

УДК 550.834

ВЫЧИСЛЕНИЕ УПРУГИХ КОНСТАНТ КВАЗИИЗОТРОПНЫХ МОНОМИНЕРАЛЬНЫХ ПОРОД

© 1999 г. К. С. Александров^{1, 2}, П. П. Турчин¹, Г. Т. Продайвода³

¹ Красноярский госуниверситет, Свободный 79, Красноярск, 660041

² Институт физики СО РАН, Академгородок, Красноярск, 660036

³ Киевский госуниверситет, Васильковская 90, Киев, 252022

Поступила в редакцию 03.02.97 г.

Исследованы причины неинвариантности детерминанта матриц модулей упругости для кубических кристаллов и показано, что требованиям симметрии удовлетворяют модифицированные матрицы упругих констант. Высшие инварианты таких матриц использованы для определения средних значений упругих свойств изотропных поликристаллов. Вычислены средние упругие константы ряда мономинеральных горных пород, состоящих из одного состава кристаллитов разных сингоний, включая моноклинные кристаллы и проведен сравнительный анализ с результатами других методов усреднения и с имеющимися экспериментальными данными.

ВВЕДЕНИЕ

В физике твердого тела, геофизике и других науках о Земле нередко необходимы сведения о значениях упругих постоянных поликристаллов, отвечающих свойствам квазиизотропного или текстурированного агрегата. Из таких средних значений определяются, например, температуры Дебая кристаллов, упругие параметры моно- и полиминеральных горных пород, значения скоростей упругих волн в земной коре и т.д.

В литературе известно немало способов вычисления свойств квазиизотропных твердых тел, исходя из значений модулей упругой жесткости C_{ij} ($i, j = 1-6$) или констант податливости S_{ij} монокристаллов [1–11]. Описание и детальный анализ результатов полученных разными способами усреднения можно найти в работах [7, 10, 11]. Вкратце они сводятся к следующему. Широко известные способы усреднения по Фойгту [1] и Реуссу [2], как было показано [3] не отвечают реальным граничным условиям и их результаты все более отличаются друг от друга с ростом упругой анизотропии в монокристалле. В практических расчетах чаще всего используется усреднение по Фойгту–Реуссу–Хиллу [3]

$$\begin{aligned} \bar{K}_X &= \frac{1}{2}(\bar{K}_\Phi + \bar{K}_P), \\ \bar{G}_X &= \frac{1}{2}(\bar{G}_\Phi + \bar{G}_P) \end{aligned} \quad (1)$$

для модулей объемного сжатия K и модуля сдвига G квазиизотропного поликристалла. Расчетные значения \bar{K}_X и \bar{G}_X , как правило, удовлетворительно согласуются с экспериментальными дан-

ными, особенно для кристаллов высших сингоний. Позднее были разработаны статистические способы вычисления [4,5], способы учета взаимодействия кристаллитов в квазиизотропном агрегате и для кристаллов высших и средних сингоний, вплоть до ромбических [5], для ряда моделей взаимодействия между кристаллами были получены [11] средние \bar{K} и \bar{G} близкие к значениям из (1).

В работе [6] на примере кубических кристаллов было показано, что, используя высшие инварианты матриц $\|C_{ij}\|$ и $\|S_{ij}\|$, можно получать значения \bar{K} и \bar{G} хорошо совпадающие с (1) и с результатами более поздних способов усреднения. Основным достоинством использования метода инвариантов является то обстоятельство: что результат усреднения не зависит от того какая из матриц $\|C_{ik}\|$ или $\|S_{ik}\|$ используется для проведения расчетов. В работе [9], было доказано, что единственным средним удовлетворяющим последнему условию и условию однородности является среднее логарифмическое, т.е.

$$\ln \bar{R} = \sum p_i \ln R_i \quad (2)$$

или

$$\bar{R} = \prod R_i^{p_i}, \quad (3)$$

где p_i – весовые множители.

Способ инвариантов использовался позднее в [8] для кристаллов гексагональной, тригональной, тетрагональной и ромбической сингоний. При этом в [8] модуль объемного сжатия \bar{K} вычислялся как среднее геометрическое \bar{K}_Φ и \bar{K}_P , а модуль сдвига \bar{G} был получен, исходя из равенств

ва детерминантов матрицы C_{ij} для кристалла и изотропной среды, т.е.

$$\bar{K} = (K_\Phi K_P)^{1/2}, \quad (4)$$

$$D_{из} = D_{кр}.$$

Наконец, в работе [12], как и в [6, 8] использовались линейные и квадратичные инварианты матриц C_{ij} и S_{ij} , но при этом было замечено, что детерминант $D(C_{ij})$, равный для кубического кристалла

$$D_{куб} = (C_{11} + 2C_{12})(C_{11} - C_{12})^2 C_{44}^3, \quad (5)$$

не является инвариантом при повороте системы координат. Объяснения этому необычному результату не было найдено.

Целью настоящей работы является рассмотрение причин, которые привели к отмеченному в [12] противоречию, и применение предложенного способа инвариантов, точнее собственных значений матриц упругих констант C_{ij} , S_{ij} , как еще одного метода определения средних значений упругих свойств квазиизотропных поликристаллов. Предлагаемый способ использован для вычисления средних упругих констант ряда мономинеральных горных пород, состоящих из одного сорта кристаллитов разных сингоний, включая моноклинные кристаллы. Для проведения расчетов по предлагаемому методу необходимы некоторые преобразования общепринятых определений матриц $\|C_{ij}\|$ и $\|S_{ij}\|$.

МАТРИЦЫ УПРУГИХ КОНСТАНТ И ИХ СОБСТВЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ

Хорошо известно, что упругие свойства монокристалла описываются тензорами четвертого ранга $\hat{C} = \{C_{\alpha\beta\gamma\delta}\}$, $\hat{S} = \{S_{\alpha\beta\gamma\delta}\}$, связывающими в законе Гука тензоры напряжений $\hat{\sigma} = \{\sigma_{\alpha\beta}\}$ и деформаций $\hat{\epsilon} = \{\epsilon_{\alpha\beta}\}$:

$$\hat{\sigma} = \hat{C}\hat{\epsilon} \text{ или } \hat{\epsilon} = \hat{S}\hat{\sigma}. \quad (6)$$

Поскольку $\hat{\sigma}$ и $\hat{\epsilon}$ симметричны по перестановке индексов, тензоры \hat{C} и \hat{S} оказываются симметричными по парам индексов, что позволяет заменить в (6) каждую из пар индексов $\alpha, \beta, \gamma, \delta = 1, 2, 3$ одним из индексов $i, j = 1-6$. Тогда C_{ij} и S_{ij} оказываются симметричными квадратными 6×6 таблицами упругих параметров, где число независимых компонент, от 3-х до 21-ой в главной системе координат, определяется точечной симметрией кристалла [13]. Если оперировать с этими таблицами как с матрицами, можно вычислить их собственные значения $\lambda_1-\lambda_6$ и на этом этапе встречается противоречие с требованиями симметрии при традиционных определениях C_{ij} и S_{ij} . Насколько

нам известно, впервые анализ этого противоречия был опубликован в работах Белю [14, 15]. Там же был предложен способ его ликвидации, который и будет использован ниже.

Суть возникших трудностей заключается в следующем. Вновь обратимся к простейшему случаю кубического кристалла. Три собственных значения "матрицы" C_{ij} для этого случая $\lambda_1 = C_{11} + 2C_{12} = 3K$, $\lambda_{2,3} = C_{11} - C_{12}$, $\lambda_{4,5,6} = C_{44}$. Небольшая неприятность заключается в том, что при переходе к изотропной среде, т.е. при $a = (C_{11} - C_{12})/2C_{44} = 1$, дважды вырожденные собственные значения $\lambda_{2,3} = (C_{11}^H - C_{12}^H) = 2G$, а трижды вырожденные $\lambda_{4-6} = C_{44}^H = G$. Для ликвидации такого "неравноправия" в λ_k в работе [6] и для кубического кристалла и для изотропной среды в исходных таблицах C_{ij} компоненты C_{44} были интуитивно удвоены и тогда $\lambda_1 = 3K$, $\lambda_{2,3} = C_{11} - C_{12}$, $\lambda_{4,5,6} = 2C_{44}$. Поскольку для кубического кристалла $K_\Phi = K_P = \bar{K}$, из равенства высших инвариантов таких симметризованных матриц было получено

$$\bar{K} = K_{куб} = \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12}), \quad (7)$$

$$\bar{G} = C_{44}a^{2/5},$$

т.е. тот же результат, как и позднее полученный в [8].

Теперь ясно, что причиной такого "неравноправия" в собственных значениях кристаллов всех сингоний являются принятые в литературе правила перехода к сокращенным обозначениям компонент тензоров напряжений и деформаций $\sigma_{\alpha\beta}$ и $r_{\alpha\beta}$ ($\alpha, \beta = 1, 2, 3$). Действительно, для того чтобы были тождественны первые два члена в правой части выражения для плотности энергии упругой деформации:

$$U = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^3 \sum_{\beta=1}^3 \sum_{\gamma=1}^3 \sum_{\delta=1}^3 C_{\alpha\beta\gamma\delta} r_{\alpha\beta} r_{\gamma\delta} =$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^6 \sum_{j=1}^6 C_{ij} r_i r_j = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^6 \sum_{j=1}^6 \bar{C}_{ij} \bar{r}_i \bar{r}_j \quad (8)$$

необходимо ввести общепринятые условия для перехода от $r_{\alpha\beta}$ к r_i :

$$r_i = r_{\alpha\beta} \quad (\alpha = \beta),$$

$$r_i = 2r_{\alpha\beta} \quad (\alpha \neq \beta). \quad (9)$$

Другой тензор второго ранга – тензор напряжений – преобразуется иначе: $\sigma_i = \sigma_{\alpha\beta}$ для всех α и β . Тогда при переходе от $C_{\alpha\beta\gamma\delta}$ к C_{ij} :

$$C_{ij} = C_{\alpha\beta\gamma\delta} \quad (10)$$

$$\begin{aligned}
 i &= 1, 2, 3, \text{ если } \alpha = \beta \\
 j &= 1, 2, 3, \text{ если } \gamma = \delta \\
 i &= 9 - (\alpha + \beta), \text{ если } \alpha \neq \beta
 \end{aligned}$$

$$j = 9 - (\gamma + \delta), \text{ если } \gamma \neq \delta.$$

В то же время переход от $S_{\alpha\beta\gamma\delta}$ к S_{ij} проводится по правилу

$$S_{ij} = \begin{cases} S_{\alpha\beta\gamma\delta} & \alpha, \beta \rightarrow i \quad i = 1, 2, 3; \quad \gamma, \delta \rightarrow j, \quad j = 1, 2, 3 \\ 2S_{\alpha\beta\gamma\delta} & \alpha, \beta \rightarrow i \quad i = 1, 2, 3; \quad \gamma, \delta \rightarrow j, \quad j = 4, 5, 6 \\ S_{\alpha\beta\gamma\delta} & \alpha, \beta \rightarrow i \quad i = 4, 5, 6; \quad \gamma, \delta \rightarrow j, \quad j = 1, 2, 3 \\ 4S_{\alpha\beta\gamma\delta} & \alpha, \beta \rightarrow i \quad i = 4, 5, 6; \quad \gamma, \delta \rightarrow j, \quad j = 4, 5, 6 \end{cases} \quad (11)$$

При таких правилах перехода к двухиндексным обозначениям упругих постоянных "матрицы" C_{ij} и S_{ij} имеют взаимно обратные, но как отмечалось выше, "неравноправные" собственные значения. Более того, эти собственные значения не отвечают требованиям симметрии [14, 15].

В соответствии с преобразованиями теории групп каждое из собственных значений этих таблиц должно отвечать какому-либо из неприводимых представлений точечной группы кристалла [14]. Например, для ромбоэдрических кристаллов было доказано, что симметризованные (см. ниже) таблицы упругих постоянных должны иметь четыре разных λ_k , два из которых являются дважды вырожденными. Если же вычислять λ_i из стандартных форм матриц, пусть из C_{ij} , например для кварца, по любым из опубликованных данных в [16], получаем шесть невырожденных λ_k , что противоречит требованиям преобразований симметрии.

Еще в известной книге Сиротина и Шаскольской [13] отмечалось, что правила перехода от индексов $\alpha\beta \rightarrow i, \gamma\delta \rightarrow j$ для тензоров второго ранга $\sigma_{\alpha\beta} r_{\gamma\delta}$ следовало бы изменить:

$$\begin{aligned}
 \bar{\sigma}_i &= \sigma_{\alpha\beta} \text{ и } \bar{r}_j = r_{\alpha\beta} \text{ при } \alpha = \beta, \\
 \bar{\sigma}_i &= \sqrt{2}\sigma_{\alpha\beta} \text{ и } \bar{r}_j = \sqrt{2}r_{\alpha\beta} \text{ при } \alpha \neq \beta.
 \end{aligned} \quad (12)$$

Таблица 1. Типы вырождения собственных значений матриц \bar{C}_{ij} и \bar{S}_{ij}

Кристаллы	Собственные значения
Изотропная среда	$\lambda_1 = 3\bar{K}, \lambda_2 - \lambda_6 = 2\bar{G}$
Кубические	$\lambda_1 = 3\bar{K}, \lambda_2 = \lambda_3, \lambda_4 = \lambda_5 = \lambda_6$
Гексагональные	$\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3 = \lambda_4, \lambda_5 = \lambda_6$
Тригональные	
Тетрагональные	$\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4, \lambda_5 = \lambda_6$
Ромбические	$\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4, \lambda_5, \lambda_6$
Моноклинные	
Триклинные	

При таком переходе подчиняющиеся закону Гука (6) компоненты 6×6 таблицы C_{ij} домножаются по следующему правилу:

$$\begin{aligned}
 \bar{C}_{ij} &= C_{ij} \quad i, j = 1, 2, 3 \\
 \bar{C}_{ij} &= 2C_{ij} \quad (i, j) = 4, 5, 6 \\
 \bar{C}_{ij} &= \sqrt{2}C_{ij} \quad \begin{matrix} i = 1, 2, 3; \quad j = 4, 5, 6 \\ i = 4, 5, 6; \quad j = 1, 2, 3. \end{matrix}
 \end{aligned} \quad (13)$$

Правила такого преобразования C_{ij} и S_{ij} в \bar{C}_{ij} и \bar{S}_{ij} удобно представить иначе, разделив таблицу 6×6 на четыре квадранта, и тогда C_{ij}, S_{ij} в соответствующих квадрантах домножаются следующим образом:

$$\begin{vmatrix} 1 & \sqrt{2} \\ \sqrt{2} & 2 \end{vmatrix} \text{ для } C_{ij} \text{ и } \begin{vmatrix} -1 & 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & 1/2 \end{vmatrix} \text{ для } S_{ij}. \quad (14)$$

Матрицы \bar{C}_{ij} и \bar{S}_{ij} остаются симметричными, имеют взаимно обратные собственные значения, которые теперь подчиняются правилам вырождения, согласно требованиям теории групп, таблица 1. При этом оказываются тождественными первый и третий члены в выражении для энергии (8). Для всех точечных групп выражения для некоторых собственных значений матриц \bar{C}_{ik} и их отнесение к неприводимым представлениям каждой группы приведены в приложении к работе [14].

Именно такие симметризованные матрицы $\|\bar{C}_{ik}\|$ используются ниже для вычисления сначала их собственных значений $\bar{\lambda}_k$, а затем и средних значений упругих свойств монокристаллов минералов \bar{K}, \bar{G} . Полученные данные сравниваются с результатами других методов усреднения, а где можно – с экспериментом, проведенным ранее для специально подобранных по качеству монокристаллов горных пород [7, 10, 11].

В таблице 2 приведены значения $\bar{\lambda}_k$ для ряда кристаллов минералов. Значения C_{ij} взяты из об-

Таблица 2. Величины собственных значений матриц \tilde{C}_{ik} для ряда кристаллов (в ГПа)

Кристалл	Сингония	λ_1	λ_2	λ_3	λ_4	λ_5	λ_6
Апатит	гексагон.	253.4	95	95	79.2	79.2	97.6
Нефелин	»	153.3	72.4	72.4	40.8	40.8	103.7
Берилл	»	463.7	183.0	183.0	135.4	135.4	208
Биотит**	»	220.0	153.6	153.6	11.6	11.6	52.4
Мусковит**	»	222.9	135.6	135.6	24.4	24.4	52.4
Мусковит	монокл.	234.8	144.4	137.4	52.7	32.6	32.2
Флогопит**	гексагон.	221.4	146.6	146.6	11.2	11.2	41.5
Цинкит	»	431.1	88.6	88.6	84.9	84.9	110.6
Циркон	тетрагон.	705.5	147	147	97.4	81.2	231
Шеелит	»	236.6	67.0	67.0	99.3	41.9	118.9
Рутил	»	671.5	246.6	246.6	255.7	86.6	378
Корунд	тригон.	756.8	364.3	364.3	262.7	262.7	395.2
Кальцит	»	232.9	121	121	35.9	35.9	48.9
α -кварц	»	117.8	138.5	138.5	57.7	57.7	81.8
Турмалин	»	402.8	216.7	216.7	129.3	129.3	165.2
Арагонит	ромбич.	176.4	92.9	85.4	82.6	62.7	51.2
Топаз	»	512	264	262	230	216	181.5
Форстерит*	»	408	215	163	162	134	142
Фаялит*	»	426	155	115	98	93	65
Микроклин 64.9 <i>og</i> , 35.6 <i>ab</i> , 3.6 <i>ap</i>	монокл.	190.5	101.5	74.8	41.8	28.9	27.2
Микроклин 78.5 <i>og</i> , 19.4 <i>ab</i> , 2.1 <i>ap</i>	»	201.3	117.1	72.4	50.4	37.7	28.4
Альбит 9	»	196.4	144.4	64.2	55.2	36.3	34.2
Олигоклаз 24	»	206.2	107.5	66.7	55.0	53.4	35.3
Лабрадор 56	»	228.6	113.2	77.6	62.3	53.1	39.2
Альбит*	»	194.5	99.6	64.8	54.9	43.1	33.8
Анортит	»	279.8	138.2	83.2	83.0	63.8	46.8

* Из значений полученных путем экстраполяции концентрационных зависимостей C_{ik} в системах форстерит-фаялит и альбит-анортит.

** Свойства слюд исследовались как для гексагональных кристаллов.

зоров [10, 16, 17]. Сравнивая эти численные данные с правилами вырождения $\tilde{\lambda}_k$ из таблицы 1, нетрудно убедиться, что требуемые условия вырождения во всех случаях выполняются. В табл. 2 не приводятся $\tilde{\lambda}_k$ для кубических кристаллов, поскольку неоднократно было показано, что, используя либо выражение (1), либо (7), можно получить практически одинаковые значения \bar{G} , если анизотропия кристалла находится в пределах $0.2 < a < 5$ [6, 8].

Степень различия между λ_2 - λ_6 для кристаллов других сингоний также характеризует анизотропию упругих свойств соответствующего кристалла, но теперь ее нельзя описать одним парамет-

ром $a = \tilde{\lambda}_2/\tilde{\lambda}_6$ как для кубического кристалла. Как уже отмечалось авторами работы [16] для гексагональных и тригональных кристаллов можно ввести два подобных параметра, например:

$$a_1 = \tilde{\lambda}_{3,4}/\tilde{\lambda}_2 \text{ и } a_2 = \tilde{\lambda}_{5,6}/\tilde{\lambda}_2, \quad (15)$$

где $\tilde{\lambda}_2$ — меньшее из невырожденных $\tilde{\lambda}_k$. Из табл. 2 видно, что например для апатита значения трех $\tilde{\lambda}_k$: $\tilde{\lambda}_2$, $\tilde{\lambda}_3$ и $\tilde{\lambda}_6$ очень близки, а $\tilde{\lambda}_4 = \tilde{\lambda}_5$. Таким образом этот кристалл, а также корунд, могут рассматриваться как псевдокубические в отношении их упругих свойств. Наивысшие параметры анизотропии имеют слюды: $a_1 \gg 1$, $a_2 < 1$.

Заметим, что ранее (см. [7]) для моноклинных кристаллов слюд значения C_{ij} измерялись как для гексагональных кристаллов. Позднее были измерены все 13 величин C_{ij} для мусковита (см. в [16]), но собственные значения, рассчитанные в моноклинной установке, сравнительно мало отличаются от предыдущих.

УПРУГИЕ СВОЙСТВА МОНОМИНЕРАЛЬНЫХ ГОРНЫХ ПОРОД

Используя собственные значения $\tilde{\lambda}_k$ матрицы \tilde{C}_{ij} из табл. 2, вычисления средних значений \bar{K} и \bar{G} изотропных поликристаллов проводились двумя способами. Как и в работах [6, 9] в обоих случаях приравнивались высшие инварианты матриц $\|\tilde{C}_{ik}\|$ для монокристалла и соответствующей изотропной среды

$$\bar{D}_{из} = 3\bar{K}(2\bar{G})^5 = \bar{D}_{кр} = \prod_{k=1}^6 \tilde{\lambda}_k. \quad (16)$$

Еще раз подчеркнем, что величина $\bar{D}_{кр}$ не зависит от ориентации кристаллитов. Только для кубических кристаллов $\bar{K} = \bar{K}_{кр} = 1/3(C_{11} + 2C_{12})$. Для кристаллов средних и низших сингоний вычисление $K_{кр}$ связано с определенными трудностями.

В одном способе определения \bar{K} , \bar{G} авторами учитывалось то обстоятельство, что в каждой точечной группе одно из $\tilde{\lambda}_k$ преобразуется по единичному представлению группы, т.е. не изменяется при любой ориентации кристаллита. Можно приписать этому $\tilde{\lambda}_1$, обычно наибольшему из невырожденных $\tilde{\lambda}_k$ (см. табл. 2), смысл утроенного значения модуля объемного сжатия, т.е.

$$\tilde{\lambda}_1 = 3\bar{K}_1. \quad (17)$$

Пять остальных $\tilde{\lambda}_k$ имеют смысл модулей сдвига и надо найти их среднее значение. Среднее логарифмическое в нашем случае:

$$\ln(2\bar{G}) = \sum_{k=2}^6 p_k \ln \tilde{\lambda}_k, \quad k \neq 1, \quad (18)$$

где весовые множители удовлетворяют условию $\sum_{k=2}^6 p_k = 1$.

Из (18) следует

$$2\bar{G}_1 = (\tilde{\lambda}_2 \tilde{\lambda}_3 \tilde{\lambda}_4 \tilde{\lambda}_5 \tilde{\lambda}_6)^{1/5}, \quad (19)$$

поскольку для изотропной среды $\tilde{\lambda}_k$, $k = 2-6$ равны $2\bar{G}$, а при полной изотропии поликристалла все p_k одинаковы и равны $1/5$, т.е. $\tilde{\lambda}_2 - \tilde{\lambda}_6$ — равноправны.

Во втором способе расчета предположение (17) не использовалось, а вместо него для модуля объемного сжатия применялось его значение по Фойгту—Реуссу—Хиллу, т.е. $\bar{K}_2 = \bar{K}_X$ (1). При этом условии

$$2\bar{G}_2 = \left(\frac{1}{3K_2} \prod_{k=1}^6 \tilde{\lambda}_k \right)^{1/5}. \quad (20)$$

Результаты проведенных расчетов представлены в табл. 3. При этом использовались значения $\tilde{\lambda}_k$ из табл. 2. Экспериментальные значения K_3 , G_3 для мономинеральных пород взяты из работ [7, 9 и 11], где они были получены из ультразвуковых и статических измерений при нормальном давлении для ближайших по составу неизменных пород с минимальной пористостью (α). Так \bar{K} и \bar{G} для оливина, вычисленные из упругих параметров монокристалла качества драгоценного камня сравнивались с K_3 и G_3 для чистого оливинита из Хибин (см. Приложение 5 в [7] и [10]), данные \bar{K} , \bar{G} для эпидота [16] сопоставлены с K_3 , G_3 для цоизитита [7] и т.д. В случае корунда использованы значения K_3 , G_3 для искусственной керамики Al_2O_3 полученные путем экстраполяции линейных зависимостей $E(\alpha)$ и $G(\alpha)$ к $\alpha = 0$ по данным работы [18].

Анализируя данные табл. 3 можно утверждать, что в целом вычисленные предлагаемым способом значения \bar{K}_1 , \bar{G}_1 , \bar{G}_2 оказались в большинстве случаев весьма близкими к значениям \bar{K}_X , \bar{G}_X . В то же время из таблицы 3 видно, что для большинства кристаллов значения \bar{K}_1 , вычисленные согласно (17) систематически выше \bar{K}_X и даже \bar{K}_Φ . Это различие невелико для слабо анизотропных минералов, например везувиана, берилла или корунда, но для сильно анизотропных слюд оно достигает 50%. Авторы полагали, что одной из возможных причин большого превышения $\bar{K}_1 > \bar{K}_X$ для тригональных и моноклинных кристаллов является то обстоятельство, что при вычислении $\tilde{\lambda}_k$ в расчет принимались все C_{ik} , включая побочные модули типа C_{14} , C_{25} , C_{46} и т.д. Это не учитывалось при усреднении по Фойгту и Реуссу. Численный эксперимент, в котором эти модули приравнивались нулю, например для кварца $|C_{14}| = |C_{25}| = |C_{46}| \rightarrow 0$, показал, что при

Таблица 3. Значения модулей упругости K и G для ряда минералов (все величины в ГПа)

№	Минерал	\bar{K}				\bar{G}						$\alpha, \%$	$\rho, \text{ кг/м}^3$	Литература		
		K_Φ	K_p	$K_x = K_2$	K_1	K_3	G_Φ	G_p	G_x	G_1	G_2			G_3	$C_{\text{ЛП}}$	K_3, G_3
Кристаллы тетрагональной системы																
1	Циркон	232.2	215.4	223.8	235.2	71.25	61.90	66.58	65.80	66.46	66.46	4700	16			
2	Рутил, иск.	218.0	209.5	213.7	223.8	123.2	95.76	109.5	109.8	110.8	110.8	4249	16	10		
3	Везувиан	82.73	82.68	82.71	82.78	57.20	57.02	57.11	57.10	57.11	57.11	3400	16			
4	Стишовит	324.0	308.3	316.2	337.5	232.2	208.3	220.3	218.3	221.2	221.2	4290	16			
5	Скаполит	58.07	57.86	57.96	58.22	24.52	21.69	23.11	23.03	23.05	23.05		16			
6	Шеелит	77.91	76.64	77.27	78.88	39.69	34.67	37.18	36.99	37.14	37.14		16			
Кристаллы гексагональной системы																
1	Гидропатит	83.33	81.64	82.49	84.45	44.94	44.32	44.63	44.41	44.62	44.62	3218	16			
2	Нефелин	49.22	48.56	48.89	50.32	32.51	28.93	30.72	30.52	30.69	30.69	2620	16			
3	Берил	153.7	152.4	153.0	154.7	82.98	80.84	81.91	81.75	81.91	81.91	2660	16			
4	Биотит ¹	59.69	41.16	50.42	73.34	42.37	12.44	27.44	22.04	23.75	23.75	3050	16			
5	Мусковит ¹	61.52	42.91	52.21	74.30	41.07	22.22	31.65	28.23	30.29	30.29	2790	16			
6	Флогопит ¹	64.19	45.36	54.77	73.11	38.61	11.78	25.20	20.57	21.80	21.80	2800	16	10		
7	Цинкит, иск.	143.6	143.5	143.5	143.7	45.81	45.35	45.58	45.56	45.56	45.56		16			
Кристаллы тригональной системы																
1	Корунд	248.0	248.0	248.0	248.0	167.5	161.6	164.5	164.6	164.6	164.6		16, 17	10, 18		
2	Кальцит	76.02	70.60	73.31	77.65	36.79	27.12	31.96	31.07	31.43	31.43		16	7		
3	Гематит	98.4	97.54	97.99	101.3	94.37	91.43	92.90	92.28	92.89	92.89		17			
4	Кварц	37.84	37.33	37.58	46.16	47.68	40.83	44.25	42.32	44.09	44.09		7, 16	10		
5	Турмалин II	122.2	110.2	116.2	134.3	89.33	82.75	86.04	83.47	85.92	85.92		17			
6	Турмалин I	110.6	102.6	106.6	116.1	78.53	72.28	75.40	74.05	75.32	75.32		17			
Кристаллы ромбической системы																
1	Оливин (кач. драг. камня)	133.7	126.9	131.3	137.9	82.40	79.34	80.87	79.96	80.75	80.75	3386	16	7		
2	Топаз	168.9	166.4	167.6	170.9	115.9	113.4	114.7	114.3	114.7	114.7		16, 17			
3	Барит	52.44	52.25	52.35	52.57	25.27	21.44	23.35	23.38	23.40	23.40	4473	16	10		
4	Арагонит	49.29	45.09	47.19	58.75	40.41	36.68	38.55	36.70	38.34	38.34		17			
5	Серя	20.60	17.56	19.08	22.05	7.22	6.17	6.69	6.45	6.64	6.64		16, 17			
6	Целестин	82.08	82.00	82.04	82.10	22.91	20.02	21.46	21.46	21.47	21.47		16, 17			
7	Ставролит	131.9	124.6	128.2	137.6	69.53	45.48	57.51	57.18	57.99	57.99		16, 17			

Таблица 3. Окончание

№	Минерал	\bar{K}				\bar{G}						$\alpha, \%$	$\rho, \text{кг/м}^3$	Литература			
		K_{Φ}	K_p	$K_x = K_2$	K_1	K_3	G_{Φ}	G_p	G_x	G_1	G_2			G_3	$C_{\text{лц}}$	K_3, G_3	
Кристаллы моноклинной системы																	
1	Эгирин	111.7	107.3	109.5	114.3	60.17	57.13	58.65	58.11	58.62			0.37			16, 17	
2	Микроклин ²	59.66	49.75	54.70	67.11	32.83	24.46	28.65	26.98	28.10						16, 17	
3	Микроклин-пертит ²	60.94	43.71	52.33	68.23	32.47	22.89	27.68	25.78	27.19			0.62	2560		16, 17	10
4	Авгит	99.68	83.72	91.70	107.0	61.15	54.11	57.63	55.87	57.62			2.0	3159		16	10
5	Диопсид (байкалит)	117.6	104.8	111.2	123.8	65.37	60.92	63.14	61.83	63.18	66.70		0.52	3280		7, 16	7
6	Энстатит (диопсид)	117.7	112.1	114.9	122.6	69.00	63.22	66.11	65.21	66.06	56.9		0.35	3280		16	10
7	Эпидот (пушкинит)	108.2	103.4	105.8	110.5	65.19	57.26	61.22	60.81	61.33	50.8		0.77	3400		16	10
8	Альбит ² , Ап 9%	57.67	44.21	50.94	65.47	32.76	25.82	29.29	27.49	28.90	29.60		0.77	2605		16	7
9	Олигоклаз ² , Ап 9%	70.40	60.72	65.56	73.17	31.92	23.41	27.67	26.98	27.58						17	
10	Олигоклаз ² , Ап 24%	65.31	57.92	61.62	68.72	32.81	28.21	30.51	29.73	30.38						16, 17	
11	Олигоклаз ² , Ап 29%	66.52	59.56	63.04	69.70	33.63	28.97	31.30	30.54	31.16						16, 17	
12	Лабрадор ² , Ап 53%	73.87	68.04	70.96	76.29	35.86	31.18	33.52	32.95	33.43	33.7			2680		16, 17	7
13	Лабрадор ² , Ап 56%	75.31	68.80	72.06	78.29	36.97	31.72	34.34	33.63	34.19	33.4			2690		16, 17	7
14	Мусковит	67.69	48.7	58.19	78.27	43.09	27.08	35.08	32.13	34.10						16	
15	Роговая обманка II	97.80	92.46	95.13	101.4	51.24	40.73	45.99	45.76	46.36						16, 17	
16	Роговая обманка I	90.10	84.17	87.15	93.05	44.90	41.41	43.15	42.55	43.11						16, 17	
17	Роговая обманка	91.26	82.68	86.97	94.80	45.03	40.92	42.98	42.25	42.98	48.3		0.70	3150		16	10
18	Ортоклаз	53.56	42.49	48.0	58.29	27.39	19.89	23.64	22.37	23.25						16	10

¹ Моноклинные псевдогексагональные кристаллы, исследовались как гексагональные.

² Сдвойникованные триклинные кристаллы, исследованные в моноклинной установке.

³ Использованы $C_{\text{лц}}$ образцов с максимальной близкой плотностью к значениям ρ образцов, для которых получены K_3 и G_3 .

этом невырожденные $\bar{\lambda}_1$ и $\bar{\lambda}_6$ в табл. 2, не изменяются, а остальные корни меняются существенно. Таким образом причина превышения \bar{K}_1 над \bar{K}_X кроется не в этом. Скорее всего это связано с неправомерностью предположения (17) для сильно анизотропных минералов. Второй способ усреднения, при котором $\bar{K}_2 = \bar{K}_X$ из (1) и для вычисления \bar{G} используется выражение (20) снимает проблему превышения \bar{K} над \bar{K}_Φ . С другой стороны известно несколько экспериментальных значений K_3 , существенно превышающих \bar{K}_X , а иногда и \bar{K}_Φ (последнее является верхней границей для всех способов усреднения). Это примеры кальцита, кварца, авгита и др. При этом исследованные образцы мрамора и кварцита не обладали заметной текстурой и не содержали других минералов. Приходится признать, что случаи превышения K_3 над \bar{K}_Φ или \bar{K}_X не являются результатом ошибок эксперимента, но могут быть связаны с различиями в составах пород.

Что касается модулей сдвига \bar{G}_1 и \bar{G}_2 , то здесь совпадение с данными других расчетов оказывается значительно лучше, чем для модулей объемного сжатия. Действительно \bar{G}_1 и \bar{G}_2 совпадают с \bar{G}_X с точностью до нескольких процентов и, как правило, $\bar{G}_1 < \bar{G}_2 \leq \bar{G}_X$. Разница между двумя способами вычисления модуля сдвига: \bar{G}_1 и \bar{G}_2 также невелика, но если для модуля объемного сжатия принимается $\bar{K}_2 = \bar{K}_X$, то и \bar{G}_2 оказывается близкой к \bar{G}_X .

Известные авторам экспериментальные данные для горных пород как правило ниже и только в немногих случаях близки к расчетным значениям. Только для керамики Al_2O_3 с $\alpha = 0$ экстраполированные экспериментальные данные совпадают с расчетными. Известно, что основными причинами снижения K_3 и G_3 по сравнению с данными расчетов являются такие несовершенства как пористость и трещиноватость. Измерения упругих свойств горных пород с использованием высоких давлений (P) показали, что на начальных участках измеряемые величины изменяются существенно, постепенно приближаясь к некоторой прямой линии при повышении давления [7, 10, 17, 19], а экстраполяция этой прямой к $P \rightarrow 0$ позволяет проводить более надежную оценку искомой величины [20]. Проведенные таким способом сравнения экстраполированных и расчетных значений упругих свойств для ряда пород, например в работе [7], показали, что эти значения практически совпадают. К сожалению, подобные зависимости

упругих свойств от давления для мономинеральных пород авторам либо не известны, либо отсутствуют сведения о минеральном составе исследованных пород.

Приведенные в таблице 3 значения \bar{K} и \bar{G} могут быть использованы и для оценки скоростей звука в породах и для вычисления упругих свойств полиминеральных пород по их минеральному составу [7, 10].

ВЫВОДЫ

Рассмотрены правила перехода к сокращенной (двухиндексной) записи матриц C_{ij} и S_{ij} тензоров упругих постоянных $C_{\alpha\beta\gamma\delta}$ и $S_{\alpha\beta\gamma\delta}$. Собственные значения этих матриц размерности 6×6 будут отвечать какому-либо неприводимому представлению точечной группы кристалла и, соответственно, удовлетворять требованиям преобразований симметрии, если при таком переходе компоненты матриц в соответствующих 3×3 квадрантах донаножаются следующим образом [14, 15]:

$$\begin{vmatrix} 1 & \sqrt{2} \\ \sqrt{2} & 2 \end{vmatrix} \text{ для } C_{ij} \text{ и } \begin{vmatrix} 1 & 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & 1/2 \end{vmatrix} \text{ для } S_{ij}.$$

На основе собственных значений таких "симметризованных" матриц и введенных способов усреднений рассчитаны средние значения упругих свойств ряда монокристаллов минералов.

Обращает на себя внимание достаточно хорошее совпадение средних значений \bar{K} и \bar{G} с результатами других способов расчета. Однако для большинства кристаллов значения модуля объемного сжатия \bar{K}_1 систематически выше аналогичных величин в усреднениях Хилла (\bar{K}_X) и даже Фойгта (\bar{K}_Φ). В то же время, результаты второго способа расчета близки к соответствующим величинам по Фойгту-Реуссу-Хиллу. Случаи превышения экспериментальных значений \bar{K} над \bar{K}_Φ или \bar{K}_X требуют специального исследования.

Авторы благодарят Л.М. Руденко за помощь в расчетах.

Работа выполнена при поддержке Конкурсного центра фундаментальных исследований по геологии Московской государственной геологоразведочной академии, грант № 27-2.2-7.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Voigt W. Lehrbuch der Kristallphysik, Teubner Verlag, Leipzig, 1928.
2. Reuss A. Berechnung der Fliesgrenze von Mischkristallen auf Grund der Plastizitätsbedingungen für Einkristalle // Zs. angew. Math. and Mech. 1929. P. 49-57.

3. Hill R. The elastic behaviour for a crystalline aggregate // Proc. Phys. Soc. 1952. A65. № 5. P. 351–359.
4. Hashin Z., Shtrikman A. A variational approach to theory of elastic behaviour of polycrystals // J. Mech. and Phys. Solids. 1962. 10. P. 343–352.
5. Watt J., Hashin-Zshtrikman bounds on the effective elastic moduli of polycrystals with orthorhombic symmetry // J. Appl. Phys. 1979. 50. № 10. P. 6290.
6. Александров К.С. Средние значения тензорных величин // ДАН СССР. 1965. 164. № 4. С. 800–803.
7. Беликов Б.П., Александров К.С., Рыжова Т.В. Упругие свойства породообразующих минералов и горных пород. М.: Наука, 1970.
8. Peresada G.J. On the calculation of elastic moduli of polycrystalline systems from single crystal data // Phys. Stat. Solidi. 1971. A4. K23–K27.
9. Александров К.С., Айзенберг Л.А. Способ вычисления физических констант поликристаллических материалов // ДАН СССР. 1966. 167. № 5. С. 1028–1031.
10. Александров К.С., Беликов Б.П., Рыжова Т.В. Вычисление упругих параметров горных пород по минеральному составу // Изв. АН СССР. Сер. геол. 1966. № 2. С. 3–19.
11. Kiewel H., Fritsche L. Calculation of effective elastic moduli of polycrystalline materials including nontextured samples and fiber textures // Phys. Rev. 1994. B50. № 1. P. 5–16.
12. Povolo F., Bolmaro R. Average elastic constants and tensor invariants // Phys. Stat. Sol. 1987. A99. P. 423–426.
13. Сиротин Ю.И., Шаскольская М.П. Основы кристаллофизики. М.: Наука, 1979. 619 с.
14. Bulou A. On considering the elastic constant table as the matrix of an operator; consequences in ferroelasticity // J. Phys. I France. 1992. 2. P. 1445–1460.
15. Bulou A., Rousseau M., Nouet J. Ferroelastic phase transitions and related phenomena // Key Engineering Materials. 1992. 68. P. 135–186.
16. Александров К.С., Продайвода Г.Т. Упругие свойства минералов // Кристаллография. 1993. 38. № 5. С. 214–234.
17. Справочник физических констант горных пород. М.: Мир, 1969.
18. Anderson O.L. A simplified method for calculating the Debye temperature from elastic constants // J. Phys. Chem. Solids. 1963. 24. P. 109–117.
19. Simmons G. Velocity of Shear Waves in Rocks to 10 kilobars // J. Geophys. Res. 1964. 69. № 6. P. 1123–1130.
20. Воларович М.П. Исследования физико-механических свойств горных пород при высоких давлениях // Геология и геофизика. 1961. № 4. С. 13–19.

Статья рекомендована к печати членом редколлегии доктором физ.-мат. наук В.П. Трубицыным.