. Верхние полусферы двух полюсных фигур $P_{\mathbf{h}}(\mathbf{y})$ ($\mathbf{h} = (hkl) = (\varphi_{\mathbf{h}}, \vartheta_{\mathbf{h}})$), относительно K_B для направлений $\mathbf{h}_1 = (001) = (0^\circ, 0^\circ)$ и $\mathbf{h}_2 = (111) = (45^\circ, 54,74^\circ)$ кубических кристаллов, ориентированных своими Z_B -осями вокруг направления $\mathbf{y} = (\varphi_{\mathbf{y}}, \vartheta_{\mathbf{y}}) = (45^\circ, 54,74^\circ)$, заданного в координатной системе образца K_A . Таким образом, преимущественные ориентации в G -пространстве будут находиться вблизи $g_0 = \{\alpha_0, \beta_0, \gamma_0\} = \{45^\circ, 54,74^\circ, 0^\circ\}$. Вследствие кубической симметрии кристаллов в G -пространстве будут существовать 24 эквивалентных «острова с повышенной интенсивностью». Для кубических кристаллов имеются шесть физически эквивалентных Z_B -осей и восемь направлений (111) их углов. Поэтому на полных полюсных сферах можно соответственно увидеть шесть или восемь «островов с повышенной интенсивностью». Знания их позиций достаточно для определения искомой ориентации $g_0 = \{\alpha_0, \beta_0, \gamma_0\}$. Интенсивность на полюсных фигурах показана в единицах, кратных хаотическому распределению (multiply random distribution, m. r. d.)

бражаются на полюсных фигурах в виде «островов» повышенной интенсивности. Комбинируя несколько полюсных фигур и картину известного расположения осей $\mathbf{h}_i = (hkl)_i$ в K_B для данной кристаллической решетки (рис. 1), можно получить приближенное наглядное представление об ориентациях с повышенной интенсивностью в G -пространстве (*текстурные компоненты*).

Прямая полюсная фигура (ПФ) $P_{\mathbf{h}_i}(\mathbf{y})$ описывает распределение элементарных зерен с фиксированным направлением \mathbf{h}_i (заданным в K_B) относительно координатной системы образца K_A . В связи с анализом ориентационного характера определенных физических свойств (например, модуля Юнга), заметно зависящих от направления \mathbf{h} в данной кристаллической решетке, представляет интерес распределение этих осей. Поэтому *обратная полюсная фигура* $R_{\mathbf{y}_j}(\mathbf{h}_i)$ описывает частоту, с которой различные кристаллические направления \mathbf{h} в зернах «смотрят» в интересующем направлении \mathbf{y}_j в данном образце (рис. 2). Полюсные фигуры являются \mathbf{h}_i - или \mathbf{y}_j -специфическими двумерными проекциями распределения ориентаций элементарных зерен в

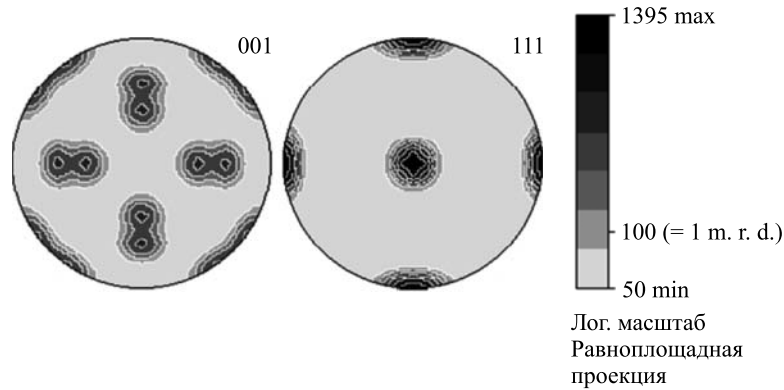


Рис. 2. Верхние полусферы двух обратных полюсных фигур $R_{\mathbf{y}}(\mathbf{h})$ ($\mathbf{y} = (x, y, z) = (\varphi_{\mathbf{y}}, \vartheta_{\mathbf{y}})$, относительно K_A) для направлений $\mathbf{y}_1 = (0, 0, 1) = (0^\circ, 0^\circ)$ и $\mathbf{y}_2 = (1, 1, 1) = (45^\circ, 54,74^\circ)$ кубических кристаллов, ориентированных их Z_B -осями вокруг направления $\mathbf{y} = (\varphi_{\mathbf{y}}, \vartheta_{\mathbf{y}}) = (45^\circ, 54,74^\circ)$, как на рис. 1. В этом случае направление \mathbf{y}_1 будет параллельно $\mathbf{h} = (\varphi_{\mathbf{h}}, \vartheta_{\mathbf{h}}) = (0^\circ, 35,24^\circ)$. Из-за кубической симметрии кристаллов имеются 24 таких физически эквивалентных направления \mathbf{h} , что приводит к существованию 24 «островов с повышенной интенсивностью» на всей сфере $\mathbf{y}_1 = (0, 0, 1)$ -й обратной полюсной фигуры $R_{\mathbf{y}}(\mathbf{h})$. Для $\mathbf{y}_2 = (1, 1, 1)$ имеем $\mathbf{y}_2 \parallel \mathbf{h} = (001)$, что соответствует существованию только шести островов на всей сфере \mathbf{y}_2 -й обратной полюсной фигуры

трехмерном G -пространстве. Математическая связь этих понятий будет рассмотрена ниже. В данном месте следует только подчеркнуть, что $P_{\mathbf{h}}(\mathbf{y})$ и $R_{\mathbf{y}}(\mathbf{h})$ описывают один и тот же объект с разных точек зрения и что в количественном отношении имеется равенство $P_{\mathbf{h}_i}(\mathbf{y}_j) = R_{\mathbf{y}_j}(\mathbf{h}_i)$. В этом смысле более последовательным, но менее употребляемым на практике, является понятие *функции распределения осей A* [6]:

$$A(\mathbf{h}, \mathbf{y}) = P_{\mathbf{h}}(\mathbf{y}) = R_{\mathbf{y}}(\mathbf{h}). \quad (2)$$

1.2. ФРО — функция распределения ориентаций. С открытием рентгеновских лучей появилась возможность гораздо эффективнее определять полюсные фигуры дифракционным путем, поскольку длина волны излучения имеет порядок межплоскостных расстояний $d(hkl)$ в кристаллической решетке данной фазы образца.

Хотя рентгеновские лучи проникают в образец только на сравнительно малую глубину от поверхности, тем не менее число охваченных зерен (в мелкозернистых образцах) выросло на несколько порядков по сравнению с оптико-поляризационным методом. Используя уравнение Брэгга–Вульфа

$$\lambda = 2d(hkl) \sin \theta, \quad (3)$$

для конкретной длины волны λ и угла рассеяния θ детекторный сигнал будет прямо пропорционален значению $\mathbf{h}_i = (hkl)_i$ -й полюсной фигуры в точке \mathbf{y}_j , зависящей от ориентации образца (см. рис. 3). Поворачивая образец в спектрометре, т. е. меняя \mathbf{y}_j не меняя геометрию пучков, можно в принципе определить $P_{\mathbf{h}_i}(\mathbf{y})$ на всей полюсной сфере (\mathbf{y}_j , $j = 1, 2, \dots, J$, $J \rightarrow \infty$). Как уже отмечалось, полюсные фигуры являются \mathbf{h}_i -специфическими проекциями распределения ориентаций зерен. Поэтому переход $J \rightarrow \infty$ эквивалентен возможности перехода от описания конечного числа K ориентаций g_k ($k = 1, 2, \dots, K$) к рассмотрению ($K \rightarrow \infty$) непрерывной функции распределения ориентаций этих зерен. ФРО $f(g)$ является плотностью вероятности, определяющей вероятность W , с которой элементарные зерна с ориентациями $g + dg$ встречаются в данном образце с объемом V :

$$W(g, dg) = \frac{1}{8\pi^2} f(g) dg = \frac{\Delta V(g, dg)}{V}, \quad \frac{1}{8\pi^2} \int_G f(g) dg = 1. \quad (4)$$

Особо следует подчеркнуть два момента:

— информация, содержащаяся в данной ФРО, относится, строго говоря, только к той области образца (gauge volume — GV), из которой была взята информация для определения ФРО;

— дифракционный эксперимент «видит» только сумму областей образца с ориентированными кристаллическими решетками, соответствующими правилу (3).

Поэтому ФРО (4) явно не зависит от пространственных параметров \mathbf{r} в образце и в этом смысле ничего «не знает» о структуре зерен в образце и их размерах. Для структур с примерно одинаковыми по размерам и форме зернами под элементарным зерном можно эвристически понимать настоящие зерна. В противном случае для статистических оценок следует рассматривать некое эквивалентное усредненное зерно или даже элементарную кристаллическую ячейку.

Хотя первые текстурные анализы применялись к геологическим образцам, новые дифракционные возможности долгое время оставались малоинтересными для геологии из-за крупнозернистого характера образцов. Зато в материаловедении и особенно в металловедении, где рассматриваются образцы (например, Fe, Cu, Al, Ni) с мелкозернистыми кристаллитами кубической симметрии (максимально упрощающей наглядность рассмотрения), развитие специальных текстурных рентгеновских спектрометров имело революционный характер. Уже к концу 40-х и началу 50-х годов прошлого столетия был накоплен богатый опыт в описании металлических образцов с помощью текстурных компонент [7]. Все это основывалось практически только на анализе полюсных фигур. Полученные же ФРО фигурировали лишь вербально либо применялись для оценки свойств поликристаллов путем арифметиче-

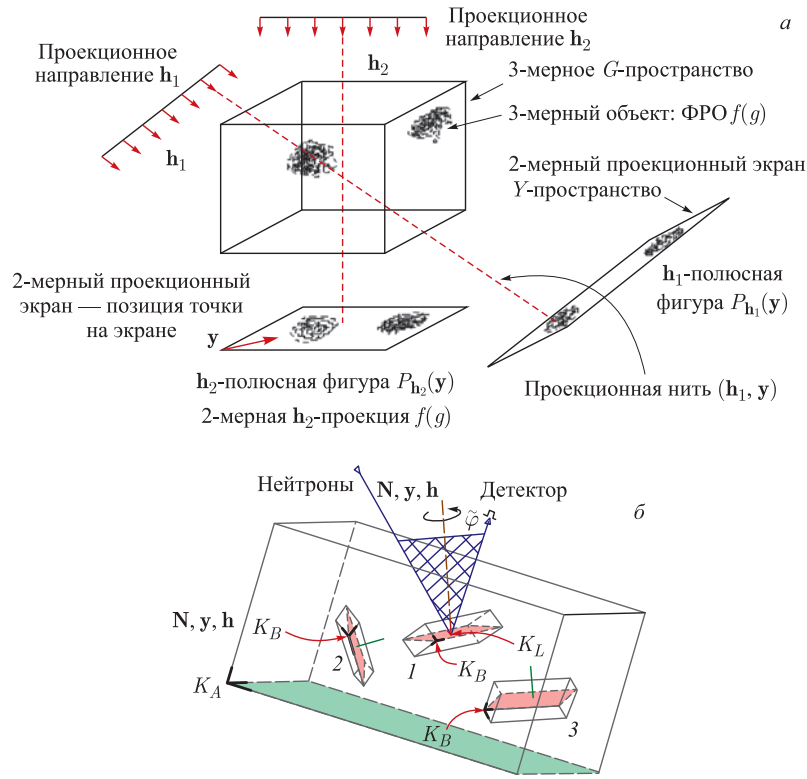


Рис. 3. *a*) Упрощенное схематическое изображение полюсной фигуры как h_i -специфической двумерной проекции ФРО $f(g)$, заданной в трехмерном ориентационном пространстве с соответствующими проекционными нитями. Наблюдается аналог с типичной задачей томографии — восстановлением трехмерного объекта из его двумерных проекций. *б*) Дифракция, наблюдаемая на поликристаллическом образце. K_A — координатная система образца. Кристалл 1 и кристалл 3 находятся в положении отражения для выбранного типа кристаллических плоскостей с нормалью h (параллельно вектору рассеяния N) и межплоскостным расстоянием $d(h)$, определяемым соотношением (3). Интенсивность детекторного сигнала пропорциональна значению полюсной фигуры $P_h(y)$. Она суммирует все кристаллы, находящиеся в положении отражения, но обладающие, возможно, отличающимися ориентациями. Так, например, все кристаллы с ориентациями, которые отличаются от g_1 вращением кристалла 1 вокруг h на угол $\tilde{\varphi}$, также будут находиться в положении отражения. Ориентировке кристалла 3 соответствует $\tilde{\varphi} = 180^\circ$. Физически эквивалентное положение изображенной на рисунке системы координат K_B (в конечном итоге определяющее ориентацию g_3) является следствием орторомбической кристаллической симметрии рассматриваемого образца

ского усреднения ориентационных зависимостей $E(g)$ физических свойств зерен:

$$\bar{E}^a = \frac{1}{8\pi^2} \int_G E(g) f(g) dg. \quad (5)$$

При этом рассматривались лишь простейший случай изотропии ($f(g) \equiv 1$) или модельные *волокнистые* (fiber) компоненты одномерной структуры в G -пространстве.

1.3. Центральная проблема текстурного анализа. Качественно новый этап теоретического анализа начался в 60-х годах прошлого столетия в связи с представлением как ФРО, так и ПФ с помощью ортогональных сферических функций (*гармонический анализ* или *фурье-анализ*) [8–10]

$$f(g) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m,n=-l}^l C_{m,n}^l D_{m,n}^l(g^{-1}), \quad (6)$$

$$P_{\mathbf{h}_i}(\mathbf{y}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m,n=-l}^l F_n^l(\mathbf{h}_i) Y_{l,n}(\mathbf{y}). \quad (7)$$

В связи с этим появилась возможность приближенно (поскольку на практике суммы по l необходимо обрывать при $l = L$) восстановить ФРО $f(g)$ из ПФ. Полусные фигуры являются двумерными проекциями ФРО с \mathbf{h}_i -, у-специфическими проекционными нитями g_t (t — thread), пересекающими G -пространство (рис. 3, *a*). Как следует из рис. 3, такая нить g_t с параметром $\tilde{\varphi} = 0-2\pi$ вдоль ее длины содержит g , отвечающие требованию, чтобы направление \mathbf{h}_i , заданное в K_B (кристаллит), было параллельно направлению \mathbf{y} , заданному в K_A (образец). Соответствующее выражение для g_t имеет вид ($\mathbf{y} = (\varphi, \vartheta)$, $\mathbf{h}_i = (\varphi_i, \vartheta_i)$)

$$g_t = g_t(\mathbf{h}_i, \mathbf{y}, \tilde{\varphi}) = \{\varphi_i, \vartheta_i, \tilde{\varphi}\}^{-1} \{\varphi, \vartheta, 0\} = \{\mathbf{h}_i, \tilde{\varphi}\}^{-1} \{\mathbf{y}, 0\}, \quad \tilde{\varphi} = 0-2\pi. \quad (8)$$

Таким образом, центральная задача текстурного анализа формулируется как интегральное уравнение типа уравнения Фредгольма для определения ФРО $f(g)$ по проекциям $P_{\mathbf{h}_i}(\mathbf{y})$ [11]:

$$P_{\mathbf{h}_i}(\mathbf{y}) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(\{\mathbf{h}_i, \tilde{\varphi}\}^{-1} \{\mathbf{y}, 0\}) d\tilde{\varphi}. \quad (9)$$

При этом (при наличии кристаллической симметрии) в (9) следует еще учесть усреднение по всем физически эквивалентным \mathbf{h}_i .

Подставляя (6) в (9) и используя соотношение (см. (7))

$$F_n^l(\mathbf{h}_i) \equiv \int_Y P_{\mathbf{h}_i}(\mathbf{y}) Y_{l,n}^*(\mathbf{y}) d\mathbf{y}, \quad d\mathbf{y} = \sin \vartheta_y d\vartheta_y d\varphi_y, \quad (10)$$

получаем (отдельно для каждого $l!$) систему алгебраических уравнений

$$F_n^l(\mathbf{h}_i) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l C_{m,n}^l Y_{l,m}^*(\mathbf{h}_i) \quad (11)$$

для искоемых коэффициентов $C_{m,n}^l$ разложения ФРО, определяемых из F -коэффициентов экспериментальных полюсных фигур [12].

Разработке метода численной реализации решения и его крайне успешному применению (в основном для поликристаллов с кубической кристаллической симметрией) были посвящены 60-е годы XX в. Параллельно шли работы по упрощению вычислений, так как, например, число $(2l+1)^2$ неизвестных коэффициентов $C_{m,n}^l$ можно заметно уменьшить, учитывая как кристаллическую симметрию зерен, так и предполагаемую статистическую симметрию образца, применяя теорию групп и симметризованные сферические функции. Кроме того, в последующие годы удалось сформулировать аппарат, описывающий «реальные» физические объекты при помощи реальных (не комплексных) сферических функций $\bar{Y}_{l,\bar{m}}^l, \bar{D}_{\bar{m},\bar{n}}^l$. Удалось также найти решение центральной задачи (9), по существу «томографического характера» (см. рис. 3, а), в замкнутом аналитическом виде, безо всяких рядов [11, 13]. Для этого, обращая (11) и используя (10), имеем

$$C_{m,n}^l = \frac{2l+1}{4\pi} \int_H F_n^l(\mathbf{h}) Y_m^l(\mathbf{h}) d\mathbf{h} = \frac{2l+1}{4\pi} \int_H \int_Y P_{\mathbf{h}}(\mathbf{y}) Y_{l,m}(\mathbf{h}) Y_{l,n}^*(\mathbf{y}) d\mathbf{h} d\mathbf{y}. \quad (12)$$

Подставляя последнее выражение в (6), при помощи аппарата обобщенных функций можно просуммировать все суммы по l, m и n и получить результат в интерпретируемой форме:

$$f(g) = f_1(g) + f_2(g) = \frac{1}{4\pi} \int_H f_1(\mathbf{h}, g) d\mathbf{h} + \frac{1}{4\pi} \int_H f_2(\mathbf{h}, g) d\mathbf{h}, \quad (13)$$

$$f_1(\mathbf{h}, g) = P_{\mathbf{h}}(g^{-1} \cdot \mathbf{h}), \quad (14)$$

$$f_2(\mathbf{h}, g) = \frac{1}{4\pi} \int (R(\mathbf{h}; g; 1) - R(\mathbf{h}; g; \cos \vartheta')) \frac{\cos(\vartheta'/2)}{\sin^2(\vartheta'/2)} d\vartheta', \quad (15)$$

$$R(\mathbf{h}; g; \cos \vartheta') = \int_0^{2\pi} P_{\mathbf{h}}(\{g^{-1} \cdot \mathbf{h}, 0\}^{-1} \cdot \mathbf{y}') d\varphi'. \quad (16)$$

Как видно, точному решению необходимы абсолютно все полюсные фигуры (интеграл по \mathbf{h}) и значения полюсных фигур на всей полюсной сфере.

Удивительным казалось, что для получения трехмерного объекта $f(g)$ требуется четырехмерный объем $(\varphi_{\mathbf{h}}, \vartheta_{\mathbf{h}}; \varphi_{\mathbf{y}}, \vartheta_{\mathbf{y}})$ данных. Причина в том, что природа дифракционного эксперимента предписывает формулировку центральной задачи (9) именно на языке полюсных фигур. Противоречие (трехмерный объект — четырехмерный объем данных) снимается благодаря существованию связи между переменными \mathbf{h} и \mathbf{y} в функции распределения осей $A(\mathbf{h}, \mathbf{y})$ (2):

$$\Delta_{\mathbf{h}}A(\mathbf{h}, \mathbf{y}) = \Delta_{\mathbf{y}}A(\mathbf{h}, \mathbf{y}), \quad (17)$$

которая следует непосредственно из представления

$$A(\mathbf{h}, \mathbf{y}) = P_{\mathbf{h}}(\mathbf{y}) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{4\pi}{l+1} \sum_{m,n=-l}^l C_{m,n}^l Y_{l,m}^*(\mathbf{h}) Y_{l,n}(\mathbf{y}) \quad (18)$$

и свойств сферических функций [2] ($\Delta_{\mathbf{r}}$ — сферическая часть оператора Лапласа)

$$\Delta_{\mathbf{r}}Y_{l,m}(\mathbf{r}) = -l(l+1)Y_{l,m}(\mathbf{r}). \quad (19)$$

Были предприняты математически заманчивые попытки [14] использовать соотношение (17) для нахождения значений полюсных фигур в областях \mathbf{y} , не измеренных на $P_{\mathbf{h}_i}(\mathbf{y})$, основываясь на данных других полюсных фигур $P_{\mathbf{h}'_i}(\mathbf{y})$ и минуя путь через восстановление ФРО*. Пока эти попытки не привели к практическим результатам. При формальном переходе к иным, чем $A(\mathbf{h}, \mathbf{y})$, распределениям и к другим переменным возникают трудности с сохранением дискретных симметрических свойств полюсных фигур, вызванных симметрией кристаллической решетки или образца [16]. Кроме того, из томографической природы (9) полюсных фигур (проекционные нити (8), см. рис. 3, *a*) следует, что для того чтобы определить какое-то значение $P_{\mathbf{h}_i}(\mathbf{y})$, для любой точки соответствующей нити должны быть известны значения $f(g)$. А для этого требуется, чтобы в каждой такой точке G -пространства пересекались как минимум две нити от других полюсных фигур. Абстрактно подтвердить это обстоятельство в случае неизмеренных областей на этих полюсных фигурах крайне затруднительно.

Были также развиты «прямые» методы решения центральной задачи (9) с явным или косвенным использованием ее томографической природы. Теперь эти методы чаще всего применяются на практике. С вводом дискретной

*Впервые уравнение (17) было опубликовано Т.И.Савеловой в 1982 г. [15]. В это же время оно обсуждалось на текстурных встречах в Университете г. Метц (Франция) и в дискуссиях с Ф. Коксом (Лос-Аламос, США) и с З. Маттисом (автором данного обзора). Подробности см. в [16].

(клеточной) структуры (g_k) в G -пространстве и на полюсной сфере ($y_j \in Y$) интегральное уравнение (9) превращается в систему линейных алгебраических уравнений довольно большого, но практически разрешимого порядка.

С помощью так называемого векторного метода [17] эта система (возможно, переопределенная и из-за ошибочных экспериментальных значений $P_{h_i}(y_j)$ некорректная) решается итерационным путем. При этом значение ФРО в k -й клетке $f_k = f(g_k)$ приравняется нулю, если оно отрицательное для данного итерационного шага.

Другой «прямой» подход, многочисленные варианты которого опираются на оригинальный WIMV-алгоритм (кодировка фамилий авторов главных составляющих комплексного алгоритма: Williams, Imhof, Matthies, Vinel) [18–21], связан со структурой решения центральной задачи (13). Значение полюсной фигуры $P_{h_i}(y)$ в точке y_j является «суммой» $(\int_0^{2\pi} d\tilde{\varphi})$ всех значений $f(g)$ вдоль проекционной нити (8) $g_t = g_t(\mathbf{h}_i, y_j, \tilde{\varphi})$.

«Размазывая» интенсивность $P_{h_i}(y_j)$ равномерно по всей этой нити обратно в G -пространство (back projection) и делая это для всех y_j , получаем $f_1(\mathbf{h}_i, g)$, которое является некоторым приближением искомой ФРО с точки зрения \mathbf{h}_i -й полюсной фигуры.

Замечательны три момента.

- Собирая согласно (9) размазанные интенсивности, входящие в $f_1(\mathbf{h}_i, g)$, обратно, исходную экспериментальную полюсную фигуру $P_{h_i}(y)$ можно воспроизвести идентично. Однако рассчитанная при помощи $f_1(\mathbf{h}_i, g)$ \mathbf{h}_i -я ($\mathbf{h}_i \neq \mathbf{h}_{i'}$) полюсная фигура $P_{h_{i'}}(y, \mathbf{h}_i)$ будет отличаться от истинной $P_{h_{i'}}(y)$, базирующейся на точной ФРО $f(g)$. Попыткой уменьшить эти разности служит усреднение по всем проекциям $(\int_H d\mathbf{h})$, приводящее к приближению $f_1(g)$ (13). Роль более сложного слагаемого $f_2(g)$ состоит в такой коррекции $f_1(g)$, чтобы восстановленная ФРО $f(g) = f_1(g) + f_2(g)$ через (9) точно воспроизводила все проекции $P_{h_i}(y)$ истинной ФРО.

- Пусть полюсная фигура \mathbf{h}_i имеет нулевое значение в точке y_j^0 ($P_{h_i}(y_j^0) = 0$). Поскольку $f(g)$ (плотность вероятности) по определению больше либо равна нулю, все значения $f(g)$ вдоль всей нити $g_t(\mathbf{h}_i, y_j^0)$ должны быть в этом случае равны нулю — и это является абсолютно точным решением, не нуждающимся в дополнительной информации от других полюсных фигур. Таким образом, задача восстановления ФРО намного упрощается, если в полюсных фигурах имеются большие области с нулевыми или малыми значениями. Можно постараться максимально воспользоваться последним обстоятельством.

- Мешающим фактором при попытке использовать $f_2(g)$ для улучшения приближения $f_1(g)$ является знак минус в (15). Все интересующие нас величины $(P_{h_i}(y), f(g))$ чисто неотрицательные, и поэтому было бы желательно

найти такие математические алгоритмы, в которых отрицательные числа не могут появляться в принципе. Этого можно добиться, работая только с мультипликационными операциями, определяющими основную структуру итерационного WIMV-алгоритма:

$$f^{(n+1)}(g) = \left[\prod_{i=1}^I \frac{P_{\mathbf{h}_i}^{\text{exp}}(g^{-1}\mathbf{h}_i)}{P_{\mathbf{h}_i}^{(n)}(g^{-1}\mathbf{h}_i)} \right]^{1/I} f^{(n)}(g), \quad (20)$$

$$f^{(0)}(g) = \left[\prod_{i=1}^I P_{\mathbf{h}_i}^{\text{exp}}(g^{-1}\mathbf{h}_i) \right]^{1/I}. \quad (21)$$

Примечательно, что уже нулевое приближение приводит к точному решению для двух экстремальных случаев: для изотропного случая ($f(g) = 1$, $P_{\mathbf{h}}(\mathbf{y}) = 1 \rightarrow f^{(0)}(g) = 1 \equiv f(g)$) и для монокристалла с ориентацией g_0 ($f(g) = \partial(g - g_0)$, $P_{\mathbf{h}}(\mathbf{y}) = \partial(\mathbf{y} - g_0^{-1}\mathbf{h}) \rightarrow f^{(0)}(g) = \partial(g - g_0) \equiv f(g)$). Это благоприятное обстоятельство обеспечивает довольно быструю и стабильную сходимость алгоритма (20) при наличии экспериментальных данных хорошего качества.

Гармонический метод является очень продуктивным при абстрактно математическом анализе задач, связанных с текстурой. Однако этот метод качественно отличается от *прямого* подхода при численной реализации (9). Так, все входящие в (6), (18) величины могут быть отрицательными и даже комплексными. Более того, сферические функции с полиномиальным характером содержат члены с численным порядком, меняющимся в очень больших пределах, что может ухудшить достигаемую точность результатов численных расчетов на компьютере [22]. Ряды по l необходимо обрывать при некотором конечном $l = L$, что ограничивает восстановление острых текстурных компонент и может привести к областям в G -пространстве с бессмысленными отрицательными значениями $f^L(g)$.

Как система уравнений для $C_{m,n}^l$ ($l = 0, \dots, L$), следующая из (7) и (11):

$$P_{\mathbf{h}_i}(\mathbf{y}_j) = \sum_l^L \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m,n=-l}^l C_{m,n}^l Y_{l,m}^*(\mathbf{h}_i) Y_{l,n}(\mathbf{y}_j), \quad (22)$$

так и алгоритм (20), (21) (для клеточной структуры G - и Y -пространств) в принципе не нуждаются в *полных* полюсных фигурах (где \mathbf{y}_j перекрывают всю полюсную сферу). Важно только, чтобы за счет достаточно большого числа измеренных $A(\mathbf{h}_i, \mathbf{y}_j)$ -данных (см. (2)) в каждой g_k -клетке пересекались несколько $g_t(\mathbf{h}_i, \mathbf{y}_i)$ -нитей (8). В дифракционном эксперименте \mathbf{h} измеряемо лишь дискретным образом и для конечного числа рефлексов \mathbf{h}_i . Кроме того, полнота и непрерывный характер измеряемых ПФ (по \mathbf{y}_j) определяется

возможностями спектрометра. Это естественным образом (см. (13)–(16)) приводит к ограничению точности воспроизводимой ФРО.

Казалось, что с развитием экспериментальной техники и бурно растущими возможностями вычислительной техники последнее обстоятельство можно минимизировать и что в 80-х годах XX в. главным направлением разработок в текстурном анализе станет применение ФРО для описания свойств текстурированных поликристаллов. Однако авторы гармонического метода в самом начале его разработки [9, 10] ошиблись при учете последствий одной специфической инверсионной симметрии дифракционного эксперимента. Это имело далеко идущие последствия для центральной задачи восстановления ФРО. В конечном счете это привело к тому, что возможности применения гармонического метода на практике сильно уменьшились.

1.4. Эффект «призраков» и пути его коррекции. Пусть задана модельная ФРО ${}^M f(g)$ с известными характеристиками текстурных компонент (интенсивность, форма, острота). Соотношение

$${}^M C_{m,n}^l = (2l + 1) \int {}^M f(g) D_{m,n}^{l*}(g^{-1}) dg \quad (23)$$

позволяет определить фурье-коэффициенты ${}^M C_{m,n}^l$ для этой ФРО. Подставляя ${}^M C_{m,n}^l$ в (6) и обрывая сумму по l при $l = L$, можно сравнением ${}^M f(g)$ с ${}^M \tilde{f}^L(g)$ изучать влияние обрыва рядов в зависимости от L на качество воспроизводимых характеристик ФРО ${}^M f(g)$. Авторы гармонического метода безосновательно предполагали, что благодаря тому, что $F_{l,n}(\mathbf{h}) \equiv 0$ для нечетных l , что следует из инверсионной симметрии полюсных фигур \tilde{P} , определяемых в дифракционных экспериментах (normal scattering, Friedel's law):

$$\tilde{P}_{\mathbf{h}_i}(\mathbf{y}) = (P_{\mathbf{h}_i}(\mathbf{y}) + P_{-\mathbf{h}_i}(\mathbf{y}))/2 = \tilde{P}_{\mathbf{h}_i}(-\mathbf{y}) = \tilde{P}_{-\mathbf{h}_i}(\mathbf{y}) = \tilde{P}_{-\mathbf{h}_i}(-\mathbf{y}), \quad (24)$$

можно заключить, что и все ${}^M C_{m,n}^l$ с нечетными l в (6) также идентично равны нулю. Необходимость суммы в (24) очевидно следует из рис. 3, так как знак нормали отражающей плоскости не определен в данном эксперименте.

Для изучения качества воспроизведения ${}^M f(g)$ в зависимости от обрыва ряда по l при $l = L$ в (6) в предположении ${}^M C_{m,n}^l \equiv 0$ для нечетных l было использовано

$${}^M \tilde{f}^L(g) = \sum_{l=0(2)}^L \sum_{m,n=-l}^l {}^M C_{m,n}^l D_{m,n}^l(g^{-1}). \quad (25)$$

При этом оказалось, что в местах истинных модельных компонент в ${}^M f(g)$ возникали компоненты в ${}^M \tilde{f}^L(g)$, которые с ростом L проявляли себя все точнее (хотя с меньшей амплитудой). В то же время в местах, где в известных ${}^M f(g)$ имелись области малых интенсивностей, вдруг возникали ложные

пики («призраки» [23]), к тому же растущие с увеличением L . Кроме того, в ${}^M\tilde{f}^L(g)$ росли (по размерам и по глубине) и отрицательные области, принципиально отсутствующие в неотрицательном ${}^Mf(g) \geq 0$. Однако все эти противоречия устраняются, если добавить в (25) члены, содержащие ${}^MC_{m,n}^l$ с нечетными l , определенными по (23), т. е. все «призраки» исчезают с ростом L [24] (см. рис. 4).

Истинной причиной возникшего противоречия и является то [11], что группы симметрии, описывающие симметрию свойств кристаллических веществ, зависящих от направлений (как \mathbf{h} или \mathbf{y}), могут содержать элементы, связанные с инверсией. Однако симметрические свойства ориентаций описываются только группами вращения, тогда как инверсия превращает правовинтовую координатную систему в левовинтовую, противоречая начальному определению ориентации.

Аналізу причин и последствий «призрачных» эффектов была посвящена первая половина 80-х годов XX в. Ценным при этом было получение, как при выводе соотношения (13), аналитически замкнутого, интерпретируемого выражения для представления *редуцированной* ФРО $\tilde{f}(g)$ (часть ФРО, учитывающая в (6) только члены с четными l) на языке истинной ФРО $f(g)$ [11, 25]:

$$\begin{aligned} \tilde{f}(g) &= \frac{f(g)}{2} + f_G(g), \quad f_G(g) = f_\pi(g) + f_\Omega(g), \\ f_\pi(g) &= \int_0^\pi \sin \vartheta d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{f(g[\varphi, \vartheta; \omega = \pi])}{8\pi} \geq 0, \\ f_\Omega(g) &= \int_0^\pi d\omega \int_0^\pi \sin \vartheta d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi \operatorname{tg}^2\left(\frac{\omega}{2}\right) \frac{f(g[\varphi, \vartheta; \omega = \pi]) - f(g[\varphi, \vartheta; \omega])}{8\pi^2}. \end{aligned} \quad (26)$$

В конце концов пришлось мириться с тем фактом, что дифракционный эксперимент биден и «не видит» *нечетную часть* $\tilde{\tilde{f}}(g)$ реально существующей ФРО $f(g) = \tilde{f}(g) + \tilde{\tilde{f}}(g)$.

Можно ли минимизировать «призрачные» эффекты, т. е. каким-то образом восстановить потерянное $\tilde{\tilde{f}}(g)$? Очевидно, что это невозможно на основе только экспериментально измеряемых редуцированных полюсных фигур $\tilde{P}_{\mathbf{h}_i}(\mathbf{y})$. Нечетная часть ${}^M\tilde{\tilde{f}}(g)$ любой ${}^Mf(g)$ дает ${}^M\tilde{P}_{\mathbf{h}_i}(\mathbf{y}) \equiv 0$. Однако степень неопределенности искомой ${}^M\tilde{\tilde{f}}(g)$ можно уменьшить, потребовав выполнения условия неотрицательности физически разумной скорректированной ФРО ${}^Kf(g) \geq 0$.

В гармоническом аппарате, применяя условие неотрицательности к областям G -пространства с отрицательными значениями $\tilde{f}(g)$, можно сформули-

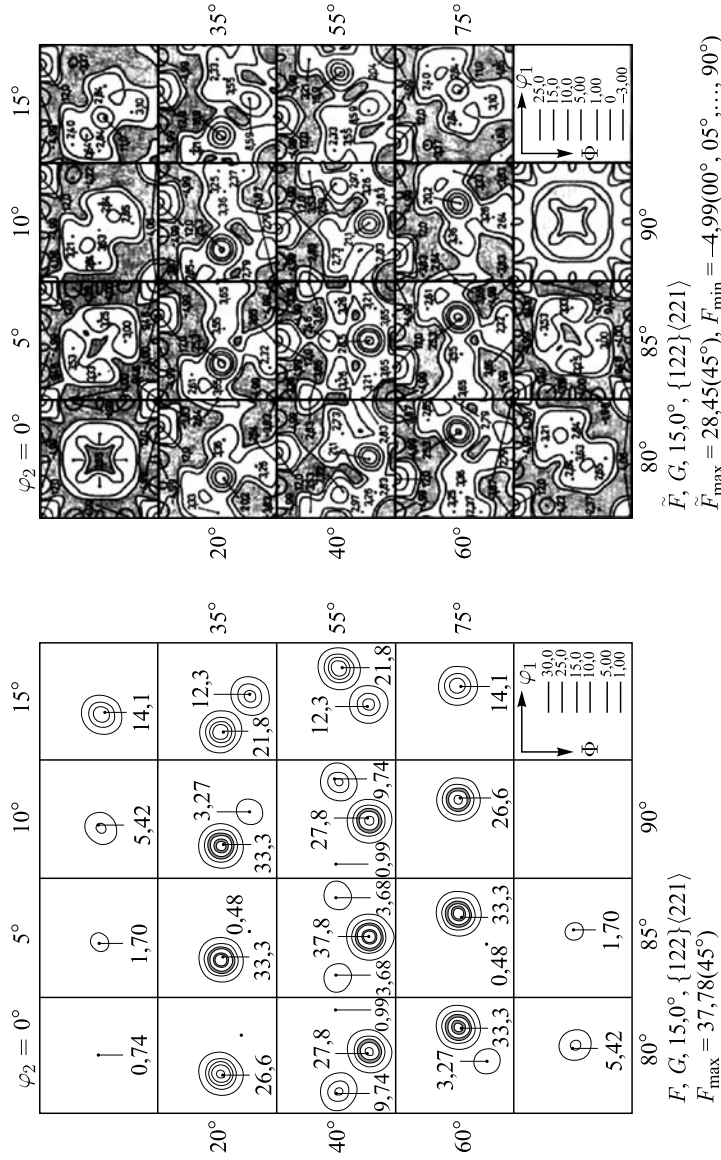


Рис. 4. Модельная ФРО (слева) $M f(g) \geq 0$ и ее редуцированная часть (справа) $M \tilde{f}(g)$ с затемненными отрицательными областями. Пример взят из [13]: гауссиан с центром в $g_0 = \{63,44^\circ, 41,19^\circ, 63,44^\circ\}$ и полушириной $b = 15^\circ$. Пример кубической кристаллической симметрии и орторомбической симметрии образца. Ориентации (углы Эйлера) даны в обозначении Бунте $(\varphi_1, \Phi, \varphi_2) = \{\alpha = \varphi_1 - \pi/2, \beta = \Phi, \gamma = \varphi_2 + \pi/2\}$. Показаны φ_2 -секции. Максимум $M f(g)$ в секции $\varphi_2 = 45^\circ$ заметно меньше, чем максимум $M \tilde{f}(g)$. Во всех секциях $M f(g)$ вблизи $\Phi = 0^\circ$ видны большие положительные «призраки» и физически бессмысленные отрицательные «ямы»

ровать схему приближенного итерационного определения (*нечетных*) $\tilde{C}_{m,n}^l$ на основе определяемых (*четных*) $\tilde{C}_{m,n}^l$ из экспериментальных $\tilde{P}_{h_i}(y)$ [26]. Усложняющим моментом является то, что на «призрачные» эффекты налагаются эффекты обрыва рядов при $l = L$ и разделить их нельзя.

Примечательно, что прямые методы, которые основываются на WIMV-алгоритме (см. (20), (21) с $P_{h_i}^{\text{exp}}(y) = \tilde{P}_h(y) \geq 0$), автоматически удовлетворяют условию неотрицательности ${}^K f(g)$. Есть и гибридные техники типа ${}^K f(g) = ({}^K F(g))^2 \geq 0$ [27] или ${}^K f(g) = \exp({}^K F(g)) \geq 0$ [28], когда ${}^K F(g)$ опять представляется гармоническими рядами. Трудности описания таким путем реально существующих нулей в ФРО очевидны.

Далее, требование ${}^K f(g) \geq 0$ не может служить опорным пунктом для коррекции призрачных эффектов, если уже исходное распределение $\hat{f}(g)$ само по себе неотрицательное. Такая ситуация возможна в случае высокого изотропного фона F рассматриваемой ФРО: $F \equiv \min f(g)$ ($0 \leq F \leq 1$). Классическим примером и критерием оценки способностей коррекционного метода служит восстановление так называемого Santa Fe-распределения [29] (см. рис. 5).

В каждом коррекционном методе используются (явным или неявным образом) некоторые *условные* элементы коррекции «призраков» в дополнение к обеспечению неотрицательности ${}^K f(g)$. Этим условием может быть, например, требование максимума энтропии ($E \sim \int_G \ln f(g)f(g) dg$), развитое в теории информации или классической томографии и применяемое в алгоритмах фрайбергской текстурной школы [30]. Коррекции аахен/краковской школы [31] или россендорфовского (последовательного WIMV) направления [21] связаны с эмпирически наблюдаемыми свойствами ФРО. Последние вытекали из анализа большого числа экспериментально исследованных текстурированных образцов, ФРО которых характеризуются наличием высокого фона с присутствием малого числа, но интенсивных текстурных компонент. *Компонентный метод* [32] дает возможность описать экспериментальные полюсные фигуры $\tilde{P}_{h_i}(y)$ путем нахождения параметров ограниченного набора текстурных компонент с использованием стандартных распределений (см. п. 1.6).

Общепринятым моментом во всех современных коррекционных методах наряду с требованием неотрицательности ФРО является учет и возможное поднятие фона в ${}^K f(g)$ (см., например, [33, 34]), которое с самого начала являлось частью WIMV-алгоритма [20]. В необходимости этого элемента в немалой степени убедило вышеупомянутое тестовое Santa Fe-распределение ${}^{\text{SF}} f(g)$ (рис. 5, а, б), очень чувствительное к «остаточным призракам», как на рис. 5, в. Если итерационно поднимать изотропную часть нормированной

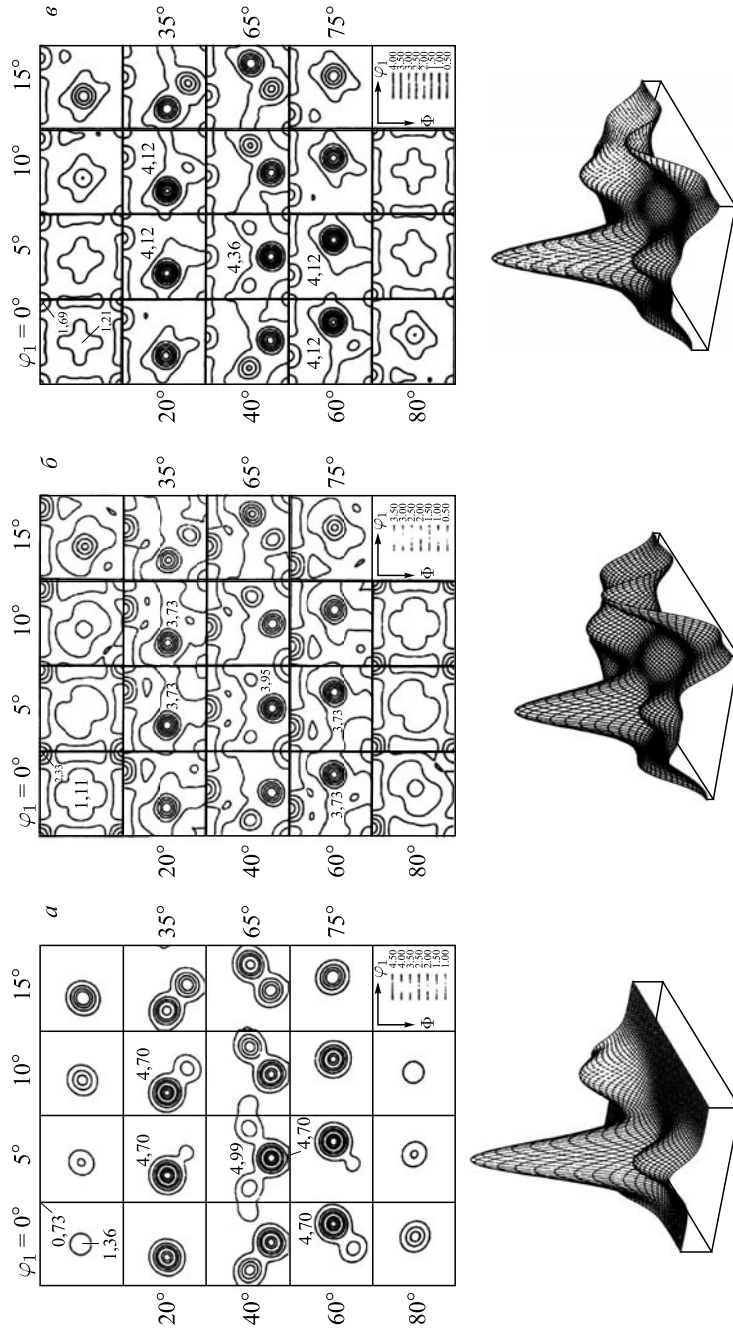


Рис. 5. а) Модельная Santa Fe ФРО $^{SF}f(g)$, аналогичная ФРО $^Mf(g)$ из рис. 4, с дополнительной высокой изотропной частью, чтобы ее редуцированная часть $^{SF}\tilde{f}(g)$ (б) всюду имела положительные значения. б) Модельная ФРО $^c f(g) = (1 - c)^{SF}f(g) + c^{SF}\tilde{f}(g)$, $c = 0,4$, также всюду положительная. Она характерна тем, что обладает максимальной энтропией. Дополнительно для большей наглядности приведены соответствующие $\varphi_2 = 45^\circ$ сечения

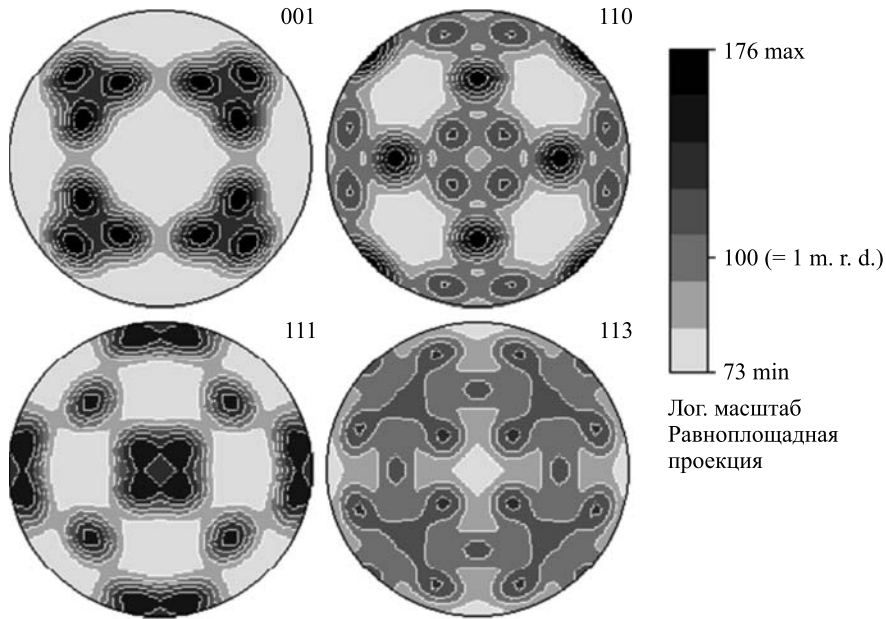


Рис. 6. Пример некоторых редуцированных полюсных фигур $\tilde{P}_{h_i}(y)$ модельной Santa Fe ФРО ${}^{\text{SF}}f(g)$ (см. рис. 5, а). Путем восстановления ФРО по этим полюсным фигурам в зависимости от применяемого метода могут быть получены варианты ФРО, изображенные на рис. 5, а, б (или любой смеси из них, рис. 5, в). Все они одинаково объясняют представленные $\tilde{P}_{h_i}(y)$

частью и продолжать при этом требовать объяснения экспериментальных полюсных фигур с достаточно хорошей точностью, то разница между результирующими ФРО различных коррекционных методов заметно сокращается. Так, например, стартовый результат (рис. 5, в) метода, добивающегося максимума энтропии, близко подходит, как и для WIMV-алгоритма, к *неизвестной* модельной ФРО ${}^{\text{SF}}f(g)$ (рис. 5, а), соответствующей вышеупомянутым эмпирически наблюдаемым свойствам реальных ФРО.

Следует отметить и все возрастающее число работ, посвященное проблеме восстановления ФРО и корректировке «призраков», в которых используются элементы довольно абстрактной математики [35, 36]. К сожалению, авторам неизвестны отклики на весьма интересную, но неортодоксальную проблему минимизации так называемых $\infty : \infty$ -ориентационных корреляций в ${}^K f(g) = \tilde{f}(g) + {}^K \tilde{\tilde{f}}(g)$, обсуждаемых в [29].

1.5. Графические представления ФРО. Для наглядного представления текстурных компонент используют двумерные сечения данного ФРО $f(g) =$

$f(\{\alpha, \beta, \gamma\})$ при одном фиксированном (например, α или γ) угле Эйлера, как на рис. 4–6. Исторически первым вариантом углов Эйлера, применяемых школой Бунге в текстурном анализе для описания ориентаций, служили углы $(\varphi_1, \psi, \varphi_2)$, $g = (\varphi_1, \psi, \varphi_2)$. Имеется связь между углами $(\varphi_1, \psi, \varphi_2)$ и $\{\alpha, \beta, \gamma\}$ (Roe/Matthies-вариант):

$$\varphi_1 = \alpha + \frac{\pi}{2}, \quad \psi = \beta, \quad \varphi_2 = \gamma - \frac{\pi}{2}. \quad (27)$$

Наглядное (и, как оказалось, также для упрощения аналитических выкладок) преимущество варианта $\{\alpha, \beta, \gamma\}$ состоит в том, что при интерпретации вращения $g = K_B \leftarrow K_A$ α является азимутом (φ), а β — полярным углом (ϑ) оси \mathbf{Z}_B в K_A . Далее, сумма всех γ -сечений ФРО дает $\mathbf{h}_i = (001)$ -полюсную фигуру $P_{\mathbf{h}_i}(\mathbf{y})$, а сумма всех α -сечений $\mathbf{y}_i = (0^\circ, 0^\circ)$ -обратную полюсную фигуру $R_{\mathbf{y}_i}(\mathbf{h})$. Примеры других вариантов углов Эйлера можно найти в [37]. Симметрия ФРО определяется точечными группами вращения G_B ($g_i^B \in G_B$; $i = 1, 2, \dots, N_B$) и G_A ($g_j^A \in G_A$; $j = 1, 2, \dots, N_A$), связанными с симметрией кристаллической решетки кристалла или статистической симметрией образца:

$$f(g) = f(g_i^B \cdot g \cdot g_j^A). \quad (28)$$

Соответственно, имеются $N^A \cdot N^B$ элементарных областей в G -пространстве, содержащих идентичную информацию, и, следовательно, достаточно представить графически только одну из этих областей.

Наиболее простой и исторически первый прием *наглядного* анализа ФРО-сечений состоял в том, что прямо на напечатанном компьютерном листинге от руки рисовались изолинии, соединяющие примерно одинаковые значения. Отсюда возникали до сих пор широко применяемые (особенно для материалов с кубической/орторомбической симметрией образцов) *прямоугольные* ФРО-сечения с изолиниями, как на рис. 4–6. При этом терялась часть ценной информации об истинной форме текстурных компонент. Для наглядного плоского двумерного представления полюсных фигур с самого начала можно было воспользоваться хорошо разработанными проекционными методами географии (проекции с равным угловым шагом, равной площадью, или стереографическая проекция, см. рис. 1). Для редуцированных $\tilde{P}_{\mathbf{h}}(\mathbf{y})$ из-за $\mathbf{y} \leftrightarrow -\mathbf{y}$ -симметрии (24) достаточно поверхности полусферы. Формально эти приемы можно перенести на α - или γ -сечения ФРО, наглядно сохраняя при этом некоторые элементы симметрии кристалла или образца. Однако из-за сложной метрики G -пространства (1) около полюсов ($\beta = 0^\circ, 180^\circ$) появляются искажения текстурных компонент. Выбирая тип проекции и используя σ - или δ -сечения ($\sigma = (\alpha + \gamma)/2$; $\delta = (\alpha - \gamma)/2$), можно добиться минимизации искажений истинных форм текстурных компонент [38] (см. рис. 7 и 8).

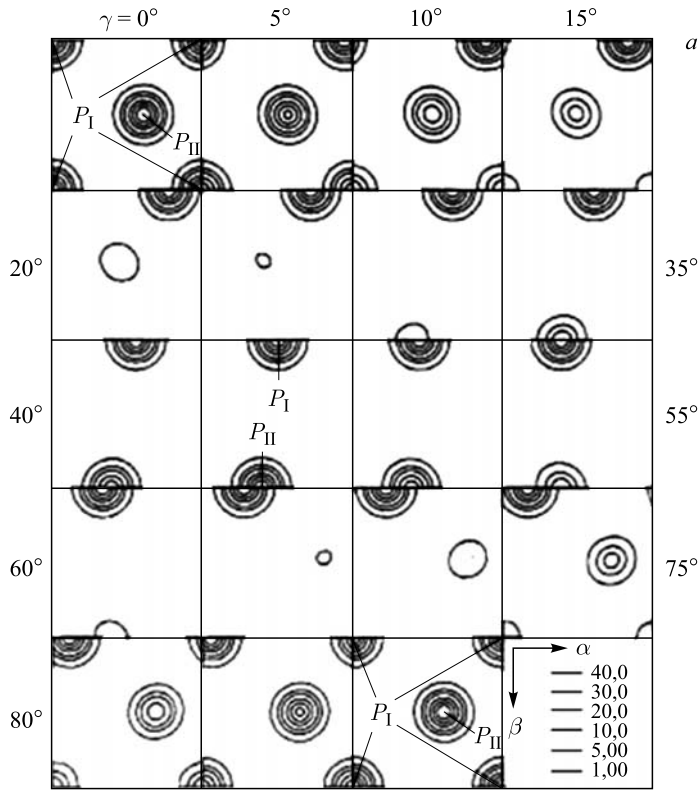


Рис. 7. γ -сечения модельной ФРО $f(g)$ с двумя компонентами сферической формы и центрами в $g_1 = \{0^\circ, 0^\circ, 0^\circ\}$ и $g_2 = \{54,7^\circ, 45^\circ, 0^\circ\}$; гауссианы с полушириной $b = 15^\circ$. Пример взят из [37]; кубическая кристаллическая симметрия и орторомбическая симметрия образца. а) Прямоугольный вариант представления сечений. Из-за сильного искажения метрики G -пространства конечная сферическая компонента I отображается в виде «шланга», проходящего через все γ -сечения при $\beta = 0^\circ$. Сечения компоненты II эллиптически искажены. Центры сечений компонент в соседних γ -сечениях смещены друг относительно друга (продолжение рис. 7 на с. 686)

На практике оптически видимые зерна часто состоят из монокристаллических «подзерен», кристаллические решетки которых повернуты друг относительно друга на малые углы. Представляют интерес и корреляции между ориентациями соседних зерен или ориентировки границ зерна относительно его кристаллической решетки. Такие корреляции $K_{B1} \leftrightarrow K_{B2}$ можно также описать аппаратом ориентаций: $g_{21} = g^{B2 \leftarrow B1} = g^{B2 \leftarrow A} \cdot g^{A \leftarrow B1} = g_2 \cdot g_1^{-1} = g_{12}^{-1}$. В корреляционном анализе или при рассмотрении процессов преобразования кристаллических решеток (фазовые переходы, рекристаллизация) часто

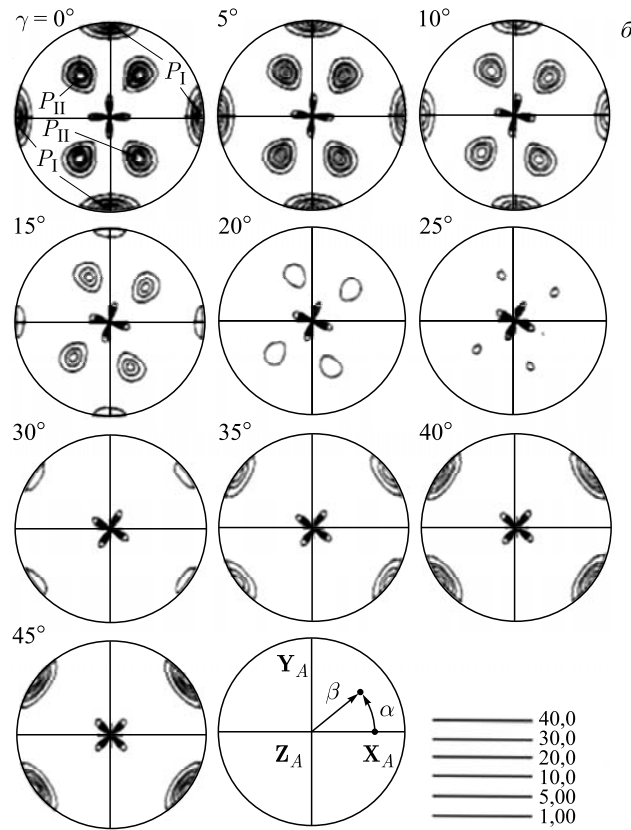


Рис. 7. б) Сферический вариант представления γ -сечений с сильными искажениями кругообразных форм сечений сфер. Полюс при $\beta = 0^\circ$ как будто втягивает в себя все изолинии (black hole effect). «Четырехлепестковая» форма следует из кубической симметрии. Проекция равной площади

используется вариант описания ориентаций с помощью $g = [\mathbf{n}; \omega]$. При этом для переменных Родригеса $[\mathbf{n}; \text{tg}(\omega/2)]$ первые из $N_{B1} \cdot N_{B2}$ элементарных областей в G -пространстве имеют особенно простой вид [39].

Интересным является предложение авторов [40] использовать одну степень свободы в интеграле (9). Результат интеграла по $\tilde{\varphi}$ не меняется, если он берется от $\tilde{\varphi}^*$ до $2\pi + \tilde{\varphi}^*$. Для фиксированного \mathbf{h}_i и $\tilde{\varphi}^*$ точки g всех нитей $g_t = g_t(\mathbf{h}_i, \mathbf{y}, \tilde{\varphi})$ (8), которые не пересекаются, заполняют G -пространство полностью [13] (ср. рис. 3, а). Поэтому выбор \mathbf{h}_i и $\tilde{\varphi}^*$ можно связать с некоторыми физически интересными условиями, отображающимися тогда в таких $(\mathbf{h}_i, \tilde{\varphi}^*)$ -специфических двумерных $\tilde{\varphi}$ -сечениях ФРО $f(g)$. Каждое такое

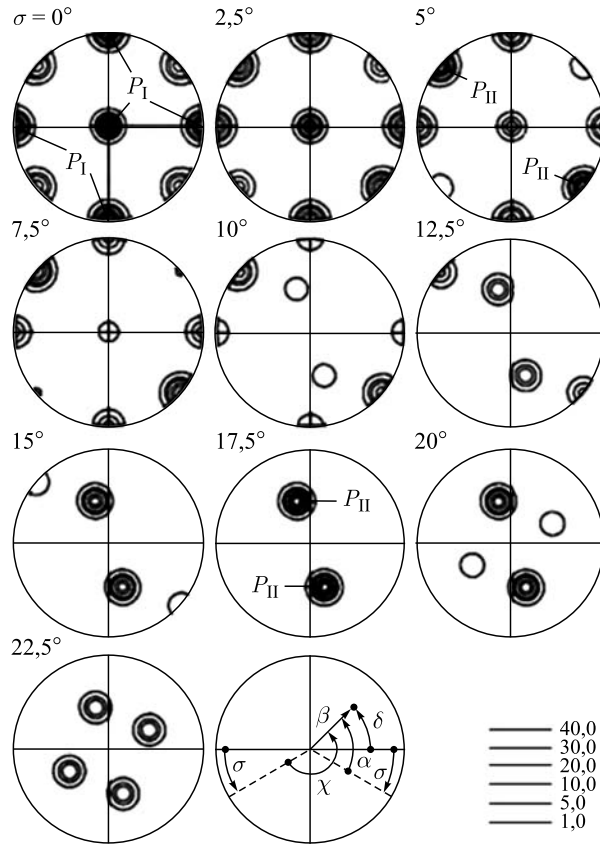


Рис. 8. Вариант представления ФРО из рис. 7, наилучшим образом отображающий формы и положения обеих сферических компонент. σ -сечения с переменными β и δ . Ценой обретаемого хорошего качества является потеря простой интерпретации симметрических свойств данной ФРО из-за смешанного характера переменных $\sigma = (\alpha + \gamma)/2$ и $\delta = (\alpha - \gamma)/2$. « $\pi/4$ -стереографическая проекция»

сечение содержит соответствующие значения $f(g_t)$ в зависимости от u , которое пробежит, как в случае полюсной фигуры, поверхность единичной сферы. Для фиксированного \mathbf{h}_i можно дополнительно ввести даже зависимость $\tilde{\varphi}^*(\mathbf{h}, u)$.

1.6. Стандартные распределения. Для оценки экспериментальных и вычислительных возможностей, юстировки измерительных установок, а также для анализа точности теоретического аппарата необходимы стандарты.

Основными элементами конструкции стандартных текстурных компонент в G -пространстве являются понятия *ориентационного расстояния* и *волокну-*

того расстояния. Обычное угловое расстояние θ между двумя единичными векторами \mathbf{n}_1 и \mathbf{n}_2 определяется как $\theta = \arccos(\mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{n}_2) \leq 180^\circ$. Поворотом на угол θ вокруг оси $[\mathbf{n}_1 \times \mathbf{n}_2]$ можно перевести \mathbf{n}_1 в \mathbf{n}_2 . Аналогично определяется ориентационное расстояние ω_{12} между двумя ориентациями g_1 и g_2 :

$$0 \leq \omega_{12} = \omega(g_1, g_2) \leq 180^\circ, \quad (29)$$

как угол поворота ω представления $g = g_2 \cdot g_1^{-1}$ или $g_1 \cdot g_2^{-1}$ в виде $[\mathbf{n}, \omega]$.

Скелетная линия *волокнистой* компоненты характеризуется единичными векторами \mathbf{n} и \mathbf{h} , соответственно заданными в K_A и K_B . Кратчайшее ориентационное расстояние от некоторой ориентации g до скелетной линии волокнистой компоненты (*волокнистое расстояние* ω_f) определяется как

$$\omega_f(g; \mathbf{h}, \mathbf{n}) = \arccos z, \quad z = \mathbf{h} \cdot g \cdot \mathbf{n}. \quad (30)$$

Первое модельное (колоколообразное) сферическое распределение вокруг g_0 , с которым работали и продолжают работать в гармоническом анализе, было введено Бунге (Bunge-Gaussian):

$${}^B f_G(g, g_0; B) = N e^{-B\omega^2}, \quad \omega = \omega(g_0, g). \quad (31)$$

Очевидным недостатком этого распределения является отсутствие в нем свойства *цикличности* ориентационного расстояния в явном виде

$$\omega = 180^\circ + \varepsilon \hat{=} 180^\circ - \varepsilon. \quad (32)$$

Далее модельные ${}^B C_{m,n}^l$ могут быть определены только приближенно или численным интегрированием. Поэтому *стандартное распределение* в G -пространстве требует, чтобы само распределение, а также все его главные параметры и характеристики были бы известны в замкнутой, интерпретируемой аналитической форме (без остаточных интегралов и бесконечных сумм), позволяющей вычислить значения главных величин данного распределения с любой (*стандартной*) точностью [13, 41].

Примером может служить разработанное россендорфской школой *стандартное гауссовское* распределение [41]

$${}^G f(g; g_0, S) = N e^{S \cos \omega}, \quad N(S) = \frac{1}{I_0(S) - I_1(S)}, \quad (33)$$

$$0 \leq S \leq \infty, \quad \omega = \omega(g_0, g),$$

с полушириной b (FWHM) «колокола» (имеющей смысл в 2π -циклическом пространстве только в пределах $0 \leq b \leq 2\pi$):

$$b = 4 \arcsin \left(\sqrt{\frac{\ln 2}{2S}} \right), \quad S \geq \frac{1}{2} \ln 2. \quad (34)$$

Для $S = 0$ имеем изотропный случай ${}^G f(g) = 1$, а для $S \rightarrow \infty \rightarrow b \rightarrow 0$ следует случай монокристалла, т. е. дельта-пик $\delta(\omega)$ при $g = g_0$. Наиболее важными производными выражениями являются

$${}^G P_{\mathbf{h}_i}(g_0, S; \mathbf{y}) = P(S, z) = N(S) I_0 \frac{S(1+z)}{2} e^{S(z-1)/2} \quad (35)$$

и

$${}^G C_{m,n}^l = {}^G C_l(S) D_{m,n}^{l*}(g_0^{-1}), \quad {}^G C_l(S) = N(S)(I_l(S) - I_{l+1}(S)). \quad (36)$$

Аналогичные выражения были получены для функции в связи с анализом проблемы «призраков» и их коррекции ${}^G f_G(g; g_0, S)$, ${}^G f_\pi(g; g_0, S)$, ${}^G f_\Omega(g; g_0, S)$ и ${}^G f_1(\mathbf{h}_i, g; g_0, S)$ (см. (14), (26)).

Гауссовское стандартное распределение является типом известного в прикладной математике распределения Мизеса–Фишера [42] в G -пространстве. В текстурном анализе были получены обобщения гауссовского распределения с эллипсоидальной формой компоненты [43], а также распределения с другими формами «колокола», например *лоренцеобразное* [44], типа $\exp(-T \operatorname{tg}^2 \omega/2)$ [45] или просто $\cos^{2n}(\omega/2)$ [46]. Аналогичные варианты существуют и для волокнистых компонент [47]. Появилась возможность моделировать также замкнутые «полые» формы, «трубки» и «кольца» в G -пространстве. Разнообразными вариациями формы модельной компоненты обладает так называемое распределение Бингхама [48].

Примером стандартной гауссовской волокнистой ((\mathbf{h}, \mathbf{n})-fibre) компоненты с ее производными функциями является (см. (30))

$${}^G f(S_f, z) = N(S_f) e^{S_f z}, \quad N(S_f) = \frac{S_f}{\operatorname{sh} S_f}, \quad S_f = \frac{\ln 2}{2 \sin^2(b_f/4)}, \quad S_f \geq 0, \quad (37)$$

$${}^G P_{\mathbf{h}_i}^f(S_f, \mathbf{h}, \mathbf{n}; \mathbf{y}) = P(S_f, z_1, z_2) = N(S_f) I_0 \left(S_f \sqrt{1-z_1^2} \sqrt{1-z_2^2} \right) e^{S_f z_1 z_2},$$

$$z_1 = (\mathbf{h}_i \cdot \mathbf{h}), \quad z_2 = (\mathbf{y} \cdot \mathbf{n}),$$

$${}^G C_{m,n}^l(S_f, \mathbf{h}, \mathbf{n}) = \frac{4\pi}{2l+1} {}^G C_l(S_f) Y_{l,m}(\mathbf{h}) Y_{l,n}^*(\mathbf{n}), \quad (38)$$

$${}^G C_l(S_f) = (2l+1) \sqrt{\frac{\pi S_f}{2}} \frac{I_{l+1/2}(S_f)}{\operatorname{sh} S_f}.$$

Введенное Савеловой [49] колоколообразное *нормальное* распределение, которое можно связать с центральной предельной теоремой теории вероятности [50, 51], определено только через его фурье-коэффициенты

$${}^N C_{m,n}^l(\varepsilon) = (2l+1) e^{-\varepsilon l(l+1)}. \quad (39)$$

Однако просуммировать соответствующую бесконечную сумму (6) по l не удается, так что явный вид этого распределения известен только прибли-

женно. Поэтому нормальное распределение не является стандартным в определенном выше смысле.

В *компонентном методе* объектами моделирования выступают экспериментальные полюсные фигуры. Аналогично можно постараться моделировать заданную ФРО (с целью ее интерпретации на языке текстурных компонент) прямо на основе ее сечений при помощи модельных распределений. При этом шаг за шагом вычитают модельные компоненты из заданной ФРО, пока G -пространство не становится пустым (см. рис. 9). Элементы таких операций содержатся в современных программных пакетах по текстурному анализу, например, в BEARTEX [52] или LaboTex [53]. Нынешние возможности компьютерной техники позволяют применять компонентный подход даже в автоматическом режиме [54].

1.7. Новые возможности определения ФРО по ориентациям отдельных зерен. Революционным шагом в технике текстурного анализа можно считать использование дифракции электронов в электронных микроскопах нового поколения (как по мощности источников, так и по применению двумерных детекторов), которые появились в 90-х годах прошлого века.

По условиям эксперимента микроскопический пучок электронов дифрагирует в маленькой области образца, точно принадлежащей определенному зерну. Возникающие при этом согласно (3) брэгговские рефлексы для различных θ_{hkl} отображаются на плоском детекторе в виде пересекающихся (hkl) -специфических линий. Наблюдаемая картина зависит от ориентации g_ν кристаллической решетки в месте попадания пучка в данном зерне, и ее можно расшифровать. Из-за применения электронного микроскопа можно исследовать только относительно малые области (поверхности или тонкие слои) образца, используя при этом микроскопические шаги электронного пучка. Результирующие наборы ориентировок g_ν содержат богатую информацию о размерах зерен, внутриверной структуре, корреляциях соседних зерен, о природе межзерновых границ, о распределении зерен разных фаз и т. п. [55].

С точки зрения определения ФРО данной фазы интерес представляет только малая, неповторяющаяся часть этих данных, отвечающая на вопрос, сколько зерен (а может быть, и с каким объемом) было исследовано и какие у них ориентации. В начале использования электронной дифракции результат измерений составлял максимум несколько сотен зерен за день. В настоящее время это число доходит до нескольких тысяч. Очевидно, что наиболее подходящими для измерений являются мелкозернистые образцы (относительно редко встречающиеся в геологических породах).

Принципиальные трудности применения дифракции электронов связаны с качеством поверхности образцов и особенно неметаллических проб, а также с возникновением высоких поверхностных электростатических зарядов, мешающих измерениям.

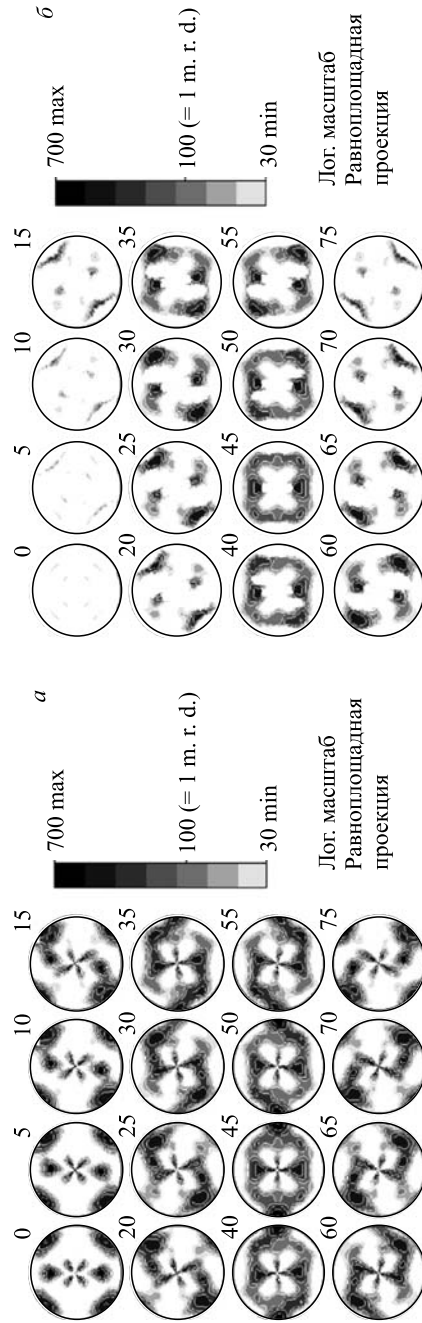


Рис. 9. Пример «дешифровки» заданной ФРО, полученной при вычитании шаг за шагом с помощью текстурных компонент всех интенсивностей из S -пространства, пока оно не становится пустым. *а)* γ -секции ФРО поликристаллического образца алюминия, построенная по ориентациям зерен (~ 8000), определяемым при помощи рассеяния электронов. Кубическая кристаллическая симметрия, орторомбическая симметрия образца. *б)* Остаток ФРО после вычитания двух компонент при $g_1 = \{90^\circ, 45^\circ, 0^\circ\}$ и $g_2 = \{45^\circ, 90^\circ, 0^\circ\}$ с интенсивностями 26,74 и 34,08% соответственно (продолжение рис. 9 на с. 692)

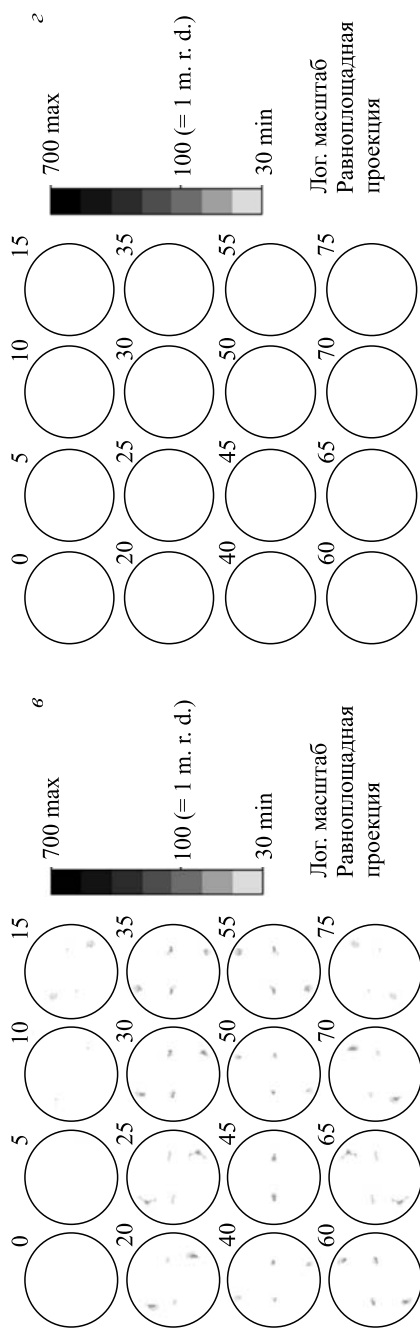


Рис. 9. а) Остаток ФРО после вычитания третьей компоненты при $g_3 = \{90^\circ, 35,26^\circ, 0^\circ\}$ с интенсивностью 37,06 %. з) Остаток ФРО после вычитания четвертой компоненты при $g_4 = \{0^\circ, 35,26^\circ, 45^\circ\}$ с интенсивностью 1,42 %. G-пространство выглядит оптически «пустым» и содержит лишь остаточную интенсивность в 0,7%

С теоретической точки зрения возникла проблема: ничего не зная о текстуре данного образца (для простоты однофазного), в текущем эксперименте имеем все возрастающее число измеренных g_ν . Если подставлять эти g_ν в соответствующие (определенного размера) клетки G -пространства, то число клеток с попаданиями и число попаданий в таких клетках все увеличивается. Очевидно, существует некоторое минимальное критическое число n^{cr} , зависящее от (неизвестной!) текстуры образца, только начиная с которого из данных n ориентаций g_ν можно восстановить искомую ФРО хотя бы в грубом приближении. Когда число измерений достигает $n > n^{cr}$, возникает вопрос, с какой точностью (разрешением) соответствующее $f^n(g)$ отображает истинную ФРО. Примечательно то, что эти вопросы удалось решить весьма конструктивно [56–60]. Для качественного анализа достаточно заменить каждую измеренную ориентацию g_ν колоколообразной компонентой с выбранной полушириной b . Тогда соответствующее суммарное ФРО $f^n(g, b)$ переходит с растущим n из стохастической картины в более гладкую и достаточно хорошо интерпретируемую.

Для получения ФРО, необходимой для количественного описания свойств данного материала, процедура более сложная. Характеристическим параметром при этом является *текстурный индекс* ФРО F_2 :

$$F_2 = \frac{1}{8\pi^2} \int f(g)^2 dg \approx F_2^M = \sum_{m=1}^M h_m^2 v_m, \quad \sum_{m=1}^M v_m = 1, \quad \sum_{m=1}^M h_m v_m = 1, \quad (40)$$

где h_m — усредненное значение ФРО в m -й клетке (с объемом v_m) дискретизированного G -пространства; M — число его клеток.

Интерпретировать абсолютное численное значение F_2 , характеризующее *остроту* данной текстуры, затруднительно. Известно только, что при отсутствии текстуры ($f(g) = h_m = 1$) имеем $F_2 = 1$, а для монокристалла $F_2 = \infty$ или $\gg 1$. Зато использование численных значений F_2 вполне оправданно для сравнений при качественном анализе зависимости некоторого интересующего свойства однотипных материалов от остроты текстуры.

С ростом числа n измеренных одиночных ориентаций $g_\nu \rightarrow {}^n h_m$ текстурный индекс ${}^n F_2^M$ (кроме случая монокристалла) сначала довольно быстро падает, а после заметного изгиба с дальнейшим увеличением n уменьшается гораздо слабее (см. рис. 10, а). Точку изгиба можно рассматривать как n^{cr} . Анализируя зависимость ${}^n F_2^M$ для линейно растущих n , нецелесообразно делать дальше более чем качественные заключения, так как значение F_2 трудно предсказать для больших n . Однако при построении зависимости ${}^n F_2^M$ от переменной $z = \text{const}/n$, как видно на рис. 10, б, после стохастического поведения $F_2^M(z)$ перейдет в строго линейный режим, сигнализируя этим достижение интересующего нас n^{cr} . Как линейную зависимость, так и значение наклона падающей прямой можно строго доказать

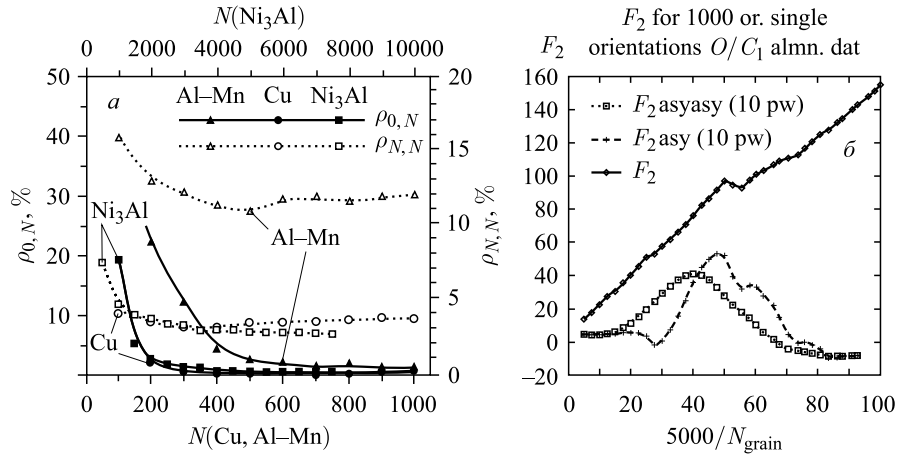


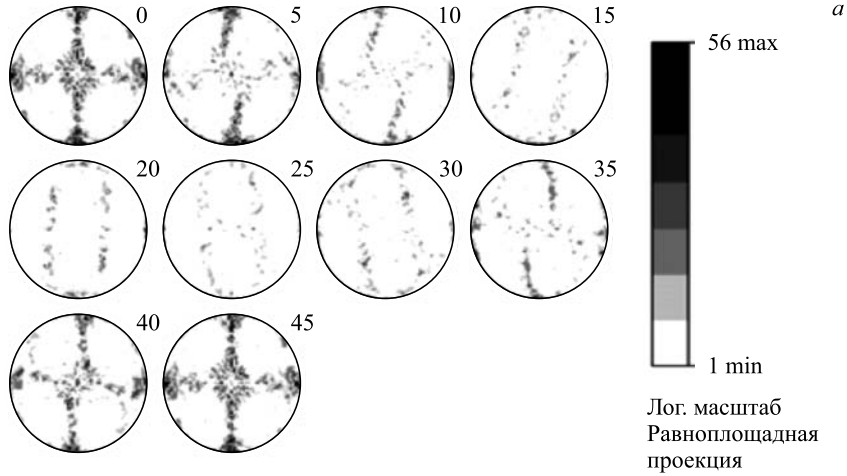
Рис. 10. Варианты анализа зависимости текстурного индекса $F_2(n)$ от числа используемых ориентаций n для восстановления ФРО ${}^n f(g)$. а) Представление ($N = n$; линейная шкала по $N!$) зависимости $F_2(n)$ сравнением с текстурным индексом F_2 известной ФРО $f_0(g) \rightarrow \rho_{0,N}$ или со значением $F_2(n')$ предыдущего шага ($n = n' + \Delta n$; $\Delta n = \text{const}$) $\rightarrow \rho_{N',N}$. Показаны примеры ФРО образцов, отличающихся по степени остроты текстур. Подробности см. в [57]. Видны кривые с точками изгиба, по которым субъективно можно судить о достижении n^{cr} . б) Представление ($N_{\text{grain}} = n$) зависимости $F_2(n)$ для случая Al-Mn из а) с использованием переменной $z = 5000/n$. Виден переход $F_2(z)$ в строго линейный режим с ростом N_{grain} (т. е. с падающим z). Определение наступления этого момента упрощается анализом кривых $F_2 \text{ asy}(z)$ и $F_2 \text{ asyasy}(z) = \text{asy}(F_2 \text{ asy}(z))$. $F_2 \text{ asy}(z)$ описывает оценку истинного значения F_2 образца путем определения пересечения асимптотической прямой для данного z с осью $z = 0$ (что соответствует $N_{\text{grain}} \rightarrow \infty$). Асимптотическая прямая приближенно проложена через максимум десять уже определенных значений $F_2(z)$ для z , отстоящих друг от друга на шаг $\Delta z \approx 2,5$. В данном эксперименте измерялись 1000 ориентаций, однако линейный режим наступает гораздо раньше. Имеем $n^{\text{cr}} = 5000/z^{\text{cr}} \approx 5000/20 = 250$ (ср. это число с возможностью найти такой результат на основе кривых для Al-Mn из а!)

(или численно определить для заданной модельной ФРО) методами теории вероятности [57].

Таким образом, используя линейную зависимость $F_2^M(z)$, можно приближенно (при помощи аппроксимации $z \rightarrow 0 \hat{=} n \rightarrow \infty$) оценить истинное значение F_2 неизвестной ФРО.

Далее, поскольку ${}^n F^M > F_2$, путем сглаживания распределения ${}^n h_m$ с колоколообразным распределением и полушириной b можно добиться того, чтобы ${}^n F_2^M(b) = F_2$, определяя этим достигнутое для данного n качество (разрешение коррелировано с b) искомой ФРО (см. рис. 11).

ФРО (Hit-ODF), 1000 ориентировок



ФРО (Hit-ODF), 250 ориентировок

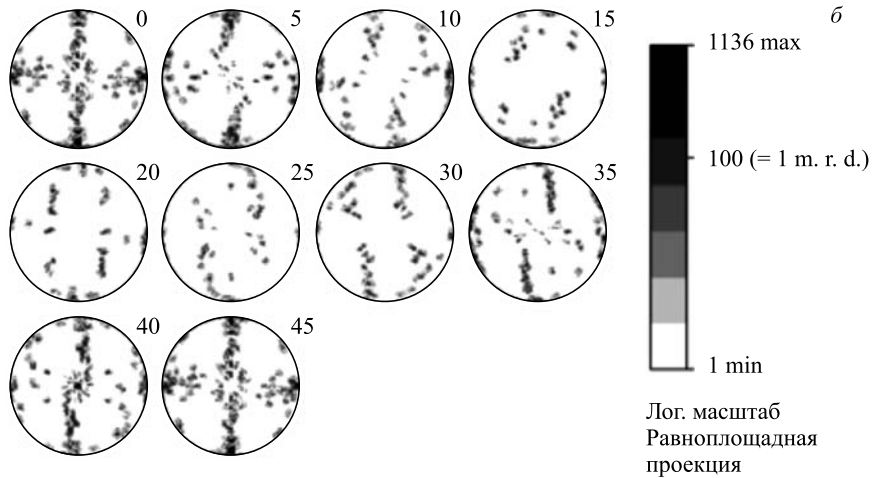


Рис. 11. Приближенное восстановление ФРО $f(g)$ образца Al-Mn на основе отдельных ориентаций, анализ которых проведен на рис. 10; σ -секции; O/D_2 -симметрии. Как следует из рис. 10, б, истинное значение F_2 образца лежит вблизи 4. а) ФРО Hit-ODF (свободная нормировка), показывающая с учетом симметрии образца частоту попаданий 1000 ориентировок в 5-градусные клетки G -пространства. $F_2(N_{\text{grain}} = 1000) \approx 17$. б) ФРО Hit-ODF (свободная нормировка), показывающая частоту попаданий $N_{\text{grain}} = n^{\text{cr}} = 250$ ориентировок в 5-градусные клетки G -пространства. $F_2(N_{\text{grain}} = 250) \approx 40$ (продолжение рис. 11 на с. 696)

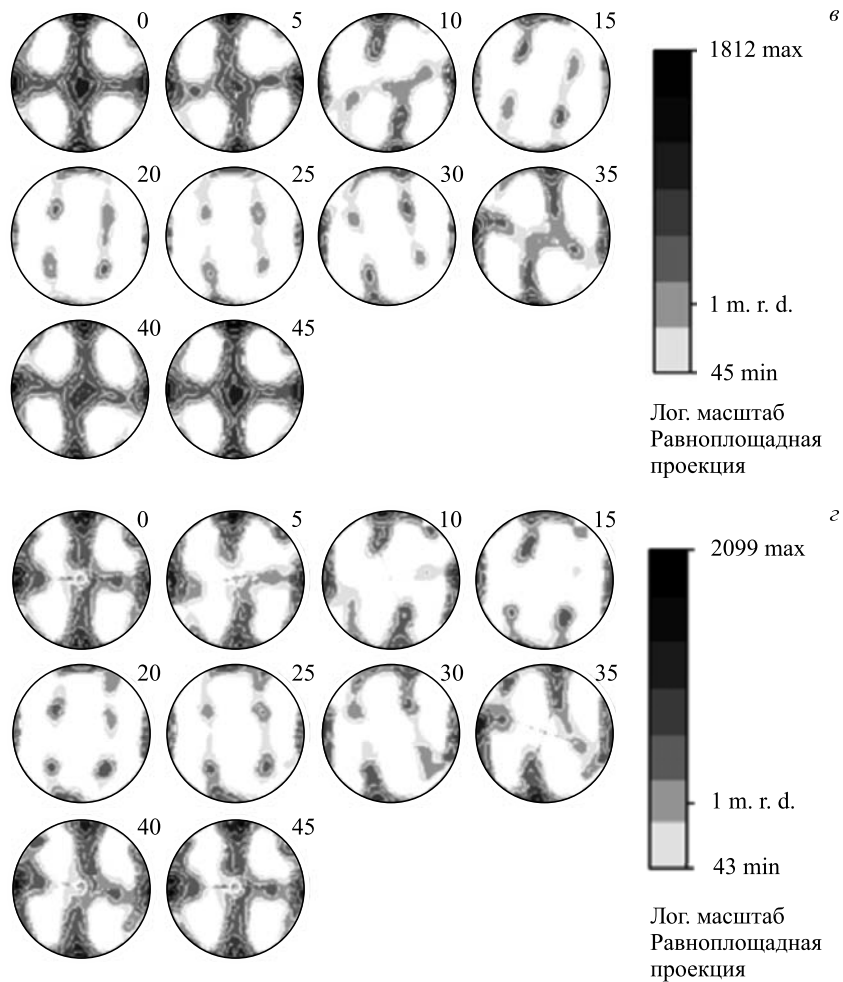


Рис. 11. б) ФРО образца, восстановленная на основе данных из *a* при помощи сглаживания ($b = 12^\circ$) и фильтрации [58] с результирующим $F_2 = 4$. з) ФРО, восстановленная на основе данных из *b* после сглаживания ($b = 13^\circ$) и фильтрации с результирующим $F_2 = 4$. ФРО, полученная лишь на основе $N_{\text{grain}} = n^{\text{cr}} = 250$, удовлетворительно отражает все главные характеристики текстуры образца

Следует отметить, что (как в лотерее) каждый эксперимент по определению одиночных ориентаций g_ν носит индивидуальный (k) характер. Соответственно, значения ${}^{(k)}n^{\text{cr}}$ и поведение ${}^{(k)}F_2^M(z)$ до достижения его линейного режима могут заметно отличаться, как видно из рис. 12.

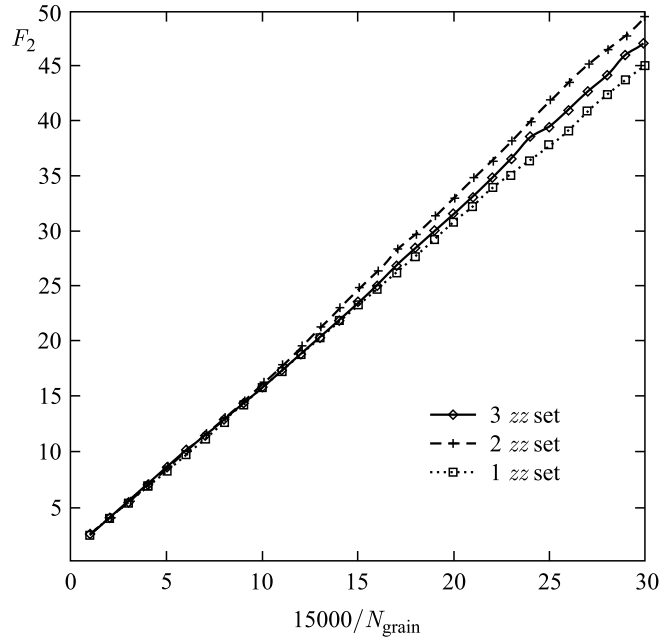


Рис. 12. Модельный эксперимент по определению ФРО $f(g)$ (изотропного образца с $f(g) = 1$) при помощи измерений ориентаций отдельных зерен. $z = 15000/N_{\text{grain}}$. Поведение $F_2(z)$ явно зависит от набора (и последовательности) случайных чисел, на основе которых определяются соответствующие ориентации. Очевидно, что кривая $F_2(z)$, соответствующая «сету 1», переходит «раньше» других (т. е. для меньшего числа N_{grain}) в линейный режим с асимптотическим значением $F_2(z)$ при $z \rightarrow 0$, равным (для всех наборов) истинному значению $F_2 = 1$ для данной ФРО

Для определения ФРО более целесообразным режимом измерений (по сравнению с систематическим сканированием образца маленькими шагами электронного пучка) является стохастическое сканирование, чтобы уже в начале эксперимента попадать в (как можно больше) различные зерна, что в принципе технически реализуемо. Интересной в этом направлении является стратегия, предлагаемая фрайбергской школой [61], начинать сканирование с грубым растром, постепенно сужая его в тех областях, где имеется большая частота попаданий в интересные области G -пространства с повышенной интенсивностью.

1.8. Специфичность текстурного анализа, глобальные характеристики ФРО. Выше уже обсуждались коренные различия свойств и понятий в текстурной области по сравнению с обычным физическим миром. Формальный перенос его методов интерпретаций и математического аппарата на проблемы

текстурного анализа могут привести к усложнениям или количественно сомнительным результатам. Характерными отличительными моментами в текстурном анализе являются: 1) цикличность (замкнутость) G -пространства с нетривиальной метрикой; 2) свойства ориентаций и операции над ними описываются только группами вращения; 3) главные объекты (ФРО и полюсные фигуры) строго неотрицательны, так как описывают вероятности. Последнее обстоятельство следует особенно подчеркнуть, поскольку часто применяемое на практике пренебрежение им может привести к ошибочным заключениям.

Рассматриваемые в нашем обычном физическом мире величины направленного характера (например, скорость, электрический ток, напряжение) или равно с ними скалярного характера (например, заряды) могут быть как положительными, так и отрицательными. В этом смысле можно говорить о двух равноправных «мирах», простирающихся до $+\infty$ или до $-\infty$, с границей в нуле.

В текстурном анализе с его *неотрицательными* объектами также имеются два равноправных «мира» с четкой границей между ними, однако с неодинаковыми областями простираения. Границей является единица ($f(g) = 1$), которая соответствует случаю изотропности или *отсутствию* текстуры (преимущественных ориентаций). Нижний мир простирается от нуля до единицы ($0 \leq f(g) \leq 1$), а верхний ($f(g) > 1$) от единицы до бесконечности (случай монокристалла). Кажущаяся *малость* нижнего мира часто приводит к необоснованному пренебрежению им в практике интерпретации ФРО. Например, в обсуждаемых в литературе представлениях ФРО изолинии часто рисуют, начиная только с единицы, хотя нижний мир в количественном отношении совершенно равноправен с верхним! Поскольку ФРО нормирована на единицу (100% всех зерен) и G -пространство конечно (100% его объема нормируется на единицу), см. (1) и (4), случай отсутствия текстуры (пустой верхний мир) можно представить себе как пруд (нижний мир) глубиной 1 м и размером 100 м^2 , полностью заполненный несжимаемой жидкостью. Возникновение текстуры (преимущественных ориентаций в различных местах G -пространства, с различной высотой и шириной пиков) возможно только путем перекачки жидкости из нижнего мира в верхний. Для количественных последствий этого, безусловно, интересны не только пики в верхнем мире, но и долины в нижнем, и их характеристики, пока слабо обсуждаемые в литературе. Простым приемом демонстрации характера распределений в нижнем мире является использование изолиний в логарифмическом масштабе.

Другим параметром, отвечающим на вопрос, какая часть зерен в образце распределена изотропно, является уже рассмотренный выше фон $0 \leq F \equiv \min(f(g)) \leq 1$.

Например, фон $F = 0,95$ означает, что 95% всех зерен в образце ориентированы хаотично, и те 5% зерен, показывающих в верхнем мире пики возможно внушительной высоты и приводящие к большим значениям тек-

стурного индекса (40), не могут сильно повлиять на свойства данного образца, хотя желание обсуждать такие пики весьма привлекательно.

Даже в случае малого фона интересны такие глобальные характеристики ФРО (существенно дополняющие F и F_2), как количество зерен образца, которое осталось в нижнем мире ($\int_{G, 0 \leq f(g) \leq 1} f(g) dg$), или какую часть G -пространства ($\int_{G, f(g) > 1} dg$) занимают ориентации, принадлежащие пикам в верхнем мире, и т. п. Специфическим свойством таких характеристик является то, что они не дают ответы на вопросы, например, сколько пиков и долин представлены в ФРО и где они расположены.

Глобальные характеристики можно получить, анализируя так называемую ФРО-гистограмму [62]. В такой диаграмме значения ФРО $f(g)$ в клетках G -пространства сортируют в линейном представлении (100 %) объема G -пространства по возрастающему принципу, подобно тому, как на книжной полке нормированной длины (100 %) выстроены по принципу возрастающей высоты книги равной длины, но разной толщины и высоты (с нормированным суммарным объемом (100 %) всех книг). На рис. 13 показан стандартный способ представления двух ФРО, а для сравнения на рис. 14 изображены соответствующие им ФРО-спектры.

Другой весьма важной характеристикой любой интерпретируемой и используемой для конкретных расчетов ФРО является понятие разрешения или, точнее, разрешающей способности Δ . Исторически это понятие возникло в оптике в связи с оценкой способности телескопов различить две близко лежащие звезды. В текстурном анализе разрешение, достигаемое в данной ФРО, определяется как свойствами и качеством экспериментальных данных, так и качеством и точностью математического аппарата или применяемого для восстановления ФРО метода. Знание хотя бы только порядка разрешения Δ (выраженное в углах, как угловое или ориентационное расстояние) важно в двух аспектах.

Во-первых, очевидно, что результаты количественных расчетов величин с большой ориентационной чувствительностью, в которых использовались ФРО плохого разрешения, следует рассматривать с осторожностью. Типичным примером этого является соотношение (5). Рассмотрим упругие свойства поликристалла $\overline{E^a}$, получаемые как арифметическое усреднение при помощи ФРО свойств монокристаллов образца разных ориентаций. Зависимость $E(g)$ можно представить в виде рядов типа (6). Тогда $\overline{E^a}$ (5) потребует $C_{m,n}^l$ -коэффициенты ФРО только до $l = 4$ из-за 4-го ранга тензора упругих постоянных и ортогональности D -функций. Эти коэффициенты можно получить с достаточной точностью уже для ФРО с умеренным разрешением. Однако приближения типа (5) полностью игнорируют реально существующие взаимодействия между зернами. Учет таких взаимодействий или формы зе-

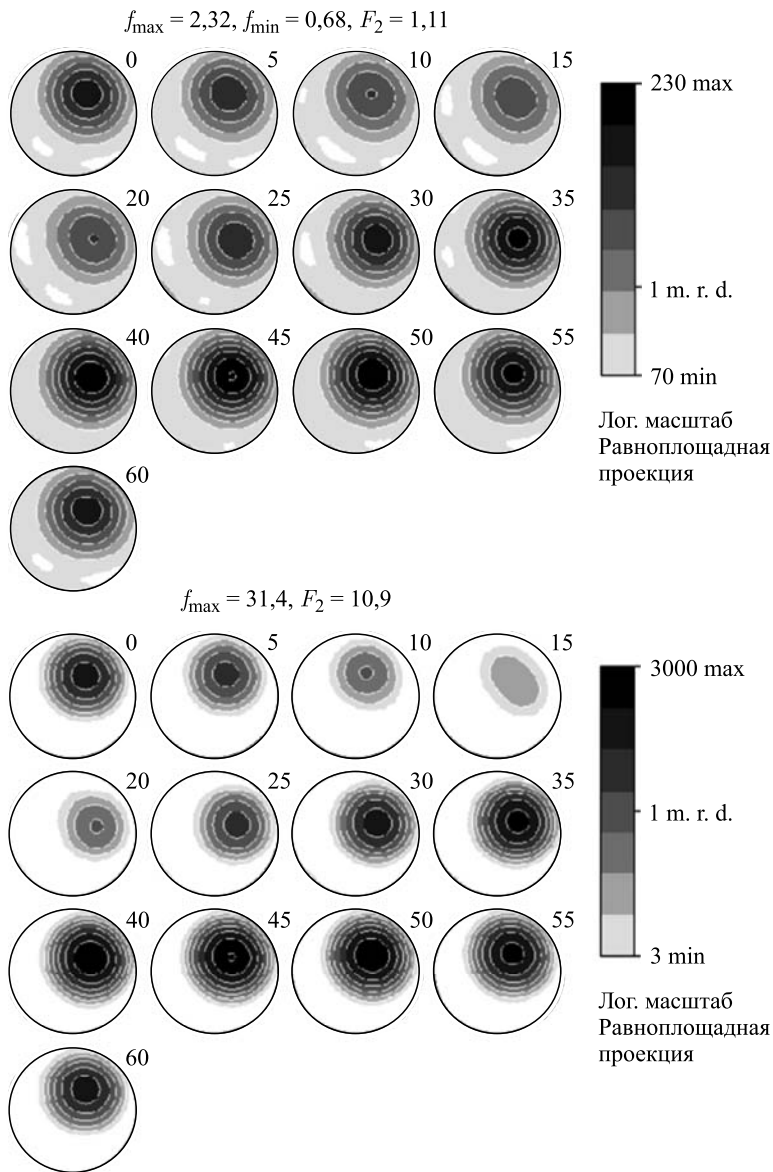


Рис. 13. Две модельные ФРО, содержащие текстурную компоненту одинакового типа, но с различной шириной и интенсивностью

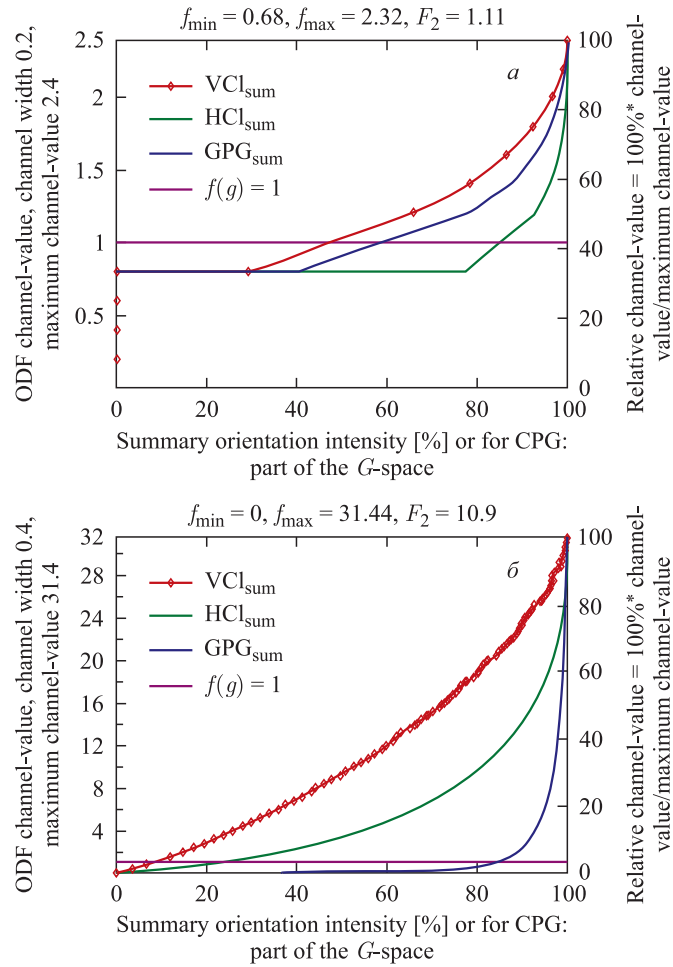


Рис. 14. Сильно отличающиеся ФРО-спектры (на первый взгляд близких) модельных распределений, представленных на рис. 13. Глобальная характеристика CPG_{sum} (summary channel part of the G -space, соответствует ФРО-гистограмме) описывает часть объема G -пространства, занятого клетками с $f(g)$, до значения, отложенного на абсциссе слева. VC_{sum} (vertical channel sum) показывает, соответственно, часть зерен, охваченных этими клетками

рен потребует при любом алгоритме расчета упругих свойств поликристалла использования $C_{m,n}^l$ -коэффициентов с более высокими l , включая и фурье-коэффициенты с нечетными l .

Вторым аспектом разрешения является то обстоятельство, что обсуждение деталей полученной ФРО, меньших, чем имеющееся разрешение, лишено смысла. Такие детали могут появиться просто из-за погрешностей вычислительного характера.

Разрешение определяется многими факторами, причем при оценках надо исходить из принципа преобладания худшего. Если измерять, например, полюсные фигуры точечными детекторами, но поворачивать образец пятиградусными шагами, то значение в 5° будет определяющей характеристикой для достигаемого разрешения. Или при использовании, например, нейтронных детекторов, видимых под углом раскрытия в 10° , пятиградусные повороты образца ничего не дадут для улучшения разрешения.

Поучительный пример в этом отношении был описан в [6]. Так, из (10) следует, что, измеряя полюсные фигуры с высоким разрешением, формально можно определить параметры $F_l^m(\mathbf{h}_i)$ до очень высоких l . Тогда в соответствии с (11) можно вроде бы определить $C_{m,n}^l$ такого же порядка l по экспериментальным данным лишь одной полюсной фигуры $P_{\mathbf{h}_i}(\mathbf{y})$. Однако в этом случае для определения всех $(2l+1)^2$ неизвестных $C_{m,n}^l$ до l высокого порядка количества независимых уравнений (11) будет недостаточно. Потребуется данные и других \mathbf{h}_i -проекций ФРО. Таким образом, достигаемое разрешение ФРО определяется также числом измеренных полюсных фигур.

Предельное $l = L$ в аппарате гармонического анализа задает порядок достигаемого разрешения Δ с грубой оценкой $\Delta \approx 180^\circ/L$, которую можно связать со средним расстоянием корней сферических функций порядка L . Образно говоря, при помощи «щупа» диаметром d на плоскости нельзя обнаружить ямы диаметром меньше d , а средний размер простирания пиков и долин сферических функций характеризует порядок их d .

При работе в аппарате прямого метода с неперекрывающимися и полностью заполняющими G -пространство пятиградусными клетками лучшее достигаемое разрешение не может быть меньше 10° , так как для оценки полуширины узкого пика необходимы значения ФРО как минимум в трех соседних клетках.

В последнее время разработаны алгоритмы со свободно выбираемым (одинаковым) угловым шагом между центрами клеток и даже с различным шагом в разных областях G -пространства в зависимости от свойств образца и возможностей эксперимента [63].

1.9. Погрешности, новые разработки, программные системы. Для задачи восстановления ФРО из дифракционных данных или по ориентациям отдельных зерен самостоятельной проблемой является оценка погрешностей результирующих значений ФРО. Даже если игнорировать для простоты проблему восстановления полной нередуцированной ФРО, то появляется целый ряд причин, влияющих на размеры погрешностей ФРО [64].

Наряду с ошибками систематического характера (оптика падающих и детектированных пучков, параметры спектрометра и гониометра, коллиматоров и детекторов) весьма сложным является учет погрешностей статистического характера. К таковым относятся, например, ограниченное количество нейтронов при проведении эксперимента с использованием рассеяния нейтронов или число зарегистрированных зерен в исследуемом объеме образца (GV).

Попыткам многостороннего рассмотрения этого вопроса была посвящена работа [65]. В более наглядной форме, но с ограничением на вычислительные ресурсы такие вопросы можно изучать методом многократного моделирования эксперимента с учетом статистических разбросов входящих параметров [66]. Наряду с оценкой погрешностей восстанавливаемой ФРО ставится и вопрос об оптимизации самого эксперимента [67].

В настоящее время имеется уже большое число (коммерческих или свободно доступных) компьютерных программ-пакетов с богатыми возможностями представления и анализа ФРО, а также применения ее для решения задач прикладного характера. Все они содержат элементы коррекции «призраков» (с разной глубиной объяснения пользователю этой нежелательной, но реально существующей проблемы) и описания примененного типа коррекции. В редких случаях такие программы содержат оценки погрешностей. В рамках данной работы можно только перечислить наиболее известные пакеты: BEARTEX [52], MAUD [68], popLA [69], LaboTex [53], MULTEX [70], MTEX [61], TexturePlus [71], POFINT, STROTEX [72], StereoPole [73] и TexTools [74]. Самым богатым по своим возможностям и широко используемым из них является MAUD. Краткое описание программ, частично с примерами, можно найти в монографии [72].

2. ПРИМЕНЕНИЕ ФРО ДЛЯ ОПИСАНИЯ СВОЙСТВ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ОБРАЗЦОВ И ИХ ИЗМЕНЕНИЙ

В предыдущем разделе рассматривались главным образом вопросы получения, представления, анализа и качества ФРО как основного носителя информации о текстуре поликристаллического образца. Упомянулись также возможности получения более детальной информации ориентационного характера, связанной с изучением и описанием ориентационных корреляций. Конечной целью последовательного текстурного анализа является описание физических свойств макроскопического поликристаллического текстурированного (и, возможно, многофазного) образца на основании свойств составляющих его монокристаллов, текстурной и структурной информации. Эта область, однако, настолько обширна, что уже приближенная классифика-

ция рассматриваемых на практике свойств материалов лежит вне возможностей данного обзора. Перечислим только некоторые из этих свойств и процессов: прочность материалов, коррозия (растрескивание), деформационные свойства (упругие, пластические), радиационная стойкость, магнитная восприимчивость, диэлектрические свойства, старение или отказ технических материалов, изменение текстуры при фазовых переходах, эффекты памяти формы, рекристаллизация, скорость и поляризация акустических (сейсмических) волн, термическое расширение и влияние текстуры на свойства тонких слоев.

Наиболее полное представление читатель может получить из вышеупомянутых монографий и материалов международных конференций по текстурному анализу ICOTOM, проходящих раз в три года [55, 75]. Наряду с этим сборники [76–80] являются весьма ценными как для первичного ознакомления с большим спектром вопросов ТА, так и для впечатления об уровне их рассмотрения уже к концу прошлого столетия.

За последние десять лет сильно выросло число качественно новых материалов (композиты, металлические и керамические пены, структурные элементы микроэлектроники и наноматериалы), требующих рассмотрения свойств и взаимодействия их разномасштабных составляющих. Текстура, описываемая количественно при помощи ФРО, является при этом только одним из факторов, влияющих на свойства таких материалов.

Ниже мы остановимся в виде демонстрации лишь на самых простых случаях «статических» свойств в том смысле, что само свойство и текстура данного образца не меняются. Главный акцент будет сделан на описание упругих свойств поликристаллического образца, обладающего кристаллографической текстурой.

Есть большая область текстурного анализа «динамического» характера, о которой мы только упомянем. Речь идет о процессе превращения некоторой начальной текстуры под влиянием внешнего механического (например, прокатка) или термического (рекристаллизация, фазовые переходы) воздействия. Очевидно, что эта более сложная область основывается как на статических элементах текстурного анализа (оценка воздействующих упругих полей), так и на динамических характеристиках монокристаллов (например, системы скольжения данной кристаллической решетки и параметры их активации) [37].

2.1. Классическая проблема — упругие свойства однофазного материала. На микроскопическом (монокристаллическом («0»)) уровне закон Гука связывает напряжения σ и деформации ε (симметрические тензоры второго ранга) через жесткость C^0 или податливость S^0 (тензоры четвертого ранга, двоякосимметричные по их индексам):

$$\sigma = C^0 \cdot \varepsilon, \quad \varepsilon = S^0 \cdot \sigma, \quad C^0 = (S^0)^{-1}. \quad (41)$$

Соответствующие соотношения на макроскопическом (обозначаются « \underline{x} », где x — любое свойство) уровне имеют вид

$$\underline{\sigma} = \underline{C} \cdot \underline{\varepsilon}, \quad \underline{\varepsilon} = \underline{S} \cdot \underline{\sigma}, \quad \underline{C} = (\underline{S})^{-1}, \quad (42)$$

где $\underline{\sigma}$ и $\underline{\varepsilon}$ — наложенные на макроскопический образец напряжения и деформации соответственно. Пусть $\langle x \rangle$ означает некоторое усреднение по всем микроскопическим значениям переменной в объеме образца. По смыслу имеем $\underline{\sigma} = \langle \sigma \rangle$ и $\underline{\varepsilon} = \langle \varepsilon \rangle$. Так, из (41) следует

$$\underline{\sigma} = \langle C^0 \cdot \varepsilon \rangle, \quad \underline{\varepsilon} = \langle S^0 \cdot \sigma \rangle, \quad (43)$$

что явно отличается от желаемой формы (42). Проблема, которую следует решить, состоит в том, чтобы при помощи некоторой *микромеханической* модели извлечь из скобок в (43) усредненные $\langle \varepsilon \rangle$ или $\langle \sigma \rangle$, связь между которыми дают искомые \underline{C} или \underline{S} из соотношений (42).

Самыми простыми моделями (появившимися около ста лет назад) являются приближения Фойгта и Ройсса: $\varepsilon = \underline{\varepsilon} = \langle \varepsilon \rangle$ (« V » — Voigt [81]) или $\sigma = \underline{\sigma} = \langle \sigma \rangle$ (« R » — Reuss [82]), что в случае арифметического (« a ») усреднения типа (5) при помощи ФРО приведет к

$$\underline{C}^V = \langle C^0 \rangle^a, \quad \underline{S}^V = \langle C^V \rangle^{-1}, \quad \underline{S}^R = \langle S^0 \rangle^a, \quad \underline{C}^R = \langle S^R \rangle^{-1}. \quad (44)$$

Давно известно, что из-за пренебрежения в (44) реально существующим взаимодействием между зернами имеем (кроме случая монокристалла (41))

$$\underline{C}^V \neq \underline{C}^R \quad \text{и} \quad \underline{S}^V \neq \underline{S}^R. \quad (45)$$

Примечательно, что отличие может составить несколько сотен процентов для сильно анизотропных монокристалльных значений C^0 при отсутствии всяких преимущественных ориентаций $f(g) = 1$. Так, значение модуля Юнга ($E = 1/S_{3333}$) составляет для хаотично ориентированного поликристаллического биотита $E^V \approx 3E^R$ [83], а для графита $E^V \approx 18E^R$ [84].

Усилиями многих авторов удалось сузить эти зависящие от теоретической модели (« M ») границы \underline{C}^M и $1/\underline{S}^M$, учитывая взаимодействия зерен приближенно на различных статистических уровнях.

Эlegantным приемом в рамках арифметического усреднения при помощи ФРО является так называемое геометрическое среднее [83, 85, 86], символически представимое как

$$\langle C \rangle^{\text{geo}} = \exp(\langle \ln C^0 \rangle^a). \quad (46)$$

Поскольку

$$\langle \ln S^0 \rangle^a = -\langle \ln C^0 \rangle^a \quad (47)$$

(см. (41)), для геометрического среднего имеем

$$C^{\text{geo}} = (S^{\text{geo}})^{-1}, \quad (48)$$

т. е. геометрическое среднее удовлетворяет инверсионному соотношению

$$\underline{C} = \langle C \rangle = \langle S \rangle^{-1} = \underline{S}^{-1}, \quad (49)$$

которое физически выполняется как на микроскопическом уровне (см. (41)), так и для макроскопического образца (42).

Хотя для геометрического среднего явно не рассматриваются никакие элементы взаимодействия между зёрнами, а также не учитывается форма зёрен, выполнение соотношения (49) охватывает, по-видимому, важные аспекты реального физического усреднения статистического ансамбля зёрен. Так, для образцов с приближенно сферическими зёрнами при отсутствии ориентационных корреляций между зёрнами (ситуация *идеального беспорядка*) с помощью геометрического среднего хорошо описываются экспериментальные данные, и результаты близки к тем, которые получаются при помощи более сложных подходов (см. ниже) с использованием элементов взаимодействия между зёрнами. В вычислительном отношении применение геометрического среднего не намного сложнее, чем простые арифметические схемы Фойгта и Ройсса (44), поскольку в нем также используется ФРО только для арифметического усреднения (см. (46)). Несмотря на существование свободно доступных компьютерных программ для расчета геометрического среднего с любым типом текстуры [52], на практике часто ограничиваются самыми простыми схемами усреднения (44) или их комбинацией, например:

$$C_C(w) = wC^V + (1-w)C^R, \quad S_C(w) = (C_C(w))^{-1} \quad (0 \leq w \leq 1). \quad (50)$$

При этом обсуждается близость экспериментальных данных к результатам w -специфических вариантов смешивания для данного типа образцов. Наиболее часто применяется приближение Хилла [87] в предположении $w = 1/2$:

$$C_C^H = \frac{C^V + C^R}{2}. \quad (51)$$

В подобном подходе не предусматривается, что наряду с C -специфическим вариантом (50) существует равноправный S -специфический вариант:

$$S_S(w) = wS^V + (1-w)S^R, \quad C_S(w) = (S_S(w))^{-1}, \quad (52)$$

и что, как и в (45), инверсионное соотношение не выполняется для этих вариантов:

$$C_C(w) \neq C_S(w) = (S_S(w))^{-1}, \quad S_S(w) \neq S_C(w) = (C_C(w))^{-1}. \quad (53)$$

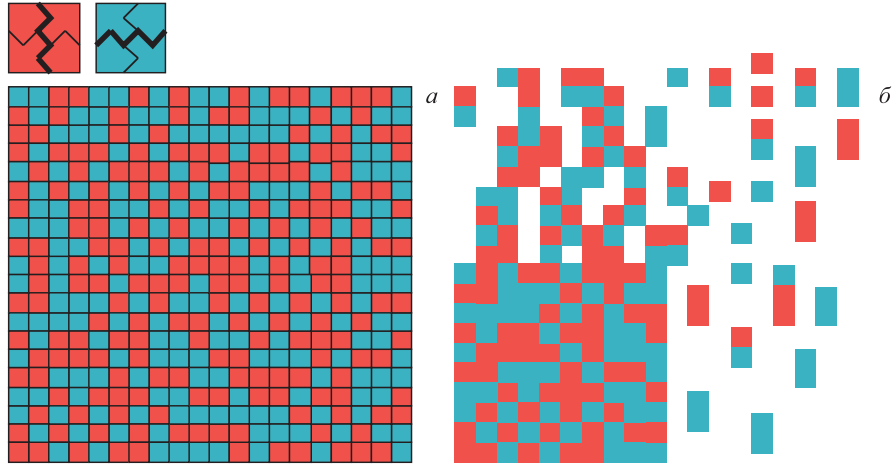


Рис. 15. Упрощенный пример двумерного однофазного поликристалла с анизотропными свойствами зерен в предположении, что возможны только две ориентации зерен. а) Отсутствие преимущественных ориентаций ($f(g) = 1$) и корреляций между ориентациями соседних зерен (случай *идеального беспорядка*). Все зерна крепко спаяны друг с другом и заполняют без пустот весь объем образца. б) Символически: пренебрежение всеми связями в расчетах на основе простых арифметических усреднений

Насколько *физичны* приближения последних двух типов, можно показать на основе простейшего примера. Пусть имеется двумерный образец с квадратными зернами, отличающимися коэффициентами жесткости в двух направлениях, и пусть существуют только две возможные ориентации зерен. На рис. 15, а символически показан макроскопический образец с отсутствием всяких преимущественных ориентаций ($f(g) \equiv 1$) и без всяких ориентационных корреляций между соседними зернами (*идеальный беспорядок*). Существенным моментом является то, что все зерна накрепко и без всяких пустот спаяны друг с другом. Рис. 15, б символизирует абсолютное разрушение (пренебрежение) всех этих связей при использовании приближений типа Фойгта и Ройсса (44), показанных на рис. 16. На рис. 17 представлены C - и S -специфические варианты, соответствующие приближению Хилла (52),

$$C_C^H = \frac{C^V + C^R}{2} = (S_C^H)^{-1} \quad \text{и} \quad C_S^H = (S_S^H)^{-1} = \left(\frac{S^V + S^R}{2} \right)^{-1}. \quad (54)$$

В принципе, эту схему можно итеративно продолжить, используя на каждом $(i + 1)$ -м шаге вместо C^V и C^R ранее полученные ${}^i C_C^H$ и ${}^i C_S^H$ (см. рис. 18). Эта итерационная схема стабильно сходится и приводит к так

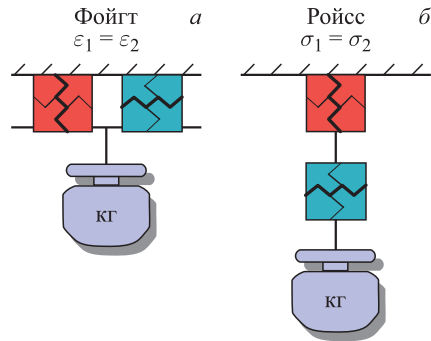


Рис. 16. Символическое представление характера расчетов упругих свойств образца, изображенного на рис. 15, а, с использованием приближений Фойгта (а) или Ройсса (б)

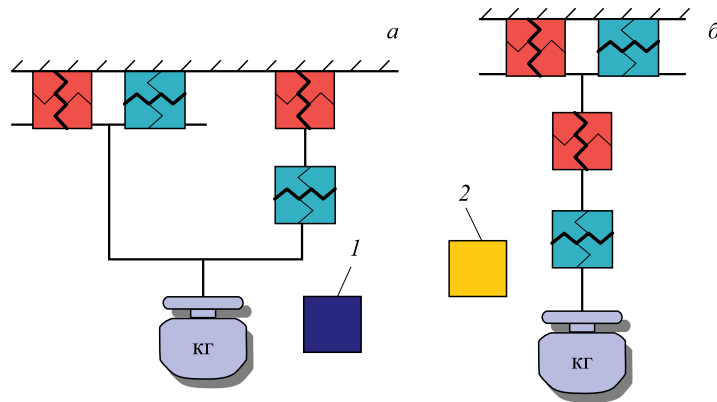


Рис. 17 (цветной в электронной версии). Две версии приближения Фойгта–Ройсса–Хилла, см. формулу (54). а) Синий квадрат (1) — C_C^H ; б) желтый квадрат (2) — C_S^H

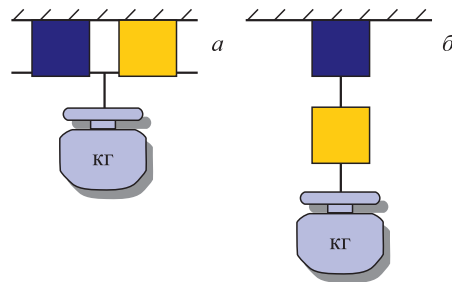


Рис. 18. Второй итерационный шаг суперприближения Хилла. а) ${}^2C_C^H$. б) ${}^2C_S^H$. ${}^1C_C^H$ — см. рис. 17, а; ${}^1C_S^H$ — см. рис. 17, б. ${}^0C_C^H = C^V$ — см. рис. 16, а; ${}^0C_S^H = C^R$ — см. рис. 16, б

называемому суперприближению Хилла (super):

$$C^{\text{super}} = (S^{\text{super}})^{-1}, \tag{55}$$

для которого, как и в случае геометрического среднего, выполняется инверсионное соотношение. Символически суперприближение Хилла можно интерпретировать как симметризованное геометрическое среднее из прибли-

жений Фойгта и Ройсса [88]:

$$C^{\text{super}} = \text{sym}(C^V \cdot C^R)^{1/2} = \text{sym}(C^R \cdot C^V)^{1/2} = [\text{sym}(S^V \cdot S^R)^{1/2}]^{-1}. \quad (56)$$

В схожем с геометрическим средним C^{geo} (46) суперприближении Хилла C^{super} не выполняется так называемый групповой принцип [84], который свойствен статическим ансамблям с идеальным беспорядком. Большого, без всякого учета взаимодействия зерен и оставаясь в рамках учета текстуры при помощи ФРО $f(g)$, добиться нельзя.

З. Хашин и С. Штрикман [89] использовали экстремальные принципы физических ансамблей, чтобы сузить границы C^V и C^R . Однако нахождение соответствующих границ осложнено для случая произвольной текстуры ($f(g) \neq 1$).

Следует заметить, что описанные тонкости разных приближений могут показаться академическими. В самом деле, металлы с кубической кристаллической структурой, часто используемые в обычной практике, обладают слабой анизотропией свойств уже на этапе монокристаллических значений C^0 . В этом случае физически корректные границы C^V и C^R для коэффициентов жесткости текстурированных образцов довольно близки, и приближения Хилла C_C^H (54) вполне достаточно для описания свойств материалов в инженерной практике. Однако начиная с металлов с гексагональной кристаллической симметрией ситуация меняется. Более того, большинство минералов, представляющих интерес при решении проблем в науках о Земле, обладают более низкой кристаллической симметрией с заметной анизотропией свойств монокристаллов.

Забегая вперед, для многофазных образцов ($\nu = 1, 2, \dots, N$) в простейшее приближение арифметического усреднения $\langle \rangle$ типа Фойгта и Ройсса (44) можно включить и усреднение по фазам с объемными весами v_ν . Однако в геологических образцах и современных материалах (например, в металлических пенах или керамиках) имеются пустоты в виде пор и трещин, для которых жесткости C_ν^0 обращаются в нуль. Соответственно, S_ν^0 обращается в бесконечность, и $C^R = 0$ теряет смысл, поскольку теоретически такой образец распадается (см. рис. 15, б), хотя в реальности он может оказаться весьма стабильным.

На основании этих соображений становится понятно, что взаимодействие между зернами необходимо каким-то образом учитывать. Поскольку такое взаимодействие происходит через границы зерен, а *точечных* границ не существует в трехмерном мире, в задачу автоматически вливаются новые параметры, такие как размер и форма зерен.

Рассматривая пока только бесконечный однофазный материал, можно предположить, что все зерна сферические и, обладая разными радиусами и не пересекаясь, заполняют весь объем образца.

Первым шагом учета взаимодействия ориентированных зерен является описание полей деформаций $\varepsilon(\mathbf{r})$ и напряжений $\sigma(\mathbf{r})$ в некоторой системе, состоящей из однородной бесконечной анизотропной матрицы (с жесткостью C^M), содержащей одно сферическое (или эллипсоидальное) зерно (с монокристаллической жесткостью C^0). Эти поля можно определить при помощи функции Грина, принадлежащей к матрице. Сама функция Грина находится путем рассмотрения специального случая точечного упругого возмущения матрицы. Такая возможность была сформулирована уже в 1900 г. Фредгольмом [90] и решена Эшелби (1957) в замкнутом виде для зерна эллипсоидальной формы [91, 92]. Рассмотрим несколько вариантов дальнейшего решения задачи учета взаимодействия.

В методе DEM (дифференциальный эффективный медиум), который основывается на приеме Эйнштейна (1906) [93], к матрице прибавляется (согласно весу $f(g)$) по одному зерну. В результате переходим к новой системе, которая в следующем шаге служит матрицей, и т. д.

Самосогласованный метод (Křöner, 1958) [94], в котором используется решение Эшелби, описывает жесткость системы C^S как сумму жесткости матрицы C^M и ее поляризации p , которая зависит как от жесткости матрицы C^M , так и от жесткости зерна C^0 , его формы (полуоси эллипсоида $\{a, b, c\}$) и от ориентации g его кристаллической решетки:

$$C^S = C^M + p(C^M, C^0, \{a, b, c\}, g). \quad (57)$$

Дальше осуществляется усреднение $\langle \rangle$ с учетом ФРО в предположении, что свойства системы в самосогласованном случае совпадают со свойствами матрицы, т. е. поляризация исчезает. Численно задача решается итерационным путем:

$${}^{i+1}C^S = {}^iC^S + \langle p({}^iC^S, C^0, \{a, b, c\}, g) \rangle, \quad (58)$$

что приводит к самосогласованному (self consistent — sc) решению $C^{\text{sc}} = {}^iC^S$ ($i \gg 1$).

Примечательно, что аналогичное (57) соотношение можно вывести и для податливостей S^S с поляризацией $q(C^M, C^0, \{a, b, c\}, g)$ и что в общем случае

$$C^{\text{sc}} \neq (S^{\text{sc}})^{-1}. \quad (59)$$

Равенство выполняется лишь для специального случая образца, содержащего только зерна одинаковой формы и только с одной фиксированной ориентацией этой формы в образце. Измеренная ФРО (распределение ориентаций кристаллических решеток в зернах образца) проявляет себя в этом случае разными ориентациями кристаллической решетки в разных зернах относительно их одинаковой и пространственно фиксированной формы. Поскольку для сферических зерен с соотношением полуосей $\{1, 1, 1\}$ вопрос ориентации формы в образце отпадает, самосогласованное приближение автоматически

выполняет инверсионное соотношение. Это объясняет весьма успешное применение самосогласованного приближения для широкого круга материалов с умеренно анизотропной жесткостью C^0 , с приближенно сферической формой зерен и ФРО произвольного типа. Для кристаллической решетки кубической симметрии, сферических зерен и изотропного случая ($f(g) = 1$) можно вывести замкнутые выражения для $C^{sc}(C_{\text{cubic}}^0, \{1, 1, 1\}, \text{iso})$ [95].

В случае, когда в образце имеются зерна одного типа несферической формы, которые, однако, по-разному ориентированы, возникает вопрос использования функции распределения ориентаций форм $F(g)$. Описание такого образца потребует рассмотрения многофазного случая, хотя его зерна принадлежат одной фазе. Ситуация упрощается, когда кристаллическая решетка во всех зернах данной эллипсоидальной формы одинаково ориентирована по отношению к координатной системе эллипсоида. В этом случае измеренная ФРО $f(g)$ выступает в качестве $F(g)$ и мы остаемся в рамках однофазного случая. Следует заметить, что в реальности такая упрощенная ситуация маловероятна. Как распределение ориентаций кристаллической решетки внутри эллипсоидальных зерен, так и распределение ориентаций самих эллипсоидальных зерен в образце могут быть не коррелированы друг с другом из-за различного характера процессов (технологических или геологических) их возникновения.

Учет распределения форм по ориентациям $F(g)$ связано с двумя осложняющими обстоятельствами даже в случае однофазного образца, когда $F(g) = f(g)$.

Во-первых, необходимо разрешить проблему (59). Это достигается при помощи так называемого GMS-приближения (GEO-MIX-SELF) [88], когда по аналогии с приемом (56) или (47) на каждом итерационном шаге из полученных ${}^i C^S$ и $({}^i S^S)^{-1}$ образуется среднее, для которого выполняется инверсионное соотношение и которое потом используется для $(i+1)$ -го шага в качестве ${}^i C^S$ или ${}^i S^S$ в выражениях для поляризации p или q (58).

Второе усложнение связано с тем, что определяющим элементом, в который в явном виде входит форма зерна $\{a, b, c\}$, является так называемый тензор Эшелби $S^{\text{Esh}}(C^M, \{a, b, c\})$ [96]. Он связан с вышеупомянутой функцией Грина, принадлежащей матрице M , и поэтому присутствует во всех приближениях, учитывающих каким-то образом взаимодействие и форму зерен, т. е. не только в самосогласованном варианте (57), (58), но и, например, в *сингулярном приближении* [97, 98].

Тензор Эшелби содержит нетривиальный двумерный интеграл и определен в координатной системе эллипсоида K_ε . Поэтому входящую в интеграл жесткость C^M , которая описывается в координатной системе образца K_A , сначала необходимо перевести в K_ε , а потом рассчитать тензор S^{Esh} . Это не представляет проблему, если все зерна имеют одинаковую форму и одинаково ориентированы. Однако если необходимо учитывать распределение ориента-

ций по форме $F(g)$, то в вычислительном отношении проблема усложняется во много раз ($\sim 200\,000$ для пятиградусных клеток в G -пространстве). Это одна из причин, по которой в научной литературе пока редко встречаются количественные результаты, описывающие роль формы зерна и ориентационного распределения несферических зерен [84].

Эффекты форм и ориентаций зерен в общем случае трудно предсказуемы, так как зависят от большого числа (максимум 21 для триклинной симметрии) независимых компонент C_{ijkl}^0 тензора жесткости данного материала.

Рассмотрим, например, фазовые скорости акустических продольных волн V_p , а также расщепление скоростей поперечных волн $\Delta V_s = V_{s1} - V_{s2}$ двух гексагональных материалов (цинк и биотит). Коэффициент анизотропии продольных волн k можно определить как

$$k = 200 \% \cdot \frac{V_{p \max} - V_{p \min}}{V_{p \max} + V_{p \min}}. \quad (60)$$

Модельный эллипсоид (зерно), ось Z_ε которого образует угол 20° с Z_A — осью образца, равномерно тиражируется вокруг Z_A , чтобы создать модельный образец, изотропный в плоскости $X_A Y_A$. Такая симметрия часто встречается в геологических пластах.

Данные расчетов табл. 1 и 2, полученные при помощи GMS-приближения, показывают, что с ростом остроты «копеечной» ($\{a = b > c\}$) или «игловатой» ($\{a = b < c\}$) формы эллипсоидального зерна свойства образцов двух

Таблица 1. Зависимость двух акустических параметров k и максимального ΔV_s от формы зерен. Модельный образец: эллипсоид с полуосями $\{a, b, c\}$ ($K_\varepsilon = K_B$), отклоненный своей осью Z_ε на 20° от оси Z_A в направлении оси X_A , равномерно размножен вокруг оси Z_A . Дополнительно приведены соответствующие значения, полученные для других вариантов усреднения с точечным характером зерен и без явного учета их взаимодействия

$\{a, b, c\}$	Цинк		Биотит	
	$k, \%$	$\max \Delta V_s, \text{ м/с}$	$k, \%$	$\max \Delta V_s, \text{ м/с}$
1, 1, 100	37,3	615,4	49,5	2109,3
1, 1, 10	37,3	615,4	49,7	2131,4
1, 1, 2	37,4	619,0	50,8	2229,5
1, 1, 1	37,7	624,5	51,0	2251,7
Фойгт	34,6	594,0	59,3	2192,7
Гео	38,3	635,6	54,5	2508,5
Super	38,2	632,3	45,8	1937,0
Ройсс	41,7	679,6	32,9	1699,4
1, 1, 0,1	39,1	638,8	45,2	1892,1
1, 1, 0,02	39,5	638,8	42,7	1732,7
1, 1, 0,01	39,6	638,9	42,3	1707,7

Таблица 2. Использованные монокристалльные упругие модули (гексагональная кристаллическая симметрия) из [99]

Монокристалл	C_{ij}^0 , ГПа					ρ , г/см ³
	C_{11}^0	C_{12}^0	C_{13}^0	C_{33}^0	C_{44}^0	
Цинк	159,0	32,3	48,2	62,1	40,0	7,14
Биотит	186,0	32,4	11,6	54,0	5,8	3,05

фаз качественно отличаются. Так, например, для цинка коэффициент анизотропии k для «копечных» зерен по сравнению со сферическими растёт, однако сильно падает в случае биотита. Такие же отличающиеся тенденции можно увидеть, сравнивая максимальные значения ΔV_s или $V_{p \min}$ (в направлении Z_A), $V_{p \max}$ (в плоскости $X_A Y_A$).

2.2. Многофазные образцы. Формально GMS-приближение для многофазных образцов отличается от однофазного случая только тем, что в усреднениях $\langle \rangle$ типа (58) для ${}^{i+1}C^S$ и ${}^{i+1}S^S$ дополнительно учитывается суммирование по фазам ν ($\nu = 1, 2, 3, \dots, N$) с соответствующими весами v_ν ($\sum_{\nu=1}^N v_\nu = 1$) и характеристиками каждой входящей в образец фазы ${}^\nu C^0$, $\{a, b, c\}_\nu$, $f_\nu(g)$, $F_\nu(g)$. Как уже отмечалось выше, при описании пор или трещин могут возникать трудности из-за необходимости учета податливостей, обращающихся в бесконечность. Однако в выражения поляризации p^ν (57) и q^ν входят только тензоры жесткости ${}^\nu C^0$, компоненты которых могут обращаться в нуль, не приводя к каким-либо неопределенностям. Более того, качество GMS-приближения, по-видимому, учитывающего наиболее важные аспекты взаимодействия зерен, отражается и в том, что для каждого типа пор в реальности существует некоторый критический объем ${}^\nu v^{cr}$, при котором статически возможно образование каналов из пор, проходящих через весь образец, что может вызвать распад образца. В самом деле, при объеме пор больше критического значения итерационный процесс (58) быстро приведет к нулевым жесткостям.

Подобно влиянию формы зерна на упругие свойства однофазного образца влияние пор, их формы, объема пористости и ориентационных распределений на свойства многофазного образца также довольно сложно предугадать. В простых случаях это возможно, например, при рассмотрении зависимости скорости звука от направления распространения акустической волны или же от объема пор определенной формы и ориентации в изотропной матрице. Такие зависимости, полученные при помощи GMS-приближения, показаны на рис. 19.

При помощи GMS-приближения можно успешно описать и более сложные случаи, когда имеются несколько типов пор (микроскопического (тре-

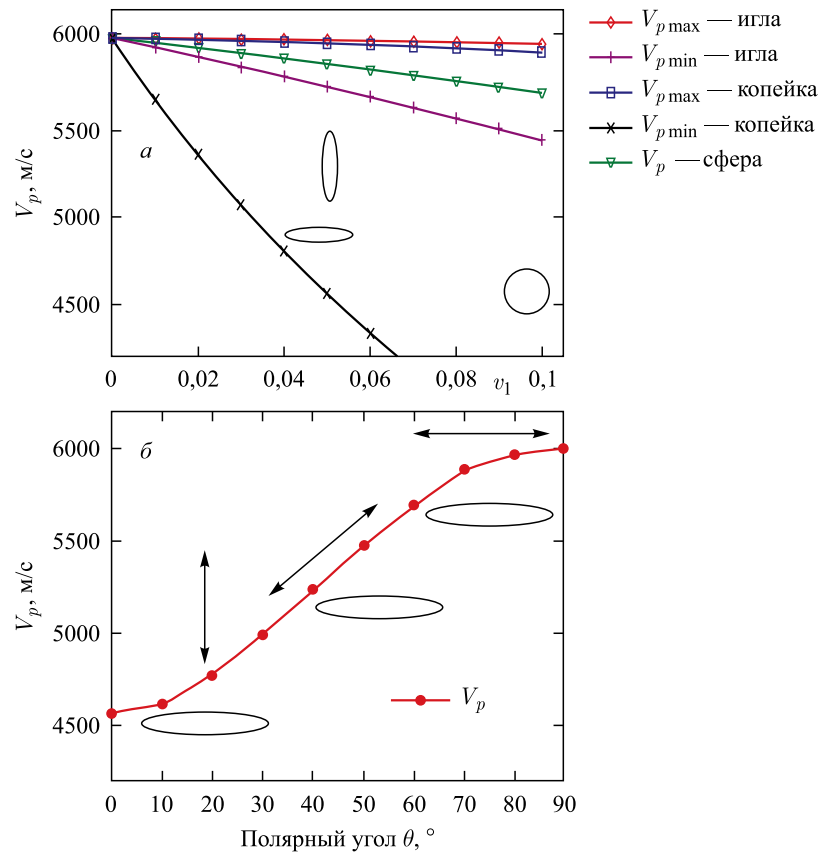


Рис. 19. а) Максимальные и минимальные значения фазовых скоростей продольных акустических волн V_p в зависимости от формы и объемного содержания пор v_1 в изотропной кварцевой матрице. Форма пор: $\{1, 1, 10\}$ — игла; $\{1, 1, 0, 1\}$ — копейка; $\{1, 1, 1\}$ — сфера. б) Значения фазовых скоростей продольных акустических волн V_p в зависимости от направления распространения звука в кварцевой изотропной матрице, содержащей поры копейчной формы $\{1, 1, 0, 1\}$ с объемным содержанием $v_1 = 0,05$, ориентированные параллельно $X_A Y_A$ -плоскости образца

щины) и макроскопического характера) с разными ориентационными распределениями [99].

Используя приближения, в которых учитывается взаимодействие зерен и пор, можно, в принципе, рассматривать и обратную задачу, когда из макроскопических данных извлекаются монокристалльные νC^0 [101], недоступные измерению или теоретически освобожденные от жидких включений [102].

В любом случае для успешного описания свойств некоторого образца необходимо использовать как можно больше экспериментальной информации о его структурных и других характеристиках (например, форма зерен, пористость и т. п.).

Во всех вышеописанных современных подходах негласно рассматриваются бесконечные среды. Это приводит к тому, что в математические алгоритмы входят только относительные, безразмерные величины (например, объемное содержание фаз v_v или отношение полуосей эллипсоида $\{a, b, c\}$ эквивалентно $\{a/c, b/c, 1\}$), т. е. все абсолютные данные о размерах или расстояниях теряются. Поэтому область удачного применения обсуждаемых теоретических подходов ограничена. Для преодоления ограничений рассматриваемые образцы, количество и качество экспериментальных данных, а также выбор используемого приближения должны соответствовать друг другу.

Как уже упоминалось, в современных материалах (композиты) или в сложных геологических образцах может существовать иерархия масштабных уровней (микроскопических, мезо- и макроскопических) со своими специфическими размерами, в которых следует употреблять специфические статистические или аналитические усреднения. Такие *мультимасштабные* подходы усиленно разрабатываются в последние годы [103]. Они стали возможными благодаря мощности современной вычислительной техники. На первичном уровне решаются задачи расчета экспериментально труднодоступных монокристаллических характеристик C^0 с использованием аппарата квантовой механики [104]. На следующем уровне, работающем с микроскопическими частями зерен или трещин, рассматриваются свойства подобных ансамблей ограниченного размера [105–107] и т. д. Ясно, что качество разномасштабных подходов во многом зависит от числа достоверных параметров, характеризующих подобные системы. И чем сложнее рассматриваемые среды, тем быстрее достигаются пределы возможностей даже с учетом больших вычислительных мощностей.

2.3. Анализ остаточных деформаций и напряжений. В образцах как инженерно-технического, так и геологического происхождения имеются области, где кристаллическая решетка интересующей фазы может быть по каким-то причинам метастабильно деформирована. Упругая реакция решетки порождает соответствующие напряжения, представляющие интерес как в объеме зерна, так и в области нескольких соседних зерен или в ограниченной макроскопической части образца, содержащей большое число зерен.

При изучении упругих полей в областях последнего типа следует учитывать кристаллографическую текстуру в виде ФРО $f(g)$. В инженерном мире для этого используется рабочий термин *остаточные напряжения*, или *остаточные деформации*. При этом обычно делается ряд упрощений и приближений. В принципе, они допустимы, если полученные результаты используются

либо для оценки порядка величины напряжений или деформаций, либо для сравнительного описания состояния интересующей области образца или для сравнения состояния однотипных образцов [108].

Нахождение абсолютных значений напряжений, в особенности в случае непростой текстуры в образце, является довольно сложной задачей, и экспериментально не подкрепленные предположения могут привести к значениям напряжений, для которых даже знак не определен однозначно.

Идея определения остаточных деформаций или напряжений с помощью дифракционного метода на первый взгляд проста. При помощи пучка частиц с длиной волны λ и с подбором угла рассеяния θ можно настраиваться (используя (3)) на определенный тип кристаллографических плоскостей $\mathbf{h}_i = (h_i k_i l_i)$ исследуемой фазы, для которой известна структура, т. е. известны межплоскостные расстояния этих плоскостей $d_0(\mathbf{h}_i)$. Интенсивность сигнала в детекторе пропорциональна значению полюсной фигуры (2) (см. рис. 3), где \mathbf{y} описывает вектор рассеяния в координатной системе образца K_A . Варьируя λ или θ , можно точно определить положение максимума дифракционного пика, соответствующего $d(\mathbf{h}_i, \mathbf{y}_j)$.

Для выбранных межплоскостных расстояний в образце значения $d(\mathbf{h}_i, \mathbf{y}_j)$ деформированной решетки будут отличаться от $d_0(\mathbf{h}_i)$. Вращая образец в спектрометре (или используя несколько детекторов в разных позициях), при помощи достаточно большого числа различных $d(\mathbf{h}_i, \mathbf{y}_j)$ сравнением с $d_0(\mathbf{h}_i)$ можно оценить степень искажения исходной решетки, т. е. определить искомую деформацию ε и эквивалентные ей напряжения σ в исследуемой области образца.

Однако на практике эта схема имеет ряд тонкостей, сильно ограничивающих возможности ее осуществления и налагающих весьма жесткие условия на качество эксперимента. Как уже упоминалось, интенсивность детекторного сигнала пропорциональна значению на полюсной фигуре $P_{\mathbf{h}_i}(\mathbf{y}_j)$. Очевидно, что в случае реальной текстуры, отличной от изотропного случая ($f(g) = 1 = P_{\mathbf{h}_i}(\mathbf{y}_j)$), для выбранных направлений \mathbf{h}_i и \mathbf{y}_j значение полюсной плотности $P_{\mathbf{h}_i}(\mathbf{y}_j)$ может быть равно нулю или иметь небольшую величину. Это значит, что соответствующий пик в дифракционном спектре отсутствует или обладает настолько плохой статистикой, что определить его смещение относительно $d_0(\mathbf{h}_i)$ не представляется возможным. Напротив, случай нулевого экспериментального значения $P_{\mathbf{h}_i}(\mathbf{y}_j) = 0$ (более корректно $\tilde{P}_{\mathbf{h}_i}(\mathbf{y}_j) = 0$ (24)) является весьма ценным для текстурного анализа, так как означает, что ФРО $f(g)$ точно равна нулю в G -пространстве вдоль проекционных нитей $g_t(\mathbf{h}_i, \mathbf{y}_j, \tilde{\varphi})$ и $g_t(-\mathbf{h}_i, \mathbf{y}_j, \tilde{\varphi})$ (8) и их эквивалентов при наличии кристаллической симметрии или статистической симметрии образца.

Поскольку ниже более подробно рассматривается применение нейтронной дифракции в связи с изучением геологических образцов, для определе-

ния остаточных деформаций или напряжений размер исследуемого объема образца GV играет важную роль. Этот объем зависит от размеров и коллимации падающего пучка и детектора. Предполагая, что исследуемые образцы (например, сферической формы диаметром 5 см) однородны по отношению к их текстуре, для определения полюсных фигур можно использовать имеющийся широкий пучок нейтронов полностью, даже целиком облучая весь образец. Этим обеспечивается хорошая статистика измеренных данных и умеренные времена измерений. При определении остаточных упругих деформаций/напряжений возникает совершенно другая задача. В пределах всего образца имеется метастабильное равновесие по напряжениям, т.е., грубо говоря, суммарные по всему образцу искажения решеток в среднем выравниваются.

Однако интерес представляют конечные деформации или напряжения, определение которых по смыслу и размерам их зон в образце требует объема GV, много меньшего по сравнению с образцом. Уменьшение измеряемого объема ухудшает статистику измеренных дифракционных пиков в единицу времени из-за уменьшения числа зерен с интересующей ориентацией. С другой стороны, определение точной позиции максимума дифракционного пика нуждается в хорошей статистике. Как будет видно из более детальных рассмотрений, смещение дифракционного пика является усредненным сдвигом дифракционных пиков от отдельных зерен. Независимо от того, учитывается измеренная или предполагаемая текстура (например, изотропность) для определения остаточных ε и σ , число зерен в GV должно быть достаточно велико, чтобы могло хорошо представить данный тип текстуры.

Кажущийся простым изотропный случай требует для воспроизведения данного типа текстуры даже большего числа зерен, чем случай с острой текстурой. Для представления одинаково ориентированных монокристаллов достаточно одного зерна. Представление изотропного бестекстурного случая потребует как минимум нескольких тысяч зерен, особенно для материалов с низкой кристаллической симметрией.

В классическом определении остаточных деформаций в инженерной практике используется рентгеновское излучение, которое ограничено исследованием поверхностных слоев в основном металлических образцов. Нейтроны имеют преимущество перед рентгеновскими лучами в том, что GV может, в принципе, находиться и в глубине больших образцов.

Новые перспективы открылись с появлением сильных источников синхротронного излучения [109]. Благодаря большой интенсивности и высокой фокусировке пучка возможно также GV и в более глубоких областях образцов. Практически доступным становится изучение свойств и поведения даже единичных зерен. Усредняя результаты по большому числу индивидуальных зерен, можно прийти прямым путем к искомым упругим полям.

Следует подчеркнуть еще одно обстоятельство, усложняющее получение достоверных результатов. Порядок остаточных напряжений σ лежит в области, оцениваемой в МПа, а порядок жесткости C^0 монокристаллов — в области ГПа. Отсюда порядок определяемых деформаций оценивается как $\varepsilon \sim 10^{-3}$. Поэтому точность (разрешение) используемых спектрометров желательна на уровне 10^{-4} . Этого трудно добиться при юстировке вращающихся частей гониометра или при фокусировке пучка в центре спектрометра, вокруг которого вращается образец. Кроме того, в ходе длительных экспериментов изменение температуры в измерительном комплексе может привести к ухудшению точности измерений до 10^{-3} за счет теплового расширения некоторых частей спектрометра и т. д.

Наиболее критическим моментом при определении абсолютных значений остаточных деформаций ε является переход от реально измеренных межплоскостных расстояний $d(\mathbf{h}_i, \mathbf{y}_j)$ к элементам тензора деформаций при помощи сравнения с недеформированными $d_0(\mathbf{h}_i)$. Как правило, точные параметры структуры недеформированной кристаллической ячейки данного образца неизвестны и могут заметно отличаться от литературных данных присутствием в кристаллической решетке загрязнений или дефектов. Разработаны способы определения эффективных d_0 для измеряемого образца. Для них требуются в любом случае дополнительные усилия в процессе текущего эксперимента или независимые измерения с помощью другого эксперимента [110].

Допустим, что все перечисленные трудности успешно преодолены. Как выглядит логическая цепочка восстановления искомого ε или σ из измеренных $d(\mathbf{h}_i, \mathbf{y}_j)$?

Деформации ε и напряжения σ являются тензорами второго ранга. Говоря об их компонентах ($\varepsilon_{kl} = \varepsilon_{lk}$, $\sigma_{kl} = \sigma_{lk}$, $k, l = 1, 2, 3$) и соответствующих значениях, необходимо определить, в какой координатной системе эти компоненты описаны: в K_A (образца), в K_B (кристаллита (исследуемой фазы)) или в K_L (лабораторной координатной системе). Если теоретически учитывается эллипсоидальная форма зерен, то понадобится даже четвертая координатная система K_ε .

Лабораторная координатная система K_L определяется направлением пучка от источника излучения до GV образца и рассеянным пучком от GV до детектора. Угол между этими двумя прямыми $< 180^\circ$, и биссектриса угла определяет координатную ось Z_L параллельно \mathbf{N} -вектору рассеяния. Ось X_L лежит в плоскости двух пучков и направлена в сторону источника. Каждому положению детектора принадлежит своя система K_L . Переход от измеренных $d(\mathbf{h}_i, \mathbf{y}_j)$ к деформациям ε осуществляется через соотношение

$$\varepsilon_{33}^L(\mathbf{h}_i, \mathbf{y}_j) = \frac{d(\mathbf{h}_i, \mathbf{y}_j) - d_0(\mathbf{h}_i)}{d_0(\mathbf{h}_i)}. \quad (61)$$

Нас интересуют в конечном счете все компоненты ε_{kl}^A или σ_{kl}^A , заданные в K_A . Переход $K_A \rightarrow K_L$ осуществляется матрицей вращения

$$g^{L \leftarrow A} = \{\mathbf{y}, 0\}, \quad (62)$$

$$\varepsilon_{33}^L(\mathbf{h}_i, \mathbf{y}_j) = \{\mathbf{y}_j, 0\}_{3k} \{\mathbf{y}_j, 0\}_{3l} \varepsilon_{kl}^A(\mathbf{h}_i, \mathbf{y}_j). \quad (63)$$

При самом грубом подходе (приближение Фойгта) предполагается, что, воспользовавшись соотношением (63) и зная измеренные ($\varepsilon_{33}^L(\mathbf{h}_i, \mathbf{y}_j)$) значения для фиксированного направления \mathbf{h}_i и разных \mathbf{y}_i , можно подгонять искомые ε_{kl}^A , заменяя ими соответствующие деформации ε_{kl}^A справа в (63). Очевидно, что эти результаты будут зависеть от \mathbf{h}_i в отличие от реально существующего среднего ε в GV , не зависящего от того, как оно будет измерено.

При более детальном подходе $\varepsilon_{33}^L(\mathbf{h}_i, \mathbf{y}_j)$ рассматривается как усредненная величина $\bar{\varepsilon}_{33}^L(\mathbf{h}_i, \mathbf{y}_j)$ деформаций $\varepsilon_{33}^L[g_t(\tilde{\varphi})]$ по всем зернам с ориентациями $g_t(\tilde{\varphi}) = g_t(\mathbf{h}_i, \mathbf{y}_j; \tilde{\varphi})$, принадлежащими проекционной нити (8). При этом следует учесть как нормальное рассеяние (24), так и усреднение по всем физически эквивалентным \mathbf{h}_i , следующим из кристаллической симметрии (Σ):

$$\bar{\varepsilon}_{33}^L(f) = \bar{\varepsilon}_{33}^L(\mathbf{h}_i, \mathbf{y}_j) = \frac{1}{2\pi} \sum_0^{2\pi} \varepsilon_{33}^L[g_t(\tilde{\varphi})] f \frac{(g_t(\tilde{\varphi})) d\tilde{\varphi}}{\tilde{P}_{h_i}(\mathbf{y})}. \quad (64)$$

Существует множество вариантов численного определения интеграла в (64), а также видоизменения его для учета дополнительных физических требований, как будет описано ниже.

Представляя $\varepsilon_{33}^L(g_t(\tilde{\varphi}))$ через монокристаллические константы S_{ijkl}^0 , заданные в K_B , и компоненты тензора напряжений $\sigma^L(t)$ или $\sigma^A(t)$, и предполагая (соответственно приближению Ройсса), что $\sigma^A(t)$ не зависит от параметров проекционной нити t , а равняется искомому макроскопическому $\bar{\sigma}^A$, соотношение (64) можно привести к виду (${}^t g^{LB} = \{\mathbf{h}_i, \tilde{\varphi}\}$)

$$\bar{\varepsilon}_{33}^L(\mathbf{h}_i, \mathbf{y}_j) = S_{33kl}^{LA}(\mathbf{h}_i, \mathbf{y}_j) \bar{\sigma}_{kl}^A, \quad (65a)$$

$$S_{33kl}^{LA}(\mathbf{h}_i, \mathbf{y}_j) = S_{33mn}^L \{\mathbf{y}, 0\}_{mk} \{\mathbf{y}, 0\}_{nl}, \quad (65b)$$

$$S_{33mn}^L(\mathbf{h}_i, \mathbf{y}_j) = \frac{1}{2\pi} \sum_0^{2\pi} {}^t g_{3\tau}^{LBt} g_{3u}^{LBt} g_{mv}^{LBt} g_{nw}^{LB} f \frac{(g_t(\tilde{\varphi})) d\tilde{\varphi} S_{\tau uvw}^0}{\tilde{P}_{h_i}(\mathbf{y})}. \quad (66)$$

Приближение (66) можно охарактеризовать как усреднение Reuss path [111].

В гармоническом аппарате с использованием представления ФРО $f(g)$ в виде рядов (6) интеграл по $\tilde{\varphi}$ может быть вычислен, что приведет к очень сложным результирующим выражениям [112, 113].

Соотношение (66) станет более компактным и прозрачным после введения так называемых моментных полюсных фигур типа ($m = 0, 1, 2$)

$$I_m(\mathbf{h}_i, \mathbf{y}_j) = \int_0^{2\pi} \sin(m\tilde{\varphi}) f(g_t(\tilde{\varphi})) d\tilde{\varphi} \quad \text{или} \quad (67)$$

$$J_m(\mathbf{h}_i, \mathbf{y}_j) = \int_0^{2\pi} \cos(m\tilde{\varphi}) f(g_t(\tilde{\varphi})) d\tilde{\varphi},$$

вбирающих в себя всю текстурную информацию [111]. Примечательно, что (67) требует истинную, не редуцированную ФРО $f(g)$, и что даже в этом простом случае (Reuss-path) бесконечная сумма по l не обрывается.

Приближение (66) не содержит никаких элементов взаимодействия зерен с ориентациями, принадлежащими проекционной нити, в данной форме учета ФРО.

Поэтому как следующий шаг вводится вариант геометрического усреднения по этому ансамблю (${}^L S^{p\text{geo}}(\mathbf{h}_i, \mathbf{y}_j)$) — усреднение Reuss path-geo, для которого тогда выполняется инверсионное соотношение. В этом случае необходимо учитывать интегралы в (67) до $m = 4$.

Еще более последовательной является попытка учета влияния соседних зерен, не принадлежащих данной проекционной нити. Это достигается при помощи конструкции, содержащей ${}^L S^{p\text{geo}}(\mathbf{h}_i, \mathbf{y}_j)$ и объемное геометрическое среднее ${}^L S^{\text{geo}}$, что приводит к усреднению bulk path-geo ${}^L S^{Bp\text{geo}}$:

$${}^L S^{Bp\text{geo}} = \text{sym}({}^L S^{p\text{geo}} \cdot {}^L S^{\text{geo}})^{1/2}. \quad (68)$$

В табл. 3 из [111] приведены численные значения $S_{33mn}^{LA}(\mathbf{h}_i, \mathbf{y}_j)$ для обсуждаемых приближений с использованием модельной ФРО.

Таблица 3. Численные значения упругих податливостей $S_{33mn}^{LA}(\mathbf{h}_i, \mathbf{y}_j)$ для различных приближений с использованием распределения типа Santa Fe в качестве ФРО, упругие постоянные S^0 для меди и экспериментальные условия: $\mathbf{y}_j = (\varphi_j = 90^\circ, \vartheta_j = 40^\circ)$, $\mathbf{h}_i = (001)$ и $\bar{P}_{\mathbf{h}_i}(\mathbf{y}_j) = 1,72$

m	n	$S_{33mn}^{LA}(\mathbf{h}_i, \mathbf{y}_j), \text{ГПа}^{-1}$		
		Reuss path	Reuss path-geo	Bulk path-geo
1	1	$-0,51 \cdot 10^{-3}$	$-0,67 \cdot 10^{-3}$	$-0,14 \cdot 10^{-3}$
2	2	$0,40 \cdot 10^{-3}$	$0,61 \cdot 10^{-3}$	$0,99 \cdot 10^{-3}$
3	3	$0,25 \cdot 10^{-2}$	$0,25 \cdot 10^{-2}$	$0,28 \cdot 10^{-2}$
2	3	$0,61 \cdot 10^{-2}$	$0,54 \cdot 10^{-2}$	$0,54 \cdot 10^{-2}$
1	3	0	0	0
1	2	0	0	0

Как видно, численные значения S_{33mn}^{LA} , полученные с применением различных микромеханических моделей, могут довольно заметно отличаться друг от друга, что, несомненно, сказывается на результатах подгоняемых искомым напряжениям σ_{kl}^A по экспериментальным деформациям $\varepsilon_{33}^L(\mathbf{h}_i, \mathbf{y}_j)$ согласно уравнению (21).

Исторически первыми исследовались остаточные напряжения поверхностных слоев образцов, где предполагалось, что $\bar{\sigma}_{k,3}^A = 0$ [114]. При этом в случае отсутствия текстуры ($f(g) = 1$) все моментные полюсные фигуры (67) с $m \neq 0$ равны нулю, что приводит к тому, что в приближении Ройсса податливости $S_{33mn}^L(\mathbf{h}_i, \mathbf{y}_j)$ не зависят от $\mathbf{y} = (\vartheta, \varphi)$. Податливости $S_{33mn}^{LA}(\mathbf{h}_i, \mathbf{y}_j)$ и, соответственно, деформации $\varepsilon_{33}^L(\mathbf{h}_i, \mathbf{y}_j)$ зависят в этом случае линейно от $\sin^2 \vartheta$. Правило $\sin^2 \Psi$ ($\Psi \cong \vartheta$) хорошо себя оправдало в инженерной практике. Эта простая зависимость верна также в случае любой ФРО ($f(g) \neq 1$) для $\mathbf{h}_i = (001)$ и всех кристаллических симметрий, содержащих оси вращения выше второго порядка, а также для $\mathbf{h}_i = (111)$ и кубической симметрии. К сожалению, условие $\bar{\sigma}_{k,3}^A = 0$ не выполняется в общем случае, и нелинейные зависимости экспериментальных данных $\varepsilon_{33}^L(\mathbf{h}_i, \mathbf{y}_j)$ от $\sin^2 \Psi$ указывают на то, что задача определения напряжений $\bar{\sigma}^A$ требует более сложного подхода через модельные $S_{33mn}^{LA}(\mathbf{h}_i, \mathbf{y}_j)$, кратко описанные выше.

Есть и другие варианты (в рамках подхода Ройсса) учета в интеграле (66) элементов взаимодействия зерен. По аналогии с описанием объемных упругих свойств поликристаллов можно рассматривать самосогласованные схемы на основе тензора Эшелби [110]. Они еще более усложняют расчеты S_{33mn}^L , не приводя к существенному улучшению результатов.

В изотропном случае ($f(g) = 1$) компоненты S_{33mn}^L не зависят от \mathbf{y} и связаны с так называемыми ХЕС (X-ray elastic constants, рентгеновские упругие константы), которые можно определить экспериментально, используя правило $\sin^2 \Psi$. При наличии текстуры рассматривают DEC (diffraction elastic constants, дифракционные упругие константы).

В приближении Фойгта (все зерна одинаково деформированы в GV) для изотропного случая податливости S_{33mn}^L в (65) просто приравнивают объемному приближению податливостей $\bar{V} S_{33mn}^L = \{C^V\}_{33mn}^{-1}$ (см. (44)). Последние не зависят от дифракционного рефлекса $\mathbf{h}_i(hkl)$ в отличие от экспериментальных S_{33mn}^L (ХЕС).

Интересной является идея Попа [115], в первую очередь направленная не на определение самих $\bar{\sigma}^A$, а на описание поправок положений дифракционных пиков за счет остаточных деформаций, вызванных остаточными напряжениями. С такими поправками качество определения кристаллических структур по методу Ритвельда [116] повышается. Исходя в (64) из того, что значение полюсной фигуры $\tilde{P}_{\mathbf{h}_i}(\mathbf{y}_j)$ известно экспериментально для направления \mathbf{y}_i , оставшиеся $(\mathbf{h}_i, \mathbf{y}_j)$ -зависимости входят в числитель (64) только

через ориентации g , принадлежащие проекционной нити (8). По аналогии с (9) числитель в (66) интерпретируется как проекция некоторой функции $E_{33}(g)$, которую можно разложить в ряд типа (6). Обрывая сумму по l при некотором L , можно постараться определить ее фурье-коэффициенты ${}^{33}C_{mn}^l$, используя измеренные деформации $\varepsilon_{33}^L(\mathbf{h}_i, \mathbf{y}_j)$. Однако если вспомнить трудности с воспроизведением ФРО из полюсных фигур и тот факт, что уже в простом приближении Ройсса требуется знание полной ФРО $f(g)$ (а не редуцированной $\tilde{f}(g)$), то даже предположение о плавной зависимости $E_{33}^L(g)$ от g не дает уверенности в успехе этого направления решения данной задачи. Численные результаты, соответствующие этому подходу с реальными или модельными экспериментальными данными, авторам неизвестны.

Наконец, следует отметить, что, имея хорошо изученный образец и надежный спектрометр, можно постараться решить дифракционным путем и обратную задачу, т.е. определить монокристаллические упругие постоянные C^0 , например, в области высоких температур или сверхвысоких давлений (ГПа), когда обычные экспериментальные методы неприменимы [117]. Налагая известные напряжения $\bar{\sigma}_{kl}^A$ на образец и измеряя соответствующие деформации $\varepsilon_{33}^L(\mathbf{h}_i, \mathbf{y}_j)$, при помощи соотношения (65) и конкретной микроскопической модели, которая задает модельные $S_{33kl}^{LA}(\mathbf{h}_i, \mathbf{y}_j, C^0)$, искомые (максимум 21) постоянные C_{klmn}^0 можно определить подгонкой. При этом рекомендуется проводить сначала компьютерный эксперимент, так как может оказаться, что измеренные деформации $\varepsilon_{33}^L(\mathbf{h}_i, \mathbf{y}_j)$ совсем или только весьма слабо зависят от некоторых искомых констант C_{klmn}^0 . Кроме того, придавая модельным деформациям $\varepsilon_{33}^L(\mathbf{h}_i, \mathbf{y}_j)$ некоторые экспериментальные ошибки, можно убедиться в чувствительности данной процедуры по отношению к таким ошибкам [101].

3. ПРИМЕНЕНИЕ НЕЙТРОНОГРАФИЧЕСКОГО ТЕКСТУРНОГО АНАЛИЗА В РЕШЕНИИ ЗАДАЧ ГЕОЛОГИИ И ГЕОФИЗИКИ

3.1. Экспериментальный текстурный анализ в геонауках. Горные породы представляют собой одно- или многофазные поликристаллические агрегаты, предпочтительные ориентировки зерен у которых образуются в процессе кристаллизации, пластической деформации, рекристаллизации, ползучести, фазовых переходов, осадконакопления и т. п. Все экспериментальные методы получения количественной информации о кристаллографических текстурах горных пород можно разделить на две большие группы.

К первой группе относятся методы, которые получили свое развитие уже в начале XX в. для изучения предпочтительных ориентировок минералов в горных породах. В 1893 г. на русском и немецком языках была опубликована работа Е. Федорова «Теодолитный метод в минералогии и петрографии» [4], сыгравшая большую роль в развитии микроструктурного анализа и

положившая начало экспериментальным методам определения ориентационных текстур горных пород. В основе метода лежит измерение индивидуальных ориентировок зерен минералов в образце горной породы с помощью оптического микроскопа или методом U-stage. Исследование кристаллов этим методом производится на особом универсальном (федоровском) столике, который крепится на столике поляризационного микроскопа. Федоровский столик имеет несколько осей, позволяющих выводить препарат из положения, перпендикулярного оси микроскопа, и вращать его в различных направлениях в пространстве. Измерение ориентаций зерен в горных породах на универсальном столике оптического микроскопа основано на анизотропии оптических свойств кристаллов. Оптические свойства зависят от симметрии кристалла и могут быть описаны оптической индикатрисой с главными осями $n_\alpha, n_\beta, n_\gamma$.

В 1923 г. Бруно Зандер [118] указал на принципиальную возможность описания упорядоченного распределения ориентаций минералов в горных породах. Им же была разработана методика определения предпочтительных ориентировок минералов в породах с помощью оптического поляризационного микроскопа и федоровского столика. Методика Б. Зандера предусматривала ряд сравнительно простых операций. Составлялась микроструктурная диаграмма для наиболее легко определяемого кристаллографического или оптического направления (полюс спайности слюды, оптическая ось кварца и т.д.), определялся ее тип (S-, B-, R-тектонит) и на основании этого высказывались суждения о кинематическом характере тектонических движений. Благодаря развитию микроструктурного анализа на зандеровской основе были выявлены характерные ориентировки минералов и сделаны первые попытки приложения теории физики деформаций и данных лабораторного моделирования к природным объектам.

Основным недостатком оптических методов является то, что определяется одна или несколько (в зависимости от числа оптически активных направлений в кристалле) ПФ (7). Это в свою очередь не позволяет однозначно различать многокомпонентные текстуры и восстанавливать ФРО (6). Полезная информация ограничивается сведениями только об ориентировках оптических осей зерен, расположенных на поверхности шлифа.

Вторая группа методов, получающих количественную информацию о текстуре, включает в себя дифракционные методы (метод рентгеновской или нейтронной дифракции). Эти методы являются статистическими и не позволяют оценить ориентировку каждого зерна. Преимущества и недостатки любой методики, рентгеновской или нейтронной дифракции, достаточно ясны. Текстура поликристаллического материала является статистическим описанием ориентаций кристаллитов, и поэтому необходимо большое число кристаллитов или зерен, чтобы получить представительную информацию об образце. Для получения воспроизводимых полюсных фигур необходимо от 10^4 до 10^5 зерен.

Известные свойства рентгеновских лучей, а именно сильное поглощение в образце и небольшой диаметр пучка, ограничивает их использование небольшими и тонкими образцами и мелкозернистыми материалами с размером зерна менее 10–20 мкм. Вследствие этого рентгеновская дифракция стала общепринятым и удобным методом неразрушающего контроля при изучении текстур в металлах и сплавах, а также керамических изделиях. В случае геологических материалов метод позволяет исследовать только поверхность образца, поскольку рентгеновские лучи поглощаются на глубинах порядка нескольких микрометров. Тем самым с помощью рентгеновской дифракции можно измерить лишь локальную текстуру на поверхности геологического образца. В лучшем случае метод применяется к анализу мономинеральных материалов, сложенных минералами орторомбической или более высокой кристаллических симметрий.

В противоположность вышесказанному нейтронный пучок имеет большое сечение (до 100×50 мм) и слабое поглощение в материале. По сравнению с рентгеновскими лучами нейтроны поглощаются в веществе менее чем в три раза, и, следовательно, с помощью нейтронной дифракции можно исследовать образцы больших размеров. В то время как во многих других исследованиях данный факт может считаться недостатком, для текстурного анализа геологических материалов это большое преимущество, поскольку текстура исследуется во всем объеме образца (а не только поверхностная или локальная текстура).

Благодаря высокой проникающей способности и большому сечению пучка нейтроны прекрасно подходят для анализа образца размером в несколько кубических сантиметров. Также становится возможным изучать с достаточной статистикой и крупнозернистые материалы, с размером зерен до миллиметра. Нейтронные измерения могут быть выполнены в геометрии прохождения на сферических, цилиндрических образцах или даже на образцах неправильной формы. Полные полюсные фигуры получают с помощью единичного сканирования без каких-либо поправок на интенсивность. Подготовка образцов для текстурного анализа с помощью дифракции нейтронов достаточно проста, поскольку не требуется их шлифовка и поверхностными эффектами (например шероховатостью) можно пренебречь. В соответствии с [12] нейтронно-дифракционные измерения с последующим расчетом функции распределения ориентаций могут быть выполнены с большей степенью точности по сравнению с другими методами.

Текстурный анализ геоматериалов часто усложнен из-за богатых рефлексами дифракционных картин многофазных пород или из-за присутствия минеральных фаз с низкой симметрией. Такие дифракционные картины содержат большое количество рефлексов, которые частично или полностью перекрываются. Сравнительный анализ результатов текстурных измерений образцов карбонатных пород, выполненных методами рентгеновской и нейтронной ди-

фракции, был выполнен в работе [119]. Авторами [120] было проведено сопоставление данных, полученных при определении текстуры двухфазного образца горной породы мусковит-кварцита, с помощью четырех различных методов, применяемых в геонауках: оптического универсального метода, метода обратного электронного рассеяния, рентгеновской текстурной гониометрии обратного отражения и времяпролетной нейтронной дифракции. В работе обсуждаются достоинства и недостатки перечисленных методов в изучении геологических материалов.

Главные преимущества применения рассеяния нейтронов в анализе текстур геологических материалов следующие:

- высокая статистическая представительность (тысячи зерен в сравнении с сотнями зерен, которые можно проанализировать с помощью оптического микроскопа);
- измерение объемных текстур в отличие от локальных (поверхностных) текстур, которые можно измерить методом рентгеновской дифракции;
- изучение как крупно-, так и мелкозернистых природных материалов;
- текстурный анализ минералов с низкой симметрией;
- исследование многофазных пород и проведение текстурного анализа отдельных минеральных компонент, что довольно сложно для других дифракционных и прямых методов текстурного анализа;
- исследование эволюции текстуры в образцах, помещенных в камеры высоких давлений и температур, что недоступно для других не нейтронных дифракционных, а также для прямых методов текстурного анализа.

С помощью нейтронной дифракции возможно одновременно изучать эволюцию микроструктур, включая дегидратацию, фазовый переход, структурные превращения в минералах и текстурные преобразования, а также формирование напряжений/деформаций с использованием современных экспериментально-измерительных комплексов, подобных СКАТ [121] и EPSILON-MDS (Дубна, Россия) [122] или HIPPO (Лос-Аламос, США) [123].

В данном обзоре обобщен богатый экспериментальный опыт измерения кристаллографических текстур горных пород, накопленный в течение более 20 лет с помощью текстурного дифрактометра СКАТ, который действует на пучке 7А импульсного реактора ИБР-2 (ЛНФ ОИЯИ). Подробную информацию о конструктивных особенностях СКАТ можно найти на сайте Лаборатории нейтронной физики им. И. М. Франка ОИЯИ (<http://flnp.jinr.ru/>), а также в опубликованных статьях (см., например, [121, 124]). Текстурные измерения проводились на образцах горных пород разного типа, относящихся к кристаллическим горным породам верхней мантии Земли, а также извлеченным из различных глубин континентальной земной коры. Цели измерения кристаллографических текстур обусловлены фундаментальными задачами геологии и геофизики [1], такими как

1) исследование связи кристаллографических текстур и текстур формы с физическими (упругими, пьезоэлектрическими, магнитными, тепловыми и др.) свойствами горных пород при различных термодинамических параметрах;

2) изучение метаморфических, геодинамических и эволюционных процессов в литосфере по данным о текстурах (в комплексе с другими данными) глубинных и приповерхностных горных пород;

3) нейтронографические исследования локальных, остаточных и решеточных деформаций и напряжений как при нормальных условиях, так и при повышенных температурах и внешних нагрузках с точки зрения развития физики очага землетрясения.

3.2. Связь между кристаллографическими текстурами и физическими свойствами горных пород мантии. Изучению структуры, текстуры и упругой анизотропии вещества мантии Земли посвящено большое количество экспериментальных работ [125–127]. Совокупные данные о скоростях упругих волн и текстурном строении горных пород часто используются для интерпретации азимутальной сейсмической анизотропии литосферы Земли [128].

Главной причиной сейсмической анизотропии верхней мантии является кристаллографическая преимущественная ориентировка породообразующих минералов. Сам факт существования преимущественной ориентировки минералов в породах верхней мантии подтвержден исследованиями на образцах [125, 129, 130], вынесенных из мантии с глубин до 220 км. Природные образцы из мантии, как правило, находят на поверхности Земли в составе массивов ультраосновных пород, ксенолитов в базальтовых месторождениях или кимберлитовых трубках. Имеющиеся данные о кристаллографических текстурах вещества мантии и его эволюции получены на основе анализа природно-деформированных образцов горных пород с учетом опыта экспериментального деформирования образцов и численного моделирования процессов текстурообразования.

Количественная оценка влияния преимущественного упорядочения оливковых зерен на упругие свойства мантийного вещества содержится в ряде работ [131–134]. Как правило, в них обсуждаются результаты измерений кристаллографической текстуры с помощью оптического метода на тонких шлифах, изготовленных из природных образцов. Так, В. Бен Исмаил и Д. Майнпрайс (1998) [135] создали базу типичных преимущественных ориентировок оливковых пород на основе анализа 110 образцов офиолитовых горных пород, а также горных пород из зон субдукции и кимберлитов. Они же попытались оценить, как меняется острота текстуры оливина в зависимости от количества измерений на шлифе. Было показано, что 100–150 измеренных зерен достаточно, чтобы острота текстуры стала стабильным параметром, характеризующим преимущественную ориентировку зерен в образце. Однако в ряде работ [57, 136] авторам удалось доказать, что даже в случае острой текстуры для корректного определения ФРО объем измерений отдельных ориен-

тировок зерен, которые дает оптический метод, должен быть в несколько раз больше. Поэтому измерения кристаллографических текстур на основе 100–150 замеров отдельных оптически активных направлений в зернах оливина может дать только полуколичественную информацию. На сегодняшний день наиболее информативным методом, который позволяет количественно описать ФРО в объемном образце горной породы, является метод нейтронной дифракции.

Авторами [137, 138] были начаты комплексные исследования факторов, определяющих упругую анизотропию мантийных пород при различных гидростатических давлениях с помощью нейтронографического текстурного анализа на дифрактометре СКАТ и ультразвукового пространственного измерения скоростей продольных волн на сферических образцах.

Приведем результаты, полученные на дифрактометре СКАТ для некоторых образцов ксенолитов и дунитов из разных регионов Европы. Исследованные образцы представляли собой в основном однофазные горные породы, образованные форстеритом (оливином). Конкретные данные о составе, местах отбора и происхождении образцов содержатся в работе [139]. Для проведения текстурных и ультразвуковых измерений использовались образцы сферической формы диаметром 50 мм. Система координат XYZ полюсных фигур, измеренных методом нейтронной дифракции у сферических образцов, является единой лабораторной системой координат, в которой представлены также карты изолиний скоростей продольных волн, измеренных ультразвуковым методом.

Одно из преимуществ количественного текстурного анализа геологических образцов заключается в том, что на основе ФРО возможно рассчитать полюсные фигуры, которые имеют важное значение для петроструктурного анализа и кинематической интерпретации текстур, но «невидимые» в нейтронном дифракционном эксперименте. Такие экспериментальные ограничения вызваны целым рядом причин, начиная с невозможности регистрации брэгговских рефлексов или пиков (определенной λ) на дифракционном спектре из-за действия закона погасания углов, недостаточная интенсивность анализируемого пика или конструкционные возможности самого дифрактометра, который выполняет измерения в фиксированном диапазоне межплоскостных расстояний d_{\max} . На рис. 20 представлены полюсные фигуры оливина (100) и (010), которые описывают преимущественную ориентировку кристаллографических плоскостей, связанных с экстремальными направлениями скоростей упругих волн в кристалле оливина. Полюсные фигуры рассчитаны на основе ФРО, восстановленной «компонентным методом» [32] с помощью программы MULTEX [70] по результатам нейтронно-дифракционных измерений. Аналогичные показанным на рис. 20 полюсным фигурам диаграммы ориентировок осей оптических индикатрис оливиновых зерен традиционно строятся по данным оптических измерений на шлифах.

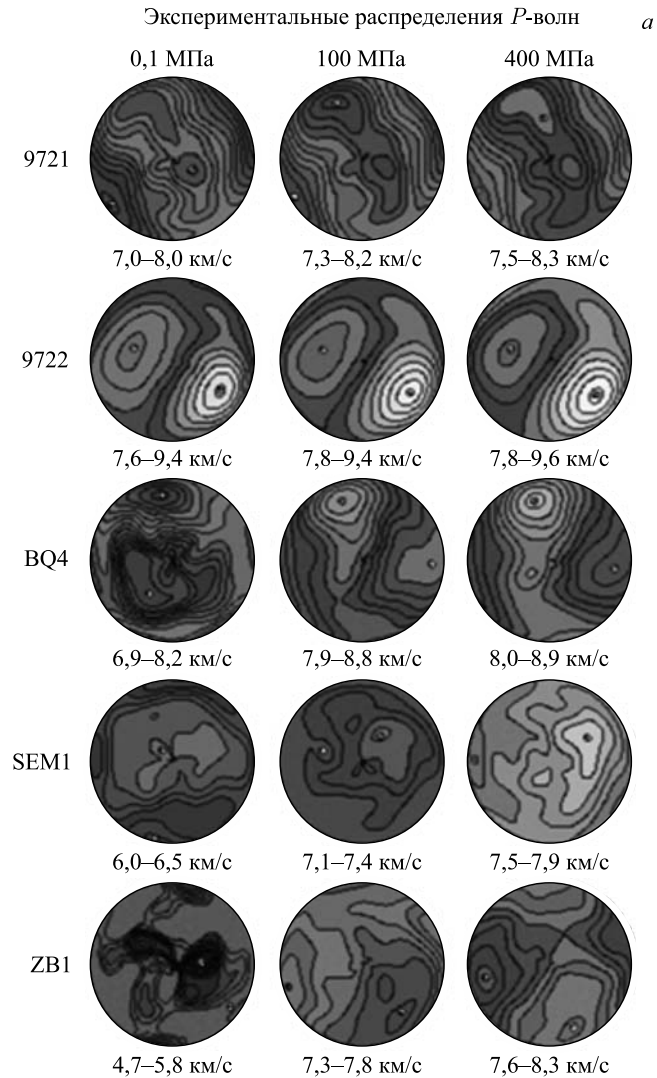


Рис. 20. Результаты нейтронографического текстурного анализа и ультразвуковых измерений скоростей продольных волн на образцах оливиносодержащих мантийных горных пород. Минимальные и максимальные значения скоростей V_p указаны внизу под каждой стереографической проекцией (a, θ). Значения минимальной и максимальной полюсной плотности выражены в единицах, кратных хаотическому распределению (θ). a) Пространственные распределения скоростей P -волн, измеренные при различных значениях всестороннего давления 0,1, 100 и 400 МПа

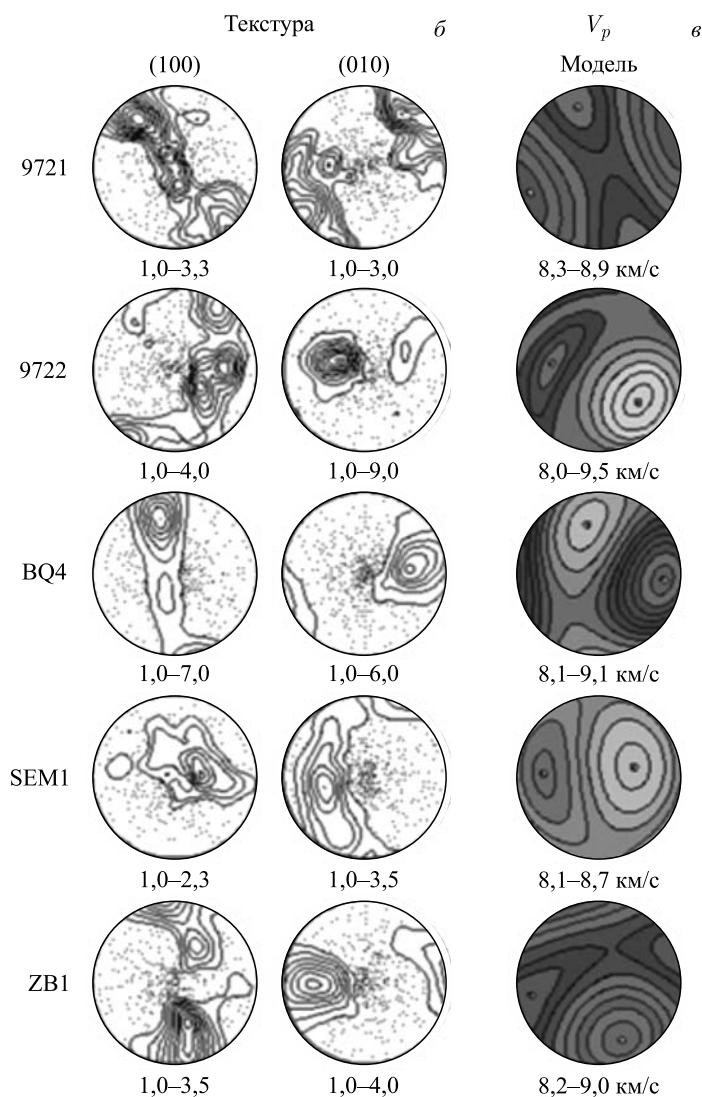


Рис. 20. *б*) Полусные фигуры оливина (100) и (010), рассчитанные на основе ФРО, восстановленной по результатам нейтронно-дифракционных измерений. *в*) Модельные распределения скоростей P -волн, рассчитанные по данным о ФРО

Сравнение полусных фигур пяти исследуемых образцов указывает на их характерные текстурные особенности. В образцах дунитов 9721, 9722 (Иврийская зона, Италия), BQ4 (Албания) преимущественная ориентировка плос-

костей (100) оливина представлена в виде поясов с хорошо выраженными максимумами вдоль них. В направлении (010) кристаллов оливина наблюдается достаточно компактный максимум с высокой полюсной плотностью. Текстура оливина в ксенолитах SEM1 и ZB1 (Железный Брод, Чехия) менее острая. Для текстуры этих образцов характерны компактные максимумы высокой интенсивности на полюсных фигурах (100), в то время как ориентировка базовых плоскостей (010) имеет тенденцию к образованию поясов с ярко выраженным максимумом полюсной плотности.

Используемый в исследовании ультразвуковой метод основан на измерении скорости звука в различных направлениях сферического образца. Метод оптимален для оценки изменений анизотропии горных пород с глубиной, так как позволяет проводить измерения при высоких термодинамических параметрах (давлении и температуре). Аппаратура для изучения пространственного распределения скоростей P -волн в образце, находящемся в камере гидростатического давления, описана в [140]. Метод состоит в том, что в различных направлениях вдоль диаметра сферического образца осуществляется излучение и прием ультразвуковых импульсов двумя пьезоакустическими преобразователями, имеющими точечный контакт с поверхностью. Электроакустические преобразователи движутся в плоскости, проходящей через ось вращения. Предложенная система позволяет измерять время пробега упругого импульса в любом направлении и вычислять значения скоростей. При вращении образца дискретно с шагом 15° получают совокупность данных из 132 точек, которые наносятся на стереографическую сетку, связанную с системой координат сферического образца.

На рис. 20 также представлены карты изолиний скоростей P -волн для пяти образцов, построенные по экспериментальным данным, полученным при атмосферном давлении, 100 и 400 МПа. При атмосферном давлении образцы ZB1 и BQ4 демонстрируют сложную форму изолиний. Наиболее заметно это проявляется в образце ZB1, который характеризуется наименьшими значениями скоростей P -волн: от 5,3 до 6,2 км/с. Образцы же 9721 и BQ4 показывают приблизительно одинаковые результаты: от 7,0 до 8,2 км/с. С ростом всестороннего гидростатического давления наблюдалось непрерывное увеличение значений скоростей, изменение положений их максимумов и минимумов, которое свидетельствует о внутреннем уплотнении исследуемых материалов.

Конфигурация линий на полюсных фигурах (100) (направление максимальной скорости P -волны в оливине) и (010) (направление минимальной скорости V_p) исследуемых образцов сопоставима с экспериментальными картинками изолиний скоростей упругих волн, измеренных при давлении 400 МПа.

Более точное сравнение предполагает моделирование скоростей P -волн, т. е. их расчет на основе ФРО, восстановленных из дифракционных данных. Моделирование изначально потребовало вычисления компонент тен-

зора упругих постоянных поликристаллических образцов (по схеме Фойгта–Ройсса (5), (44)) на основе данных о текстурах породообразующих минералов и их монокристаллических упругих модулей. Поскольку содержание оливина в образцах достаточно велико, влияние других минеральных фаз в расчет не принималось. Табличные значения упругих модулей оливина были взяты из [100]. Результатом моделирования являются картины пространственного распределения скоростей P -волн (см. рис. 20), согласованные с системой координат экспериментальных карт изолиний. Модельные распределения V_p хорошо сопоставимы с экспериментальными картами изолиний для образцов 9721, 9722 и BQ4 при давлении выше атмосферного. Распределение изолиний на модельных картах для образцов ZB1 и SEM1 идентичны экспериментальным распределениям лишь в случае самого высокого всестороннего давления 400 МПа.

Изменение характера анизотропии упругих волн у образцов ZB1 и SEM1 с ростом давления и некоторые отличия модельных и экспериментальных карт изолиний (для 400 МПа) упругих волн может быть обусловлено следующими причинами. При атмосферном давлении после выхода на поверхность произошла дезинтеграция горной породы, внутри объема возникли трещины, поры с различным заполнением и другие дефекты. Степень дезинтеграции породы определяется температурными градиентами, возникающими в ее объеме при охлаждении, т. е. находится в прямой зависимости от скорости выхода породы на поверхность. Так, длительные, протекающие в течение миллионов лет, экструзивные процессы (как в случае дунитов 9721, 9722 и BQ4) характеризуются незначительным дефектообразованием в структуре горной породы. Если же выход породы происходил быстро (в течение нескольких часов, например, в ходе вулканической деятельности; образцы SEM1 и ZB1), то в силу резкого снижения давления с десятков мегапаскаль до атмосферного и больших температурных градиентов в горной породе неизбежно происходит дезинтеграция по всему объему породы. В связи с этим на характер упругой анизотропии может влиять хаотическая составляющая, т. е. беспорядочно ориентированные трещины, поры и другие дефекты.

На примере образцов ZB1 и SEM1 видно, что с ростом гидростатического давления влияние хаотической составляющей существенно уменьшается, но не устраняется совсем. При повышении давления основным фактором, контролирующим анизотропию, становится кристаллографическая текстура.

Измерения упругих свойств образцов ксенолитов в лабораторных условиях при всесторонних давлениях, а также расчет их эффективных упругих характеристик на основе количественной информации о кристаллографической текстуре играют важную роль в оценке величины и ориентировок сейсмических скоростей и анизотропии верхней мантии *in situ*, что может быть использовано для калибровки и более точной интерпретации геофизических данных.

3.3. Типизация текстур кварца в образцах кварцосодержащих горных пород. Кристаллографическая текстура не только является самым выразительным признаком анизотропии физических свойств горной породы, но и определяет важнейшие генетические особенности, позволяющие восстанавливать динамику геосреды, — ее тектоническую активность, характер движения, силу процессов, направление и т. д.

Кварц как самый распространенный минерал земной коры входит в состав многих горных пород. Преимущественная ориентировка кварца исследуется наиболее часто, поэтому закономерности и механизмы его ориентировки изучены достаточно полно [141–148]. Начиная с работ Б. Зандера [118], предложившего формально-геометрический метод разделения кварцевых ориентировок на S-, В- и R-тектониты, микроструктурный анализ кварца стал одним из главных методов в решении петрологических и тектонофизических задач. Но оптический метод, традиционно используемый в микроструктурном анализе, позволяет исследовать ориентировку только оптических осей кварца в шлифе горной породы и не описывает пространственное распределение зерен кварца в образце. Это снижает информационные возможности метода. В последнее время для изучения многообразия текстур кварца в различных по генезису горных породах стали применять дифракционные методы (рентгеновские, синхротронные, нейтронные), которые позволяют измерять ориентировку многих кристаллографических направлений.

С появлением мощных источников нейтронов и нейтронных текстурных дифрактометров возможности текстурного анализа расширились.

В течение более десятилетия (начиная с 1998 г.) измерения кристаллографических текстур кварцосодержащих горных пород проводились на нейтронном спектрометре СКАТ (ЛНФ ОИЯИ). Обобщение результатов текстурных измерений большой коллекции образцов с разных глубин континентальной коры Европы, Северной и Южной Америк было представлено в цикле статей [149–151]. В работах этого цикла анализируются текстурные исследования, которые выполнялись специалистами из различных стран в рамках международных геологических и геофизических проектов. С помощью нейтронного текстурного дифрактометра СКАТ было измерено более 70 различных по размеру образцов мономинеральных и многофазных горных пород. Для каждого образца по данным нейтронно-дифракционных измерений количественно восстановлены преимущественные ориентировки (ФРО) зерен кварца по методу WIMV (20), (21) с использованием программного пакета BEARTEX [52]. Выявлены разнообразные типы кристаллографических текстур кварцевых минеральных ассоциаций и проведена их классификация. Текстурная классификация призвана установить, к какому текстурному классу принадлежит данная кристаллографическая текстура. Установив принадлежность текстуры к определенной группе, можно упростить задачу определения генезиса данной горной породы. Процесс классификации, как правило, со-

стоит из двух этапов. Первоначально выявляются особенности, присущие конкретному текстурному классу. Причем выявленные характерные особенности должны обладать свойством инвариантности относительно таких преобразований, как трансляция, поворот или масштабирование. Вторым этапом по сути своей является классификация, т.е. каждая кристаллографическая текстура, обладающая набором характерных особенностей, соотносится с определенным текстурным классом или типом.

В первой статье цикла [149] выявлялись особенности преимущественных ориентировок кварца в образцах однофазных горных пород (кварцитов и песчаников). При этом наблюдались хорошо развитые и неискаженные типы текстур, что позволило провести типизацию и создать идеальные модели кварцевых полюсных фигур. Было выделено четыре типа кристаллографических текстур кварца в кварцитах и песчаниках. Они представлены на рис. 21–24 в виде полюсных фигур оптических осей (0001) кварца («невидимых» на дифракционных спектрах из-за экспериментальных возможностей СКАТ), электрических осей (11-20) и двух плоскостей ромбоэдров — положительной (10-11) и отрицательной (01-11). Следует заметить, что отдельные типы текстур хорошо согласуются с данными, полученными другими авторами [152–154].

К первому типу кристаллографических текстур можно отнести кварцсодержащие породы с практически идеальной преимущественной ориентировкой зерен кварца, повторяющей ориентировку монокристалла кварца во всем объеме образца. Этот тип представлен образцами Quarzit1 и QBT (рис. 21). В направлении c -осей (0001) существует один сильный максимум полюсной плотности. Расположение максимумов на ПФ (11-20), (10-11), (01-11) соответствует гексагональной симметрии. У образца QBT интенсивность соседних (по азимутальному углу φ) максимумов полюсной плотности на полюсных фигурах (10-11) и (01-11) отличается не более чем на 12%. Для образца Quarzit1 эта разница интенсивностей составляет 2–2,5 раза. Это значит, что образец QBT представляет собой практически идеальный дофинеийский двойник, в образце Quarzit1 дофинеийские двойники занимают 45–50% объема. На рис. 21, б и в показаны идеализированные полюсные фигуры кварца, образованного несдвоенными и сдвоенными по дофинеийскому закону монокристаллами.

Ко второму типу текстур можно отнести текстуры, выявленные в образцах 39а, 39б, Сап, 26а, 26б2 (рис. 22, а). Идеальные полюсные фигуры для этого типа приведены на рис. 22, б. Эти текстуры имеют схожие между собой ориентировки и симметрию (ориентация максимума полюсной плотности на ПФ (0001) выбрана перпендикулярно плоскости проекции). От текстур первого типа они отличаются размытостью максимумов и меньшими значениями полюсной плотности. В отличие от текстуры первого типа, где на ПФ (11-20) наблюдаются шесть четко локализованных максимумов, у второго

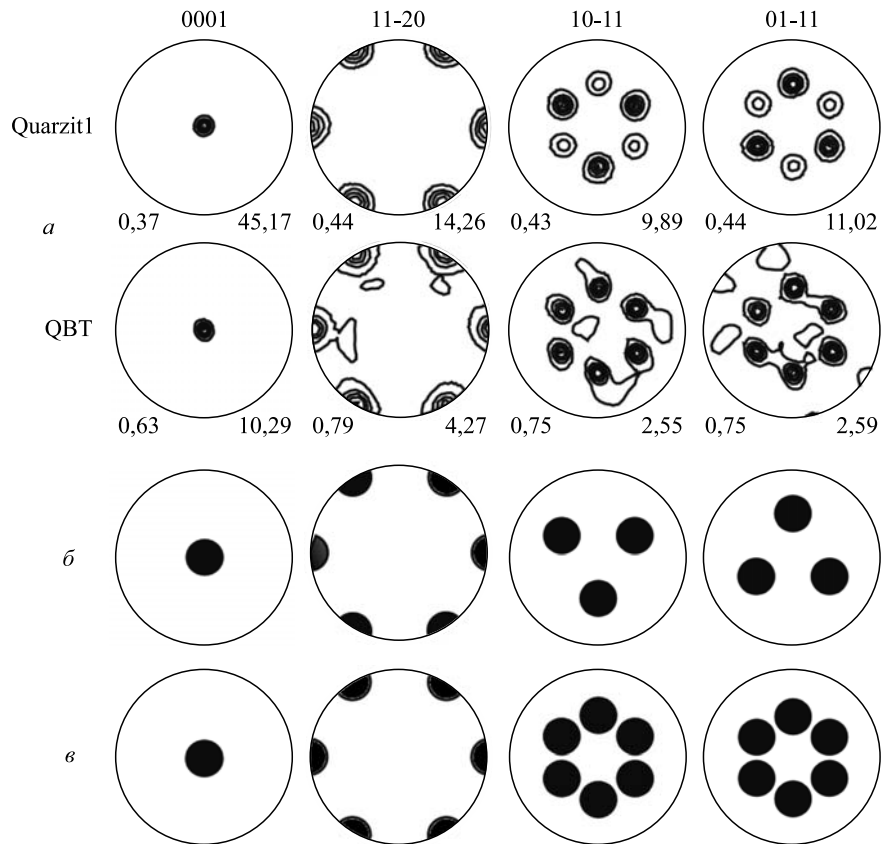


Рис. 21. *a*) Полюсные фигуры кварца образцов кварцита QBT, Quarzit1. Внизу каждой проекции указаны минимальное и максимальное значения полюсной плотности в единицах, кратных хаотическому распределению (multiply random distribution, m. r. d.) Изолинии на ПФ проведены с равным шагом, начиная со значения 1 m. r. d. Показаны идеальные полюсные фигуры кварца, образованного несдвойникованными монокристаллами кварца (*б*) и сдвойникованными по дофинейскому закону (*в*). Структурная ось кварца [0001] перпендикулярна плоскости проекции, направление оси [10-10] — WE

типа ориентировка этих осей оказывается стянутой в концентрический пояс, характерный для аксиальной текстуры. Максимумы полюсной плотности на ПФ ромбэдров расположены таким образом, что симметрия полюсной фигуры (10-11) + (01-11) является гексагональной (образцы Can, 39a, 26db2). По мере уменьшения полюсной плотности и увеличения хаотической компоненты текстуры относительная интенсивность трех максимумов полюсной

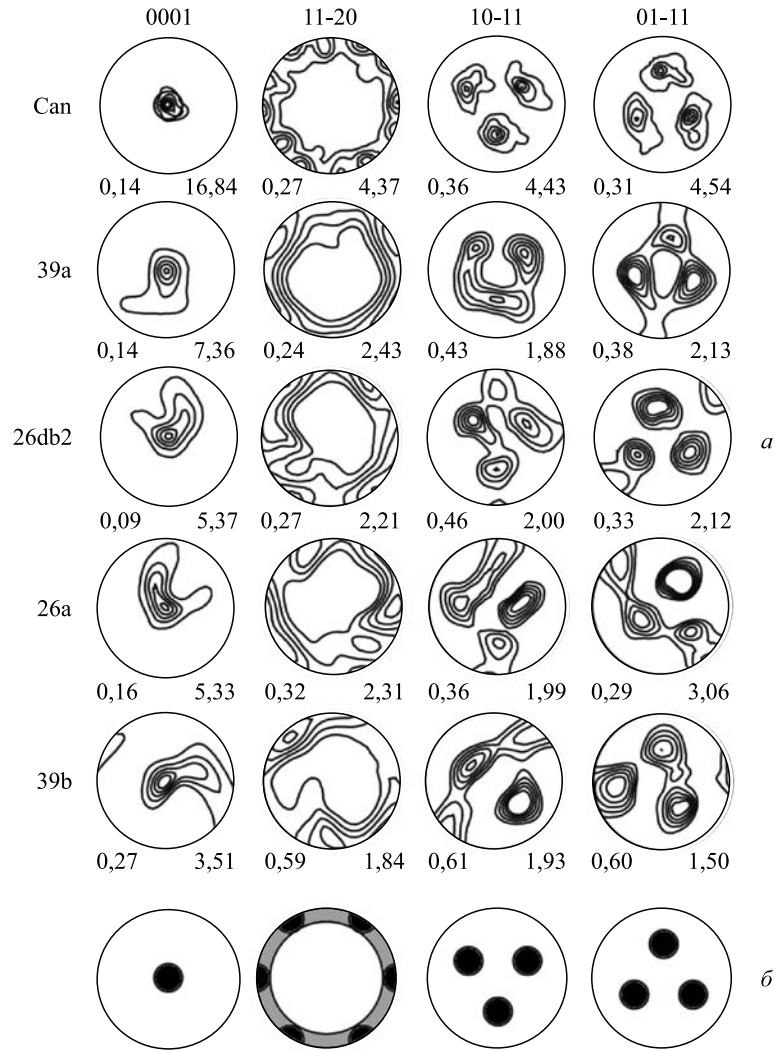


Рис. 22. Полусные фигуры кварца образцов кварцита Can, 39a, 26db2, 26a, 39b (а) и идеальные полусные фигуры кварца, тип II (б). Структурная ось кварца [0001] перпендикулярна плоскости проекции, направление оси [10-10] — WE

плотности на ПФ (10-11) и (01-11) изменяется, появляется тенденция к образованию поясов.

Третий тип текстур (образцы 26b1, Quartz2, Qreds) представлен на рис. 23, а. На полусных фигурах (0001) наблюдается размытие максимума

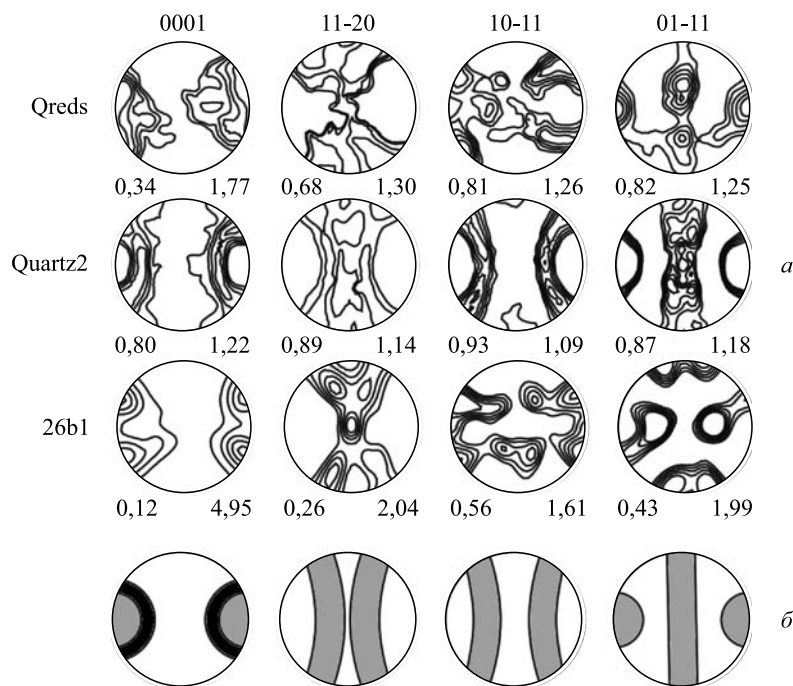


Рис. 23. Полюсные фигуры кварца образцов кварцита 26b1, Qreds, Quartz2 (*a*) и идеальные полюсные фигуры кварца, тип III (*б*)

полюсной плотности с тенденцией к поясному распределению c -осей вдоль дуг малых кругов (26b1 \rightarrow Quartz2). В отдельных случаях на поясах наблюдаются слабые симметричные максимумы (образец 26b1). На ПФ (11-20) a -оси ориентируются по пересекающимся поясам. Ориентация большого и малого ромбэдров теряет тригональную симметрию, присущую идеальной ориентировке монокристалла (рис. 21, *б*). На ПФ (10-11) проявляются два ярко выраженных пояса, на ПФ (01-11) — пояс по дуге большого круга и перпендикулярный его плоскости широкий максимум. Идеальные ПФ этого типа приведены на рис. 23, *б*.

К образцам, обладающим четвертым типом преимущественных ориентировок, можно отнести группу Ai, Shoksh1, Sert, Quartz1d (рис. 24, *a*). Для ПФ (0001) характерно поясное распределение c -осей по дуге большого круга (образец Sert) или по двум пересекающимся таким поясам. На ПФ (11-20) наблюдаются симметрично связанные с ориентацией c -осей максимумы (в направлении, перпендикулярном плоскости пояса на ПФ (0001)). При возрастании азимутального угла φ , под которым пересекаются пояса c -осей на

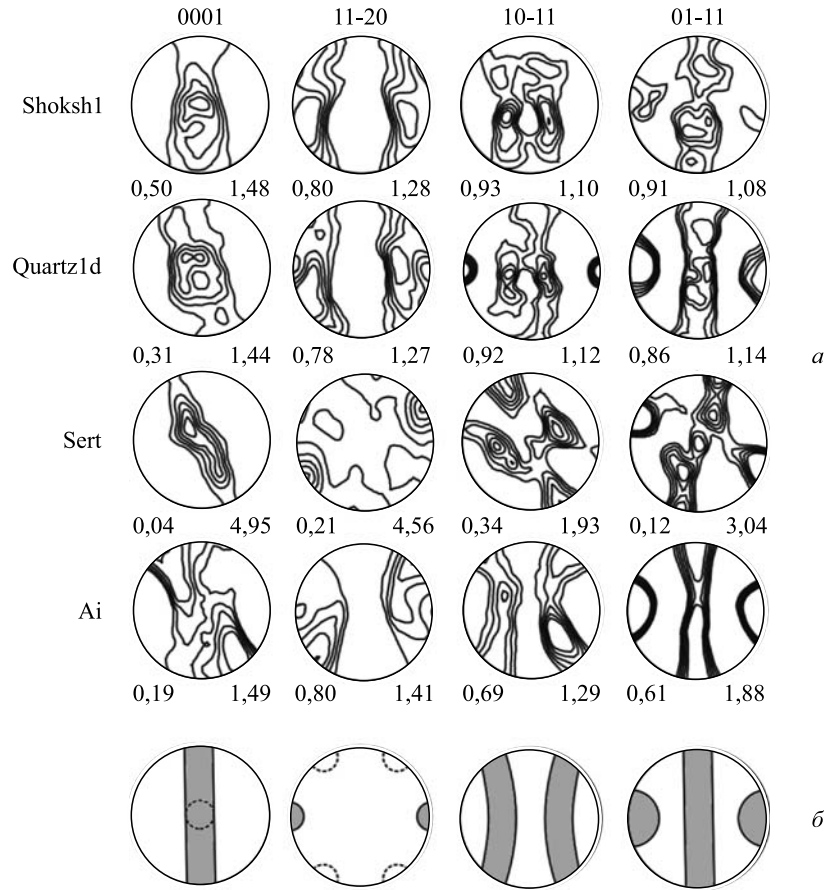


Рис. 24. Полусные фигуры кварца образцов кварцита Ai, Shoksh1, Sert, Quartz1d (а) и идеальные полусные фигуры кварца, тип IV (б)

ПФ (0001) появляется тенденция к ориентировке a -осей по дугам малых кругов (образец Ai). На ПФ (01-11) наблюдается пояс по дуге большого круга и перпендикулярный его плоскости максимум. Большой ромбоэдр (ПФ (10-11)) проявляет тенденцию к ориентировке по двум поясам, как в случае ПФ типа III (образцы Ai, Shoksh1). Ориентировки большого и малого ромбоэдров образца Quartz1d практически идентичны. Идеальные ПФ этого типа приведены на рис. 24, б.

Во второй статье [150] цикла показано, как четыре установленных типа текстур кварца обнаруживают себя в многофазных горных породах, таких как гранулиты, гнейсы, амфиболиты и сланцы.

В третьей статье [151] приведены примеры различных горных пород, отобранных из разных мест, но для которых выделены группы текстур одинакового типа. Обсуждается связь между типами текстур кварца, физическими механизмами их образования и условиями, при которых возможна реализация этих процессов. Основанием для данного рассмотрения послужили экспериментальные факты, описывающие различные стадии деформирования в кварце и связанные с ними особенности текстурообразования, а также влияние таких факторов, как вид тензора деформации, температурного режима, давления и фазовых переходов, на возникновение устойчивых типов текстуры. Одним из наиболее существенных выводов в статье можно считать подтверждение существования однотипных текстур кварца у образцов разных горных пород как мономинеральных, так и многофазных, отобранных в разных пунктах и с разных глубин континентальной коры Европы, Северной и Южной Америк. Дальнейшие исследования могут выделить основные факторы, контролирующие генезис различных по типу кристаллографических текстур.

Текстуры первого типа, обнаруженные преимущественно у кварцитов, представляют собой поликристаллы друзового типа, а острая текстура свидетельствует о том, что данные кварциты образовывались в процессе друзового роста с предпочтительной ориентировкой роста кристаллов в направлении оптической оси без больших внешних воздействий.

Текстуры, отнесенные к типу II (рис. 22), по-видимому, также образовались в процессе друзового роста, но испытывали влияние внешних (меняющихся, градиентных и т. п.) полей либо межзерновых трансформаций. Это привело к размытию центрального максимума на ПФ (0001) и стягиванию шести максимумов на (11-20) в пояс, но текстура сохранила высокую остроту. Подобная текстура могла сформироваться и в результате рекристаллизации при дислокационном скольжении в кварце по граням призм m в направлении, перпендикулярном оси c .

Особый интерес представляет образец Сап (рис. 22), на ПФ (11-20) которого отчетливо выделены двенадцать максимумов, равномерно распределенных по большой окружности. Это может означать, что текстура проявляет пьезоэлектрические свойства, т. е. в процессе кристаллизации гидротермального раствора при благоприятной ориентировке зародышевых зерен возникли предпочтительные ориентировки электрических осей. Возможно проявление пьезоэлектрических свойств и у образцов Quarzit1, QBT (рис. 21), 39a (рис. 22).

У образцов из Кольской сверхглубокой скважины СГ-3 и с поверхности Печенгской геологической структуры прослеживаются общие закономерности в преимущественной ориентировке кварца. Так, у амфиболитов из различных глубин разреза СГ-3 и отобранных аналогов с поверхности обнаружены текстуры кварца II и IV типов. А у гнейсов из скважины и с поверхности найдены аналоги, соответствующие типу III. Данный вид текстуры обнаружен у образ-

цов с различным минеральным составом и процентным содержанием кварца. Тем не менее ориентационный механизм, создавший текстуры кварца, одинаков, и им могла быть пластическая деформация, осуществлявшаяся путем двойникования или внутрикристаллического скольжения.

Оказалось, что можно использовать картины преимущественных ориентировок кварца для установления факта фазового α - β -перехода в кварце, который имеет место при охлаждении кристаллизовавшихся горных пород. Сам по себе α - β -переход не изменяет ориентации c - и a -осей кварца. В качестве отличительного признака, характеризующего возможность присутствия в эволюционной истории горной породы β - α - или α - β - α -переходов в кварце, должна быть выбрана сходная ориентировка большого и малого ромбоэдров. Максимумы полюсной плотности на ПФ (10-11) и (01-11) должны быть расположены аналогичным образом, значения минимальной и максимальной полюсной плотности на ПФ (10-11) и (01-11) должны быть близки. Таким условиям, например, удовлетворяют кварциты QBT (рис. 21), Quartz1d (рис. 24).

Обнаружение сходных ориентировок (10-11) и (01-11) также показывает, что в ходе превращения β -кварц \rightarrow α -кварц девиаторная нагрузка в среде, по-видимому, не превышала 50 МПа. Это позволяет сформулировать ограничения на величины механических напряжений и температурный режим, существовавшие при формировании текстур в горных породах рассматриваемого геологического массива. По-видимому, в картинах преимущественных ориентировок кварца можно найти также признак (параметр) скорости процесса. Возможно, текстурный анализ скоро позволит получить данные для ответа и на этот вопрос.

При интерпретации экспериментальных текстурных данных необходимо учитывать, что в массивах горных пород в различные геологические периоды происходила смена вида напряженно-деформированного состояния и температурного режима. В течение геологического времени в одних условиях возникли ориентировки высокой степени упорядочения, а при изменении условий на первоначальные ориентировки накладывались более молодые. Наблюдаемая на полюсных фигурах картина преимущественной ориентировки зерен минералов является интегральным выражением ориентирующих и дезориентирующих процессов.

Тем более сложным становится анализ текстур кварца, обладающего большим количеством систем скольжения (~ 150) и способного претерпевать в условиях, существующих в недрах Земли, ряд фазовых превращений [155].

3.4. Деформационные процессы и эволюция литосферы по данным о текстурах глубинных и приповерхностных горных пород. В данном разделе основной акцент будет сделан на интерпретацию возможных деформационных механизмов, которые привели к образованию текстур, наблюдаемых в образцах плагиогнейсов и ортоамфиболитов из Кольской сверхглубокой скважины (СГ-3), и их аналогов с поверхности Печенгской геологической

структуры на основании данных, полученных с помощью дифрактометра СКАТ.

Систематические нейтронографические текстурные исследования многофазных образцов горных пород из керна Кольской сверхглубокой скважины проводились в Лаборатории нейтронной физики ОИЯИ в сотрудничестве с Институтом механики и структуры горных пород и Геологическим институтом Чешской академии наук (Прага), Научно-производственным центром «Кольская сверхглубокая», начиная с 1999 г. [156, 157]. Затем к работам с использованием нейтронов подключились сотрудники ИГЕМ РАН (Москва) [158–160], ИФЗ РАН (Москва) [160] и Кильского университета (Германия) [161].

Были изучены опорные образцы архейских пород из разреза Кольской сверхглубокой скважины в интервале глубин 7–12 км и их аналоги с поверхности на участке Муста-Тунтури. Из Кольской сверхглубокой скважины для исследований были отобраны две группы образцов: биотит-мусковит-плагиоклазовые гнейсы и амфиболиты. Первым критерием для отбора образцов архейских пород являлось *отсутствие или минимальное проявление регрессивных изменений*. Предпочтение было отдано более однородным мелкозернистым образцам, а также тем, которые в меньшей степени были подвергнуты техногенным воздействиям, т. е. испытали дискование керна на глубине. На поверхности был выбран участок Муста-Тунтури, находящийся в 45 км к северо-востоку от скважины СГ-3, со сходными структурами. Он сложен породами кольской серии, метаморфизированными на уровне амфиболитовой фации и в минимальной степени затронутыми катаклазом и регрессивными изменениями.

Аналогия тех и других пород подтверждалась с помощью количественного подсчета породообразующих минералов, определения их состава с помощью микронзонда, анализа ассоциаций минералов, микроструктурных и петрофизических исследований.

В задачу нейтронографических исследований входило определение кристаллографических текстур основных породообразующих минералов амфиболитов и гнейсов с помощью дифрактометра СКАТ (ОИЯИ, Дубна) и проведение сравнительного текстурного анализа образцов.

Основные минералы, составляющие амфиболиты, — это роговая обманка (моноклинная симметрия), плагиоклаз (триклинная симметрия) и кварц (тригональная симметрия). Процентное содержание роговой обманки в изучаемых образцах составляет 65–70 %, плагиоклаза — 20–25 %, содержание кварца колеблется в интервале 3–10 %.

Основные минеральные фазы, входящие в гнейсы, — это плагиоклаз, кварц и биотит. Плагиоклаз в гнейсах составляет половину и больше от всего объема образца (47–59 %), он имеет достаточно однородный химический состав и представлен плагиоклазом № 20–30. Вторая по объему минеральная

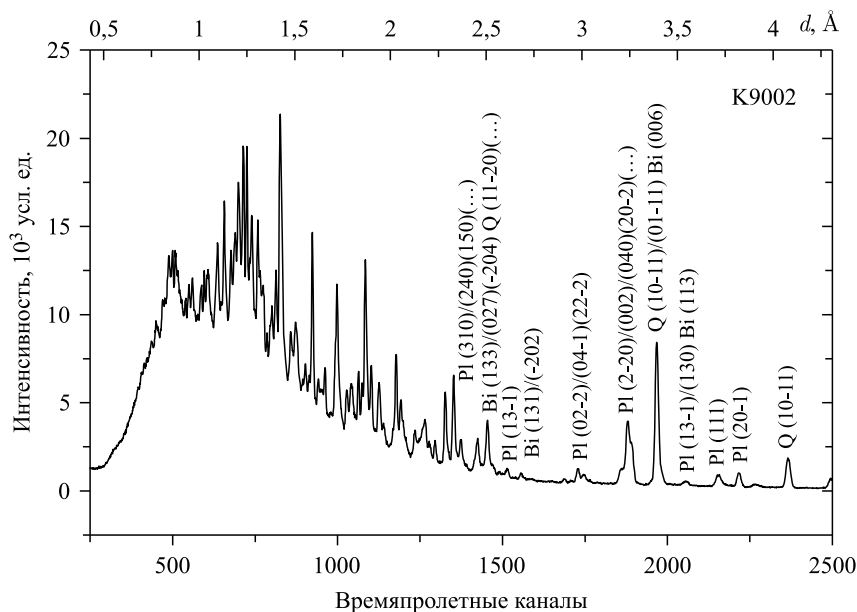


Рис. 25. Дифракционный спектр образца биотитового гнейса K9002 из Кольской сверхглубокой скважины. На нем проиндексированы некоторые брэгговские рефлексы: Pl — плагиоклаз, Q — кварц, Bi — биотит

ассоциация — это кварц, его содержание в образцах порядка 30 %, благодаря чему кварц относительно легко обнаруживается по сильными дифракционным пикам на дифракционных спектрах. Биотит на дифракционном спектре (см., например, рис. 25) обладает слабыми, к тому же часто перекрывающимися пиками, что отражает его моноклинную симметрию. Содержание биотита колеблется в широком интервале от 7 до 22 %.

Несмотря на сложный характер полученных дифракционных картин, для девяти измеренных образцов было построено достаточное число экспериментальных полюсных фигур, необходимых для последующего количественного текстурного анализа.

Процедура восстановления ФРО была проведена для преобладающих в процентном отношении минеральных фаз измеренных образцов. При этом был использован компонентный метод [70, 162], согласно которому результирующая ФРО представляется в виде текстурных компонент, т. е. в виде суммы круговых гауссовских распределений, например, типа (33). В состав компонент включается и бестектурная компонента, которая описывает объем хаотически ориентированных кристаллитов в образце горной породы. В результате ФРО были восстановлены для плагиоклаза и кварца в образцах

биотитовых плагиогнейсов, а также для роговой обманки и плагиоклаза в образцах амфиболитов.

На основе ФРО были рассчитаны полюсные фигуры основных кристаллографических направлений (100), (010) и (001) породообразующих минералов. Благодаря количественному текстурному анализу существует возможность установления полной ориентации минерала и минеральных ассоциаций относительно базовой системы координат, например, географической системы координат, в которой были отобраны образцы. Система координат полюсных фигур первоначально устанавливалась в лабораторной системе координат образца XYZ , которая связана с географическими координатами места отбора образца.

Анализ кристаллографической текстуры роговой обманки выявил существование двух устойчиво воспроизводимых типов (рис. 26, 27), что позволяет сделать предположение о двух этапах в образовании преимущественных ориентировок этой минеральной составляющей в амфиболитах. Для первого этапа характерны острые максимумы на полюсных фигурах (001) и поясное распределение полюсной плотности на ПФ (010) и (100) (рис. 26). Второму этапу соответствуют сильно коррелирующие максимумы основных кристаллографических плоскостей (001), (010) и (100) (рис. 27). Преимущественная ориентировка первого типа, по-видимому, образовалась в процессе магматического течения на более ранней стадии образования горной породы.

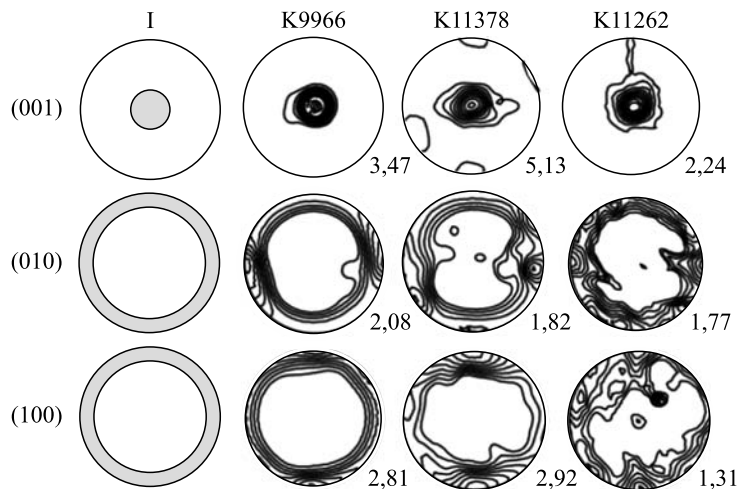


Рис. 26. Полюсные фигуры роговой обманки образцов амфиболитов K9966, K11378, K11262 из разных глубин Кольской сверхглубокой скважины. Для сравнения слева приведены идеальные полюсные фигуры роговой обманки для текстуры (тип I), образовавшейся в процессе магматического течения

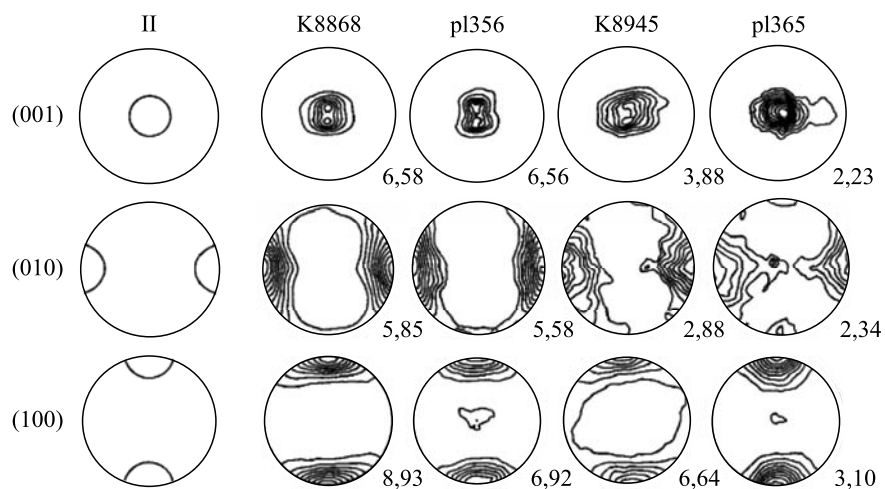


Рис. 27. Полюсные фигуры роговой обманки природных образцов амфиболитов K8868, K8945 из разных глубин Кольской сверхглубокой скважины и образцов-аналогов с поверхности p1365, p1365. Для сравнения слева приведены идеальные полюсные фигуры роговой обманки для текстуры (тип II), образовавшейся в процессе пластической деформации

Образование ориентировок в процессе магматического течения происходит за счет вращения жестких вытянутых кристаллитов в вязкой матрице породы. В сильнодеформированных образцах второго типа текстур возможным механизмом образования является дислокационное скольжение зерен роговой обманки в направлении $[001]$ по плоскостям (100) . Данная система скольжения в роговой обманке была установлена экспериментально при $600\text{--}750^\circ\text{C}$ и всестороннем давлении 10 кбар.

На полюсных фигурах роговой обманки образцов из Кольской сверхглубокой скважины и с поверхности (рис. 28) прослеживаются общие закономерности в преимущественной ориентировке роговой обманки. Для всех образцов наблюдается локализованный максимум полюсной плотности в направлении (001) . В ориентировках (010) и (100) также наблюдаются максимумы, распределенные в поясах по дуге большого круга, которые хорошо коррелируют между собой и с максимумом на полюсной фигуре (001) . Схожесть кристаллографических текстур роговой обманки в образцах-аналогах из скважины и с поверхности позволяет заключить, что в ходе эволюции земной коры текстура роговой обманки сохранила свою устойчивость, что, в свою очередь, свидетельствует об относительном постоянстве температурного режима в течение эволюционного периода. Устойчиво проявляющийся тип текстуры роговой обманки в амфиболитах может задавать пространственно-

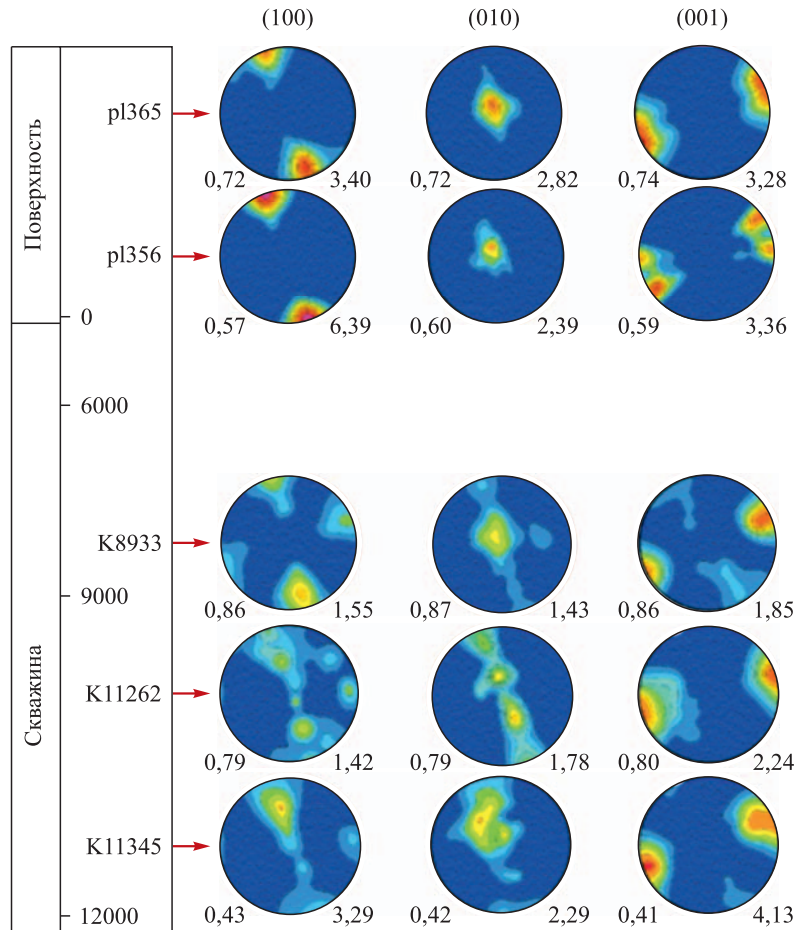


Рис. 28. Полусные фигуры роговой обманки образцов амфиболитов, рассчитанные на основе ФРО. К11345, К8933 — образцы из разреза Кольской сверхглубокой скважины; p1365, p1356 — образцы с поверхности участка Муста-Тунтури. Внизу указаны минимальные и максимальные значения полусной плотности в единицах, кратных хаотическому распределению

временную систему координат, неизменную в течение длительного геологического времени. Это свидетельствует в пользу интегральной модели глубинного строения Печенгского рудного района (ИГЕМ РАН, ВНИИГеосистем, Москва), согласно которой эволюция этой части земной коры происходила в виде медленного субвертикального поднятия пород с глубины на поверхность (рис. 29).

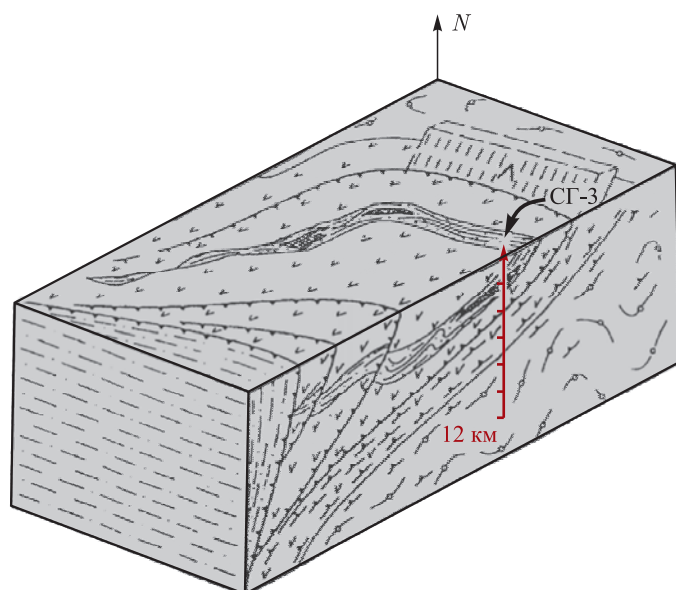


Рис. 29. Модель глубинного строения Печенгского рудного района (ИГЕМ РАН, ВНИИГеосистем, Москва)

Текстуры плагиоклаза в амфиболитах и гнейсах сложнее и разнообразнее, чем текстуры других породообразующих минералов. Плагиоклаз является низкосимметричным минералом, только одно из его кристаллографических направлений b примерно совпадает с распределением нормалей к плоскости (010), другие же направления a и c в монокристалле расположены под углами к плоскостям (100) и (001). Тем не менее для общего представления о пространственной ориентировке зерен плагиоклаза выбраны полюсные фигуры (001), (010) и (100), показанные на рис. 30, 31.

Из рис. 30 видно, что преимущественная ориентировка плагиоклаза в образцах амфиболитов более слабая по сравнению с роговой обманкой, что можно объяснить его большей податливостью к деформационным воздействиям и процессам метаморфизма.

Тот факт, что плоскости пинакоида (001) плагиоклаза в образцах гнейсов и амфиболитов сохранили свою пространственную преимущественную ориентировку (рис. 30, 31), может свидетельствовать в пользу единого ориентационного механизма, создавшего плагиоклазовые текстуры и действовавшего на одном геологическом этапе. По всей вероятности, таким механизмом могло стать двойникование в условиях пластической деформации. Последующие метаморфические изменения в горной породе под влиянием меняющихся

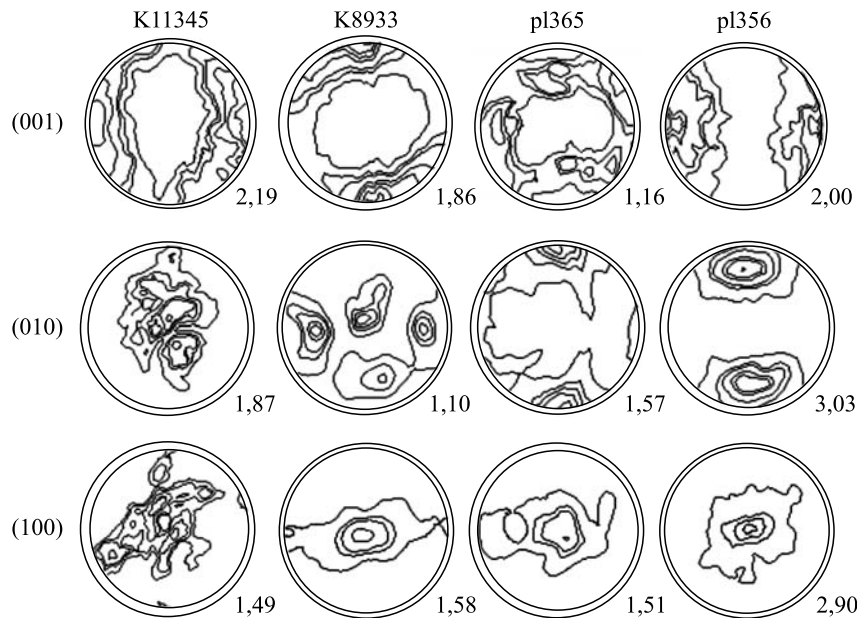


Рис. 30. Полусные фигуры плагиоклаза образцов амфиболитов, рассчитанные на основе ФРО. К11345, К8933 — образцы из разреза Кольской сверхглубокой скважины; pl365, pl356 — образцы с поверхности участка Муста-Тунтури. Справа внизу указаны максимальные значения полюсной плотности в единицах, кратных хаотическому распределению

p -, T -параметров могли сильно трансформировать текстуру плагиоклаза, не разрушив тем не менее ее вообще и сохранив «память» о первоначальном этапе текстурообразования в виде схожих картин ориентировки на полюсных фигурах (001).

Взаимная ориентировка различных минеральных фаз в различных по минеральному составу горных породах, по-видимому, также может оказывать влияние на ход текстурных трансформаций минералов. Взаимодействие плагиоклаза с роговой обманкой — основным породообразующим минералом амфиболитов, сохранившим сильную преимущественную ориентировку, привело к нарушениям и даже к разрушению первичной ориентировки плагиоклаза в амфиболитах в большей степени (рис. 30), чем в гнейсах (рис. 31), что и отразилось на полюсных фигурах (001). Отсутствие ярко выраженных закономерных ориентировок на полюсных фигурах плагиоклаза может быть также свидетельством сильных рекристаллизационных процессов в ходе эволюции архейских амфиболитовых пород, которые в большей степени затронули плагиоклаз, чем роговую обманку.

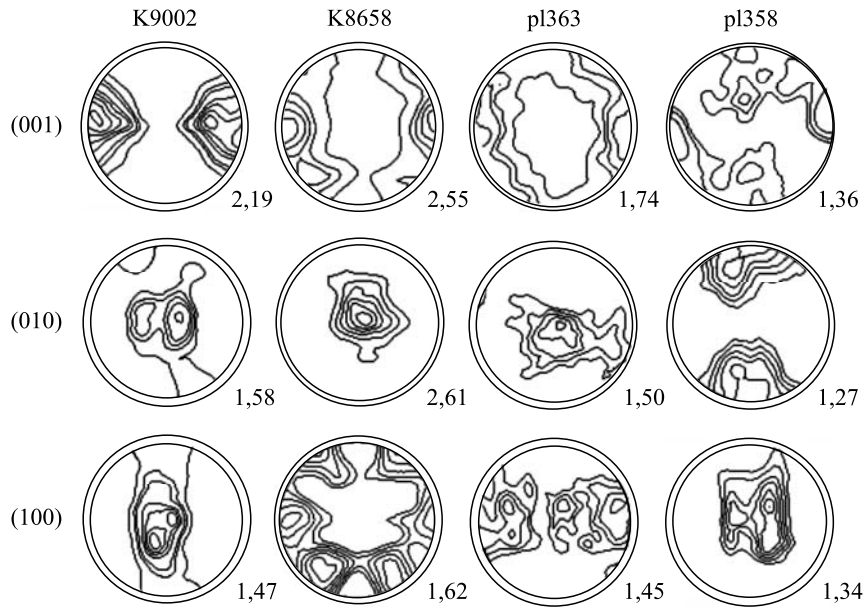


Рис. 31. Полусные фигуры плагиоклаза образцов гнейсов, рассчитанные на основе ФРО. K9002, K8658 — образцы из разреза Кольской сверхглубокой скважины; pl363, pl358 — образцы с поверхности участка Муста-Тунтури. Справа внизу указаны максимальные значения полюсной плотности в единицах, кратных хаотическому распределению

Наличие больших разновидностей текстур кварца, занимающего незначительный объем в образцах амфиболитов, может быть результатом большого разнообразия генетических процессов в кварце, его полиморфизма, большей податливости к разнообразным метаморфическим механизмам. Последние трансформируют «реликтовые» текстуры кварца, возникшие на стадии образования амфиболитовой породы, таким образом, что они могут быть полностью или частично перекрыты более поздними текстурами или, наоборот, размыты при охлаждении породы в результате фазового перехода и разных типов двойникования.

То, что кристаллографическая текстура роговой обманки играет определяющую роль в формировании сейсмических свойств образцов амфиболитов Кольской серии, доказали результаты сопоставления скоростей продольных упругих волн, рассчитанных по данным о текстурах и измеренных экспериментально при гидростатических давлениях до 400 МПа (рис. 32). Акустические измерения проводились на установке высокого давления в Геологиче-

ском институте Чешской АН (Прага). Несмотря на то, что минеральный состав амфиболитов включает помимо роговой обманки плагиоклаз и кварц, существовавшие возможности обработки дифракционных спектров позволяли восстанавливать лишь полюсные фигуры роговой обманки, проявлявшей себя изолированными брэгговскими рефлексами на спектрах [157]. Поэтому модельные пространственные распределения скоростей продольных волн на рис. 32 (нижний ряд) по сути являются трехмерными картинами распределения скоростей образца, состоящего только из роговой обманки. Тем не менее сопоставление с акустическими измерениями при 400 МПа дает полную уверенность, что кристаллографическая текстура роговой обманки является преобладающим фактором, контролирующим анизотропию упругих свойств амфиболитов из СГ-3.

Нейтроннографический текстурный анализ позволил получить характеристики текстур горных пород, недоступные для традиционных геологических методов, выявить пространственную ориентировку минералов в объеме породы и необычное поведение роговой обманки, плагиоклаза при высокотемпературных пластических деформациях. Фундаментальное значение проведенных исследований заключается в том, что они впервые позволили определить состав и свойства того каркаса, который слагает глубинные зоны древней континентальной земной коры и в котором развиваются более поздние тектонические и петрологические процессы (на примере Печенгской геологической структуры).

3.5. Кристаллографические текстуры горных пород как фактор, определяющий сейсмическую анизотропию, и источник сейсмической неоднородности литосферы. Существует ряд физических и литологических причин, контролирующих упругие свойства горных пород в условиях *in situ* (рис. 33) [163]. Упругая анизотропия горных пород литосферы Земли может быть вызвана различными факторами, начиная с крупномасштабных (например, ориентированных разломов, слоев) и заканчивая микроструктурными (ориентированными трещинами, порами и преимущественной ориентировкой кристаллов).

В настоящее время с помощью комплексного применения нейтроннографического текстурного анализа и пространственного измерения скоростей ультразвуковых волн в больших образцах горных пород сферической формы при различных давлениях можно наиболее полно устанавливать причины, вызывающие анизотропию упругих свойств горных пород. Нейтроннографический текстурный анализ позволяет с высокой точностью определять кристаллографические текстуры относительно больших крупнозернистых образцов горных пород, т.е. дает количественную информацию о пространственной ориентировке кристаллических решеток зерен по всему ансамблю минералов. Пространственное прозвучивание образца суммирует в себе информацию и о других факторах, создающих анизотропию в неоднородных поликристалли-

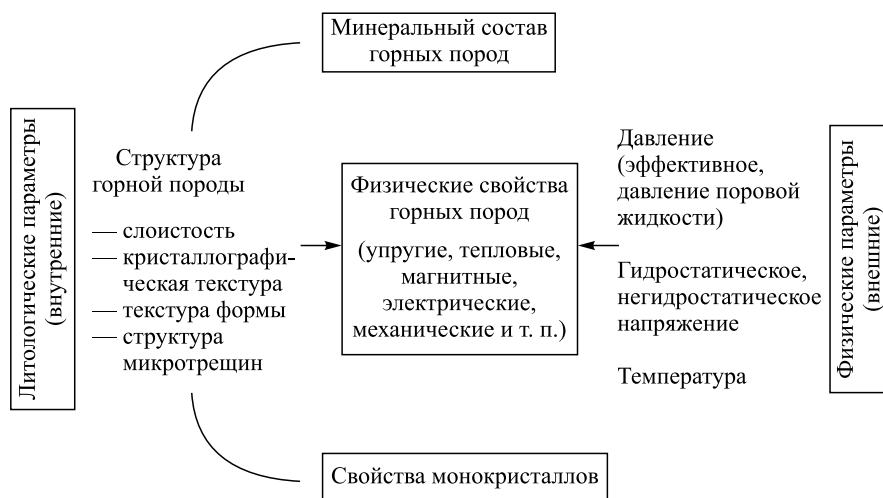


Рис. 33. Факторы, контролирующие упругие свойства горных пород

ческих средах, таких как ориентированные поры, трещины, текстура формы и ориентированные границы зерен.

Последние результаты совместного применения нейтронного рассеяния и различных акустических методов измерения скоростей упругих волн (на установках в Геологическом институте Чешской АН в Праге и в Кильском университете в Германии) связаны с изучением горных пород, извлеченных из исследовательской скважины ОКУ, заложенной в юго-восточной части Балтийского щита вблизи г. Оутокумпу (Финляндия).

Проходка скважины в Оутокумпу была закончена в 2005 г. Как предсказывалось, скважина пересекла мощные пласты биотитовых гнейсов. Но неожиданно на глубине 1500–2000 м были обнаружены слои горных пород с повышенными скоростями. Они образованы магматическими породами и по сути являются сильным сейсмическим рефлексором. Представлял интерес сравнительный анализ биотитовых гнейсов выше и ниже зоны повышенных скоростей (1500–2000 м). С этой целью были проведены нейтронографические измерения пяти образцов биотитовых гнейсов с глубин 600–1100 м (ОКУ676.10, ОКУ818.05, ОКУ578.10, ОКУ908.25 и ОКУ1093.6). Результаты текстурного анализа по методу WIMV [52] показали наличие острой текстуры биотита и более слабой преимущественной ориентировки кварца и плагиоклаза [164]. Ориентированная структура биотита задает направление максимального распространения продольной и максимального расщепления поперечной волн в образце, что согласуется с данными ультразвуковых измерений.

Экспериментальные ультразвуковые измерения скоростей P - и S -волн при повышенных температурах и давлениях с использованием аппарата высокого давления были проведены в петрофизической лаборатории Кильского университета. Специальная конструкция аппарата позволяет измерять скорости (P) продольных и ортогонально-поляризованных сдвиговых ($S1$, $S2$) волн в трех перпендикулярных направлениях на образце кубической формы (с длиной ребра 43 мм).

Скорости продольных упругих волн $V_p Z$ в направлении оси скважины, рассчитанные по данным текстурных нейтронно-дифракционных измерений, удовлетворительно согласуются со скоростями $V_p \log$, измеренными в скважине (рис. 34). А это значит, что преимущественная ориентировка зерен биотита в биотитовых гнейсах вносит определяющий вклад в сейсмическую

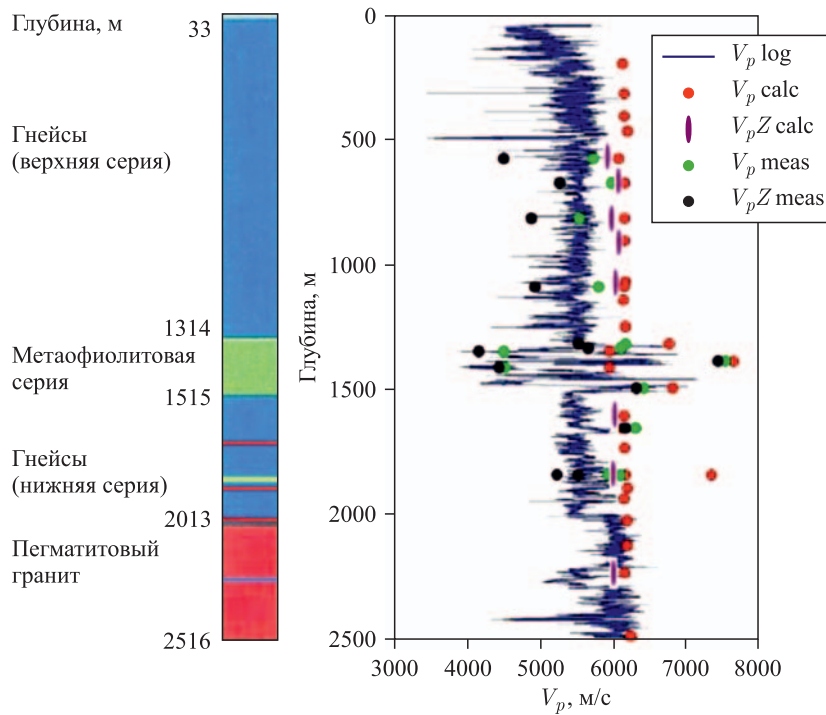


Рис. 34. Сравнительный анализ результатов моделирования скоростей V_p по данным нейтронографического текстурного анализа (calc), лабораторных акустических измерений образцов биотитовых гнейсов (meas) из научной скважины Оутокумпу (Финляндия) с данными сейсмического каротажа скважины (log). Слева в разрезе показаны основные литологические типы горных пород, вскрытые при проходке скважины Оутокумпу

анизотропию и создает зоны повышенного сейсмического отражения на контактах биотитовых гнейсов и метафиолитового комплекса [165].

Однако результирующая объемная упругая анизотропия, полученная моделированием скоростей V_p по ФРО минеральных компонент во всех образцах биотитовых гнейсов, отличается от экспериментально измеренной анизотропии. Чтобы понять причины таких расхождений, была инициирована методическая работа, в которой результаты моделирования по данным нейтронной дифракции сравнивались с лабораторными акустическими измерениями, выполненными на образце ОКУ818 двумя различными методами [166]. Первоначально с помощью нейтронного дифрактометра СКАТ были измерены полюсные фигуры биотита, кварца и плагиоклаза на образце нерегулярной формы, извлеченного с глубины 818 м из скважины Оутокумпу. На рис. 35 представлен количественный текстурный анализ образующих образец минералов, а также пространственные распределения скоростей упругих волн (V_p , $V_{s1}-V_{s2}$), полученные на основе полифазного усреднения вкладов каждой минеральной компоненты. На рис. 36 показаны зависимости скоростей квази-продольных P -волн от давления, зарегистрированные на образце ОКУ818 сферической формы на установке гидростатического давления (Геологический институт, Прага). Здесь же для сравнения приведены результаты измерений скоростей P -волн в аппарате трехосного сжатия, проведенных для трех направлений X , Y и Z в кубическом образце, вырезанном из того же зерна, извлеченного с глубины 818 м (система XYZ выбрана в соответствии со структурной системой координат). Экспериментальные данные при высоких давлениях, полученные двумя методами, коррелируют друг с другом, особенно в области давлений начиная с 50 МПа. Расхождения в величинах скоростей при атмосферном давлении вызваны различиями в системах нагружения образца.

Тем не менее упругая анизотропия P -волн, предсказанная по результатам усреднения упругих свойств объемного образца и данным о кристаллографических текстурах минералов, оказалась значительно ниже (7,9%), чем измеренная анизотропия (13–15%), даже для значений всестороннего давления 200 МПа. При этих условиях, когда поры и трещины в образце считаются закрытыми, именно кристаллографические текстуры порообразующего минерального скелета должны стать главным фактором, определяющим упругую анизотропию образца. Стало очевидно, что при использовании в расчетах полифазного усреднения не учитывается форма зерен (морфологическая анизотропия слоистых силикатов) и наличие межзеренных границ, что уменьшает расчетные упругие модули образца и, соответственно, величины рассчитанных скоростей. По-видимому, помимо текстуры преимущественная ориентировка биотитовых зерен по форме (текстура формы) и зернограницные эффекты усиливают измеренную объемную упругую анизотропию.

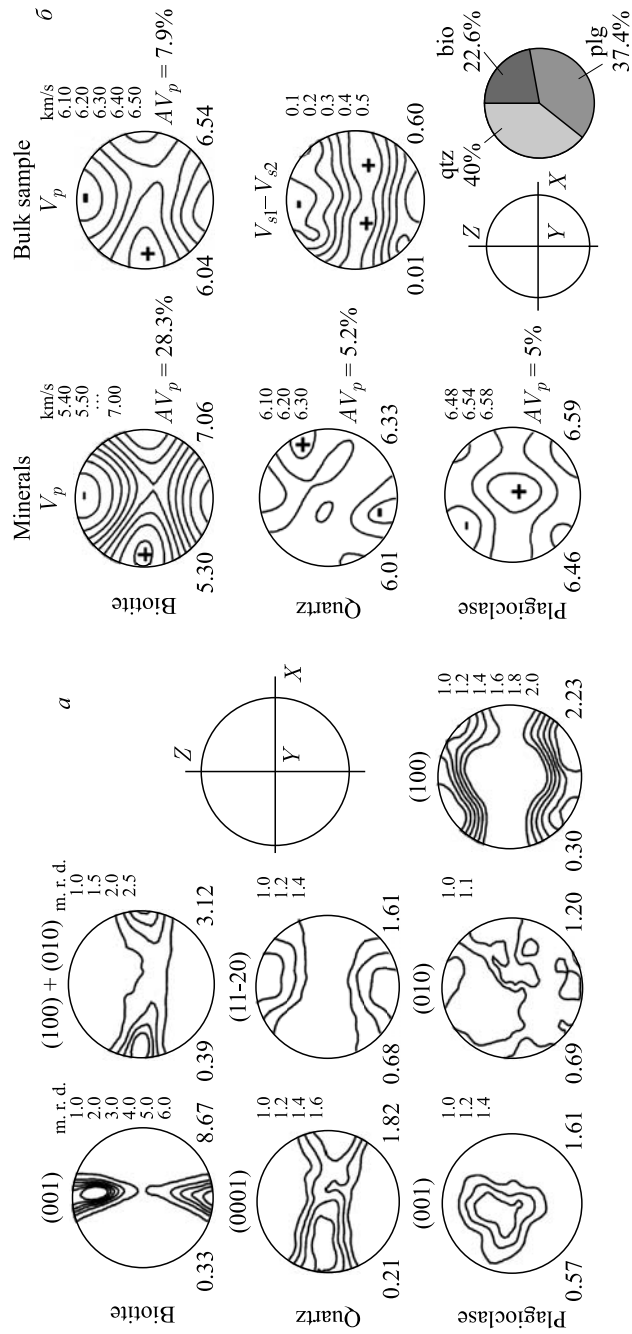


Рис. 35. а) Полусные фигуры биотита, кварца и плагиоклаза образца OKU818, вычисленные на основе ФРО минеральных фаз, восстановленных из нейтронно-дифракционных данных. б) Рассчитанные трехмерные распределения скоростей R-волн каждой минеральной фазы и пространственное распределение скоростей R-волн и расщепления S-волн ($V_{s1} - V_{s2}$) объемного образца с учетом минерального состава образца (диаграмма внизу справа)

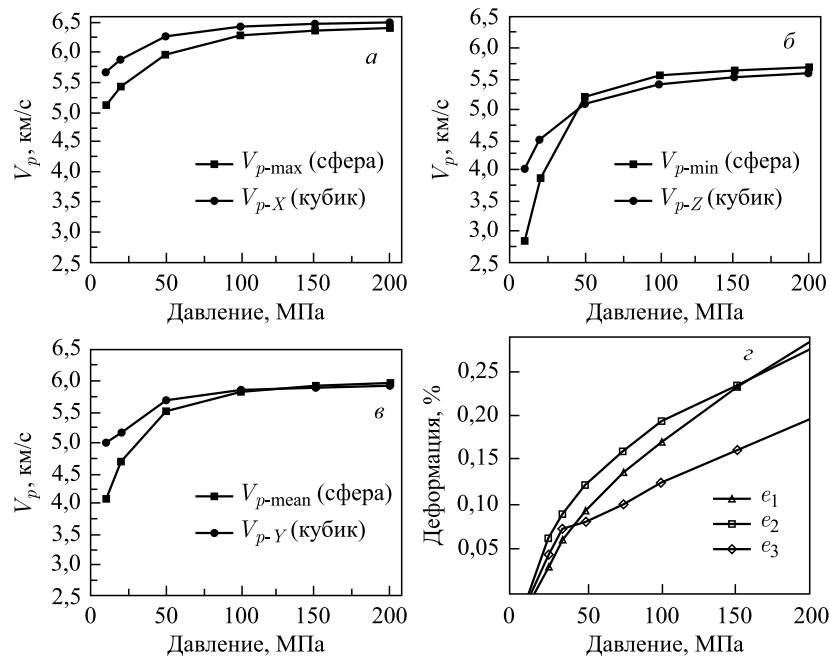


Рис. 36. Результаты измерений скоростей P -волн на образце биотитового гнейса OKU818. *а–в*) Сравнение скоростей P -волн, измеренных на образце кубической формы в направлениях X , Y , Z , со значениями максимальной, средней и минимальной скоростей, измеренных на сферическом образце в интервале давлений 20–200 МПа. *г*) Кривые деформации для трех направлений X , Y и Z в кубическом образце, полученные по данным о смещении поршня в аппарате трехосного сжатия

Результаты, полученные для образца OKU818, были пересмотрены с использованием более современных возможностей количественного текстурного анализа и более точной микромеханической модели для расчета упругих характеристик и скоростей упругих волн в геологических образцах.

Для того чтобы определить «истинную» анизотропию упругих свойств и оценить вклад ориентированных трещин и кристаллографической текстуры минералов в объемную анизотропию образцов горных пород, авторами [99] использовались два различных метода. Во-первых, проводились измерения скоростей квазипродольных и квазипоперечных P - и S -волн в трех ортогональных направлениях как функций давления и температуры и, во-вторых, моделировалось трехмерное распределение скоростей упругих волн на основе нейтронных данных о кристаллографических текстурах образцов. Был проведен сравнительный нейтронографический анализ образца OKU818 с помощью

спектрометра СКАТ на реакторе ИБР-2 (Дубна, Россия) и на дифрактометре HIPPO в исследовательском центре LANSCE (Лос-Аламос, США). Более того, для обработки дифракционных данных был применен метод Ритвельда с использованием программы MAUD [68]. Результаты измерений для биотитовой компоненты показаны на рис. 37. Подобное же сопоставление текстурных данных выполнено для других минералов, составляющих образец, — кварца и плагиоклаза. Сравнение нейтронных данных показало, что HIPPO обладает лучшей статистикой, но худшим разрешением измеренных полюсных фигур, зато СКАТ имеет лучшее угловое разрешение на полюсных фигурах.

Конечный этап моделирования заключался в решении уравнения Кристоффеля для упругой волны, распространяющейся в анизотропной среде, и нахождении значений скоростей упругих волн в заданных направлениях [167]. Подробное описание метода моделирования с использованием количественных текстурных данных можно найти, например, в [159]. В работе [99] помимо традиционно используемого метода усреднения по Фойгту расчеты проводились по методу GEO-MIX-SELF (GMS, [88]), а также учитывалась форма биотитовых зерен (эллипсоиды с соотношением полуосей 0,05:1:0,2) и присутствие в образце вытянутых пор с объемным содержанием 0,1%. Для сравнения результаты вычислений скоростей P -волн при использовании различных методов усреднения приведены на рис. 38. Так, при расчете упругих свойств по методу Фойгта (5), (44) коэффициент упругой анизотропии ($AV_p = 200 \cdot (P_x - P_z) / (P_x + P_z)$) для биотитового гнейса составляет 10,4%, в случае учета формы зерен биотита в алгоритме GEO-MIX-SELF он возрастает до 12,6% и при использовании дополнительно микротрещин он равен 14,9% (случай D), в отличие от измеренного с помощью акустических волн в эксперименте — 15,3%. Такое удовлетворительное соответствие моделирования (вариант D) и эксперимента было получено из-за учета при моделировании формы зерен биотита и небольшого присутствия трещин в образце. Подобные микропоры, обычно связанные с границами зерен филлосиликатов, могут быть в породах земной коры даже на глубине и давать ощутимый вклад в наблюдаемую сейсмическую анизотропию. Проведенное исследование позволило высказать предположение [165], что структурно-зависимая анизотропия сейсмических скоростей образцов биотитовых гнейсов, представляющих преобладающий литотип горных пород выше и ниже зоны рефлектора в скважине Оутокумпу, может значительно влиять на значения коэффициентов отражения на границе с метаофиолитовой серией горных пород.

Практика применения нейтронографического текстурного анализа в рамках проектов глубокого бурения началась с проекта КТВ (Kontinentales Tiefbohrprojekt) в Германии и была продолжена в проектах Кольской сверхглубокой скважины СГ-3 (Заполярный, Россия) и исследовательской скважины Оутокумпу (Финляндия). Использование количественной информации о влиянии текстуры и структуры горных пород на состояние вещества литосферы

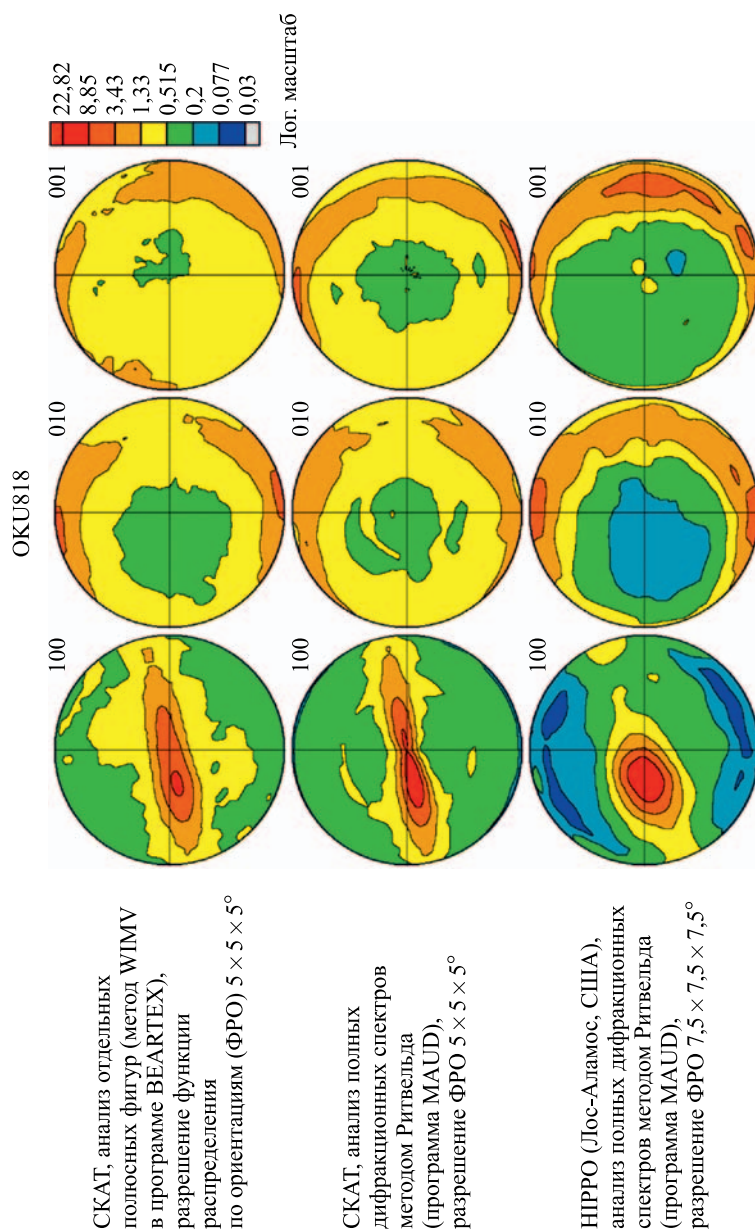


Рис. 37. Сравнение результатов измерений преимущественных ориентировок биотитовых зерен, полученных с помощью текстурного дифрактометра СКАТ (ЛНФ, ОИЯИ) и текстурного дифрактометра НIPPO (Лос-Аламос, США). Полусные фигуры биотита образца биотитового гнейса с глубины 818 м научной скважины Оутокумпу (Финляндия)

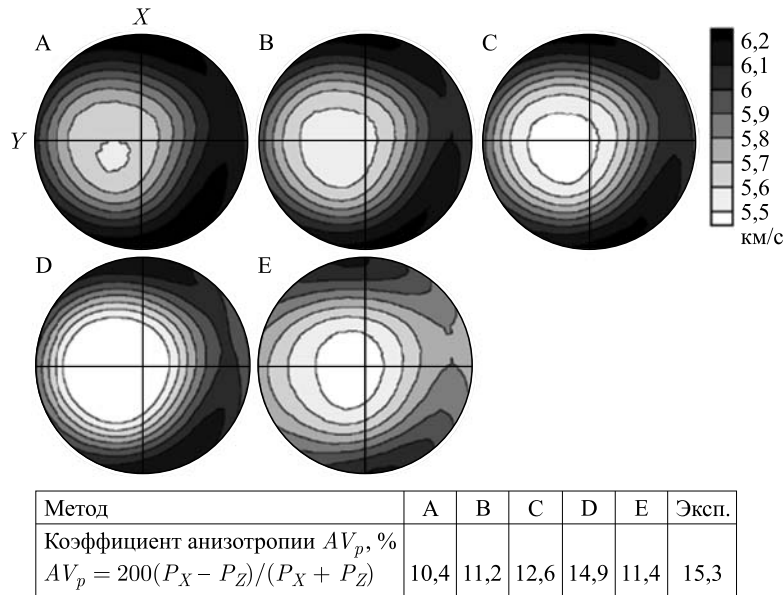


Рис. 38. Пространственное распределение скоростей P -волн и коэффициенты упругой анизотропии, рассчитанные для различных моделей на основе измерений на дифрактометре HIPPO (A–D): A — усреднение по Фойгту; B — метод самосогласования, C — метод самосогласования с учетом формы зерен 1:0,2:0,01; D — дальнейшее уточнение модели C, но с учетом присутствия в образце пор объемом 0,1%; E — с использованием модели Фойгта и данных дифрактометра SKAT; эксп. — результаты расчета по данным измерений V_p на установке трехосного сжатия

Земли на различных ее глубинах, полученной современными методами текстурного анализа, выводит современную сейсмологию на новый уровень. Количественный текстурный анализ горной породы и оценка текстурно-зависимых сейсмических свойств дает современное понимание состояния вещества литосферы и новые данные, которые могут быть использованы в практике геологоразведочных работ при проведении сейсмоакустического профилирования и построения сейсмических разрезов исследуемых блоков литосферы Земли.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Целью данного обзора являлась попытка в ограниченной и по возможности общедоступной форме представить этапы становления и последующего применения аппарата количественного текстурного анализа. Существование

кристаллографической текстуры связано со статистическими распределениями ориентаций, описываемых в специальном неевклидовом пространстве. Поэтому операции, связанные с ними, часто отличаются от привычной практики и опыта описания простых физических явлений.

В течение почти столетия количественный текстурный анализ достиг впечатляющего уровня как в плане теоретического аппарата, так и в появлении стремительно развивающихся экспериментальных и вычислительных возможностей. Нейтронное рассеяние как один из современных физических методов в сочетании с текстурным анализом открыли доступ к решению фундаментальных проблем в науках о Земле.

Из-за своей статистической природы и свойств реально осуществляемых экспериментов в текстурном анализе существуют свои специфические проблемы и затруднения. Их следует учитывать во избежание неверных заключений при некритичном использовании простых («считаемых») приближений или доступных компьютерных программ.

Новые перспективы в данной области связаны с изучением сложных геологических материалов (обладающих многими минеральными фазами, пористостью, распределением зерен по размерам и форме и т. п.) или современных технических материалов (композиты, пены). Причем количественный текстурный анализ будет лишь составным элементом многомасштабного подхода к описанию свойств подобных поликристаллических материалов, существенно зависящих от взаимодействия их микро- и мезоскопических составляющих. Принципиальной проблемой таких подходов станет необходимость детального экспериментального определения как можно большего числа параметров изучаемых структур, а также пределы вычислительных ресурсов.

Авторы надеются, что выбор показанных аспектов количественного текстурного анализа и примеров применения его аппарата в науках о Земле соответствует сформулированной выше цели и намерению идейного вдохновителя данного обзора профессора А. Н. Никитина, ученого и организатора науки, посвятившего последние десятилетия своей жизни этой области исследования.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Никитин А. Н., Иванкина Т. И.* Нейтронография в науках о Земле // ЭЧАЯ. 2004. Т. 35, вып. 2. С. 348–407.
2. *Edmonds A. R.* Angular Momentum in Quantum Mechanics. Princeton Univ. Press, 1957.
3. *Варшалович Д. А., Москалев А. Н., Херсонский В. К.* Квантовая теория углового момента. Л.: Наука, 1975.
4. *Федоров Е. С.* Теодолитный метод в геологии и петрографии. СПб.: Типография А. Якобсона, 1893. 219 с.

5. Лукин Л. И., Чернышев В. Ф., Кушнарёв И. М. Микроструктурный анализ. М.: Наука, 1965. 124 с.
6. Bunge H.-J. *Mathematische Methoden der Texturanalyse*. Berlin: Akademie-Verlag, 1969.
7. Wassermann G., Grewen J. *Texturen Metallischer Werkstoffe*. Berlin: Springer-Verlag, 1962.
8. Виглин А. С. Количественная мера текстуры поликристаллического материала. Текстульная функция // ФТТ. 1960. Т. 2, № 10. С. 2463–2476.
9. Roe R. J. Description of Crystallite Orientation in Polycrystalline Materials. General Solution to Pole Figure Inversion // J. Appl. Phys. 1965. V. 36. P. 2024–2031.
10. Bunge H.-J. Zur Darstellung allgemeiner Texturen // Z. Metallkunde. 1965. V. 56. P. 872–874.
11. Matthies S. On the Reproducibility of the Orientation Distribution Function from Pole Figures (Ghost Phenomena) // Phys. Stat. Sol. (b). 1979. V. 92. P. K135–K138.
12. Bunge H.-J. *Texture Analysis in Materials Science*. London: Butterworth, 1983.
13. Matthies S., Vinel G., Helming K. *Standard Distributions in Texture Analysis*. Berlin: Akademie-Verlag, 1987.
14. Savjolova T. I. Calculation of Domains of Dependence for Pole Figures with an Ultrahyperbolic Equation // Textures and Microstructures. 1995. V. 23. P. 185–199.
15. Савелова Т. И. О решении одной обратной задачи дифракции // Докл. АН СССР. 1982. Т. 266. С. 590–593.
16. Matthies S., Esling C. Comments to a Publication of Savjolova T. I. Concerning Domains of Dependence in Pole Figures // Textures and Microstructures. 1998. V. 30. P. 201–227.
17. Vadon A., Ruer D., Baro R. The Generalization and Refinement of the Vector Method for the Texture Analysis of Polycrystalline Materials // Adv. X-Ray Analysis. 1980. V. 23. P. 349–360.
18. Williams R. D. Analytical Methods for Representing Complex Textures by Biaxial Pole Figures // J. Appl. Cryst. 1968. V. 40. P. 4329–4335.
19. Imhof J. An Iteration Procedure in the Texture Analysis // Phys. Stat. Sol. (b). 1983. V. 119. P. 693–701.
20. Matthies S., Vinel G. On the Reproduction of the ODF of Textured Samples from Reduced Pole Figures Using the Concept of Conditional Ghost Correction // Phys. Stat. Sol. (b). 1982. V. 112. P. K111–K120.
21. Matthies S. 20 Years WIMV, History, Experience and Contemporary Developments // Materials Sci. Forum. 2002. V. 408–412. P. 95–100.
22. Matthies S. Some Remarks on Theoretical Developments in Quantitative Texture Analysis and on the Optimal Calculation of Harmonic Quantities with High Precision // Textures and Microstructures. 1988. V. 8–9. P. 115–129.

23. *Pospiech J.* Private Communication. 1977.
24. *Matthies S., Pospiech J.* On the Demonstration of the Ghost Effect in Texture Analysis // *Phys. Stat. Sol. (b)*. 1980. V. 97. P. 547–556.
25. *Matthies S.* On the Reproducibility of the ODF of Texture Samples from Pole Figures. Part III: Relationship between the ODF and the Reduced ODF $f(g)$ // *Kristall und Technik*. 1980. V. 15. P. 431–444.
26. *Dahms M., Bunge H. J.* Positivity Method for the Determination of Complete ODFs // *Textures and Microstructures*. 1988. V. 10. P. 21–35.
27. *Van Houtte P.* The Use of a Quadratic Form for the Determination of Non-Negative Texture Functions // *Textures and Microstructures*. 1983. V. 6. P. 1–20.
28. *Van Houtte P.* A Method for the Generation of Various Ghost Correction Algorithms the Example of the Positivity Method and the Exponential Method // *Textures and Microstructures*. 1991. V. 13. P. 199–212.
29. *Matthies S.* On the Principle of Conditional Ghost Correction and Its Realization in Existing Correction Concepts // *Textures and Microstructures*. 1991. V. 14–18. P. 1–12.
30. *Schaeben H.* Entropy Optimization in Texture Geometry. I. Methodology // *Phys. Stat. Sol. (b)*. 1988. V. 148. P. 63–72.
31. *Pawlik K., Pospiech J., Luecke K.* The ODF Approximation from Pole Figures with the AID of the ADC Method // *Textures and Microstructures*. 1991. V. 14–18. P. 105.
32. *Helming K., Eschner T.* A New Approach to Texture Analysis of Multiphase Materials Using a Texture Component Model // *Cryst. Res. Technol.* 1990. V. 25. P. K203–K208.
33. *Dahms M.* Introduction of the Phon-Concept into Pole Figure Inversion Using the Iterative Series Expansion Method // *Textures and Microstructures*. 1992. V. 19. P. 169–174.
34. *Dahms M.* Final Positivity Correction in the Harmonic Method // *Textures and Microstructures*. 1993. V. 21. P. 61–69.
35. *Hielscher R., Schaeben H., Chateigner D.* On the Entropy to Texture Index Relationships in Quantitative Texture Analysis // *J. Appl. Cryst.* 2007. V. 40. P. 371–375.
36. *Junk M., Budday J., Boehlke T.* On the Solvability of Maximum Entropy Moment Problems in Texture Analysis // *Math. Models and Methods in Appl. Sci.* 2012. V. 22(12). P. 1250043.
37. *Kocks U. F. et al.* *Texture and Anisotropy: Preferred Orientations in Polycrystals and Their Effect on Materials Properties*. Cambridge Univ. Press, 2000.
38. *Matthies S., Helming K., Kunze K.* On the Representation of Orientation Distributions in Texture Analysis by σ -Sections // *Phys. Stat. Sol. (b)*. 1990. V. 157. P. 71–83. P. 489–507.
39. *Neumann P.* Representation of Orientations of Symmetrical Objects by Rodrigues Vectors // *Textures and Microstructures*. 1991. V. 14–18. P. 53–58.

40. *Fundenberger J.J., Schaeben H., Boogaart K.G.* Visualization of Patterns of Preferred Crystallographic Orientation by ω -Sections // *Material Sci. Forum.* 2005. V. 495–497. P. 289–294.
41. *Matthies S.* Standard Functions in the Texture Analysis // *Phys. Stat. Sol. (b).* 1980. V. 101, No. 2. P. K111–K115.
42. *Fisher R.H.* Dispersion on a Sphere // *Proc. Roy. Soc. A.* 1953. V. 217. P. 295–305.
43. *Eschner T.* Texture Analysis by Means of Model Functions // *Textures and Microstructures.* 1993. V. 21. P. 130–146.
44. *Matthies S.* Form Effects in the Description of the ODF of Texturized Materials by Model Components // *Phys. Stat. Sol. (b).* 1982. V. 112, No. 2. P. 705–716.
45. *Ivanova T.M., Nikolaev D.I.* New Standard Function for Quantitative Texture Analysis // *Phys. Stat. Sol. (b).* 2001. V. 228. P. 825–836.
46. *Schaeben H.* A Simple Standard Orientation Density Function: The Hyperspherical de la Vallée Pousin Kernel // *Phys. Stat. Sol. (b).* 1997. V. 200. P. 367–376.
47. *Matthies S. et al.* Standard Distributions for the Case of Fibre Textures // *Phys. Stat. Sol. (b).* 1988. V. 150. P. 262–277.
48. *Kunze K., Schaeben H.* The Bingham Distribution of Quaternions and Its Spherical Radon Transform in Texture Analysis // *Math. Geology.* 2004. V. 36, No. 8. P. 917–943.
49. *Савелова Т.И.* Предисловие // Новые методы исследования текстуры поликристаллических материалов: Сб. ст. / Сост. И.И. Папилов. М.: Металлургия, 1985. 312 с.
50. *Matthies M., Muller J., Vinel G.W.* On the Normal Distribution in the Orientation Space // *Textures and Microstructures.* 1988. V. 10. P. 77–96.
51. *Nikolaev D.J., Savyolova T.I.* Normal Distribution on the Rotation Group $SO(3)$ // *Textures and Microstructures.* 1997. V. 29. P. 201–233.
52. *Wenk H.-R. et al.* BEARTEX: A Windows Based Program for Quantitative Texture Analysis // *J. Appl. Cryst.* 1998. V. 31. P. 262–269.
53. *Pawlik K., Ozga P.* LaboTex: The Texture Analysis Software // *Goettinger Arbeiten zur Geologie und Palaeontologie.* 1999. SB4; www.labosoft.com.pl.
54. *Hielscher R., Schaeben H.* A Novel Pole Figure Inversion Method: Specification of the MTEX Algorithm // *J. Appl. Cryst.* 2008. V. 41. P. 1024–1037.
55. *Engler O., Randle V.* *Texture Analysis: Macrotecture, Microtexture & Orientation Mapping.* CRC Press, 2010.
56. *Matthies S., Wagner F.* On a $1/n$ Law in Texture Related Single Orientation Analysis // *Phys. Stat. Sol. (b).* 1996. V. 196. P. K11–K15.
57. *Matthies S., Wagner F.* Using Sets of Individual Orientations for ODF Determination // *Proc. of ICOTOM-12.* Montreal: NRC Research Press, 1999. P. 40–45.

58. *Pospiech J., Jura J., Gottstein G.* Statistical Analysis of Single Grain Orientation Data Generated from Model Textures // Proc. of ICOTOM-10. Clausthal, Germany: Trans. Tech. Publ., 1993. P. 407–12.
59. *Matthies S., Vinel G.W.* On Some Methodical Developments Concerning Calculations Performed Directly in the Orientation Space // Ibid. P. 1641–1646.
60. *Boogaart K. G.* Statistics for Individual Crystallographic Orientation Measurements. PhD Thesis. TU Freiberg, Aachen: Shaker Verlag, 2001.
61. *Bachmann F., Hielscher R., Schaeben H.* Texture Analysis with MTEX — Free and Open Source Software Toolbox // Solid State Phenom. 2010. V. 160. P. 63–68.
62. *Matthies S.* The ODF-Spectrum a New and Comprehensive Characterization of the Degree of Anisotropy of Orientation Distributions // Proc. of ICOTOM-14. Materials Sci. Forum. 2005. V. 495–497. P. 331–336.
63. *Schaeben H. et al.* Orientation Density Function- Controlled Pole Probability Density Function Measurements: Automatic Adapted Control of Texture Goniometers // J. Appl. Cryst. 2007. V. 40. P. 570–579.
64. *Muecklich A., Klimanek P.* Experimental Errors in Quantitative Texture Analysis from Pole Figures // Materials Sci. Forum. 1994. V. 157–162. P. 257–286.
65. *Luzin V. V., Nikolaev D. I.* On the Errors of Experimental Pole Figures // Textures and Microtextures. 1996. V. 25. P. 121–128.
66. *Lychagina T. A., Nikolaev D. I.* Investigation of Experimental Pole Figure Errors by Simulation of Individual Spectra // Crystallogr. Rep. 2007. V. 52, No. 5. P. 774–780.
67. *Bachmann F., Schaeben H., Hielscher R.* Optimizing the Experimental Design of Texture Goniometry // J. Appl. Cryst. 2012. V. 45. P. 1173–1181.
68. *Lutterotti L., Matthies S., Wenk H.-R.* MAUD: A Friendly JAVA Program for Material Analysis Using Diffraction // IUCr Newsletter of the CPD. 1999. V. 21. P. 14–15.
69. Texture Analysis and Modeling Package. Material Science and Technology Division. LNL, Los Alamos, USA, 1995; popLA@lanl.gov.
70. *Helming K.* Texture Approximation by Model Components // Material Structures. 1998. V. 5, No. 1. P. 3–9.
71. *Vaudin M. D.* Ceramic Division. NIST. Gaithersburg. USA. 1999; mark.vaudin@nist.gov.
72. *Chateigner D.* Combined Analysis. Wiley & Sons, 2010.
73. *Salzmann I., Resel R.* STEREOPOLE: A Software for the Analysis of X-ray Diffraction Pole Figures with IDL // J. Appl. Cryst. 2004. V. 37. P. 1029–1033.
74. TexTools. Univ. of Montreal, Canada, 2005. www.resmat.com.
75. Proc. of the 16th Intern. Conf. on Textures of Materials (ICOTOM 16), Montreal 2011 / Eds.: Tewari A. et al. Mumbai: Trans. Tech. Publ. 2012. 1070 p.
76. Theoretical Methods of Texture Analysis / Ed. Bunge H.J. DGM Verlag, 1987. 450 p.

77. *Advances and Applications of Quantitative Texture Analysis* / Eds.: Bunge H. J., Esling C. DGM Verlag, 1991. 310 p.
78. Новые методы исследования текстуры поликристаллических материалов: Сб. ст. / Сост. И. И. Папиров. М.: Metallurgiya, 1985. 312 с.
79. *Вишняков Я. Д. и др.* Теория образования текстур в металлах и сплавах. М.: Наука, 1997. 343 с.
80. *Берестова С. А., Хананов Ш. М.* О некоторых путях становления структурно-феноменологических теорий в механике деформируемого твердого тела // Вестн. ПГТУ. Механика. 2010. С. 17–29.
81. *Voigt W.* Lehrbuch der Kristallphysik. Leipzig: Teubner, 1928.
82. *Reuss A.* Berechnung der Fließgrenze von Mischkristallen auf Grund der Plastizitätsbedingung für Einkristalle // Z. Angew. Math. Mech. 1929. V. 9. P. 49–58.
83. *Mathies S., Humbert M.* On the Principle of a Geometric Mean of Even-Rank Symmetric Tensors for Textured Polycrystals // J. Appl. Cryst. 1995. V. 28, No. 3. P. 254–266.
84. *Mathies S.* GEO-MIX-SELF Calculations of the Elastic Properties of a Textured Graphite Sample at Different Hydrostatic Pressures // J. Appl. Cryst. 2012. V. 45. P. 1–16.
85. *Aleksandrov K. S., Aizenberg L. A.* A Method for Determining Physical Constants of Polycrystal Materials // Dokl. AN SSSR. 1966. V. 167. P. 1028–1031.
86. *Moraviec A.* Calculation of Polycrystal Elastic Constants from Single-Crystal Data // Phys. Stat. Sol. (b). 1989. V. 154. P. 535–540.
87. *Hill R.* The Elastic Behaviour of a Crystalline Aggregate // Proc. Phys. Soc. 1952. V. 65 P. 349–354.
88. *Mathies S.* On the Combination of Self-Consistent and Geometric Mean Elements for the Calculation of the Elastic Properties of Textured Multi-Phase Samples // Solid State Phenom. 2010. V. 160. P. 87–93.
89. *Hashin Z., Shtrikman S.* Note on a Variational Approach to the Theory of Composite Elastic Materials // J. Franklin Inst. 1961. V. 271, No. 4. P. 336–341.
90. *Fredholm I.* Sur les Equations de l'Equilibre d'un Corps Elastique // Acta Math. 1898. V. 23. P. 1–42.
91. *Eshelby J. D.* The Determination of the Elastic Field of an Ellipsoidal Inclusion and Related Problems // Proc. Roy. Soc. A. 1957. V. 241(1226). P. 376–396.
92. *Mura T.* Micromechanics of Defects in Solids. Kluwer Acad. Publ., 1991.
93. *Einstein A.* Eine neue Bestimmung der Moleküldimensionen // Ann. Phys. 1906. V. 19. P. 289–306; Ann. Phys. 1911. V. 34. P. 591–592.
94. *Kröner E.* Berechnung der Elastischen Konstanten des Vielkristalls aus den Konstanten des Einkristalls // Z. Phys. 1958. V. 151, No. 4. P. 504–518.
95. *Moraviec A.* The Effective Elastic Constants of Quasi-Isotropic Polycrystalline Materials Composed of Cubic Phases // Phys. Stat. Sol. (a). 1996. V. 155. P. 353–364.

96. *Matthies S., Vinel G. W.* On the Calculation of the Eshelby Tensor and the Beauty of Our Nature // *Solid State Phenom.* 2005. V. 105. P. 113–118.
97. *Шермергор Т. Д.* Теория упругости микронеоднородных сред. М.: Наука, 1977. 400 с.
98. *Bayuk I. O., Chesnokov E. M.* Correlations between Elastic and Transport Properties of Porous Cracked Anisotropic Media // *Phys. Chem. Earth.* 1998. V. 23, No. 3. P. 361–366.
99. *Wenk H.-R. et al.* Revisiting Elastic Anisotropy of Biotite Gneiss from the Outokumpu Scientific Drill Hole Based on New Texture Measurements and Texture-Based Velocity Calculations // *Tectonophysics.* 2012. V. 570–571. P. 123–134.
100. *Simmons G., Wang H.* Single Crystal Elastic Constants and Calculated Aggregate Properties: A Handbook. M.I.T. Press, 1971.
101. *Matthies S., Priesmeyer H. G., Daymond M. R.* On the Diffractive Determination of Single Crystal Elastic Constants Using Polycrystalline Samples // *J. Appl. Crystal.* 2001. V. 34, No. 5. P. 585–601.
102. *Bayuk I. O., Ammerman M., Chesnokov E. M.* Elastic Moduli of Anisotropic Clay // *Geophys.* 2007. V. 72, No. 5. P. D107–D117.
103. *Wang M., Pan N.* Elastic Property of Multiphase Composites with Random Microstructures // *J. Comp. Phys.* 2009. V. 228. P. 5978–5988.
104. *Mazo M. A. et al.* Molecular Dynamics Simulation of Thermomechanical Properties of Montmorillonite Crystal. 3. Montmorillonite Crystals with PEO Oligomer Intercalates // *J. Phys. Chem. B.* 2008. V. 112. P. 3597–3604.
105. *Drach B. et al.* Numerical Modeling of Carbon/Carbon Composites with Nanotextured Matrix and 3D Pores of Irregular Shapes // *Intern. J. Solids Struct.* 2011. V. 48. P. 2447–2457.
106. *Roberts A. P., Garboczi E. J.* Elastic Properties of Model Porous Ceramics // *J. Am. Ceram. Soc.* 2000. V. 83. P. 3041–3048.
107. *Cho Y. J. et al.* Effect of Pore Morphology on Deformation Behaviours in Porous Al by FEM // *AEM.* 2013. V. 15. P. 166–169.
108. *Noyan I. C., Jerome B. C.* Residual Stress: Measurement by Diffraction and Interpretation. Springer-Verlag, 1987.
109. *Waghchaure A. S.* Residual Stress Analysis by Diffraction Using High-Energy Synchrotron Radiation. Michigan Tech. Univ. Houghton, 2010.
110. *Hauk V.* Structural and Residual Stress Analysis by Nondestructive Methods. Elsevier, 1997.
111. *Matthies S.* Moment Pole Figures in Residual Stress Analysis // *Textures and Microstructures.* 1996. V. 25. P. 229–236.
112. *Brakman C. M.* Residual Stresses in Cubic Materials with Orthorhombic or Monoclinic Specimen Symmetry: Influence of Texture on ψ Splitting and Non-Linear Behavior // *J. Appl. Cryst.* 1986. V. 16. P. 325–340.

113. Schuman C., Humbert V., Esling C. Determination of the Residual Stresses in a Low Carbon Steel Sheet Using ODF // *Z. Metallk.* 1994. V. 85. P. 559–563.
114. Van Houtte P., Buysse L. De. The Influence of Crystallographic Texture on Diffraction Measurements of Residual Stress // *Acta Met.* 1993. V. 41. P. 323–336.
115. Popa N. C., Balzar D. Elastic Strain and Stress Determination by Rietveld Refinement: Generalized Treatment for Textured Polycrystals for All Laue Classes // *J. Appl. Cryst.* 2001. V. 34. P. 187–195.
116. Rietveld H. M. A Profile Refinement Method for Nuclear and Magnetic Structures // *J. Appl. Cryst.* 1969. V. 2, No. 2. P. 65–71.
117. Matthies S. et al. Effect of Texture on the Determination of Elasticity of Polycrystalline ε -Iron from Diffraction Measurements // *Earth and Planetary Sci. Lett.* 2001. V. 194, No. 1. P. 201–212.
118. Sander B. Zur Petrographisch-tektonischen Analyse // *Jahrb. Geol. Bundes Anstalt. A.* 1923. V. 23. P. 215–222.
119. Wenk H.-R. et al. Comparison of Neutron and X-ray Diffraction in Texture Analysis of Deformed Carbonate Rocks // *J. Struct. Geol.* 1984. V. 6. P. 687–692.
120. Ullemeyer K. et al. Texture Analysis of a Muscovite-Bearing Quartzite: A Comparison of Some Currently Used Techniques // *J. Struct. Geol.* 2000. V. 22. P. 1541–1557.
121. Ullemeyer K. et al. The SKAT Texture Diffractometer at the Pulsed Reactor IBR-2 at Dubna: Experimental Layout and First Measurements // *Nucl. Instr. Meth. A.* 1998. V. 412, No. 1.
122. Walther K. et al. Epsilon-MDS — a Neutron Time-of-Flight Diffractometer for Strain Measurements // *Solid State Phenom. Trans. Tech. Publ.* 2005. V. 105. P. 67–70.
123. Wenk H.-R., Lutterotti L., Vogel S. Texture Analysis with the New HIPPO TOF Diffractometer // *Nucl. Instr. Meth. A.* 2003. V. 515. P. 575–588.
124. Frischbutter A. et al. Strain and Texture Measurements on Geological Samples Using Neutron Diffraction at IBR-2, Joint Institute for Nuclear Research Dubna (Russia) // *Part. Nucl.* 2006. No. 7(123). P. 545–568.
125. Mercier J. C. C. Olivine and Pyroxenes // *Preferred Orientation in Deformed Metals and Rocks: An Introduction to Modern Texture Analysis.* Orlando, FL: Acad. Press, 1985. P. 407–430.
126. Skrotzki W. et al. Microstructure and Texture in Lherzolites of the Balmuccia Massif and Their Significance Regarding the Thermomechanical History // *Tectonophysics.* 1990. V. 179. P. 227–251.
127. Zhang S., Karato S.-Y. Lattice Preferred Orientation of Olivine Aggregates Deformed in Simple Shear // *Nature.* 1995. V. 375. P. 774–777.
128. Mainprice D. Seismic Anisotropy of the Deep Earth // *Treatise on Geophysics.* 2007. V. 2. P. 437–491.
129. Nicolas A., Christensen N. I. Formation of Anisotropy in Upper Mantle Peridotites: A Review // *Geodynamics Ser. V. 16: Composition, Structure and Dynamics of the Lithosphere–Asthenosphere System.* Washington, DC: Am. Geophys. Union, 1987. P. 111–123.

130. *Mainprice D., Barruol G., Ben Ismail W.* The Anisotropy of the Earth's Mantle: From Single Crystal to Polycrystal // *Geophys. Monograph Ser. V. 117: Mineral Physics and Seismic Tomography from the Atomic to the Global Scale.* Washington, DC: American Geophysical Union, 2000. P. 237–264.
131. *Peselnick L., Lockwood J.P., Stewart R.* Anisotropic Elastic Velocities of Some Upper Mantle Xenoliths Underlying the Sierra Nevada Batholiths // *J. Geophys. Res.* 1977. V. 82. P. 2005–2010.
132. *Mainprice D., Silver P.G.* Interpretation of SKS-Waves Using Samples from the Subcontinental Lithosphere // *Phys. Earth Planet. Inter.* 1993. V. 78. P. 257–280.
133. *Ji S., Zhao X., Francis D.* Calibration of Shear-Wave Splitting in the Subcontinental Upper Mantle beneath Active Orogenic Belts Using Ultramafic Xenoliths from the Canadian Cordillera and Alaska // *Tectonophysics.* 1994. V. 239. P. 1–27.
134. *Soedjatmiko B., Christensen N.I.* Seismic Anisotropy under Extended Crust: Evidence from Upper Mantle Xenoliths, Cima Volcanic Field, California // *Tectonophysics.* 2000. V. 321. P. 279–296.
135. *Ben Ismail W., Mainprice D.* An Olivine Fabric Database: An Overview of Upper Mantle Fabrics and Seismic Anisotropy // *Tectonophysics.* 1998. V. 296. P. 145–157.
136. *Engler O., Jura J., Matthies S.* Influence of Number and Arrangement of Single Orientation Measurements on their Statistical Relevance // *Proc. of ICOTOM-12.* Montreal: NRC Research Press, 1999. P. 68–73.
137. *Lokajicek T. et al.* Neutron Diffraction and Ultrasonic Sounding: A Tool for Solid Body Investigation // *Nondestructive Characterization of Material VIII.* New York: Plenum Press, 1998. P. 529–533.
138. *Иванкина Т.И. и др.* Исследование анизотропии оливинового ксенолита с помощью акустических волн и дифракции нейтронов // *Физика Земли.* 1999. № 5. С. 29–39.
139. *Никитин А.Н. и др.* Анизотропия и текстура оливиносодержащих мантийных пород при высоких давлениях // *Физика Земли.* 2001. № 1. С. 64–78.
140. *Pros Z.* Investigation of Anisotropy of Elastic Properties of Rocks on Spherical Samples at High Hydrostatic Pressures // *High Pressure and Temperature Studies of Physical Properties of Rocks and Minerals.* Kiev: Nauk. Dumka, 1977. 56 p.
141. *Griggs D.T., Blacic J.D.* The Strength of Quartz in the Ductile Regime // *Trans. Am. Geophys. Union.* 1964. V. 45, No. 1. P. 102–103.
142. *Ave Lallemant H.G., Carter N.L.* Pressure Dependence of Quartz Deformation Lamellae Orientations // *Am. J. Sci.* 1971. V. 270. P. 218–235.
143. *Hofmann J.* Das Quarzteilgefüge von Metamorphiten und Anatexiten, Dargestellt am Beispiel des Osterzgebirges (DDR) // *Freiberger Forschungshefte C.* 1974. V. 297. Erkundungsgeologie. 107 p.
144. *Кожевников В.Н.* Условия формирования структурно-метаморфических парагенезисов в метаморфических комплексах. Л.: Наука. Ленингр. отд-ние, 1982. 183 с.

145. Казаков А. Н. Динамический анализ микроструктурных ориентировок минералов. Л.: Наука. Ленингр. отд-ние, 1987. 272 с.
146. Никитин А. Н., Русакова Е. И., Иванкина Т. Т. К теории образования пьезоэлектрических текстур в горных породах // Изв. АН СССР. Физика Земли. 1989. № 6. С. 49.
147. Wenk H.-R., Pannetier J. Texture Development in Deformed Granodiorites from the Santa Rosa Mylonite Zone, Southern California // J. Struct. Geol. 1990. V. 12. P. 177–184.
148. Nikitin A. N., Ivankina T. I. On the Possible Mechanisms of the Formation of Piezoelectric Active Rocks with Crystallographic Textures // Textures and Microstructures. 1995. V. 25. P. 33–43.
149. Никитин А. Н. и др. Аналогичные кристаллографические текстуры кварца в горных породах континентальной земной коры по данным нейтронографии. Ч. I. Типизация текстур в мономинеральных горных породах // Кристаллография. 2008. Т. 53, № 5. С. 859–866.
150. Никитин А. Н. и др. Аналогичные кристаллографические текстуры кварца в горных породах континентальной земной коры по данным нейтронографии. Ч. II. Типизация текстур в многофазных горных породах // Там же. С. 867–875.
151. Никитин А. Н. и др. Аналогичные кристаллографические текстуры кварца в горных породах континентальной земной коры по данным нейтронографии. Ч. III. Связь типов текстур кварца с механизмами и условиями текстуробразования // Там же. С. 876–885.
152. Schäfer W. Neutron Diffraction Applied to Geological Texture and Stress Analysis // Eur. J. Mineral. 2002. V. 14. P. 263–289.
153. Wenk H.-R. Preferred Orientation in Deformed Metals and Rocks: An Introduction to Modern Texture Analysis. Orlando, FL: Acad. Press, 1985. 610 p.
154. Wenk H.-R. Neutron Scattering in Earth Sciences. Reviews in Mineralogy and Geochemistry // Mineral. Soc. America. 2006. V. 63. 620 p.
155. Калинин В. А., Родкин М. В., Томашевская И. С. Геодинамические эффекты физико-химических превращений в твердой среде. М.: Наука, 1989. 157 с.
156. Ivankina T. I. et al. Textures and Elastic Anisotropies of Amphibolites from the Kola Borehole // Proc. of the Twelfth Intern. Conf. on Textures of Materials. Montreal, 1999. V. 2. P. 1587–1592.
157. Nikitin A. N. et al. Texture Controlled Elastic Anisotropy of Amphibolites from the Kola Superdeep Borehole SG-3 at High Pressure // Физика Земли. 2001. № 1. С. 41–49.
158. Лобанов К. В. и др. Сопоставление архейских пород из разреза Кольской сверхглубокой скважины и их аналогов с поверхности по результатам структурно-петрологических, петрофизических и нейтронографических исследований // Петрология. 2002. № 1. С. 30–45.

159. *Иванкина Т. И. и др.* Анизотропия архейских амфиболитов и гнейсов из разреза Кольской сверхглубокой скважины по данным нейтронографического текстурного анализа // *Физика Земли*. 2004. № 4. С. 74–87.
160. *Иванкина Т. И. и др.* Изучение строения геопространства Кольской сверхглубокой скважины методами ультразвукового, нейтронографического и микроструктурного анализа горных пород // *Геофизические исследования*. Ин-т физики Земли РАН: Сб. науч. тр. Вып. 1. М.: ИФЗ РАН, 2005. С. 88–107.
161. *Ivankina T. I., Kern H. M., Nikitin A. N.* Directional Dependence of *P*- and *S*-wave Propagation and Polarization in Foliated Rocks from the Kola Superdeep Well: Evidence from Laboratory Measurements and Calculations Based on TOF Neutron Diffraction // *Tectonophysics*. 2005. V. 407. P. 25–42.
162. *Helming K., Eschner T.* A New Approach to Texture Analysis of Multiphase Materials Using a Texture Component Model // *Cryst. Res. Technol.* 1990. V. 25. P. K203–K208.
163. *Siegesmund S.* The Significance of Rock Fabrics for the Geological Interpretation of Geophysical Anisotropics // *Geotektonische Forschungen*. 1996. V. 85. P. 1–123.
164. *Ivankina T. I., Kern H., Nikitin A. N.* Neutron Texture Measurements and 3D Velocity Calculations on Strongly Foliated Biotite Gneisses from the Outokumpu Deep Drill Hole // *Outokumpu Deep Drill Project, Second Intern. Workshop, May 21–22, 2007*, Espoo, Finland: Programme and Extended Abstr. Geol. Survey of Finland, Southern Finland Office, Marine Geology and Geophys. Report Q10.2/2007/29. P. 47–50.
165. *Kern H. et al.* Elastic Wave Velocities, Chemistry and Modal Mineralogy of Crustal Rocks Sampled by the Outokumpu Scientific Drill Hole: Evidence from Lab Measurements and Modeling // *Physics of the Earth and Planetary Interiors*. 2009. V. 175. P. 151–166.
166. *Kern H. et al.* The Effect of Oriented Microcracks and Crystallographic and Shape Preferred Orientation on Bulk Elastic Anisotropy of a Strongly Foliated Biotite Gneiss // *Tectonophysics*. 2008. V. 457, No. 3–4. P. 143–149.
167. *Петрашень Г. И.* Распространение волн в анизотропных упругих средах. Л.: Наука, 1980. 280 с.