АППРОКСИМАЦИЯ ОБЛИКА КРИСТАЛЛА ТРЁХОСНЫМ ЭЛЛИПСОИДОМ

Степенщиков Д.Г.

Геологический институт КНЦ РАН, Анапты, stepen@geoksc.apatity.ru

Рост кристалла в анизотропных условиях (неравномерный приток вещества, направленное воздействие, гравитация, ориентировка кристалла и т.п.), в общем случае, сопровождается неодинаковым развитием его граней. Получаемая при этом форма кристалла называется реальной [3] или искажённой (вынужденной, видимой, поверхностной) [5] и представляет интерес для генетической минералогии как индикатор симметрии кристаллообразующей среды. Фиксация такой формы может выполняться с разной степенью детализации несколькими взаимосвязанными способами [4], из которых самый распространённый – зарисовка или фотографирование образца. Этот способ, безусловно, нагляден, но «однобок» и порой излишне детализирован. В данной работе будет рассмотрен более упрощённый способ представления искажённой формы кристалла через его облик или габитус.

Рис. 1. Кристалл ромбической сингонии с измеренными параметрами и соответствующая его облику точка (красное) в единичном квадрате.

Согласно определению, облик кристалла оценивается по его линейным размерам a , b и c , измеренным вдоль трёх направлений [1]. В этом есть определённый плюс, так как вся информация об облике заключена всего в трёх числах. Если рассматривать отношения этих чисел, то при условии, что $a \leq b \leq c$, облик можно представить наглядно в виде точки с координатами $(a/b, b/c)$ внутри единичного квадрата, (рис. 1). Но есть и сложности. Во-первых, выбор направлений, вдоль которых измеряются числа a , b и c неоднозначен. Они могут быть как сонаправлены, так и нет с элементами симметрии кристалла, быть взаимно ортогональными или нет (рис. 2 а, б). Во-вторых, сами величины могут быть измерены разными способами (рис. 2 б, в) или иметь определённую упорядоченность (например, может особо выделяться параметр, соответствующий главной оси в сингониях средней категории). В-третьих, при «неудачно» выбранных направлениях и способе измерения, одним и тем же измеренным величинам могут соответствовать разные облики (рис. 3).

Эти недостатки связаны с нестрогим определением облика (в [2] об этом сказано прямо), в котором нечётко указаны «три направления» и способ измерения «вытянутости» или «уплощённости». Точное определение облика должно корректно работать для всех случаев, то есть быть при-

Рис. 2. Кристалл тригональной сингонии с различно измеренными величинами a и b : а – вдоль неперпендикулярных осей 2-го порядка, б – вдоль взаимно перпендикулярных направлений, между точками пересечения направлений с поверхностью кристалла, в – вдоль взаимно перпендикулярных направлений, между наиболее удаленными вдоль направления точками кристалла.

Рис. 3. а – идеальный октаэдрический кристалл, б, в – его искажённые формы. Все формы имеют одинаковые величины a , b и c измеренные вдоль осей 4-го порядка.

менимым к кристаллам любой сингонии и любой степени искажения, а также быть более или менее адекватным интуитивной оценке наблюдаемых форм. Так, для всех неискажённых простых форм кубической сингонии эта оценка должна констатировать строгую изометричность – равенство всех трёх параметров, а любое искажение этих форм должно тут же отводить оценку от строгой изометричности, чего нет, например, на рис. 3.

В данной работе предлагается заменить искажённую форму кристалла более простым геометрическим телом, а именно трёхосным эллипсоидом. Такой эллипсоид задаётся тремя параметрами – длинами своих взаимно перпендикулярных полуосей. Положение центра эллипсоида, длины его полуосей и их ориентировка выбираются таким образом, чтобы обеспечить «наибольшее приближение» формы эллипса к форме рассматриваемого искажённого кристалла. В качестве критерия, максимизирующего такое приближение (или, что то же самое, минимизирующего расхождение) предлагается использовать минимум симметрической разности объёмов эллипсоида и искажённой формы кристалла, т.е. сумму объёмов их непересекающихся частей (рис. 4). В идеале, если кристалл сам имеет эллипсоидную форму (например, кварцевая галька), то такая симметрическая разность равняется нулю.

Рис. 4. Двухмерная проекция искажённого кристалла и совмещённого с ним эллипсоида. Симметрическая разность показана красным.

Данный подход отчасти подкрепляется его применением к искажённым кристаллам кубического габитуса, форма которых представляет собой, в общем случае, прямоугольный параллелепипед, и может быть описана его тремя параметрами – длиной, шириной и высотой. Предположим, что эллипсоид, аппроксимирующий искажённый кристалл, имеет с ним общий центр и оси, сонаправленные с осями 4-го порядка. Тогда в силу симметрии, достаточно рассмотреть симметрическую разность V объёмов искажённой формы кристалла и эллипсоида только в одном октанте (например, положительном). Обозначим полудлину, полуширину и полувысоту параллелепипеда как a , b и c , а соответствующие полуоси эллипсоида – p , q и r (рис. 5). Тогда верно равенство:

$$V = abc + 2(V_1 + V_2 + V_3) - \frac{\pi}{6} pqr,$$

где V_1, V_2 и V_3 – объёмы четвертей эллипсоидных сегментов вдоль осей x , y и z (рис. 5).

Рис. 5. Схема получения объёма симметрической разности параллелепипеда и аппроксимирующего его эллипсоида.

Найдём объём V_1 через интеграл:

$$V_1 = \frac{1}{4} \int_a^p S_y dx = \frac{1}{4} \int_a^p \pi q \sqrt{1 - \frac{x^2}{p^2}} r \sqrt{1 - \frac{x^2}{p^2}} dx = \frac{\pi q r}{4} \int_a^p \left(1 - \frac{x^2}{p^2}\right) dx = \frac{\pi q r}{12} \left(2p - 3a + \frac{a^3}{p^2}\right)$$

Аналогично для V_2 и V_3 :

$$V_2 = \frac{\pi p r}{12} \left(2q - 3b + \frac{b^3}{q^2}\right), \quad V_3 = \frac{\pi p q}{12} \left(2r - 3c + \frac{c^3}{r^2}\right)$$

Подставляя полученные выражения в исходную формулу и упрощая выражение, получим:

$$V = abc + \frac{5\pi}{6} pqr - \frac{\pi}{6} \left(3aqr - \frac{qra^3}{p^2} + 3bpr - \frac{prb^3}{q^2} + 3cpq - \frac{pqc^3}{r^2}\right)$$

Выясним, при каких p, q и r объём V принимает минимальное значение. Найдём стационарные точки функции $V(p, q, r)$:

$$\begin{cases} \frac{\partial V}{\partial p} = \frac{\pi}{6} \left(5qr - \frac{2qra^3}{p^3} - 3br + \frac{rb^3}{q^2} - 3cq + \frac{qc^3}{r^2}\right) = 0 \\ \frac{\partial V}{\partial q} = \frac{\pi}{6} \left(5pr - 3ar + \frac{ra^3}{p^2} - \frac{2prb^3}{q^3} - 3cp + \frac{pc^3}{r^2}\right) = 0 \\ \frac{\partial V}{\partial r} = \frac{\pi}{6} \left(5pq - 3aq + \frac{qa^3}{p^2} - 3bp + \frac{pb^3}{q^2} - \frac{2pqc^3}{r^3}\right) = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 5qr - \frac{2qra^3}{p^3} - 3br + \frac{rb^3}{q^2} - 3cq + \frac{qc^3}{r^2} = 0 \\ 5pr - 3ar + \frac{ra^3}{p^2} - \frac{2prb^3}{q^3} - 3cp + \frac{pc^3}{r^2} = 0 \\ 5pq - 3aq + \frac{qa^3}{p^2} - 3bp + \frac{pb^3}{q^2} - \frac{2pqc^3}{r^3} = 0 \end{cases}$$

Сделаем замену: $\frac{a}{p} = m, \frac{b}{q} = n, \frac{c}{r} = k$. Получим систему уравнений:

$$\begin{cases} qr(5 - 2m^3 - 3n + n^3 - 3k + k^3) = 0 \\ pr(5 - 3m + m^3 - 2n^3 - 3k + k^3) = 0 \\ pq(5 - 3m + m^3 - 3n + n^3 - 2k^3) = 0 \end{cases}$$

Учитывая, что p, q и r не могут быть нулевыми, имеем:

$$\begin{cases} 5 - 2m^3 - 3n + n^3 - 3k + k^3 = 0 \\ 5 - 3m + m^3 - 2n^3 - 3k + k^3 = 0 \\ 5 - 3m + m^3 - 3n + n^3 - 2k^3 = 0 \end{cases}$$

Складывая все три уравнения, получим равенство:

$$m + n + k = \frac{5}{2}$$

Вычитая из первого уравнения системы второе, из первого третье и из второго третье, получим систему:

$$\begin{cases} (m-n)(m^2 + mn + n^2 - 1) = 0 \\ (m-k)(m^2 + mk + k^2 - 1) = 0 \\ (n-k)(n^2 + nk + k^2 - 1) = 0 \end{cases}$$

Данная система равносильна следующим случаям:

- 1) $(m-n) = (m-k) = 0$. Отсюда следует, что $m = n = k = \frac{5}{6}$;
- 2) $(m-n) = 0$, $(m^2 + mk + k^2 - 1) = 0$. Тогда $k = \frac{5}{2} - 2m$ и из второго равенства получим квадратное уравнение $4m^2 - 10m + 7 = 0$, которое не имеет действительных корней;
- 3) $(m^2 + mn + n^2 - 1) = (m^2 + mk + k^2 - 1) = 0$. Вычтем из первого уравнения второе и, преобразуя выражение, получим $(n-k)(m+n+k) = 0$. Это равенство выполняется только при $n = k$, что автоматически сводится к первому или второму случаю.

Таким образом, мы имеем единственную точку экстремума $\left(\frac{6}{5}a, \frac{6}{5}b, \frac{6}{5}c\right)$ функции $V(p, q, r)$, при $m = n = k = \frac{5}{6}$. Она является точкой минимума, что легко проверить, подставляя в исходную формулу координаты этой точки, и любой другой, например точки (a, b, c) – в последней значение функции $V(p, q, r)$ будет больше. Главный вывод заключается в том, что полученные значения полуосей аппроксимирующего эллипсоида относятся друг к другу так же, как и параметры аппроксимируемого параллелепипеда, а значит им, в частности, будет соответствовать одна и та же точка в единичном квадрате (рис. 1). Параметры эллипсоида в абсолютном выражении пропорционально увеличены в 1.2 раза.

Рассмотренный пример, основан на предположении об известных ориентировках осей эллипсоида и положении его центра. Строгое доказательство того, что подобная установка даёт минимум V , требует более громоздкого доказательства. Ситуация усугубляется при переходе к более сложным формам, для которых облики интуитивно понятны (например, все формы кубической сингонии должны аппроксимироваться сферами). В общем случае, требуется найти 9 неизвестных параметров (координаты центра эллипсоида, ориентировки осей и длины полуосей), из которых практически информативны только три последних.

Вычислительная сложность метода, как представляется автору, может быть преодолена созданием эффективных алгоритмов и компьютерных программ, позволяющих по уже разработанным способам представления форм кристаллов находить параметры аппроксимирующего их эллипса.

Работа выполнена в рамках темы НИР ГИ КНЦ РАН № 0231-2015-0001.

Литература

1. Бетехтин А.Г. Курс минералогии: учебное пособие / А.Г. Бетехтин; под науч. ред. Б.И. Пирогова и Б.Б. Шкурского. 2-е изд., испр. и доп. М.: КДУ. 2010. 736 с.
2. Булах А.Г. Общая минералогия: учебник для студ. высш. учеб. заведений / А.Г. Булах, В.Г. Кривовичев, А.А. Золотарёв. 4-е изд., перераб. и доп. М.: Изд. центр «Академия». 2008. 416 с.
3. Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г. Реальные кристаллографические простые формы // ЗВМО. № 2. 2004. С. 112-120.
4. Степенщиков Д.Г. О внешней симметрии кристалла // Федоровская сессия 2010. Матер. конф. СПб. 2010. С. 152-154.
5. Шафрановский И.И., Корень Р.В., Дубов П.Л. К методике изучения искажённых форм на кристаллах минералов // Зап. Всесоюз. Мин. общ. 1971. Т. 100. Вып. 1. С. 42-48.