



Napjatostní analýza založená na dvojčatění kalcitu

Rigorózní práce

Mgr. Jiří Rez, Ph.D.

Brno 2013

Bibliografické údaje:

Autor:	Mgr. Jiří Rez, Ph.D.
Název práce:	Napjatostní analýza založená na dvojčatění kalcitu
Studijní program:	Geologie
Studijní obor:	Geologie
Akademický rok:	2013/2014
Klíčová slova:	napjatostní analýza, kalcit, inverzní metoda

Abstrakt:

Práce se zabývá napjatostními metodami založenými na mechanickém dvojčatění kalcitu. Pro tyto účely byl v programovacím prostředí Delphi vytvořen počítačový program TwinCalc, který uživateli poskytuje nástroje pro napjatostní analýzu všemi v literatuře uváděnými metodami. TwinCalc umožňuje importovat data naměřená na univerzálním stolku a generovat soubory dat numericky. Tento software byl použit pro vývoj metodiky napjatostní analýzy mechanického dvojčatění kalcitu. V práci jsou prezentovány a diskutovány možnosti vylepšení dosavadní metodiky, které jsou testovány na numericky generovaných datech.

Bibliographic entry:

Author:	Mgr. Jiří Rez, Ph.D.
Title:	Paleostress analysis based on calcite twinning
Degree programme:	Geologie
Field of study:	Geologie
Academic year:	2013/2014
Key words:	paleostress analysis, calcite, inversion method

Abstract:

This thesis is focused on methods of paleostress analysis based on mechanical twinning of calcite. A computer programme called TwinCalc was created using Delphi development software. TwinCalc can perform stress analysis using all published methods, import data obtained via universal stage mounted on a polarization microscope or generate data for testing purposes. TwinCalc was the main tool used for testing the methods of stress analysis based on calcite twinning. Modifications and enhancement possibilities of the methodology are discussed and tested using numerically generated data.

Prohlášení:

Na předkládané práci jsem pracoval samostatně a použitou literaturu jsem řádně citoval a uvedl v seznamu literatury. Svoluji k zapůjčování práce v knihovně.

Jiří Rez

Obsah:

1. Úvod	1
1.1. Úvod do reologie kalcitu	1
1.2. Úvod do reologie dolomitu	2
1.3. Proč tedy kalcit	3
2. Charakteristiky dvojčatění	6
3. Metody napjatostní analýzy	12
3.1 Orientace napětí	12
3.2 Velikost diferenciálního napětí	14
3.3 Kompletní tenzor napjatosti	16
4. Poznámky k metodice a diskuse	19
4.1 TwinCalc	19
4.2 Metoda pravoúhlých klínů	20
4.3 Metoda úplného prohledání	21
5. Závěry	26
6. Literatura	27

1. Úvod

Značná část sedimentárních komplexů obsahuje karbonáty, ať již jako primární součásti vápenců, dolomitů aj., nebo jako výplň trhlin vzniklých před, během a po deformačních procesech, které v průběhu své existence prodělaly. Tato masová rozšířenost karbonátů společně s jejich neobvyklými optickými vlastnostmi a velmi častým výskytem dvojčatných lamel upoutala pozornost vědců již před mnoha a mnoha lety. Dá se říci, že karbonáty, a především pak kalcit, jsou hned po kovech nejlépe prozkoumanou minerální fází, a to především z hlediska intrakrystalinní deformace a jejích mechanismů.

Nejčastěji se vyskytujícími karbonáty jsou bezesporu kalcit a dolomit. Oba minerály se liší krystalovou symetrií: kalcit spadá do prostorové grupy $R\bar{3}c$, kdežto dolomit kvůli rovnocennému zastoupení Ca^{+II} a Mg^{+II} iontů spadá do prostorové grupy $R\bar{3}$. Z toho plynou rozdíly v mechanismech intrakrystalinní deformace obou minerálů.

1.1. Úvod do reologie kalcitu

Plastická deformace kalcitu probíhá dvěma hlavními mechanismy: prokluzem po kluzných plochách a mechanickým dvojčatěním. Základní kluzné a dvojčatné plochy v kalcitu jsou uvedeny v obr. 1.1 a tab. 1.1.

Deformační vznik dvojčatných lamel v kalcitu a jejich krystalografická predispozice byly odvozeny již na konci devatenáctého století (např. Baumhauer 1879, Dove 1860, Johnsen 1902, Mügge 1883, Pfaff 1859, Reusch 1867). Baumhauer (1879) zjistil, že kalcit lze zdvojit již pouhým tlakem čepele nože na hranu klence (obr. 1.2). Friedel (1926) jako vůbec první popsal a graficky vyjádřil mechanismus dvojčatění v kalcitu.

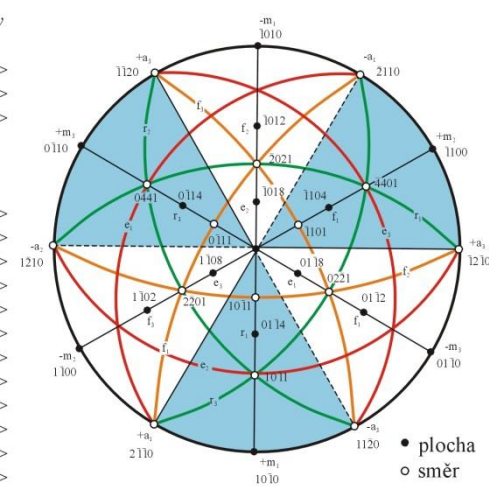
Maximální velikost deformace akomodované dvojčatěním je 32,7 %. Je tedy jasné, že plastická deformace v kalcitu neprobíhá pouze mechanickým dvojčatěním, ale také prokluzem po jiných krystalograficky predisponovaných plochách (obr. 1.1). Protože však tento mechanismus deformace nezanechává v krystalech tak patrné stopy jako mechanické dvojčatění, nebyl prokluz v první polovině dvacátého století výrazněji studován. Mügge (1898) se pokoušel docílit prokluzu po ploše dvojčatění e $\{1018\}$, ale neúspěšně. Několik dalších autorů se pokusilo podat důkazy, že často pozorovaná přednostní orientace kalcitových zrn v mramorech paralelní s plochami e $\{1018\}$ vzniká hlavně mechanickým dvojčatěním podél těchto ploch v pozitivním směru (obr. 1.3) a prokluzem ve směru negativním (Buerger 1930). Tyto důkazy se ve světle novějších poznatků zdají nepřesvědčivé. V roce 1951 publikoval Robertson (1951) výsledky svých experimentů, jimiž se mu podařilo prokázat existenci kluzného systému m $\{1010\}$.

dvojčatné systémy

$e^+ \{1018\} <4041>$
 $r^+ \{1014\} <2021>$
 $f^+ \{1014\} <1011>$

kluzné systémy

$r^\pm \{1014\} <2021>$
 $r \{1014\} <1210>$
 $r^- \{1014\} <2021>$
 $f^\pm \{1012\} <2201>$
 $f^+ \{1012\} <1011>$
 $f^- \{1012\} <2201>$
 $f^\pm \{1012\} <0221>$
 $f^- \{1012\} <2201>$
 $c \{0001\} <1210>$
 $a \{1210\} <2021>$
 $m \{1010\} <1210>$



Obr. 1.1: Přehled známých dvojčatných a kluzných systémů v kalcitu (strukturní indexy, stereografická projekce na horní polokouli (Bestmann & Prior 2003).

	morfologické indexy	strukturní indexy
c	$\{0001\}$	$\{0001\}$
m	$\{1010\}$	$\{1010\}$
r	$\{1011\}$	$\{1014\}$
e	$\{1012\}$	$\{1018\}$
f	$\{2021\}$	$\{1012\}$
q	$\{0331\}$	$\{1013\}$
s	$\{0551\}$	$\{1015\}$

Tab. 1.1: Nomenklatura krystalových ploch v kalcitu a jejich indexy (Turner et al. 1954b).

c	$\wedge$	r	44,5°
c	$\wedge$	e	26,25°
c	$\wedge$	f	63°
c	$\wedge$	q	71,25°
c	$\wedge$	s	78,5°
e_1	$\wedge$	e_2	45°
r_1	$\wedge$	r_2	75°
e_1	$\wedge$	r_1	70,75°
e_1	$\wedge$	r_2	38°
a_1	$\wedge$	r_1	52°
a_2	$\wedge$	r_1	45°
f_1	$\wedge$	f_2	79°

Tab. 1.2: Vzájemné úhly nejdůležitějších krystalografických prvků kalcitu (Turner et al. 1954b).

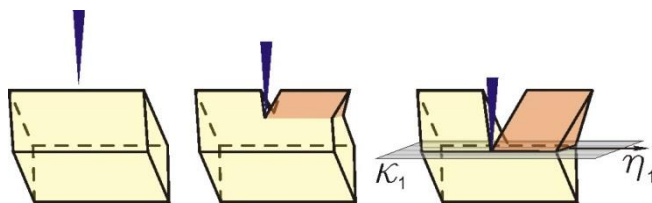
Velkým přínosem pro poznání plastické deformace kalcitu byla práce Turnera a kol. (Turner et al. 1954b). Na základě experimentální deformace monokrystalů kalcitu podél různých krystalografických směrů definovali značnou část dnes známých kluzných systémů v kalcitu (tab. 1.1 a 1.2) a podali základní pevnostní charakteristiky mechanického dvojčatění podél ploch e . Provedli 34 experimentů v kompresním i extenzním režimu ve 12 různých orientacích za teplot 20, 150, 300 a 400°C. Mimo

jiné odhalili i větší teplotní závislost τ_c (kritické střížné napětí, CRSS) kluzných ploch r než u dvojčatných ploch e (obr. 1.4). Podle Turnera et al. (1954b) jsou nejdůležitějšími mechanismy intrakrystalinní deformace kalcitu dvojčatění na plochách e $\{10\bar{1}8\}$ v pozitivním smyslu, prokluz po r $\{10\bar{1}4\}$ v pozitivním smyslu a prokluz po plochách f $\{1012\}$. Uvedli též možnost dvojčatění po plochách r v pozitivním smyslu. Vyvrátili dlouho diskutovanou možnost prokluzu po plochách e v negativním smyslu, i když se neoprostili jistých spekulací o jeho existenci. Tato důkladná práce postavená na velmi dobře provedených experimentech je dodnes základem chápání intrakrystalinní deformace kalcitu.

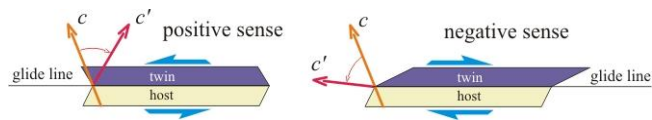
Borg a Handin (1967) provedli řadu torzních experimentů na monokrystalech kalcitu. Ověřili, že všechny systémy popsané Turnerem (Turner et al. 1954b) jsou aktivní i během torzní deformace, zaznamenali však mnohem větší aktivitu dvojčatění na plochách r a prokluz po plochách r v negativním smyslu.

Výčet autorů zabývajících se intrakrystalinní deformací kalcitu by nebyl úplný bez De Bressera a Spiers (De Bresser 1996, De Bresser & Spiers 1993, 1997). Na základě zhruba desetiletých uniaxiálních experimentů doplnili mozaiku kluzných a dvojčatných systémů v kalcitu včetně rozlišení několika kluzných směrů na plochách r a f , opětovně potvrdili existenci kluzného systému m a c , a odhalili existenci kluzného systému a . Největším přínosem bylo ale stanovení pevnostních charakteristik hlavních kluzných systémů (obr. 1.5; De Bresser & Spiers 1997). Uvedli, že pevnost (hodnota kritického střížného napětí, τ_c) jednotlivých kluzných systémů klesá s narůstající teplotou a zvyšující se rychlostí deformace (obr. 1.5 a 1.6).

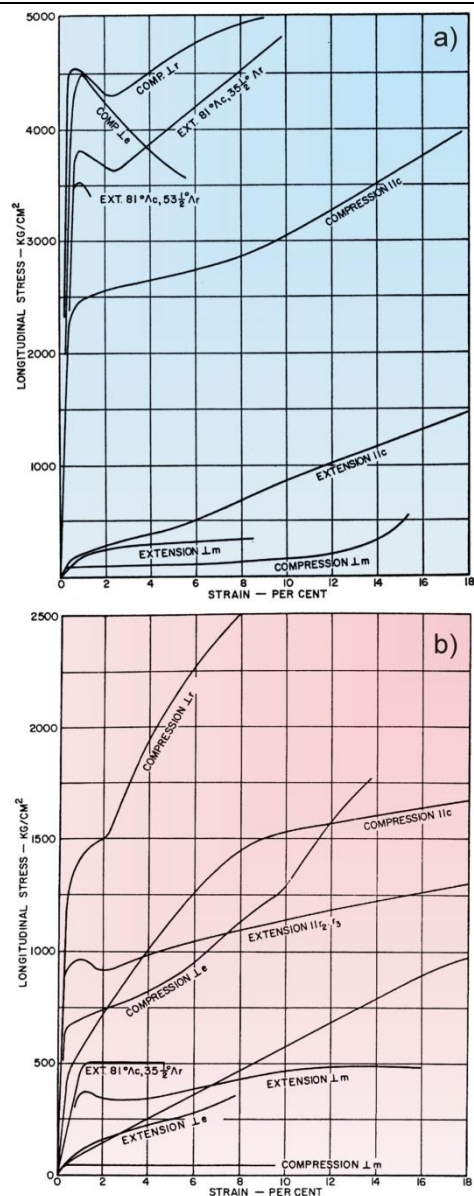
Pro podrobnější výčet prací zabývajících se plastickou deformací kalcitu se čtenář odkazuje na práce Klassen-Neklyudové (1964) a zejména De Bressera (1991).



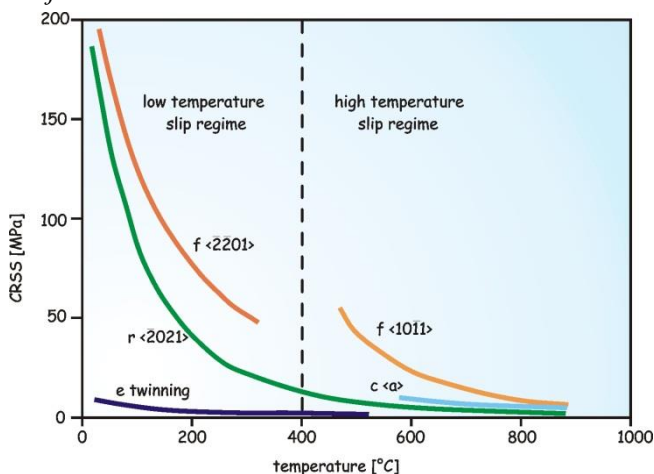
Obr. 1.2: Mechanické dvojčatění kalcitu Baumhauerovou metodou (čepelí nože). κ_1 je dvojčatná plocha a η_1 je translační vektor dvojčatění g .



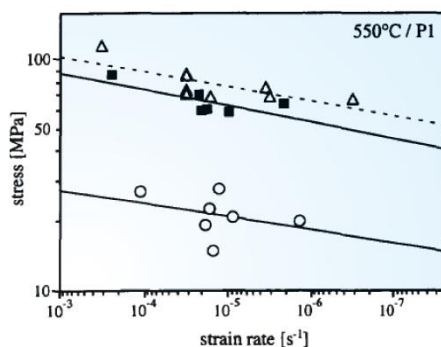
Obr. 1.3: Určení smyslu pohybu po kluzných i dvojčatných krystalografických plochách (Wagner et al. 1982).



Obr. 1.4: a) pracovní diagram pro vybrané experimenty pro teplotu 20°C, spodní tři křivky jsou pro vzorky vhodně orientované pro dvojčatění; b) pracovní diagram pro teplotu 300°C. Jasně jde vidět dramatické snížení pevnosti s nárůstem teploty (Turner et al. 1954a), pozn.: obrázek b má jiné vertikální měřítko.



Obr. 1.5: Závislost τ_c (kritické střížné napětí) kluzných a dvojčatných systémů v kalcitu na teplotě deformace (De Bresser & Spiers 1997).



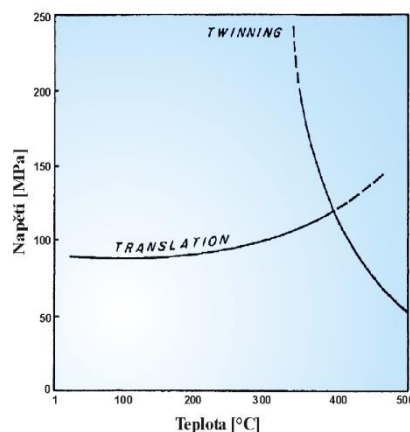
Obr. 1.6: Příklad závislosti velikosti napětí na rychlosti deformace při teplotě 550°C (De Bresser & Spiers 1997).

1.2. Úvod do reologie dolomitu

Dolomit náleží jiné prostorové skupě než kalcit, z čehož plynou podstatné rozdíly v charakteristických rysech plastické deformace obou nejvíce zastoupených karbonátů. Tato rozdílná příslušnost se odvíjí od odlišného chemického složení (zastupování Ca iontů s Mg ionty v poměru 1:1).

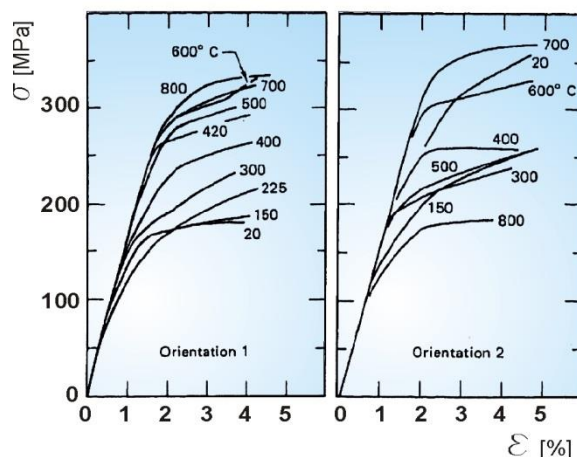
Již Tschermak (1881) se snažil docílit zdvojitání dolomitu, ale bezúspěšně. Johnsen (1902) sice nedocílil zdvojitání dolomitu, ale zato docílil prokluzu po bazální ploše $c \{0001\}$ ve směru $\langle 10\bar{1}0 \rangle$. Fairbairn a Hawkes (1941) zjistili, že dolomit dvojčatí podél ploch $f \{1012\} \langle 2\bar{2}01 \rangle$ v negativním směru (obr. 1.3). Turner et al. (1954a) a Handin a Fairbairn (1955) ověřili vznik dvojčatných lamel v dolomitu podél f -ploch v negativním smyslu za vysokých teplot a všesměrných napětí. Při experimentech za různých teplot došli k pozoruhodnému závěru, že při nárůstu teploty deformace z 25 na 300°C klesla pevnost dolomitických hornin pouze o 10%, zatímco u kalcitického mramoru běžně o 55%.

Práce Higgse a Handina (1959) přinesla některá velmi zajímavá poznání. Prokázali existenci bazálního kluzného systému $c \{0001\} \langle 10\bar{1}0 \rangle$ v pozitivním i negativním směru jako hlavního deformačního mechanismu a dvojčatění podél ploch $f \{1012\}$ v negativním směru. Sérií experimentů za různých teplot prokázali dominanci bazálního prokluzu za teplot nižších než 400°C a mechanického dvojčatění za teplot vyšších. Odhalili také velmi zajímavou a neobvyklou skutečnost, že τ_c bazálního kluzného systému c narůstá s narůstající teplotou (obr. 1.7). τ_c systému c stoupá z 88 MPa při teplotě 24°C na zhruba 118 MPa při teplotě 400°C, což je do značné míry ojedinělý fenomén, který způsobuje strmější křivku deformačního zpevnění, než jaká je pozorována u kalcitu či jiných materiálů. Při této teplotě také dochází ke změně dominantního deformačního mechanismu z bazálního kluzu na dvojčatění podél ploch f (Higgs & Handin 1959). Tato změna je také neobvyklá, u většiny materiálů je s nárůstem teploty preferován spíše kluz než mechanické dvojčatění, které je dominantní za nízkých teplot a/nebo vysokých rychlostech deformace.

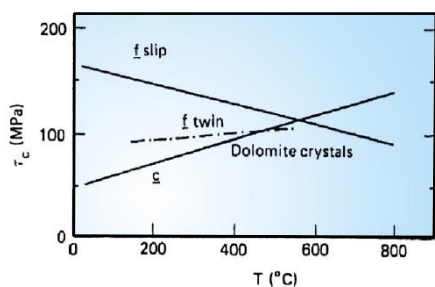


Obr. 1.7: Závislost velikosti τ_c (kritické střižné napětí) f a c systémů v dolomitu na teplotě (Higgs & Handin 1959).

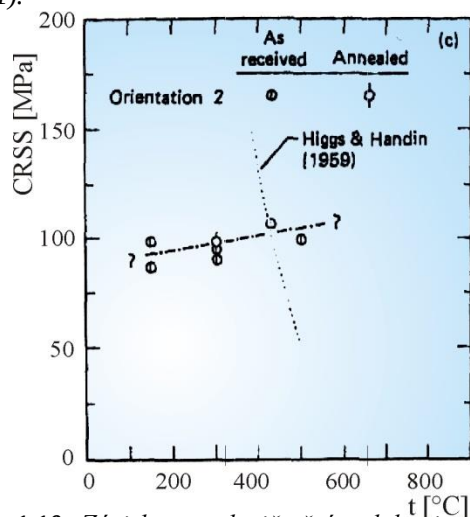
Barber (1977) experimentálně potvrdil existenci prokluzu podél ploch f v pozitivním směru. Toto zjištění podpořila práce Barbera et al. (1981). Autoři této práce, co do kvality srovnatelné pouze s pracemi De Bressera a Spierse pro kalcit, provedli komplexní sadu experimentální komprese dolomitových monokrystalů v různých krystalograficky orientovaných směrech. Objevili také prokluz podél r -ploch $\{10\bar{1}4\}$, do té doby neznámý. Pozorovali pozitivní korelaci velikosti τ_c a teploty (obr. 1.8). Tento jev vysvětlili štěpením hranových dislokací a zvýšenou koncentrací šroubových dislokací v dolomitu, což je důsledkem přítomnosti Ca^{2+} a Mg^{2+} ve struktuře. Příčiny štěpení dislokací a následky zvýšené koncentrace šroubových dislokací jsou přehledně popsány v každé učebnici struktury a vlastností materiálů (např. Pokluda et al. 1994). Za nízkých teplot (<500°C) jsou nehomogenity deformace kompenzovány křehkou deformací na plochách r , za teplot vyšších prokluzem podél ploch f . Největším přínosem byla kvantifikace velikosti τ_c pro f -kluz v pozitivním směru (obr. 1.9) a oprava závislosti velikosti τ_c pro f -dvojčatění na teplotě (obr. 1.9 a 1.10).



Obr. 1.8: Pracovní diagramy komprese monokrystalů dolomitu. Jasná pozitivní korelace napětí a teploty. a) paralelně s m , pod úhlem 60° od c ; b) kolmo na c (Barber, Heard, Wenk, 1981).



Obr. 1.9: Velikosti τ_c kluzných a dvojčatných systémů v dolomitu v závislosti na teplotě deformace (Barber et al. 1981).



Obr. 1.10: Závislost τ_c dvojčatění v dolomitu na teplotě: srovnání dat Higgse a Handina (1959) a Barbera, et al. (1981)

1.3. Proč tedy kalcit

K plastické intrakrystaliní deformaci krystalu dojde tehdy, pokud napětí působící na jedné či několika kluzných či dvojčatných plochách překročí kritickou hodnotu τ_c (např. Turner 1953):

$$\vec{S} \cdot \vec{g} > \tau_c \quad (1.1)$$

kde:

$\vec{S}$ – napětí na ploše $\vec{n}$

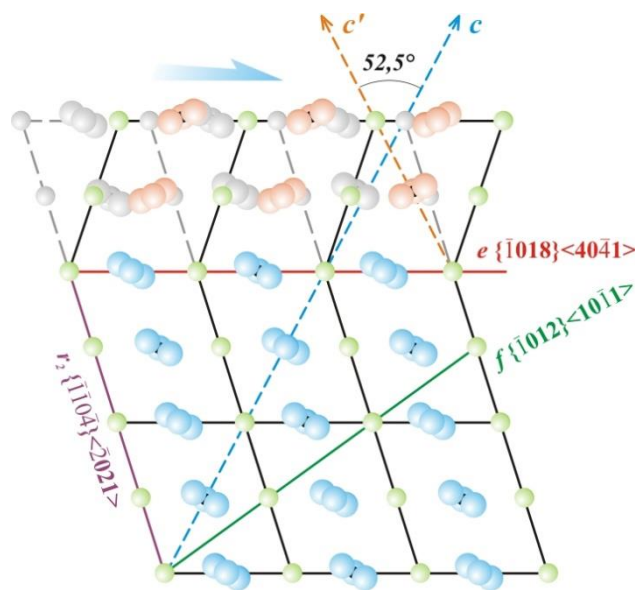
$\vec{g}$ – kluzný vektor

τ_c – kritické střížné napětí

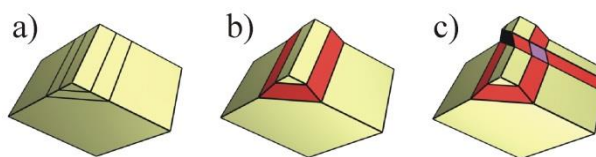
Kluzné a dvojčatné roviny se tedy dají přirovnat k mikrozlomům a lze je zpracovávat obdobnými procedurami, avšak s tou výhodou, že obsahují pouze přesně definované kluzné vektory ("rýhování") a kritická střížná napětí pro aktivaci daného systému byla již experimentálně zjištěna, čímž se do značné míry omezí možná řešení inverzních procedur. Avšak z celé škály výše popsaných krystalografických systémů se dají v praxi použít pouze dvojčatné systémy, protože kluzné systémy nezanechávají v krystalové mřížce prakticky žádné stopy. Je tedy zcela nemožné aktivitu kluzných systémů detekovat bez použití složitějších zařízení (TEM, HVEM). Dalším problémem je, že nelze přesně říci, který kluzný vektor byl

na dané kluzné ploše aktivní a jestli došlo k pohybu v kladném nebo záporném směru (toto je možné pouze u laboratorních experimentů, u kterých přesně známe vstupní orientaci vzorku). Oproti tomu dvojčatění zanechává v mřížce jasné patrnou stopu, protože při dvojčatění dochází k rotaci mřížky a tedy i optické osy, a vzniklá lamela je tedy jasné patrná i v polarizačním mikroskopu. Dvojčatění má také pouze jeden jediný kluzný vektor (a tedy jen jediný smysl pohybu), čímž odpadá jakékoliv pochybnosti o kluzném vektoru a smyslu pohybu.

I když dvojčatění má stejné vnější projevy jako jednoduchý stříh (deformace rovnoběžnou translací, asymetrie vzniklých struktur, apod.), nedochází k dvojčatění pouhým kluzem jednotlivých vrstev atomů jako u kluzu podél kluzných systémů, ale rotací části mřížky podél roviny dvojčatění (Klassen-Neklyudova 1964; obr. 1.11). Struktura kalcitu neklade takové rotaci výrazné překážky, a proto je dvojčatění u kalcitu na plochách e $\{1018\}$ (sečou hrany klence, obr. 1.12) velmi snadné. Dvojčatění je dokonce snadnější než kluz podél nejhustěji obsazených rovin r (plochy štěpnosti) a za teplot nižších než 400 °C je naprosto dominantním deformačním mechanismem (De Bresser & Spiers 1997; obr. 5).



Obr. 1.11: Struktura kalcitu (projekce na plochu r). Trojčetná osa symetrie skupiny CO_3^{2-} (modré koule) a tedy i osa c během dvojčatění rotuje o 52,5° (oranžové koule), kdežto atomy Ca (zelené koule) se pouze posunují ve směru kluzného vektoru (upraveno podle Pabst 1955).

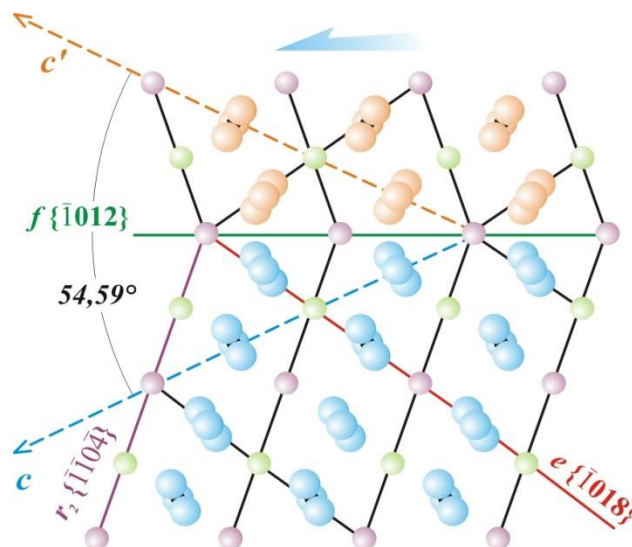


Obr. 1.12: a, b) dvojčatná plocha e_1 před a po zdvojčatění, plocha seče hrany klence; c) dvojče podél plochy e_2 interferuje s dvojčetem e_1 za vzniku tzv. Roseho kanálu.

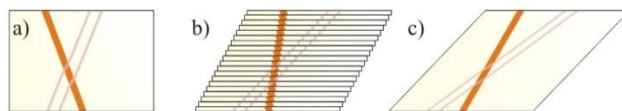
Dolomit nedvojčatí podél ploch $e \{ \bar{1}018 \}$ jako kalcit, ale podél ploch $f \{ \bar{1}012 \}$. Příčinou je střídání atomů Ca a Mg podél ploch e (obr. 1.13). Plochy f obsahují pouze Mg nebo Ca ionty, a tak je dvojčatění možné. Vysoká hodnota τ_c pro dvojčatění je způsobená menší hustotou atomů na plochách f a tím způsobené strukturní komplikace na hranicích lamel (obr. 1.13) a ztížený pohyb dvojčatových dislokací (viz dále). Proto je také preferovaným nízkoteplotním deformačním mechanismem u dolomitu bazální kluz, i když hodnota jeho τ_c je také značně vysoká (50 až 100 MPa při teplotě 0 až 400°C; Barber et al. 1981).

Pokud vezmeme v úvahu fakt, že pro deformační a napjatostní analýzu karbonátů je ze všech deformačních mechanismů vhodné pouze dvojčatění, je nutné konstatovat, že dolomit se pro tyto účely jeví jako nevhodný, protože ke dvojčatění dochází až za velmi vysokých teplot a diferenciálních napětí nebo při extrémně heterogenní distribuci napětí v polykrystalickém agregátu, a tedy značná část deformace je akomodována kluznými systémy dlouho před tím, než dojde k aktivaci dvojčatných systémů. Také směry a velikosti hlavních normálových napětí zjištěné některou dostupnou inverzní metodou jsou zavádějící kvůli vnitřní rotaci dvojčatných lamel během deformace způsobené právě aktivitou bazálního kluzného systému (např. Turner et al. 1954b; obr. 14).

Oproti tomu u kalcitu je dvojčatění za teplot nižších než 400°C dominantním deformačním mechanismem. K nehomogenní distribuci napětí v polykrystalických agregátech a s tím spojené aktivaci i méně vhodně orientovaných dvojčatných ploch dochází pouze při velkých diferenciálních napětích, velkých rychlostech deformace a velkých deformacích (nad 4–8%). Většina přirozeně deformovaných hornin tedy splňuje hlavní předpoklady (podrobnosti viz dále) použití dvojčatných lamel v kalcitu pro napjatostní a deformační analýzu. Většina orogenních oblastí zahrnuje nedeformované či jen slabě metamorfované karbonátové (kalcitické) horniny nebo žíly, a právě tato velká rozšířenost kalcitu jej předurčuje jako velmi užitečný nástroj napjatostní analýzy použitelný jak v horských pásmech, tak i v málo odkrytých oblastech, kde jsou možnosti klasických metod napjatostní analýzy značně omezené.



Obr. 1.13: Struktura dolomitu (projekce na plochu a). Trojčetná osa symetrie skupiny CO_3^{2-} (modré koule) a tedy i osa c během dvojčatění rotuje o $54,59^\circ$ (oranžové koule). Dvojčatění je možné pouze podél roviny f zaplněné pouze atomy Mg (fialové koule). Střídání atomů Ca a Mg v rovině e brání dvojčatění (upraveno podle Barber & Wenk 1979).



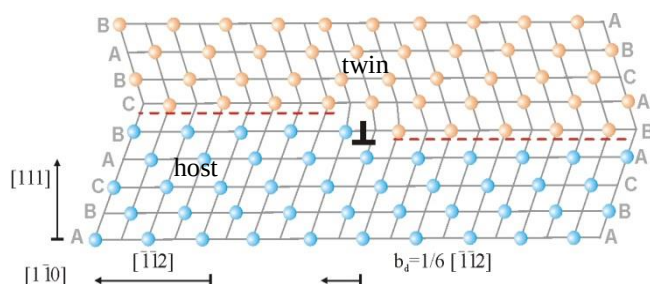
Obr. 1.14: Vnitřní rotace dvojčatných lamel při progresivní deformaci kluzem: a) výchozí stav; b) deformace jednoduchým stříhem; c) deformace jednoduchým stříhem způsobila vnitřní rotaci dvojčatných lamel, které se již nejeví v krystalograficky správné pozici.

2. Charakteristiky dvojčatění

Podle makroskopických projevů rozeznáváme dvě základní varianty dvojčatění: dvojčatění se změnou tvaru a dvojčatění beze změny tvaru - "*twinning with change of form*" a "*twinning without change of form*" (Klassen-Neklyudova 1964). Dvojčatění se změnou tvaru se na povrchu projevuje v podobě stupňů a čar obdobně jako kluz. Při dvojčatění dochází ke změně orientace struktury v určité části krystalu – dvojčeti, která je koherentně navázána na strukturu hostujícího zrna. Této změny orientace struktury lze nejnadhěji docílit zrcadlením struktury hostujícího zrna podél dvojčatné plochy (např. u kalcitu) anebo složitějšími procesy spojenými s rotací struktury. Taková dvojčata vznikají při růstu krystalu, teplotních či fázových změnách a v neposlední řadě působením vnější síly. Dvojčatění beze změny tvaru se neprojevuje změnou tvaru a bývá dominantně růstového charakteru. Ze známých horninotvorných minerálů pouze křemen při působení vnější síly vytváří mechanická dvojčata beze změny tvaru a to podle Dauphineho zákona (Klassen-Neklyudova 1964, Tullis 1980).

Pro napjatostní analýzu jsou nejdůležitější dvojčata vzniklá působením vnější síly tzv. mechanickým dvojčatěním. Dominantně se jedná o dvojčata se změnou tvaru. Aby mohlo dojít k mechanickému zdvojčatění krystalu, musí napětí působící na krystalograficky daných plochách vyvolat střížné napětí dostatečné k překonání tzv. τ_c (CRSS, kritické střížné napětí), potřebného ke vzniku a propagaci dvojčete. Ke vzniku dvojčete nedochází samozřejmě náraz napříč celým krystalem a v celé mocnosti budoucí lamely (u kalcitu při $t > 170^\circ\text{C}$ běžně 3–5 μm), ale postupně od místa iniciace (nejčastěji hranice zrn nebo inkluze) dále do krystalu a po jednotlivých vrstvách. Vznik dvojčete lze na počátku vysvětlit pohybem neúplné dislokace a nárůst jeho mocnosti pak pohybem tzv. dvojčatových dislokací, které jsou definovány jako *stupeň v koherentní hranici dvojčete*. Jsou tedy vázány na hranici dvojčete a způsobují připojování dalších a dalších strukturních buněk ke dvojčeti (obr. 2.1; např. Pokluda et al. 1994). Rychlost propagace dvojčete v podélném směru je srovnatelná s rychlostí dislokací v daném materiálu, tedy blízko rychlosti zvuku, rychlost nárůstu mocnosti dvojčete je v řádu 1 mm/s (Klassen-Neklyudova 1964, Tullis 1980). Energie potřebná ke vzniku a pohybu iniciální skluzové dislokace je řádově vyšší než energie potřebná pro pohyb dvojčatových dislokací, tedy k růstu lamely (Pokluda et al. 1994, Tullis 1980). Ale protože experimentálně zjištěná τ_c pro dvojčatění jsou relativně nízká, dá se předpokládat, že ke vzniku lamely dochází v místech koncentrace napětí např. na hranicích zrn. Podle Newmana (1994) dokonce neexistuje pojem τ_c pro dvojčatění ve stejném smyslu jako

pro kluzné systémy, u nichž je úměrné energii potřebné pro pohyb hranových dislokací podél roviny kluzu. Experimenty s whiskery (dokonalé syntetické krystaly) ukazují, že i při vysokých napětích krystaly dvojčatí pouze v místech uchycení vzorků do experimentálního aparátu, tedy pouze v místech možné koncentrace napětí (Cahn 1964, Newman 1994). Velikost τ_c se ve světle těchto úvah jeví spíše jako napětí potřebné k růstu lamel než k jejich iniciaci. Nicméně přírodní krystaly a polykrystalické agregáty obsahují tolik možných koncentrátorů napětí, že lze hodnoty τ_c zjištěné experimentálně považovat za napětí potřebné ke vzniku a růstu dvojčat.

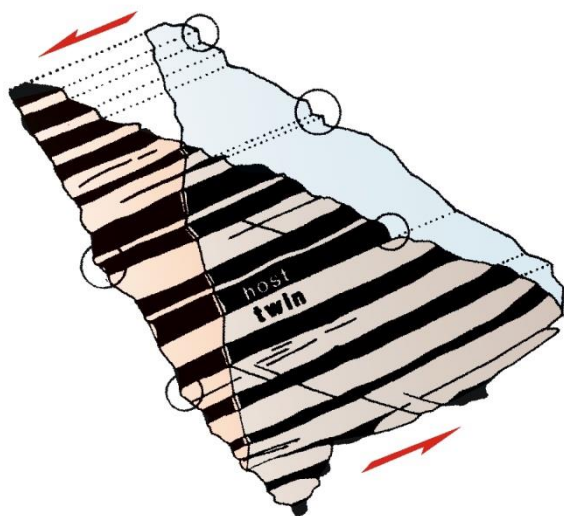


Obr. 2.1: Dvojčatová dislokace v f.c.c. mřížce s Burgersovým vektorem b_d . V jejím okolí se vytváří pole elastické deformace, která akomoduje rozdíly ve struktuře hostující mřížky a mřížky dvojčete spojené s pohybem dislokace (podle Pokluda et al. 1994).

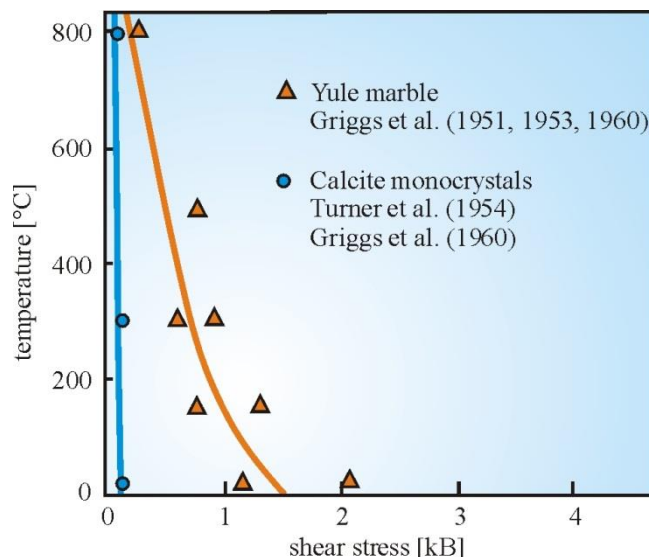
Ke vzniku mechanického dvojčete a ke kluzu dojde, když střížné napětí na dvojčatné respektive kluzné ploše překročí kritickou hodnotu. Velikost τ_c kluzných systémů závisí především na teplotě deformace, rychlosti deformace a dalších faktorech. Za zvýšené teploty je τ_c kluzných systémů obecně nižší než za teplot nižších, což je způsobeno zvýšenou frekvencí kmitů mřížky a s tím spojeným snížením hodnoty P-N napětí potřebné k pohybu dislokace. Tomuto procesu (pohybu dislokace pomocí skoků způsobených vyšší frekvencí kmitů mřížky v souvislosti s vyšší teplotou) se říká tepelná aktivace. Oproti kluzným systémům nejsou dvojčatné systémy teplotně aktivované, což se projevuje pouze mírným poklesem τ_c s narůstající teplotou (obr. 1.5 a 1.8). Tento pokles je opět způsoben zvýšenou frekvencí kmitů mřížky, což však dvojčatění pouze usnadňuje, není základním předpokladem pohybu dislokací jako u kluzných systémů (Klassen-Neklyudova 1964). Klassen-Neklyudova (1964) také uvedla, že při experimentální deformaci kalcitu dochází v teplotním rozmezí -142°C až 20°C k redukci τ_c až o polovinu a při teplotách 20°C až 400°C zůstává jeho hodnota konstantní. Griggs et al. (1960) potvrdili redukci pevnosti kalcitu o polovinu v teplotním rozmezí 25 – 300°C a jeho konstantní hodnotu až do teplot kolem 800°C .

Odlišná situace je u polykrystalických agregátů. Při dvojčatění dochází ke změně tvaru zrna (obr. 2.2). Dvojčatění představuje v měřítku jednoho zrna nehomogenní deformaci, navíc není distribuce dvojčat v krystalu rovnoměrná a mocnost jednotlivých lamel značně kolísá (obr. 2.2). Ze změny tvaru zrna při deformaci a nehomogenity distribuce deformace v zrně pramení dva zásadní jevy: a) dochází k deformačnímu zpevnění zrna, k akomodaci nehomogenity deformace dochází buď deformací zrna sousedního, anebo prokluzem po hranici zrna, tedy aktivací kluzných systémů s vyšším τ_c ; b) nehomogenní deformace jednoho zrna způsobuje nehomogenní koncentrace napětí na hranicích zrn a tím dvojčatění podél méně vhodně orientovaných ploch (viz dále). S tím je spojená také nehomogenní deformace celého agregátu, protože vhodněji orientovaná zrna akomodují až dvojnásobek deformace než je celková deformace agregátu (Spiers 1979). Protože při deformačním zpevnění dochází k aktivaci teplotně aktivovaných mechanismů, je také výsledná hodnota τ_c pro polykrystalické agregáty teplotně závislá a je celkově vyšší než pro monokrystaly (Tullis 1980; obr. 2.3).

Teplota deformace také silně ovlivňuje hustotu a mocnost vzniklých lamel (Ferrill 1991, 1998, Groshong 1974). Hustota dvojčatných lamel D (twin density) je počet lamel na 1 mm, počítáno kolmo na průběh lamel, a mocnost lamel t (twin width) je pravá mocnost lamely (obr. 2.4). Za teplot nižších než zhruba 200°C vznikají tenké lamely a při narůstající deformaci se zvyšuje jejich hustota (Groshong 1974). Tenké lamely mají mocnost do 5 μm . Některé lamely se projevují jen jako tenké tmavé čáry o mocnosti kolem 1 μm tzv. mikrolamely (Groshong 1972). Groshong (1974) upozornil, že mocnost tenkých lamel a obzvláště

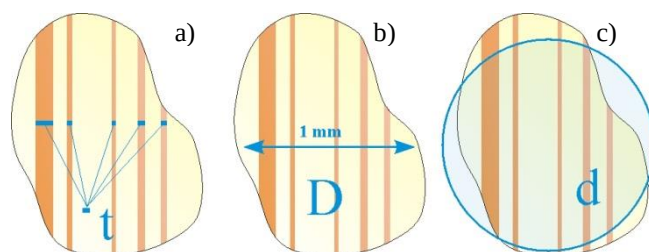


Obr. 2.2: Zdvojčatěním krystalu došlo ke změně jeho tvaru. Deformace dvojčatěním je nehomogenně distribuována, dvojčata jsou různě mocná (Burkhard 1993).



Obr. 2.3: Závislost τ_c dvojčatění kalcitu na teplotě pro monokrystaly a polykrystalické agregáty (Tullis 1980)

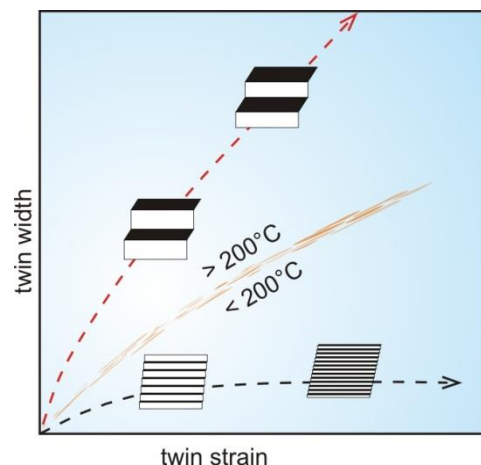
mikrolamel změřená v optickém mikroskopu může být nadhodnocena až o 50%, a to kvůli optickým jevům na hranicích lamely. Za teplot vyšších než 200°C vznikají lamely mocnější než 5 μm a s narůstající deformací se zvětšuje jejich mocnost (obr. 2.5). Tento jev se projevuje především u polykrystalických agregátů a je spojen s nutností akomodovat nehomogenní deformaci způsobenou dvojčatěním. Tato akomodace je spojena s aktivací kluzných systémů, případně dalších termálně aktivovaných deformačních mechanismů anebo prokluzem či dynamickou rekrytalizací na okrajích zrn (Ferrill 1998, Ferrill et al. 2004, Tullis 1980). Při deformaci za nízkých teplot je akomodace této nehomogenní deformace obtížná, není umožněna difuze, a proto je dříve dosaženo napětí potřebného k nukleaci nových lamel než pro aktivaci kluzných systémů. Za vysokých teplot nenastávají kvůli zvýšené difuzi problémy s akomodací nehomogenní deformace, a proto vzniká pouze nižší množství lamel a pokračující deformace se projevuje jejich růstem.



Obr. 2.4: Parametry zrna měřené pro napjatostní a deformační analýzu kalcitu: a) průměrná mocnost lamel t ; b) hustota lamel D (počet lamel na 1 mm); c) velikost zrna d (průměr kružnice stejné plochy jako zrna). D a t se měří na univerzálním stolku v řezu kolmo na lamely.

Groshong et al. (1984a) objevili systematické změny v morfologii dvojčatných lamel v závislosti na teplotě deformace v Helvetských Alpách a podle toho rozčlenil dvojčata do čtyř skupin (obr. 2.6). K podobnému výsledku dospěli Groshong (1988) a Evans a Dune (1991) v Apalačích. Tento trend změny morfologie se zdá být všeobecně platný a tak Ferrill et al. (2004) definovali termometr založený na morfologii dvojčatných lamel v kalcitu, vyjádřený grafem, ve kterém je vztažena hustota dvojčat k průměrné mocnosti dvojčat (obr. 2.7). Tento termometr nevyniká přílišnou přesností, avšak je velmi nenáročný a pro hrubou orientaci postačuje.

Termometr Ferrilla et al. (2004) je postaven na předpokladu, že dvojčatění není citlivé na rychlost deformace. Toto prokázali již Turner a Heard (1965). De Bresser a Spiers (1990) při experimentální deformaci kalcitových monokrystalů zjistili, že při teplotě $< 600\text{ }^{\circ}\text{C}$ se krystaly deformovaly dominantně dvojčatěním a že velikost napětí byla prakticky nezávislá na rychlosti deformace (obr. 2.8). Při vyšších teplotách se na deformaci podílí i kluzné systémy, jejichž τ_c je závislá na rychlosti deformace, což se projevuje závislostí τ_c monokrystalu jako celku na rychlosti deformace. Bohužel vyčerpávající studie vlivu rychlosti deformace na τ_c dvojčatných a kluzných systémů v kalcitu v teplotním rozpětí $20\text{--}800\text{ }^{\circ}\text{C}$ v literatuře chybí. U polykrystalů je tato závislost spojená s nehomogenní deformací způsobující aktivitu kluzných systémů (viz výše). Rutter (1974) provedl řadu experimentů se solnhofenským vápencem a carrarským mramorem. Zjistil, že za nižších teplot deformace je vliv rychlosti deformace

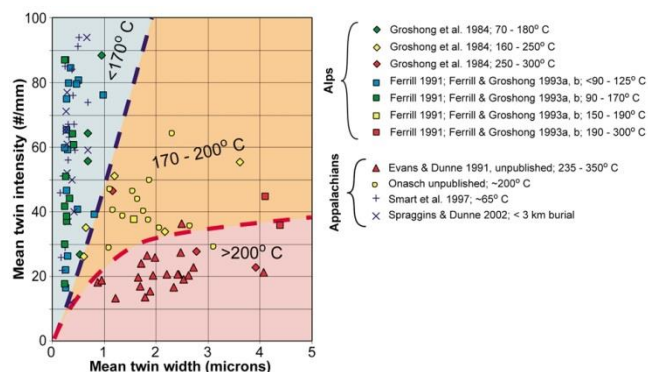


Obr. 2.5: Mocnost a hustota (viz obr. 18) dvojčatných lamel v závislosti na teplotě a velikosti deformace (Ferrill 1998).

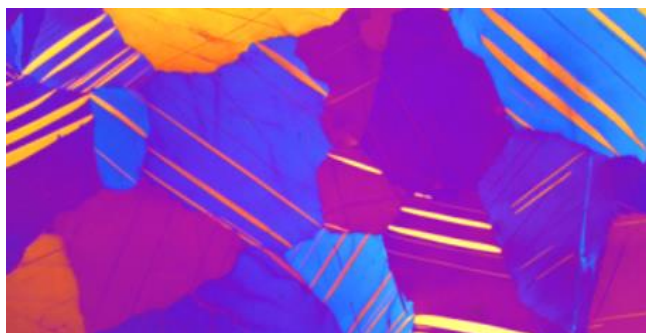
nižší než za teplot vyšších (obr. 2.10). Je však třeba brát v úvahu rozdíly v rychlostech deformace běžných při laboratorních experimentech v rozmezí 10^{-1} až 10^{-8} s^{-1} a rychlostí deformace v přírodě 10^{-13} až 10^{-15} s^{-1} (Pfiffner & Ramsay 1982). Dá se předpokládat, že rychlosti deformace běžné v přírodě jsou natolik nízké, že jejich změny mají na velikost τ_c pro dvojčatění polykrystalických agregátů zanedbatelný vliv. Tuto myšlenku podporuje i fakt, že při experimentální deformaci za vyšších teplot vznikají tlusté lamely, které mají čočkovitý tvar (obr. 2.9), avšak v přírodě pozorované tlusté lamely bývají přímé anebo pouze mírně se zužující k hranicím zrn (Burkhard 1993). To naznačuje, že buď byly čočkovité okraje lamel rekrystalovány a nebo při nízké rychlosti deformace čočkovité lamely nevznikají.

	type I	type II	type III	type IV
Geometry	- thin twins - straight - rational - 1, 2 or 3 sets per grain	- thick ($>>1\mu\text{m}$) - straight - slightly lense shaped - rational	- curved thick twins - twins in twins - completely twinned - irrational	- thick, patchy - sutured twin boundaries - trails of tiny grains - irrational
Description				
Interpretations	- little deformation - little cover - very low temperature - (post-metamorphic) - (late tectonic)	- considerable deformation - completely twinned grains are possible - syn- or post-metamorphic deformation	- large deformation - intracrystalline deformation mechanisms (r- & f-glide) - syn-metamorphic deformation	- large deformation - dynamic recrystallization (grain boundary migration) - pre- or syn-metamorphic deformation
Temperature	$< 200\text{ }^{\circ}\text{C}$	$150\text{--}300\text{ }^{\circ}\text{C}$	$> 200\text{ }^{\circ}\text{C}$	$> 250\text{ }^{\circ}\text{C}$
	I	II	III	IV

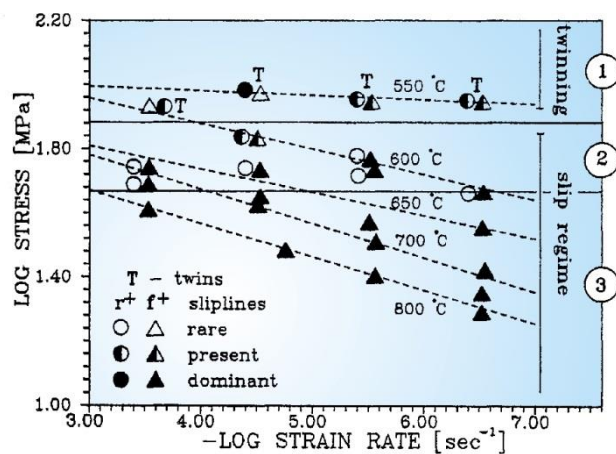
Obr. 2.6: Vliv teploty deformace na morfologii dvojčatných lamel (podle Burkhard 1993, Ferrill et al. 2004).



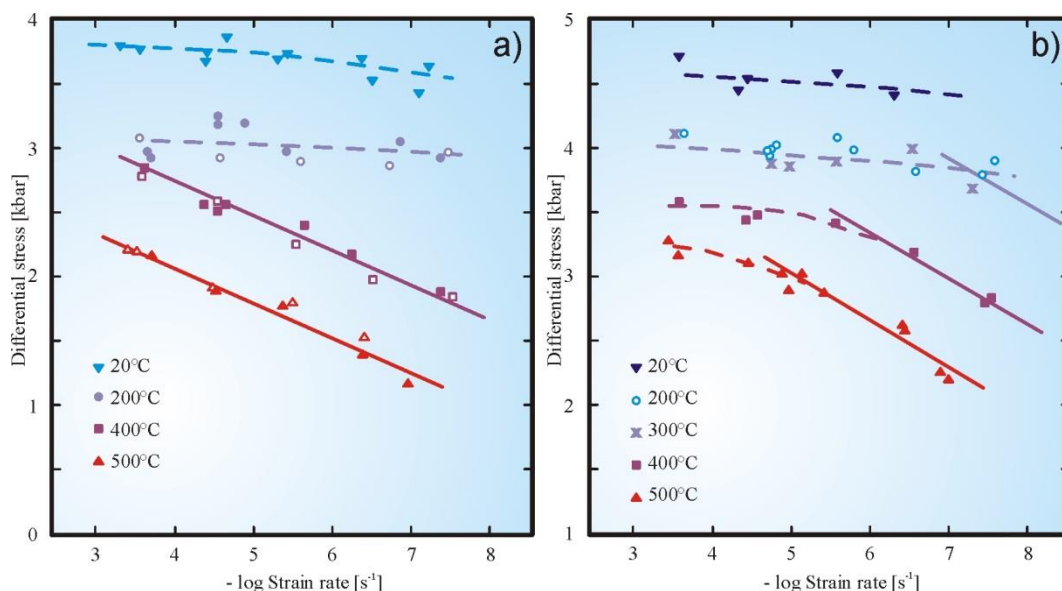
Obr. 2.7: Graf průměrné hustoty lamel versus průměrná mocnost lamel z Alp a Apalačů. Data z jednotlivých teplotních skupin se shlukují a potvrzují tak závislost morfologie dvojčatných lamel na teplotě deformace (Ferrill et al. 2004)



Obr. 2.9: Experimentálně deformovaný Carrarský mramor. Dvojčatné lamely jsou tlusté a mají čočkovitý tvar (zkřížené nikoly + sádrovcová destička; Heilbronner 2000).



Obr. 2.8: Velikost diferenciálního napětí na rychlosti deformace a teplotě. 1 – deformační režim s dominancí dvojčatění, napětí prakticky nezávislé na rychlosti deformace; 2 a 3 – režimy s narůstajícím podílem r a f kluzu, jasně patrný je pokles napětí s poklesem rychlosti deformace (De Bresser & Spiers 1990).



Obr. 2.10: Grafy závislosti velikosti diferenciálního napětí na rychlosti deformace pro a) solnhofenský výpenec; b) carrarský mramor. Obě horniny mají podobný trend zvyšujícího se vlivu rychlosti deformace s narůstající teplotou. Plošší průběh křivek za rychlostí deformace pod 10^{-5} s^{-1} u carrarského mramoru lze vysvětlit faktem, že tento materiál je hrubozrnnější a proto snadněji dvojčatí (Rutter 1974).

Kromě výše zmíněné teploty deformace a rychlosti deformace ovlivňuje dvojčatění kalcitu hlavně napjatostní pole a jeho orientace vůči zrnům. Jak již bylo uvedeno v rovnici 1.1, ke zdvojčatění dojde, pokud střížné napětí na dvojčatné ploše přesáhne kritickou hodnotu τ_c a to pouze v pozitivním směru (obr. 1.3). σ_1 musí tedy ležet v pravoúhlém klínu, který neobsahuje osu c (obr. 2.11). Velikost napětí na dvojčatné ploše závisí na velikosti Schmidova kritéria μ :

$$\mu = \sin \chi \cdot \cos \lambda \quad 2.1$$

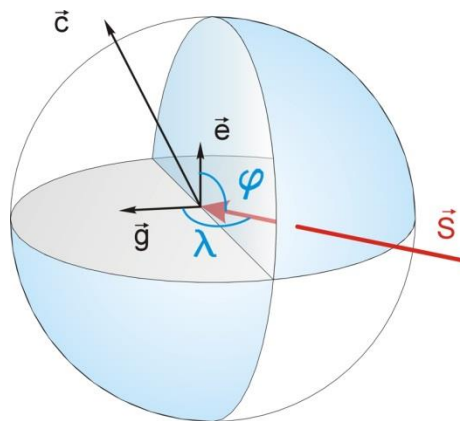
přičemž

$$\chi = \frac{\pi}{2} - \varphi \quad 2.2$$

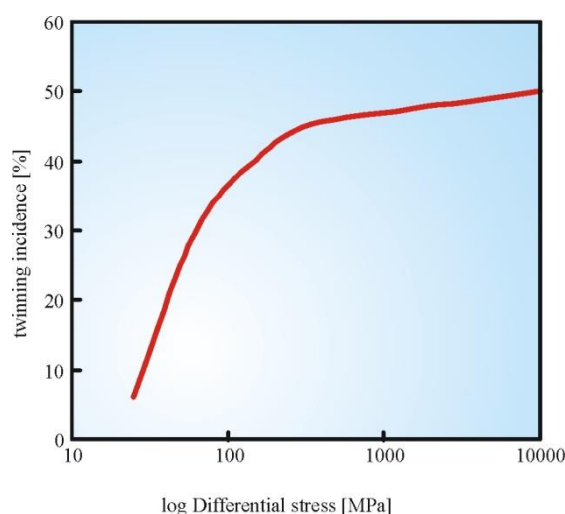
kde φ a λ jsou úhly podle obr. 2.11. Schmidovo kritérium nabývá hodnot 0 – 0.5, přičemž nejvhodněji orientovaná napětí mají μ rovno 0.5 (φ i $\lambda = 45^\circ$) a nejméně vhodná 0. Pokud není napětí orientováno ve vhodném kvadrantu (klínu) ke dvojčatění nedojde ani při sebevětších napětích.

Všeobecně se uvádí, že velikost τ_c pro dvojčatění není závislá na normálovém napětí (De Bresser 1991, Pokluda et al. 1994, Rowe & Rutter 1990, Turner 1953). Pro dvojčatění je tedy zásadní velikost diferenciálního napětí: čím vyšší diferenciální napětí, tím větší je procento zdvojčatění I_t (Twinning Incidence, (Rowe & Rutter 1990); obr. 2.12). Pokud jsou zrna v agregátu orientována všesměrně, tak minimálně 20 % zrn nebude kvůli nevhodné orientaci zdvojčatěno (Rowe & Rutter 1990). U přednostně uspořádaných agregátů záleží I_t na orientaci a tvaru matice orientace – buď zdvojčatí neočekávaně velké anebo naopak malé množství zrn. Procento zdvojčatění I_t je ovlivněno také dobou působení napětí. Čím déle napětí působí, tím tlustější jsou lamely vhodně orientovaných zrn, tím větší je nehomogenita deformace a tím i nehomogenita distribuce napětí mezi zrna a dochází ke zdvojčatění i méně vhodně orientovaných zrn a nárůstu I_t (Friedman & Heard 1974).

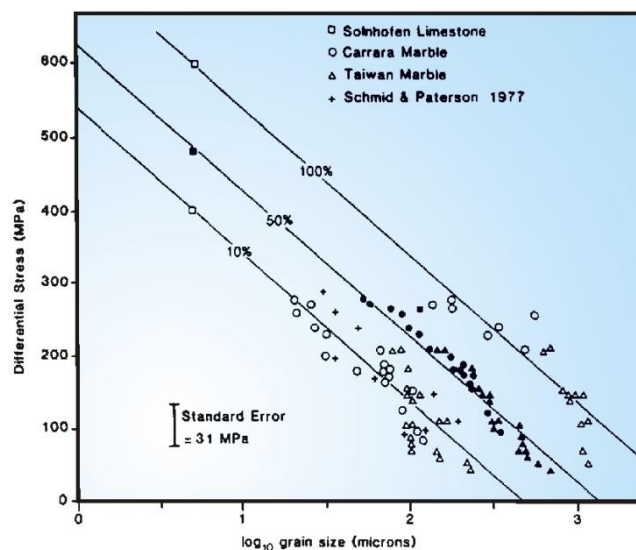
Mechanické dvojčatění v kalcitu závisí také na velikosti zrna (Friedman & Heard 1974, Newman 1994, Rowe & Rutter 1990). Experimenty prokázaly, že menší zrna dvojčatí obtížněji než zrna větší (obr. 2.13). Toto je způsobeno pravděpodobně větším deformačním zpevněním agregátů s menším zrnem způsobeným relativně větším podílem hranic zrn v agregátu, a tedy i větší nutností akomodovat heterogenní deformaci způsobenou dvojčatěním.



Obr. 2.11: Pravoúhlé klíny, ve kterých musí ležet napětí S vyvolané danou napjatostí, aby došlo ke zdvojčatění. Velikost střížného napětí paralelního s vektorem g je závislá na úhlech φ a λ , parametrech Schmidova kritéria.



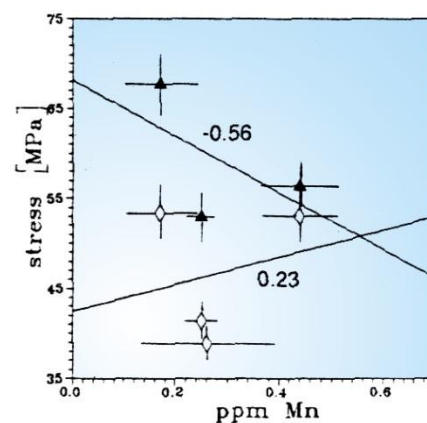
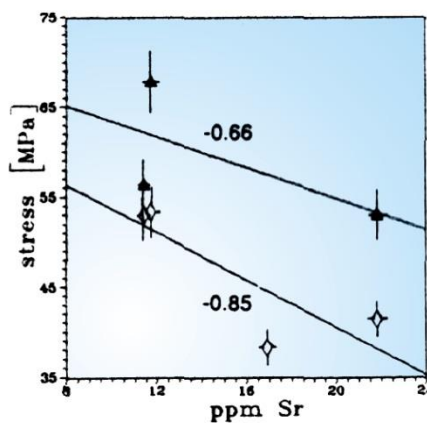
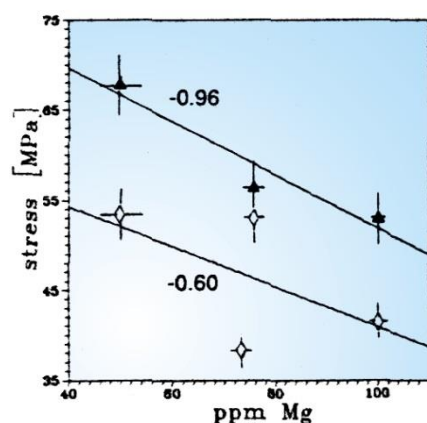
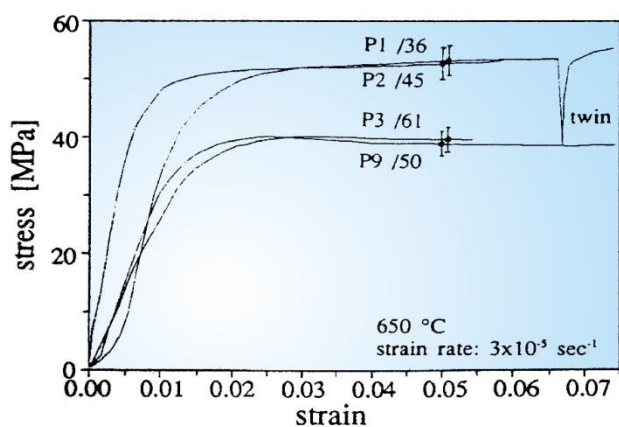
Obr. 2.12: Vliv velikosti diferenciálního napětí na procento zdvojčatění (teoretický vztah bez vlivu velikosti zrna a dalších faktorů).



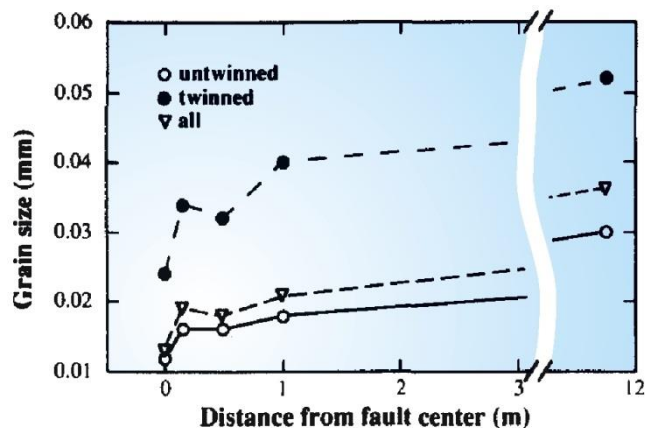
Obr. 2.13: Graf závislosti velikosti diferenciálního napětí na velikosti zrna při konstantním procentu zdvojčatění I_t 10, 50 a 100 % - plné symboly jsou data pro 50% I_t (Rowe & Rutter 1990).

Newman (1994) uvedl, že nezdvojčatělá zrna bývají menší než zrna zdvojčatělá (obr. 2.14). Kromě velikosti zrna má na dvojčatění vliv také distribuce zrn v jednotlivých velikostních třídách a s tím spojená prostorová distribuce zrn z různých zrnitostních tříd. Čím více má zrno kolem sebe sousedů, tím větší je pravděpodobnost koncentrace napětí k nukleaci dvojčete (obr. 2.15). Pokud je zrno obklopeno stejně velkými zrny, je pravděpodobnost zdvojčatění nižší, než pokud je zrno obklopeno větším množstvím zrn menších (Newman 1994). Obdobný vliv mají také póry, které lze chápat jako inkluze s nulovou pevností (např. Pokluda et al. 1994). Přítomnost porů způsobuje nehomogenní distribuci napětí mezi zrny a koncentraci napětí. Porézní vápence sedimentárního původu dvojčatí snadněji než metamorfované a kompaktní vápence (Ferrill 1998).

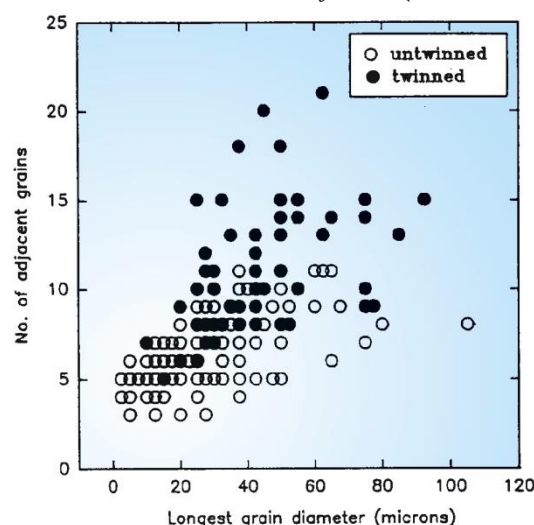
Pevnostní charakteristiky dvojčatných i kluzných systémů kalcitu ovlivňuje také obsah stopových prvků ve struktuře (obr. 2.16). De Bresser (1991) zjistil, že obsahy většiny jím stanovených stopových prvků (Mg, Sr, Zn, Ti, Y, Cu a Be) mají negativní korelaci s napětím, jediný mangan má pozitivní trend (obr. 2.17). Obecně lze říci, že obsahy cizorodých atomů snižují pevnost jak kluzných tak i dvojčatných systémů (např. Pokluda et al. 1994).



Obr. 2.17: Grafy závislosti velikosti napětí na obsahu vybraných stopových prvků (De Bresser 1991).



Obr. 2.14: Graf závislosti velikosti zrna na vzdálenosti od násunové plochy dokazující redukci velikosti zrna při deformaci. Důležitější však je, že zdvojčatělá zrna jsou za všech okolností větší než nezdvojčatělá (Newman 1994).



Obr. 2.15: Počet okolních zrn versus velikost zrna. Jasně patrný nárůst počtu zdvojčatělých zrn s nárůstem počtu sousedních zrn (Newman 1994).

Obr. 2.16: Srovnání pracovních diagramů pro 4 monokrystaly. Odlišný průběh křivek je způsoben různými obsahy stopových prvků (De Bresser 1991).

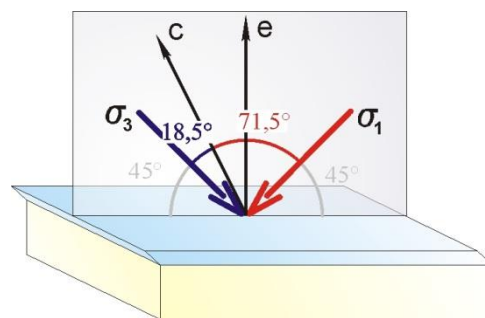
3. Metody napjatostní analýzy

Deformační charakter dvojčatných lamel v kalcitu byl rozpoznán již v devatenáctém století (Baumhauer 1879, Dove 1860, Johnsen 1902, Mügge 1883, Pfaff 1859, Reusch 1867), avšak jeho využití pro napjatostní analýzu se datuje až do padesátých let 20. století a pro deformační analýzu dokonce až do let sedmdesátých. Jednalo se především o grafické metody, skutečný rozvoj napjatostní a deformační analýzy kalcitu nastal až s rozvojem výpočetní techniky.

Existuje několik dostupných metod napjatostní analýzy lišících se podle toho, jaké parametry tenzoru napjatosti lze získat a lze je podle toho rozdělit do tří skupin. První skupina metod se zabývá získáním orientace hlavních normálových napětí, druhá zjištěním diferenciálního napětí, a třetí skupina metod získává kompletní tenzor napjatosti.

3.1 Orientace napětí

Jak již bylo uvedeno, aby došlo ke zdvojitání, musí střížné napětí na dvojčatné ploše e překročit τ_c a to v kladném směru. Na základě tohoto kritéria navrhl Turner (1953) jednoduchou grafickou metodu, později nazvanou **TDA** (Turner Dynamic Analysis), založenou na faktu, že jak osy c , tak i póly dvojčatných ploch e monofázově deformovaných agregátů vytváří v bodových diagramech shluky, jejichž orientace je vůči osám napjatosti vždy stejná (obr. 3.2). Střížné napětí podél plochy dvojčatění je největší, když je velikost Schmidova faktoru 0,5, tedy pokud osy komprese a extenze leží v jedné ploše s osou c a normálou plochy e a jsou orientovány pod úhlem $71,5^\circ$ respektive $18,5^\circ$ od osy c (45° od normály plochy e ; obr. 3.1; Handin & Griggs 1951). Statistickým vyhodnocením možných os komprese a extenze všech lamel v agregátu lze získat orientaci skutečných os komprese a extenze. Je možno určit průměrnou orientaci osy c a normály e a z nich

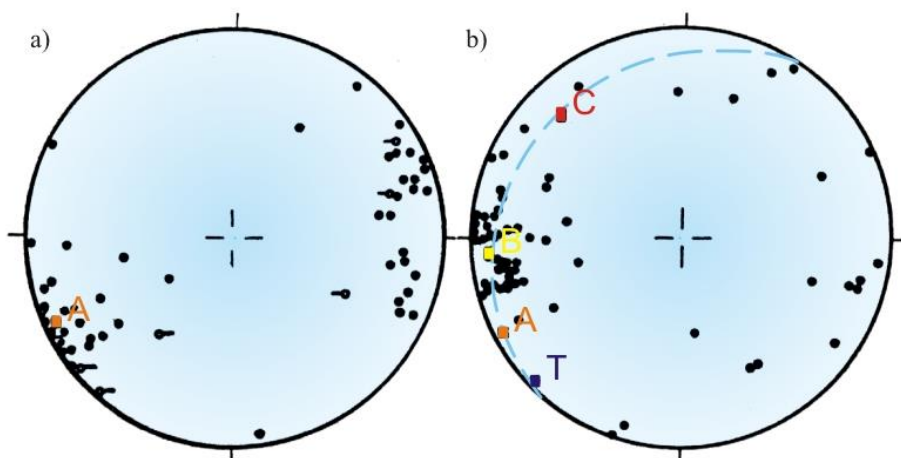


Obr. 3.1: Nejvýhodněji orientované osy napětí pro dvojčatění (Schmidovo kritérium = 0,5): osa komprese (σ_1) svírající úhel $71,5^\circ$ s osou c a osa extenze (σ_3) úhel $18,5^\circ$ s osou c .

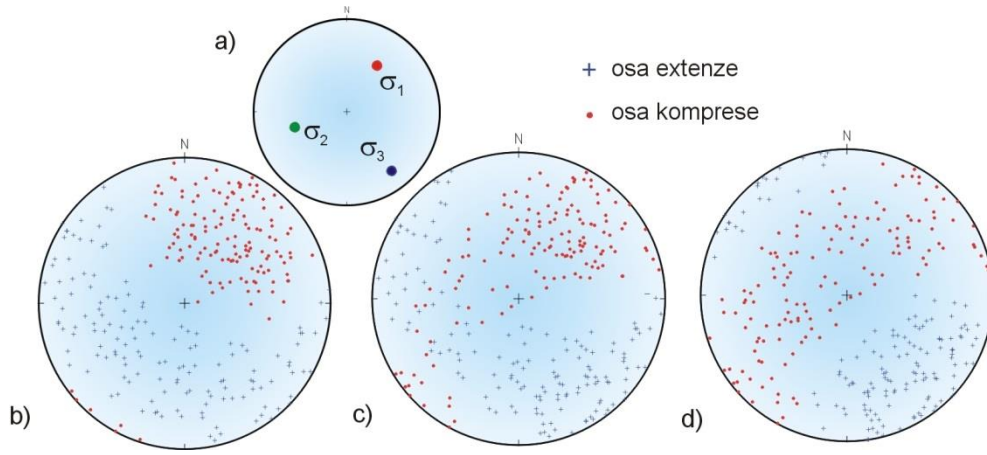
se zkonstruují osy komprese a extenze (Turner 1953; obr. 3.2b) a nebo se osy komprese a extenze konstruují pro každou dvojčatnou lamelu a statisticky se zpracují shluky os komprese a extenze (obr. 3.3).

Zrna s více zdvojitými systémy musí projít selekcí, z každého takového zrna je vybrán pouze výraznější systém a ostatní nejsou brány v potaz. Turner (1953) uvedl, že při extenzních experimentech jsou zrna s dvěma i třemi zdvojitými systémy celkem běžná, kdežto u kompresních experimentů obsahuje pouze pár zrn dva systémy lamel a žádná zrna nejsou zdvojitá třemi systémy lamel.

Základními předpoklady metody TDA jsou všesměrná orientace kalcitových zrn a jednofázová deformace způsobená jednoosým napětím (tenzor napjatosti s tvarovým parametrem $\Phi = 0$ anebo $\Phi = 1$; $\Phi = (\sigma_2 - \sigma_3) / (\sigma_1 - \sigma_3)$). Pokud jsou tyto předpoklady porušeny, jsou shluky os napětí neostře anebo promísené (obr. 3.3). Pokud je elipsoid napjatosti prolátní, osy komprese vytvoří uzavřený shluk a osy σ_2 a σ_3 vytvoří pásmovou kružnici a naopak. Pokud má elipsoid napjatosti obecně trojosý charakter, shluky os komprese a extenze se promísí (obr. 3.3). Pokud jde o polyfázovou deformaci, tak osy komprese a extenze vytvoří



Obr. 3.2: a) bodový diagram os c přirozeně deformovaného yulského mramoru, oranžový bod A je orientace průměrné osy c ; b) bodový diagram pólů dvojčatných ploch e , žlutý bod B je průměrná orientace normály plochy e . Modrý přerušovaný oblouk je plocha procházející průměrnou orientací c a normály e , kompresní osa C a extenzní osa T byly konstruovány pod úhlem 45° od průměrné normály e (Turner 1953).



Obr. 3.3: Bodové diagramy os komprese a extenze pro různé tvarové parametry tenzoru napjatosti (a): b) $\Phi = 0$; c) $\Phi = 0,5$; d) $\Phi = 1$. Jasně patrné je omezené použití pro trojosé elipsoidy (c) i značně neostře shluky os komprese respektive extenze.

v bodovém diagramu více shluků, čímž se diagram stává nepřehledným, zvláště pokud je rozdíl v orientaci dvou fází menší než 45° .

Numerický postup TDA popsal Spang (1972). Tenzor napjatosti na ploše dvojčatění v souřadnicích plochy dvojčatění má tvar:

$$E_{\alpha\beta} = \begin{bmatrix} +1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad 3.1$$

Pro srovnání tenzorů z více dvojčatných lamel je třeba je rotovat do stejného souřadného systému podle rovnice:

$$E_{ij} = E_{\alpha\beta} l_{\alpha i} l_{\beta j} \quad 3.2$$

kde $l_{\alpha i}$ a $l_{\beta j}$ jsou směrové kosiny. Směry kompresních a extenzních napětí jsou potom vyjádřeny maticí:

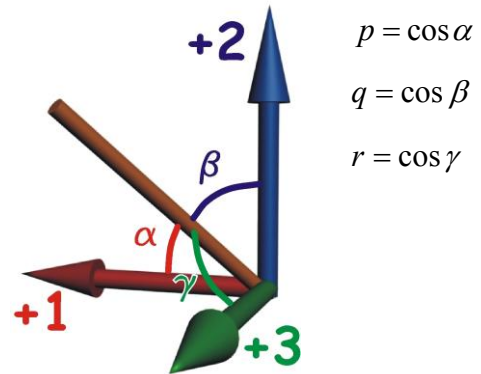
$$E_{ij} = \begin{bmatrix} p^2 - p'^2 & pq - p'q' & pr - p'r' \\ pq - p'q' & q^2 - q'^2 & qr - q'r' \\ pr - p'r' & qr - q'r' & r^2 - r'^2 \end{bmatrix} \quad 3.3$$

kde p, q, r jsou směrové kosiny kompresních os a ; p', q', r' jsou směrové kosiny extenzních os (obr. 3.4). Matice E_{ij} pro všechny systémy dvojčatných lamel se sečtou a vydělí jejich počtem. Charakteristické vektory výsledné matice jsou směry os napětí.

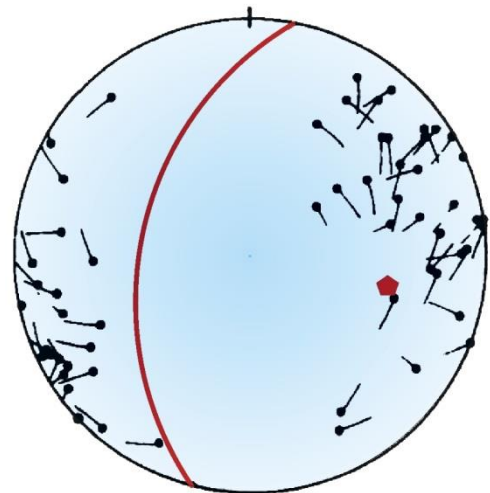
Distribuce extenzních a kompresních os je kromě velikosti diferenciálního napětí dána tvarovým parametrem působícího tenzoru napjatosti (obr. 3.3). Z toho vyplývá, že je vhodnější konstruovat osy napětí pro každou dvojčatnou lamelu, a znát tedy jejich distribuci, ze které se dá usuzovat buď na tvarový parametr působícího tenzoru napjatosti nebo na polyfázovost deformace spíše než použít metodu Spanga (1972), která počítá „průměrnou“ orientaci tenzoru napjatosti. Výpočet je také mnohem jednodušší:

$$\vec{\sigma}_1 = \frac{[\vec{n} \times (\vec{n} \times \vec{c})] + \vec{n}}{\sqrt{2}} \quad 3.4$$

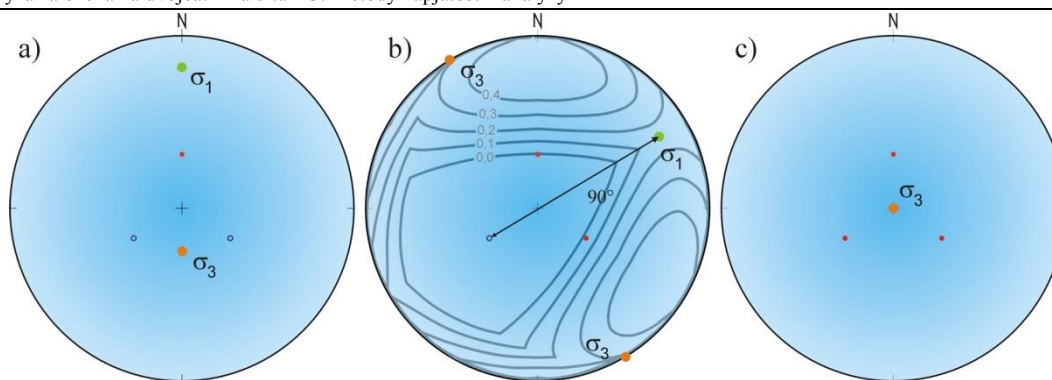
$$\vec{\sigma}_3 = \frac{[(\vec{n} \times \vec{c}) \times \vec{n}] + \vec{n}}{\sqrt{2}} \quad 3.5$$



Obr. 3.4: Definice směrových kosinů p, q, r (Spang 1972).



Obr. 3.5: Diagram pólů dvojčatných ploch. Čárky u pólů směřují ke směru σ_1 . Na červeném oblouku leží σ_2 a σ_3 (Shelley 1992).



Obr. 3.6: Nissenova metoda. a) konstrukce σ_1 a σ_3 pro jednu dvojčatnou lamelu; b) směr σ_1 leží v místě stejných velikostí Schmidova kritéria pro obě dvojčatné lamely (svírá úhel 90° s normálou třetí, nezdvojitě e-plochy; c) pokud jsou zdvojitě všechny systémy, je směr σ_3 paralelní s osou c (podle Nissen 1964).

Jinou grafickou metodou je metoda Dietrichové a Songa (1984). Metoda byla navržena pro určení směru σ_1 . Do diagramu v Lambertově projekci se vynesou vždy pól dvojčatné lamely e a osa c . Stejně jako u metody TDA se předpokládá, že směr σ_1 leží ve stejné rovině jako c a e . Proto se od pólu e -plochy ve směru velkého oblouku e - c vynesou krátká čárka, která ukazuje směrem k σ_1 (tedy analog metody m-ploch z napjatostní analýzy zlomů). Tam kde se čárky všech systémů lamel pomyslně protínají, leží σ_1 (obr. 3.5). Metoda má stejné předpoklady i neduhy jako TDA a tím, že poskytuje o polovinu méně údajů než TDA, se jeví ještě méně vhodná.

Nissen (1964) správně podotkl, že působením jednoho napjatostního pole může dojít k aktivaci více než jednoho systému dvojčatných lamel. Selekcí pouze nejvýraznějšího systému lamel, jak navrhl Turner (1953) přicházíme tedy o informace o napjatostním poli. Nissen (1964) proto navrhl následující postup. Kompresní a extenzní osy se pro zrna s jedním systémem dvojčatných lamel konstruují jako při TDA. Aby došlo ke zdvojitění dvou systémů lamel, musí být hodnota Schmidova kritéria μ stejná pro obě lamely (tzn. napětí musí být dostatečně velké pro překonání τ_c obou systémů). Osa komprese je koplanární s osou c a normálou nezdvojitě e-plochy, se kterou svírá úhel 90°. Osa extenze je kolmá na rovinu c - e (obr. 3.6b). Zdvojitění všech tří systémů je možné pouze při jednoosé extenzi paralelní s osou c (Nissen 1964). Tyto předpoklady jsou samozřejmě platné pouze pro jednofázově deformované vzorky.

3.2 Velikost diferenciálního napětí

Jak již bylo naznačeno v kapitole 2, jsou faktory jako procento zdvojitění I_t či hustota dvojčatných lamel D závislé na velikosti diferenciálního napětí. Z tohoto faktu vychází jediné dvě experimentálně kalibrované metody k určení velikosti diferenciálního napětí: metoda Jamisona a Spanga (1976) a Rowe a Ruttera (1990). Obě metody jsou omezeny pouze na jednofázovou deformaci a mají shodné předpoklady: homogenní nerotační deformaci, malou

velikost deformace (3–4%), všesměrnou orientaci kalcitových zrn a prolátní elipsoid napjatosti.

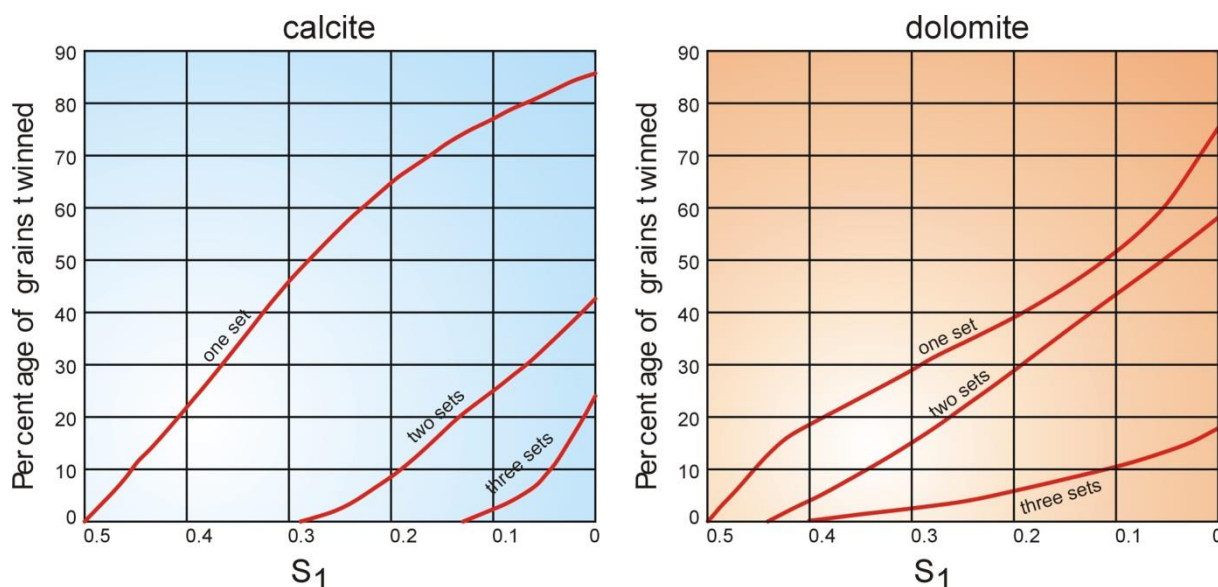
Metoda Jamisona a Spanga (1976) je založena na předpokladu, že pro všechny dvojčatné lamely jedné fáze lze nalézt takové napětí, které vyhovuje všem lamelám. Jde tedy o hledání vhodné velikosti Schmidova kritéria pro nejméně vhodně orientované lamely, pro všechny ostatní je Schmidův faktor vždy větší. Pak již lze vypočítat diferenciální napětí podle jednoduchého vzorce:

$$\Delta\sigma = \frac{\tau_c}{S_1} \quad 3.6$$

kde $\Delta\sigma$ je velikost diferenciálního napětí, τ_c je velikost kritického střížného napětí a S_1 je Schmidovo kritérium. Jamison a Spang (1976) experimentálně kalibrovali závislost S_1 na procentu zdvojitění (I_t =počet zdvojitěných zrn z celkového počtu zrn) zrn s jedním, dvěma a třemi systémy lamel (obr. 3.7). I_t se zjišťuje za použití obyčejného polarizačního mikroskopu. Pro zrna se třemi systémy lamel se zjišťuje přímo, pro zrna se dvěma systémy lamel je součtem I_t zrn se třemi a se dvěma systémy a konečně I_t pro zrna s jedním systémem je součtem I_t s jedním, dvěma a třemi systémy. Výsledkem jsou velikosti diferenciálního napětí pro jeden, dva a případně i tři systémy lamel, jejichž velikosti se většinou liší. Nejblíže skutečné velikosti diferenciálního napětí bývá většinou hodnota pro dva systémy lamel anebo se mohou výsledky zprůměrovat. Pro polyfázově deformované agregáty jsou zjištěné velikosti značně nadhodnoceny, lze ji tedy použít pouze po předešlé separaci dat do homogenních souborů.

Jamison a Spang kalibrovali svoji metodu také pro dolomit (obr. 3.7). Jak však již bylo naznačeno v kapitolách 1.2 a 1.3, dolomit dvojčatí až za vyšších teplot a diferenciálních napětí, předtím dochází k deformaci bazálním kluzem, a proto se zvyšuje nehomogenita deformace a tím i chyby zjištěných diferenciálních napětí, takže napětí získaná metodou Jamisona a Spanga (1976) lze pokládat za orientační.

Rowe a Rutter (1990) propracovali metodu Jamisona a Spanga do větších detailů. V první řadě zohlednili vliv



Obr. 3.7: Empirické křivky pro určení hodnoty S_1 pro zrna s jedním, dvěma a třemi systémy dvojčatných lamel pro kalcit a dolomit (Jamison & Spang 1976).

velikosti zrna na procento zdvojitění (obr. 2.13) a odvodili empirický vztah pro výpočet diferenciálního napětí:

$$\sigma = 523 + 2,13I_t - 204 \log d \quad 3.7$$

kde I_t je procento zdvojitění a d je velikost zrna. Směrodatná odchylka této metody je 31 MPa. Z rovnice je ovšem jasně patrné, že pro zrna větší než 5,312 mm jsou vypočtená diferenciální napětí záporná.

Dalším faktorem, který se dá přímo zjistit v polarizačním mikroskopu vybaveném univerzálním stolkem je hustota dvojčat D . S narůstajícím napětím se zvyšuje hustota lamel (obr. 3.8) a tento parametr je nezávislý na velikosti zrna (Rowe & Rutter 1990).

$$\sigma = -52 + 171,1 \log D \quad 3.8$$

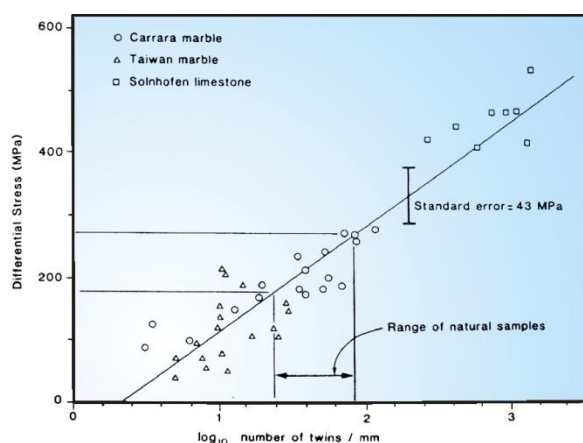
kde D je hustota dvojčat (počet/mm). Směrodatná odchylka tohoto vztah je 43 MPa.

Poslední metoda sloužící k zjištění velikosti diferenciálního napětí vyvinutá Rowem a Rutterem (1990) je založena na míře zdvojitění V (volume % twinning), což je zdvojitěná část objemu krystalu vyjádřená v procentech. Rowe a Rutter (1990) definovali vztah vyjadřující závislost míry zdvojitění na teplotě a diferenciálním napětí:

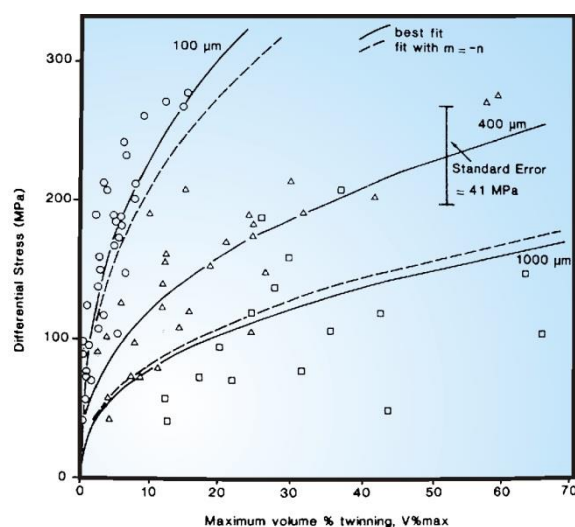
$$\log \sigma = 2,72 + 0,4(\log V - \log d) \quad 3.9$$

kde V je míra zdvojitění a d je velikost zrna. Směrodatná odchylka je 40 MPa (obr. 3.9).

Tyto tři metody Rowa a Ruttera poskytují velikosti diferenciálního napětí, které se liší až o 60 MPa. Diferenciální napětí zjištěná za použití rovnic 2.2.5 a 2.2.6 jsou si velmi blízká (obr. 3.10) a tak se dá usuzovat, že jsou správnější.



Obr. 3.8: Graf závislosti hustoty dvojčat na diferenciálním napětí (Rowe & Rutter 1990).



Obr. 3.9: Závislost míry zdvojitění V na velikosti diferenciálního napětí a teplotě deformace (Rowe & Rutter 1990).

Metody Jamisona a Spanga (1976) a Rowa a Ruttera (1990) se kromě zohlednění velikosti zrna liší také teplotou experimentů. Zatímco Jamison a Spang (1976) prováděli své experimenty za pokojových teplot, Rowe a Rutter (1990) kalibrovali své metody na základě experimentů prováděných v teplotním rozsahu 200–800°C, z čehož pramení některá omezení obou metod. Ferrill (1998) srovnával výsledky obou metod na experimentálních datech Groshonga (1974) a na přirozeně deformovaných vzorcích z Alp a Apalačí. Zjistil, že metoda Rowa a Ruttera nadhodnocuje diferenciální napětí při teplotě deformace pod 200°C 4–9 krát a naopak metoda Jamisona a Spanga (1976) podhodnocuje diferenciální napětí za vyšších teplot. Navrhl tedy, že pro oblasti s teplotou deformace nižší než 200°C je vhodnější použít metodu Jamisona a Spanga (1976), i když nezohledňuje vliv velikosti zrna na procento zdvojitění, a v oblastech s vyšší teplotou deformace navrhuje používat metody Rowa a Ruttera (Ferrill 1998).

3.3 Kompletní tenzor napjatosti

Ani jedna z výše zmíněných metod neposkytuje kompletní údaje o napjatostním poli při vzniku dvojčatných lamel a není schopna zpracovat polyfázově deformované horniny. Teprve s nástupem výpočetní techniky je možno přistoupit k náročnějším metodám, které nemají problémy s polyfázovými soubory dat a poskytují kompletní informace o napjatostním poli a v kombinaci s některými klasickými metodami napjatostní analýzy poskytují údaje o změnách napjatostního pole v čase.

V současné době nejpropracovanější metodou je modifikovaná inverzní metoda Etchecopara (1884) autorů Lacombe a Laurenta (např. Lacombe & Laurent 1996, Laurent et al. 1981, Laurent et al. 2000, Tournet et al. 1990).

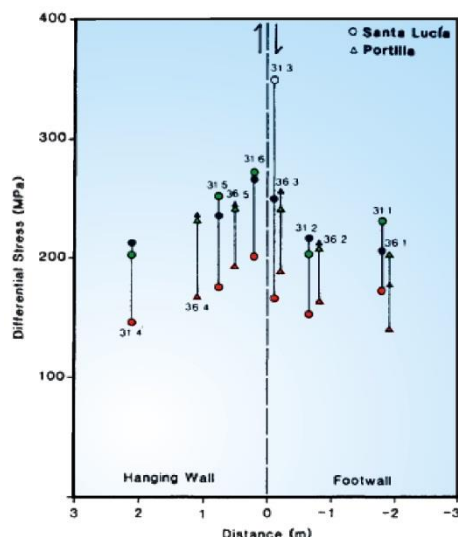
Metoda vychází ze vztahu:

$$\vec{m} \times \sigma \times \vec{n} = \vec{\tau}_m \quad 3.10$$

kde σ je tenzor napjatosti, m je kluzný vektor, n je normála dvojčatné plochy a τ_m je střížné napětí ve směru vektoru m . Aby došlo ke zdvojitění, musí být toto napětí vyšší nebo rovno kritické hodnotě τ_c .

$$\sigma_D = \begin{bmatrix} \frac{2-\Phi}{3} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{2\Phi-1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{-\Phi+1}{3} \end{bmatrix} \quad 3.11$$

$$\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 = 0 \quad 3.12$$



Obr. 3.10: Velikosti diferenciálních napětí získaných metodami Rowa a Ruttera (1990): metoda I_t – zelené symboly; metoda D – černé symboly; metoda V – červené symboly (Rowe & Rutter 1990).

Principem metody je najít takový tenzor σ_D , aby byl kompatibilní s co největším počtem zdvojitěných i nezdvojitěných ploch. Zahrnutí nezdvojitěných ploch do výpočtu výrazně omezuje počet možných řešení a tím značně zpřesňuje výsledky metody.

Výpočet začíná generováním náhodných redukovaných tenzorů napjatosti. Tournet et al. (1990) používají 100 až 1000 tenzorů. Při aplikaci daného tenzoru existují pro každou dvojčatnou plochu 4 možné situace, viz tab. 3.1 a obr. 3.11. V ideálním případě spadají všechny dvojčatné plochy do prvních dvou kategorií (best-fit tenzor pro monofázově deformovaný agregát). Ve většině případů nastávají i zbylé dvě varianty. Zatímco tzv. nekompatibilní zdvojitěné plochy (plochy v agregátu zdvojitěné, ale aplikovaný tenzor napjatosti by nezpůsobil jejich zdvojitění) mohou být následkem nevhodné kombinace parametrů daného tenzoru napjatosti anebo polyfázové deformace, tzv. nekompatibilní nezdvojitěné plochy jsou pouze následkem nevhodných parametrů tenzoru napjatosti, a proto jsou využívány jako hlavní kritérium výběru best-fit tenzoru.

Original twin set is:	Twin set after tensor application would be:	τ_j vs τ_c
twinned	twinned	• $\tau_j > \tau_c$
untwinned	untwinned	• $\tau_j < \tau_c$
twinned	untwinned	• $\tau_j > \tau_c$
untwinned	twinned	• $\tau_j < \tau_c$

Tab. 3.1: Možné kombinace dvojčatění při aplikaci tenzoru napjatosti na data

Na základě výše popsané klasifikace dvojčatných ploch se vypočte tzv. **penalizační funkce** f podle vzorce:

$$f = \sum_{i=1}^{i=n} (\tau_j - \tau_a) \quad 3.13$$

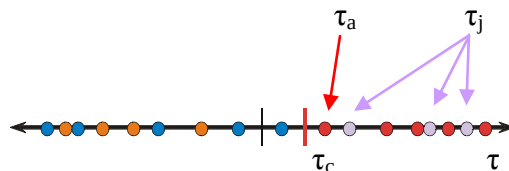
kde τ_a je nejmenší hodnota střížného napětí pro kompatibilní zdvojčatělé lamely a τ_j jsou velikosti střížného napětí podél nekompatibilních nezdvojčatělých ploch (obr. 3.11). Redukovaný tenzor s nejmenší hodnotou penalizační funkce je vybrán a postoupen další analýze.

Dalším krokem je optimalizace nalezeného tenzoru metodou nejmenších čtverců tak, aby výsledný tenzor byl kompatibilní s co největším počtem zdvojčatělých i nezdvojčatělých dvojčatných ploch (obr. 3.12).

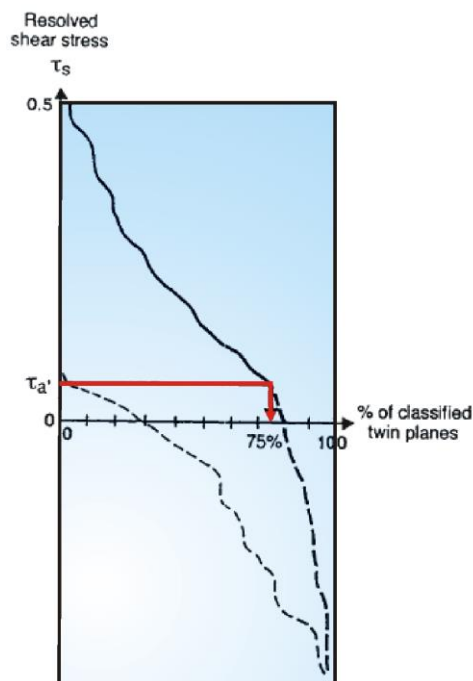
Po optimalizaci následuje selekce, při níž je „best fit“ tenzor aplikován na soubor dat a jsou vybrány kompatibilní zdvojčatělé a všechny nezdvojčatělé plochy jako soubor jedné homogenní fáze a ostatní zdvojčatělé a všechny nezdvojčatělé plochy postupují další cyklus hledání (Laurent et al. 2000).

Směry hlavních normálových napětí jsou konzistentní s experimentálními daty a rozlišovací schopnost této metody je kolem 5° (Lacombe & Laurent 1996). Poněkud odlišná situace je u diferenciálního napětí. Přesnost metody v tomto směru je závislá na procentu nezdvojčatělých ploch. Pokud je počet nezdvojčatělých ploch nízký, může metoda hodnotu diferenciálního napětí nadhodnotit, protože procento kompatibilních zdvojčatělých lamel je v takovém případě velmi vysoké a hodnota τ_a je anomálně nízká (Lacombe & Laurent 1996). Tato situace nastává při vysokém počtu deformačních fází. Avšak při aplikaci metody na experimentálně deformované vzorky (uniaxiálně i triaxiálně deformované) poskytuje metoda přesné hodnoty diferenciálního napětí (obr. 3.13; Lacombe & Laurent 1996, Laurent et al. 2000, Laurent et al. 1990).

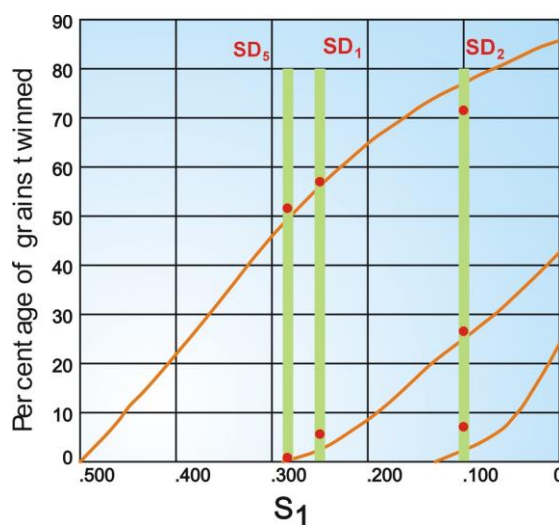
Vylepšení metody Laurenta a Lacomba představuje práce Rochera et al. (2004). Hlavní rozdíl představuje složitější vícenásobná separace dat. Tenzor druhé a další fáze je aplikován také na homogenní soubor dat předešlých fází a jsou vybrány kompatibilní lamely i z těchto fází, protože dvojčatné lamely mohou být i vícekrát aktivovány. Takto vytvořený nový soubor dat je použit pro další optimalizaci hledaného tenzoru, čímž se celá procedura zpřesňuje (obr. 3.14).



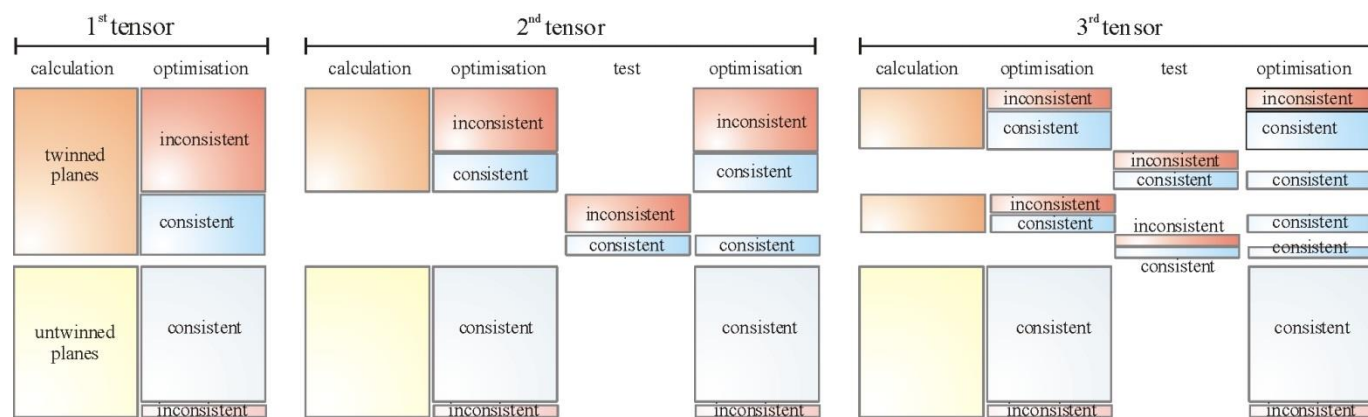
Obr. 3.11: Klasifikace dvojčatných systémů podle tab. 3.1 pro jeden ze 100–1000 aplikovaných tenzorů (Tournieret & Laurent 1990).



Obr. 3.12: Procentuální vyjádření kompatibilních zdvojčatělých (tlustá čára) a nezdvojčatělých ploch v závislosti na τ_s . Červená čára označuje hodnotu τ_s pro „best fit“ tenzor, který je kompatibilní pro 75% zdvojčatělých lamel a je nekompatibilní pouze pro 2% nezdvojčatělých ploch. Tlustá čárkovaná čára je pro nekompatibilní plochy (Lacombe & Laurent 1996).



Obr. 3.13: Srovnání výsledků metody Laurenta a Lacomba (červené tečky) s metodou Jamisona a Spanga (1976). Procentuální zastoupení zrn s jedním, dvěma a třemi zdvojčatělými systémy ve třech zkoumaných vzorcích odpovídají vztahům odvozeným Jamisonem a Spangem (Laurent et al. 1990).



Obr. 44: Schéma výpočtu modifikovanou metodou total-search podle Rochera et al. (2004). Best-fit tenzor druhé fáze je testován i na homogenním souboru dat první fáze a je provedena druhá optimalizace zahrnující i kompatibilní lamely ze souboru první fáze. Pro třetí tenzor je postup obdobný s tím rozdílem, že se testuje se i na homogenních souborech dat z první a druhé fáze.

4. Poznámky k metodice a diskuse

4.1 TwinCalc

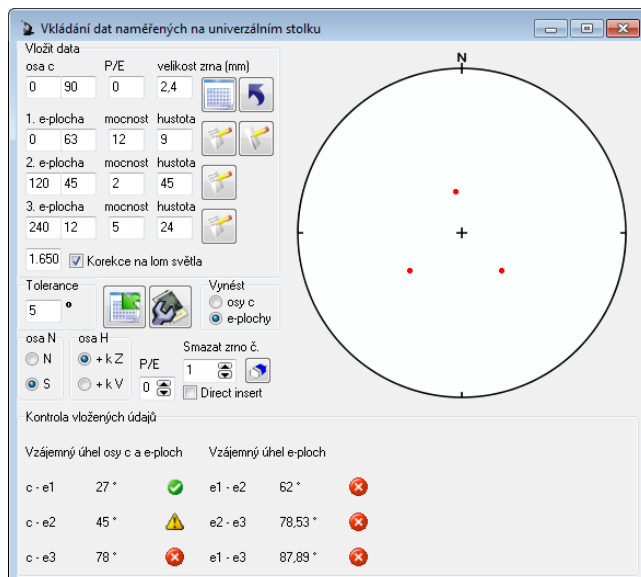
Pro účely napjatostní analýzy a testování byl pro platformu Windows v programovacím prostředí Delphi v jazyce Object Pascal vytvořen program TwinCalc (www.eltekto.cz). Zatím poslední verze programu (1.4.7) využívá grafické knihovny GR 32 (www.graphics32.org), která podporuje antialiasing bitmap (oproti standardní grafické knihovně Delphi umí objekty vykreslit „hladké“), a podporuje multithreading, tedy využití veškeré kapacity vícejádrových procesorů (umí pro výpočty využít až 8 jader CPU). Program TwinCalc umí provést napjatostní analýzu všemi výše popsanými metodami a také deformační analýzu metodou Groshonga et al. (Groshong 1972, Groshong et al. 1984b). Při tvorbě programu bylo dbáno jak na grafickou úpravu uživatelského rozhraní a výstupů, tak na intuitivnost ovládání.

Vstupními daty TwinCalcu jsou měření na univerzálním stolku (obr. 4.1). Při vkládání dat je zavedena korekce na použitý segment (např. Fediuk 1961), data jsou metodou nejmenších čtverců ortogonalizována a jsou dopočteny nezdvojitelné plochy. V případě zcela nezdvojitelných zrn lze jejich orientaci zadat pomocí optické osy *c* a orientace štěpné plochy *r*. TwinCalc také určí vzájemné úhly zadávaných prvků a upozorní uživatele, pokud je chyba větší než povolená odchylka, anebo pokud se podle úhlu jedná o štěpnou plochu (k záměně za mikrolamelu může snadno dojít).

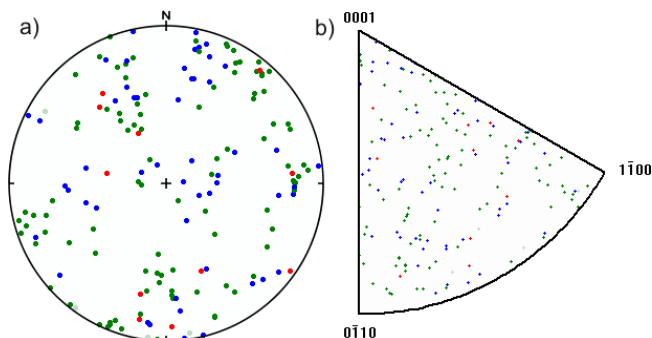
Pro zobrazení dat jsou standardně používány bodové diagramy v geografických osách („pole figure“ – PF; obr. 4.2a). Alternativně mohou být použity tzv. inverse pole figures (IPF; zobrazení orientace v krystalografických osách; vzhledem k symetrii kalcitu stačí pouze 1/6 diagramu; obr. 4.2b), které se používají pro analýzu přednostní orientace a deformačních mechanismů (Schwartz et al. 2000), a které mohou být také okonturovány. Uživateli je k dispozici také tabulka se vstupními daty.

Analýzy jednotlivými metodami jsou prováděny v samostatných formulářích pomocí tlačítek na hlavním panelu nástrojů. Na formulářích jsou také veškerá nastavení a ovládací prvky, aby byla práce s programem co nejjednodušší. Výsledky jsou prezentovány graficky (jako bitmapy v rozlišení 330x330 pixelů, tedy zhruba šířka jednoho sloupce dvousloupcové sazby na A4, jako vektorové obrázky ve formátu *.emf), a v tabulkách (obr. 4.3).

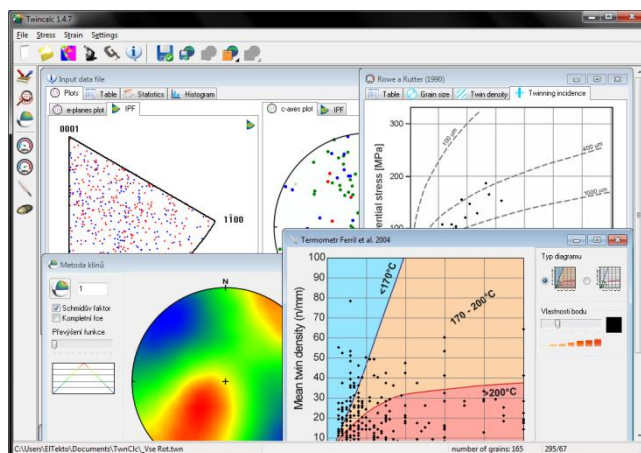
Pro účely testování byl v programu vytvořen také generátor dat. Data lze generovat uniformně (algoritmem Sato & Yamaji 2006) či jakkoliv přednostně orientovaně. Tento generátor byl použit k tvorbě testovacích souborů.



4.1: Formulář TwinCalcu pro vkládání měření na Fjodorovově stolku (pro kontrolu jsou ve spodní části zobrazeny úhly svírající vložené prvky; pokud je vzájemný úhel v rámci tolerance, objeví se zelené kolečko, pokud ne, objeví se kolečko červené; pokud je úhel svíraný osou *c* a některou z dvojčatných lamel roven $44.5^\circ \pm$ tolerance, objeví se výstražný trojúhelník).



4.2: Nejužívanější reprezentace orientace krystalografických prvků: a) pole figure – osy *c* v geografických osách (lambertova projekce, spodní polokoule); b) inverse pole figure – orientace os *c* v krystalografických osách (stereografická projekce, horní polokoule).



4.3: Ukázka výsledků některých analýz provedených TwinCalcem.

4.2 Metoda pravoúhlých klínů

Metodu pravoúhlých klínů vyvinuli Angelier a Mechler pro napjatostní analýzu zlomů (Angelier & Mechler 1977). Princip metody lze aplikovat i na dvojčatné lamely (např. Nemcok et al. 1999). Aby došlo ke zdvojitění, musí střížné napětí τ podél kluzného vektoru g v pozitivním směru přesáhnout kritickou hodnotu τ_c (např. De Bresser & Spiers 1997, Turner 1953), což znamená, že směr σ_1 musí ležet v pravoúhlém klínu, který neobsahuje optickou osu c , a σ_3 v klínu opačném (obr. 2.11). V průniku všech konstruovaných kompresních a extenzních klínů leží hledaná normálová napětí σ_1 a σ_3 (obr. 4.4).

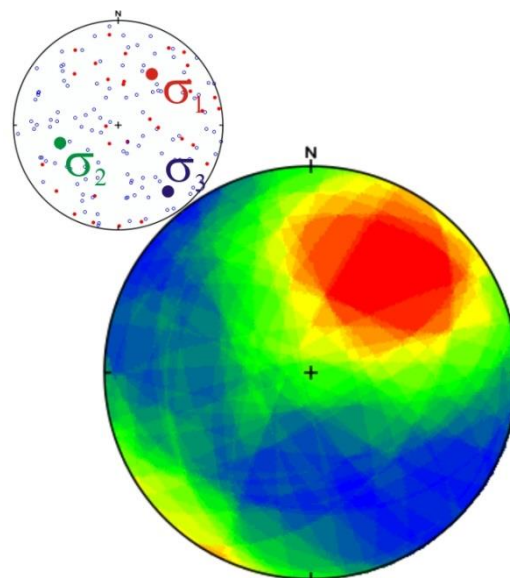
Metodu pravoúhlých klínů lze zpřesnit použitím Schmidova kritéria μ . Velikost střížného napětí na ploše e je úměrná orientaci napětí S :

$$\tau = \mu \cdot |\bar{S}| \quad 4.1$$

kde μ je Schmidovo kritérium (rovnice 2.1 a 2.2, obr. 2.11). Schmidovo kritérium nabývá hodnot 0–0.5. Nejvýhodněji orientované napětí má hodnotu Schmidova kritéria 0.5, svírá s normálou plochy e úhel 45° a leží uprostřed kompresního pravoúhlého klínu (obr. 4.5). Směrem k okrajům klínu se hodnota Schmidova kritéria zmenšuje (obr. 4.5; Handin & Griggs 1951). V případě, že je tvarový parametr Φ^1 tenzoru napjatosti blízký 0 (prolátní elipsoid), je napětí S paralelní se směrem σ_1 . Dále, čím větší úhel svírá normála plochy e se směrem σ_2 , tím menší úhel svírá napětí S se směrem σ_1 i za vyšších hodnot Φ . Z uvedeného vyplývá, že napětí σ_1 , které způsobilo zdvojitění lamely, leželo nejpravděpodobněji v centru pravoúhlého klínu a mělo Schmidovo kritérium blízke 0,5. Distribuci hodnot Schmidova kritéria (obr. 4.5) lze tedy použít jako pravděpodobnostní funkci (dále označována jako f_μ) orientace σ_1 a σ_3 (Rez & Melichar 2010), a to prostým sečtením hodnot pro všechny lamely (obr. 4.6). Směr σ_1 odpovídá maximu funkce, směr σ_3 minimu.

Již Laurant a Lacombe prokázali, že možná řešení napjatostní analýzy lze velmi efektivně omezit použitím nezdvojitěných dvojčatných systémů. Hledané napětí jednoduše nemohlo ležet v pravoúhlém kompresním klínu nezdvojitěného systému, a pokud ano, tak bylo jím vyvolané střížné napětí pro zdvojitění nedostatečné. Hodnoty Schmidova kritéria se v případě nezdvojitěných systémů odečítají (obr. 4.6; Rez & Melichar 2010).

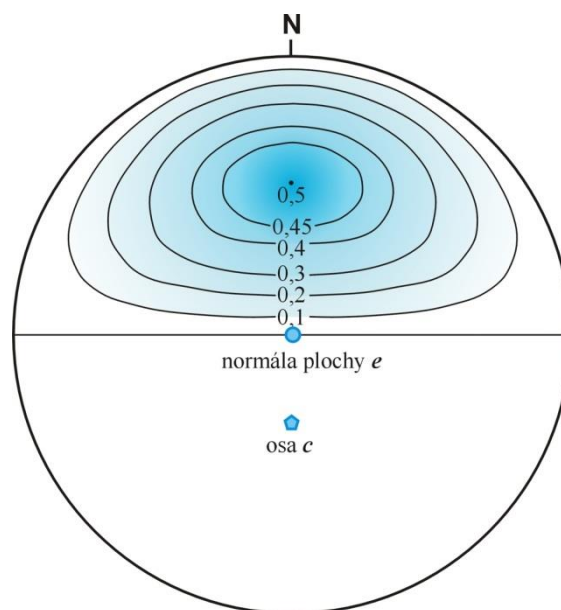
Diagram distribuce funkce f_μ neodráží pouze orientaci hlavních normálových napětí či vícefázovost deformace, ale také tvarový parametr tenzoru napjatosti. Navzdory předpokladu, že směry napětí S jsou paralelní se směrem hlavně prolátních elipsoidů a výsledná funkce f_μ by měla



Obr. 4.4: Příklad použití metody pravoúhlých klínů na generovaných datech (orientace pólů zdvojitěných lamel a orientace hlavních normálových napětí jsou na bodovém diagramu vlevo nahoře). σ_1 bude ležet v červené oblasti, σ_3 v oblasti modré.

preferovat právě tyto napjatosti, reaguje funkce f_μ velmi dobře i na oblátní tenzory napjatosti (obr. 4.7).

Tato metoda je poněkud robustní a získaná maxima a minima funkce f_μ jsou neostrá (a tudíž mohou mít problém rozlišit dvě napjatostní fáze od jedné s oblátním tenzorem napjatosti). Pro prvotní a velmi rychlé zhodnocení analyzovaného souboru měření a kontrolu výsledků jiných metod se však hodí velmi dobře.



Obr. 4.5: Distribuce velikosti Schmidova kritéria μ v kompresním pravoúhlém klínu (Handin & Griggs 1951).

¹ $\Phi = (\sigma_2 - \sigma_3) / (\sigma_1 - \sigma_3)$

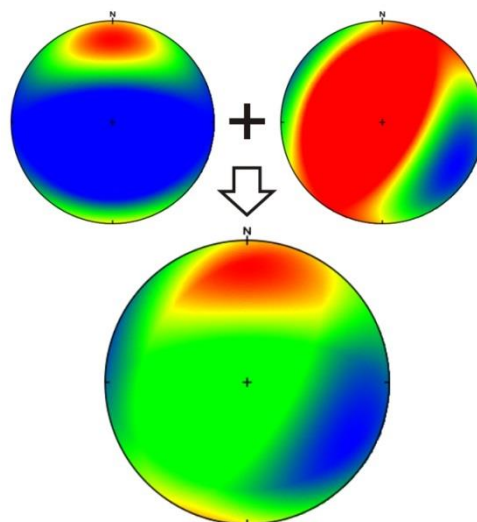
4.3 Metoda úplného prohledání

Relevantnost inverzní metody autorů Lacomba a Laurenta byla ověřena samotnými autory na experimentálních datech (Laurent et al. 1990). Nicméně podrobné testování odhalilo některé její nedostatky (Rez & Melichar 2010). Jedná se především o dva vzájemně propojené problémy: množství testovaných tenzorů a vlastní penalizační funkci.

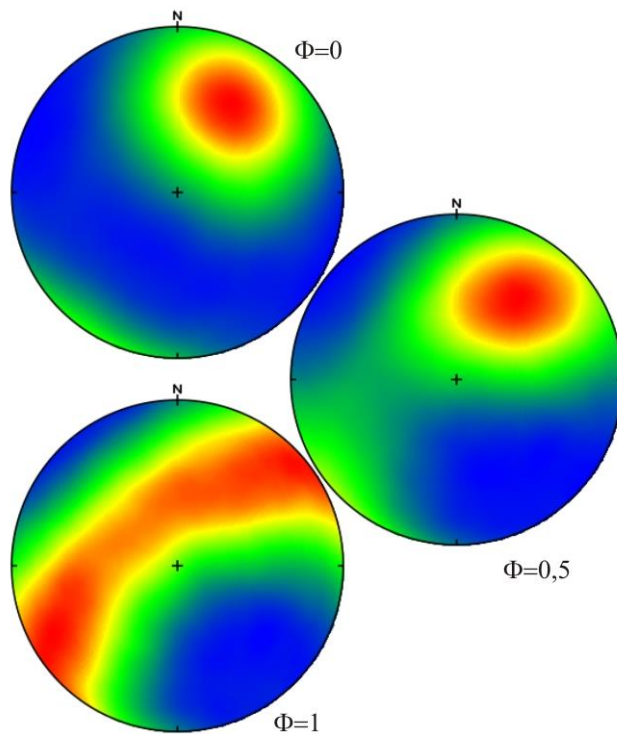
Analýza založená na cca 1000 náhodně generovaných redukováných tenzorech napjatosti následovaná optimalizací nalezeného tenzoru prakticky pokaždé nalezne řešení, které ovšem vzhledem k malému množství testovaných tenzorů ani zdaleka nemusí odpovídat realitě. V případě jednofázově deformovaného agregátu, kdy má penalizační funkce pouze jedno minimum, mohou být výsledky reálné, i když nemusí být zcela přesné. Pokud byla deformace vícefázová, má penalizační funkce několik minim. Může se tedy snadno stát, že algoritmus nalezne falešné minimum, které vznikne „kombinací“ několika minim. Zjevná je také neopakovatelnost řešení. Tyto nevýhody lze snadno vyřešit systematickou analýzou předem stanoveného, početného a pokaždé stejného souboru tenzorů napjatosti. TwinCalc umožňuje parametry kroku prohledávání směrů hlavních normálových napětí libovolně nastavit, a to až do kroku 1° (tedy pro jeden směr σ_1 lze analyzovat až 180 možných směrů σ_2 , respektive σ_3). Tvarový parametr Φ má pevně daný krok 0,1. Pro jeden směr σ_1 analyzuje TwinCalc až 1980 tenzorů napjatosti. Celkem lze tedy analyzovat až 64 152 000 redukováných tenzorů napjatosti ($360 \times 90 \times 180 \times 11$).

Výsledky analýzy metodou Laurenta a Lacomba lze alespoň částečně zkontrolovat za pomoci grafů τ_s/I_t (tedy graf kumulativní četnosti velikosti střížného napětí na zdvojitěných a nezdvojitěných plochách; obr. 3.12). Tímto způsobem lze pouze značně omezeně potvrdit vhodnost vybraného tenzoru napjatosti. Pro kontrolu reálnosti výsledků je ovšem výhodné mít možnost vizualizovat hodnoty penalizační funkce pro všechny analyzované tenzory napjatosti a ověřit její chování v 9D prostoru napjatosti², respektive v jeho 5D podprostoru, který pro tyto účely zcela postačuje. Protože hledáme tenzor napjatosti s minimální hodnotou penalizační funkce, můžeme pro jednoduchost vizualizace zobrazovat pouze minimální hodnotu funkce pro skupinu tenzorů napjatosti s jedním společným normálovým napětím, např. σ_1 , a v **distribučním diagramu** ji kódovat barvou (obr. 4.8). Je-li krok prohledávání 1° , lze v distribučním diagramu každým směrem zobrazit nejnížší hodnotu funkce pro 1980 tenzorů

napjatosti (obr. 4.8). Pro ještě lepší pochopení chování penalizační funkce je výhodné zobrazit v distribučním diagramu hodnoty funkce pouze pro určitý tvarový parametr Φ (v TwinCalcu po 0,1; obr. 4.9). Výsledná sekvence 11 diagramů umožňuje vytvořit si poměrně přesnou představu jak o napjatostním poli, kterému byl zkoumaný agregát vystaven, tak také o vícefázovosti deformace.



Obr. 4.6: Konstrukce distribučního diagramu funkce f_μ pro jednu zdvojitěnou lamelu (0/63) a jeden nezdvojitěný systém (120/63). σ_1 odpovídá maximu funkce (červená), směr σ_3 minimu (modrá).



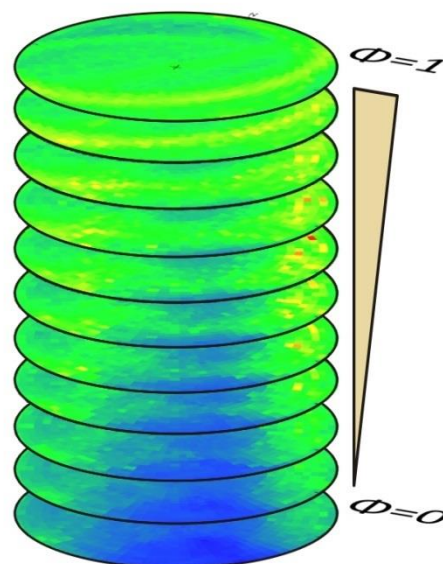
Obr. 4.7: Distribuční diagramy funkce f_μ pro numericky generovaný soubor zrn deformovaný prolátním, trojosým a oblátním tenzorem napjatosti (směry hlavních normálových napětí i orientace zrn stejná jako na obr. 4.4).

² tzv. σ -space, definován Fryem (2001) jako 6D prostor (symetrického tenzoru napjatosti). Melichar a Kernstocková (2010) však poukázali na zjevné geometrické výhody používání 9D napjatostního prostoru.

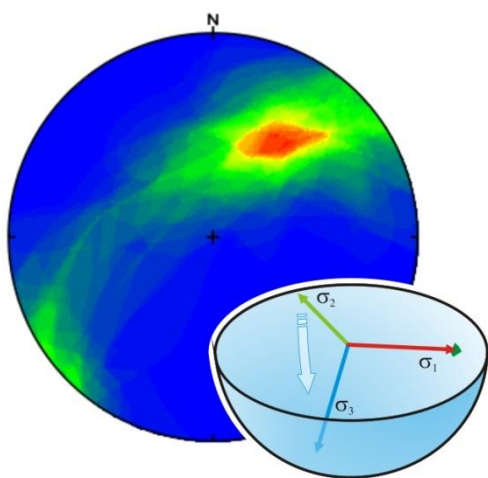
Penalizační funkce f (3.13; dále bude označována jako f_L) je minimalizační funkcí. Hledáme tedy tenzor napjatosti s nejnižší hodnotou funkce f_L . Z toho ovšem pramení zásadní problém. Existuje totiž celá řada tenzorů napjatosti s nulovou nebo velmi nízkou hodnotou penalizační funkce f_L , které ovšem nerepresentují reálnou napjatost (obr. 4.10). Jedná se o napětí většinou tak malá nebo tak špatně orientovaná, že nemají žádné kompatibilní zdvojitěné lamely, a tedy nulové τ_a , a žádné nebo jen minimální množství nekompatibilních nezdvojitěných ploch. Nalezneme tedy tenzor napjatosti, který určitě nezpůsobil deformaci agregátu. Taková řešení je nutné při analýze odfiltrout podmínkou v algoritmu.

Za úvahu také stojí použití τ_a pro výpočet penalizační funkce a také velikosti diferenciálního napětí. τ_a je nejmenší velikost střížného napětí podél zdvojitěné lamely směřově kompatibilní se zkoumaným tenzorem napjatosti. Lamely s nejnižší hodnotou τ_a jsou nejméně vhodně orientované. Procedura založená na velikosti τ_a hledá tedy takový tenzor napjatosti, který reaktivoval co největší počet dvojčatných lamel. Pokud je agregát deformován vícefázově, může být zdánlivě vhodně orientována i lamela zdvojitěná v jiné fázi. Výsledná hodnota τ_a může být tím pádem mnohem nižší, než byla ve skutečnosti. To má za následek vysoké výsledné hodnoty diferenciálního napětí (3.6) a s tím spojené velké množství nekompatibilních nezdvojitěných ploch (tab. 3.1, obr. 3.11). V praxi se ukazuje, že v separovaném souboru homogenní fáze dosahují nekompatibilní nezdvojitěné plochy až poloviny počtu kompatibilních zdvojitěných lamel (Rez 2010). Některé nekompatibilní nezdvojitěné plochy lze zajisté přisoudit jak nehomogenní distribuci napjatosti v agregátu, tak hlavně chybám měření na univerzálním stolku, nicméně

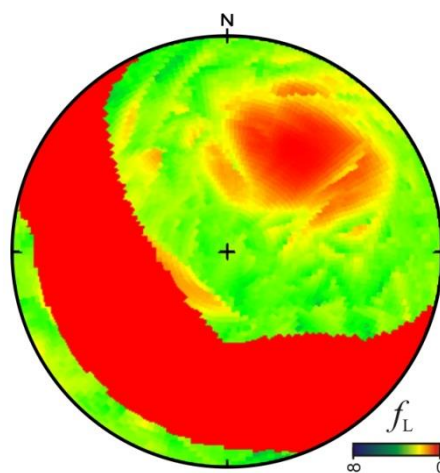
drtivá většina je pravděpodobně přiřazena separované fázi kvůli příliš vysokému diferenciálnímu napětí (což vyplývá i z obr. 3.11). Z tohoto hlediska je výhodnější místo τ_a použít nejvyšší hodnotu střížného napětí τ_j (obr. 3.11) na nezdvojitěných plochách, označme si jej např. τ_b . Při použití τ_b , které je v ideálním případě velmi blízké τ_a (většinou bývá vyšší), je diferenciální napětí výsledného tenzoru napjatosti nižší, takže separovaný homogenní soubor neobsahuje nekompatibilní nezdvojitěné plochy, obsahuje však také menší počet kompatibilních zdvojitěných lamel. Použití τ_b je velmi citlivé na chybu měření, protože nekompatibilní nezdvojitěné plochy s velkou chybou měření mohou podstatně zvýšit τ_b a tím dokáží „vyblokovat“ správné řešení. Reálná hodnota τ_c leží pravděpodobně mezi τ_a a τ_b , ale je numericky nezjistitelná



Obr. 4.9: Řezy penalizační funkce f pro tvarové parametry $\Phi = 0$ až $\Phi = 1$.



Obr. 4.8: Příklad distribučního diagramu penalizační funkce f a princip jeho tvorby. Každý směr představuje nejvhodnější tenzor napjatosti z 1980 tenzorů se společným směrem σ_1 . Velikost penalizační funkce je kódována barvou (nejvhodnější tenzory červeně, nejméně vhodné modře).



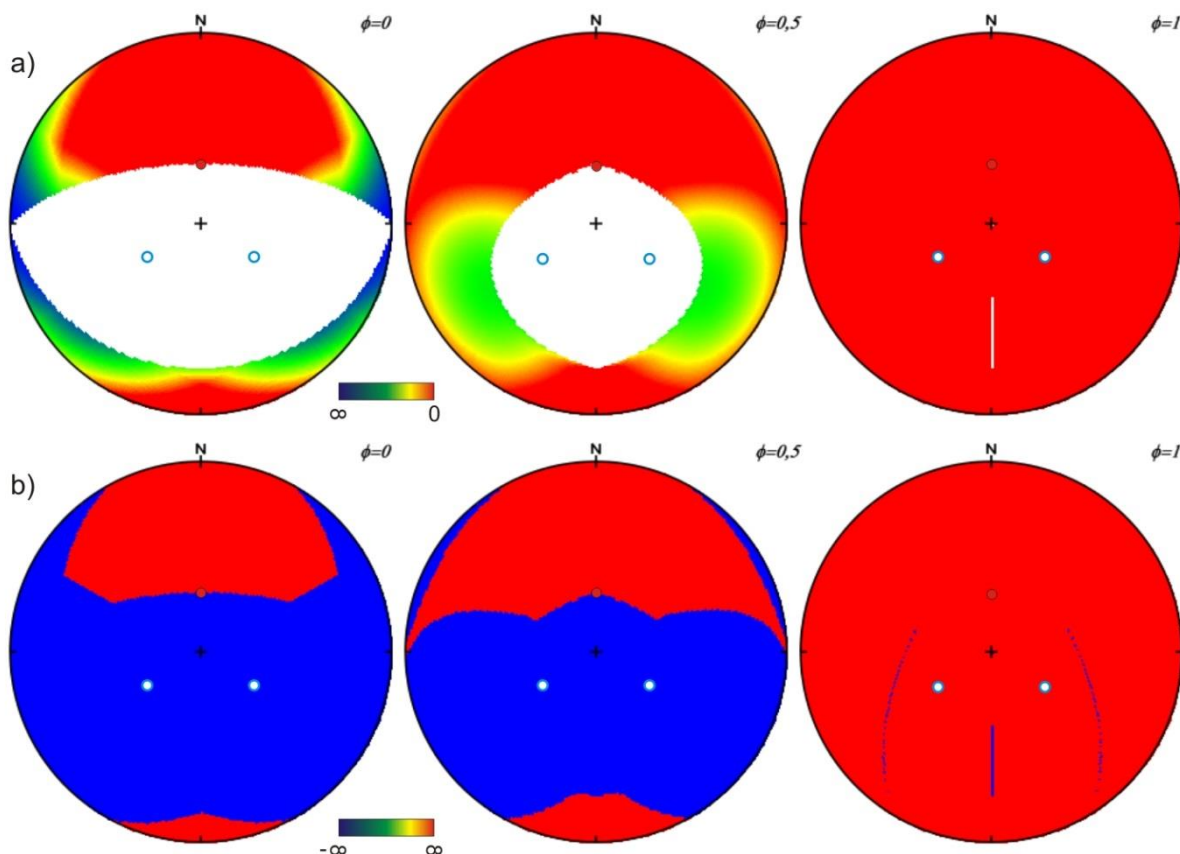
Obr. 4.10: Příklad distribučního diagramu f_L bez odfiltrování špatných řešení (stejná vstupní data jako na obr. 4.4). Správné řešení vytváří shluk kolem směru σ_1 použitého při generování souboru, špatná řešení vytváří pásmovec kružnici kolmo na směr σ_1 .

vzhledem k chybě měření, nehomogenní distribuci napjatosti a polyfázovosti deformace. Využití τ_b pro výpočet f_L není možné, protože tímto způsobem automaticky vynecháváme řešení s nekompatibilními nezdvojčatělými plochami, a proto by všechny hodnoty funkce f_L byly nulové.

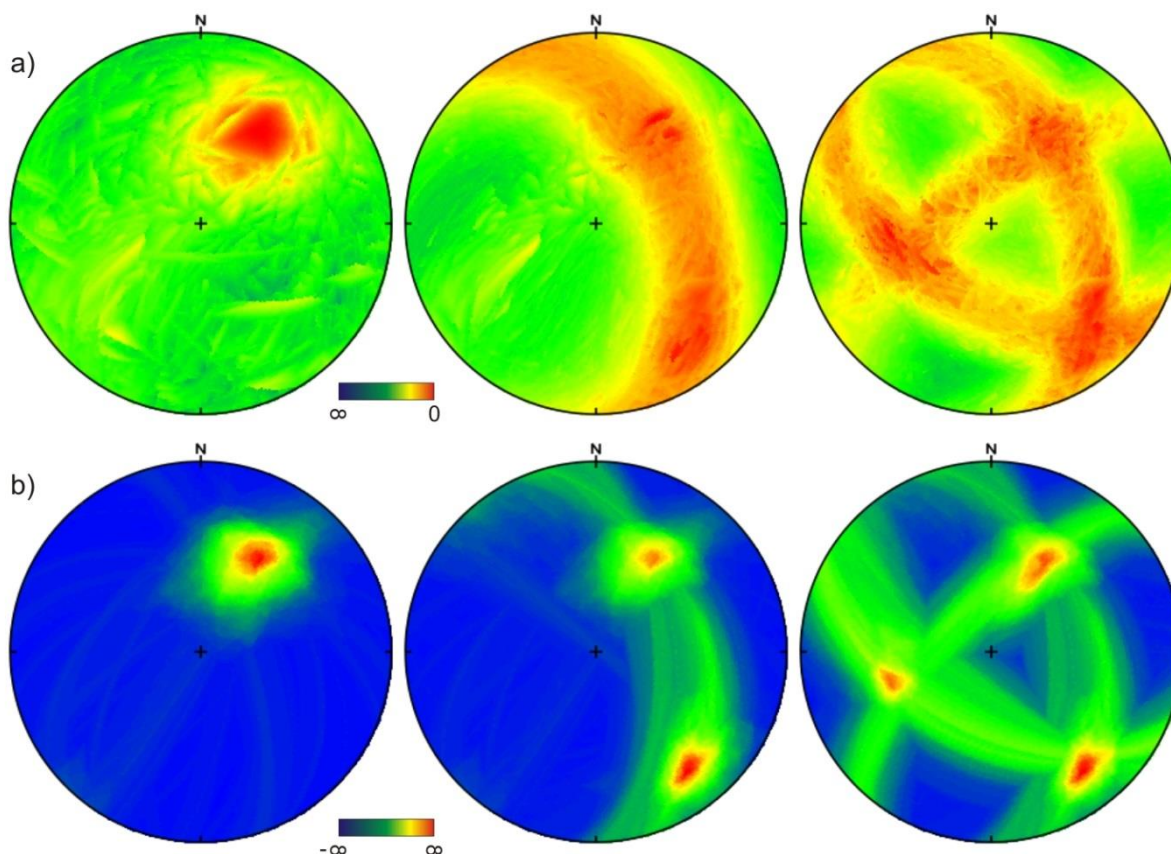
Obecným jevem při napjatostní analýze založené na dvojčatění kalcitu metodami hledajícími best-fit tenzor pomocí penalizační funkce je „slynutí“ maxim (minim) penalizační funkce dvou blízkých napjatostních fází, protože může lehce nastat situace, že směs vhodných lamel (zlomů) ze dvou homogenních fází se numericky jeví jako lepší řešení. Na rozdíl od napjatostní analýzy zlomů, jejíž řešení leží v nadrovině 9D σ -prostoru kolmé k devítrozměrnému vektoru zlomu (Melichar & Kernstocková 2010), leží možné řešení napjatostní analýzy založené na dvojčatění kalcitu v σ -poloprostoru omezeném soustavou lineárních nerovnic sestavených na základě vztahu 1.1 pro všechny zdvojčatělé lamely. To je způsobeno krystalograficky daným kluzným vektorem g , podél něhož dochází ke dvojčatění. K pohybu na ploše zlomu a vzniku rýhování dochází vždy ve směru maximálního střížného napětí – normála plochy zlomu, rýhování i napětí S , které reaktivaci zlomu způsobilo, jsou koplanární. U dvojčatných ploch nemusí napětí S ležet v jedné rovině s normálou plochy e a kluzným vektorem g ,

stačí, když je složka střížného napětí τ podél vektoru g větší než τ_c (1.1). Z toho pramení menší schopnost odlišit blízké napjatostní fáze. Penalizační funkce tento „vrozený handicap“ mechanického dvojčatění prohlubuje. Je tedy třeba volit penalizační funkci, která produkuje co nejostřejší maxima (minima), aby ke slynutí maxim (minim) docházelo co nejméně.

Výsledky testování funkce f_L jsou na obr. 4.11a a 4.12a. Jedná se o jedno vertikálně orientované zrno s jednou zdvojčatělou lamelou a soubor tří numericky generovaných souborů dat (bodové diagramy vstupních dat jsou na obr. 4.13, parametry použité napjatosti v tab. 4.1). Jak je z diagramů patrné, jsou minima velmi neostrá a rozpadající se v dílčí minima (i když se výsledné tenzory v případě numericky generovaných souborů dat poměrně dobře shodují s tenzory použitými pro generování dat). Z obr. 4.14a je však patrné, že pokud je agregát deformován blízkými tenzory napjatosti, dochází k výše diskutovanému „slynutí“ fází – výsledkem analýzy je tenzor napjatosti, který je jakýmsi průměrem obou tenzorů, kterými byl agregát deformován (směr σ_1 leží mezi směry σ_1 použitými při tvorbě souboru dat).



Obr. 4.11: Distribuční diagramy penalizačních funkcí f_L (a) a f_R (b) pro jedno vertikálně orientované zrno s jednou zdvojčatělou lamelou (červené kolečko) a dvěma nezdvojčatělými plochami (modrý kroužek s bílou výplní) pro tvarové parametry $\Phi=0$, $\Phi=0.5$ a $\Phi=1$.



Obr. 4.12: Distribuční diagramy penalizačních funkcí f_L (a) a f_R (b) pro tři numericky generované soubory dat deformované jednou, dvěma a třemi napjatostními fázemi (vstupní data na obr. 4.13, parametry tenzorů v tab. 4.1).

	σ_1	σ_2	σ_3
F_1	34/39 50 MPa	255/43 15 MPa	143/22 0 MPa
F_2	143/22 50 MPa	34/39 15 MPa	255/43 0 MPa
F_3	255/43 50 MPa	143/22 15 MPa	34/39 0 MPa

Tab. 4.1: Přehled napjatostí, které byly použity při generování souborů použitých k testování TwinCalcu a použité metodiky.

Výsledky testování jednoznačně vedou k potřebě nové penalizační funkce, protože jakkoliv jsou možnosti metody již v teoretické rovině limitované, není rozhodně využít její potenciál v celé šíři. Poněkud lepších výsledků lze dosáhnout použitím penalizační funkce f_R , která je váženým součtem počtu kompatibilních zdvojitých a nezdvojitých ploch mínus počet nekompatibilních nezdvojitých ploch:

$$f_R = n_{CT} \frac{n_U}{n_{TU}} + n_{CU} \frac{n_T}{n_{TU}} - n_{IU} \quad 4.2$$

kde

n_{CT} – počet kompatibilních zdvojitých lamel

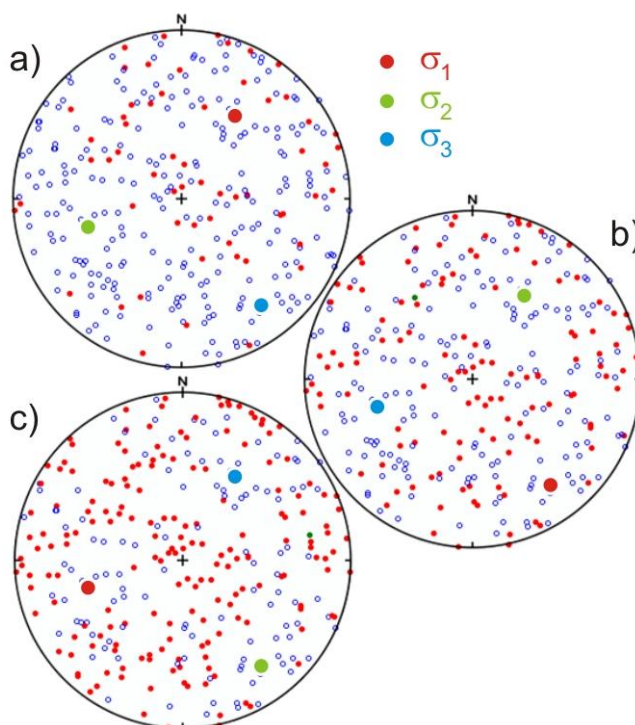
n_{CU} – počet kompatibilních nezdvojitých ploch

n_{IU} – počet nekompatibilních nezdvojitých ploch

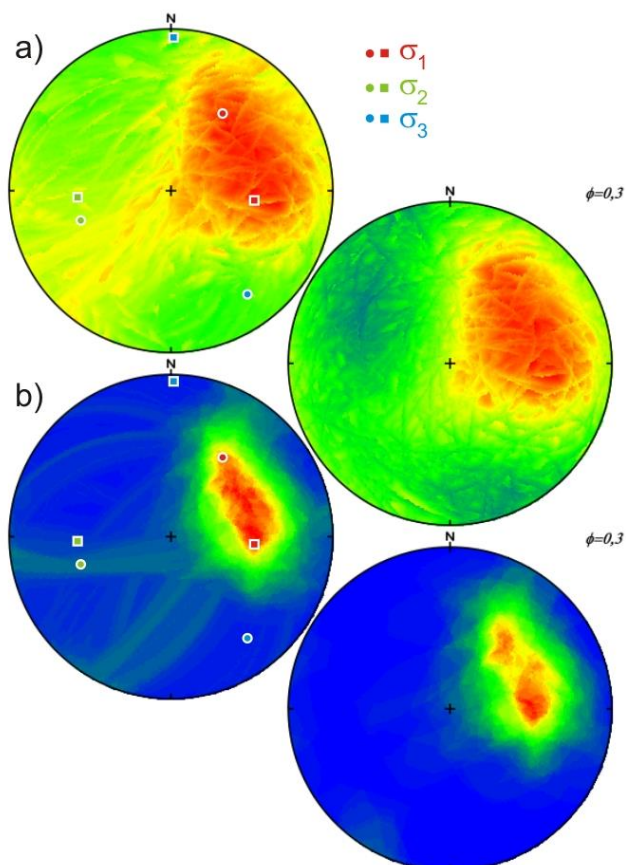
n_U – počet nezdvojitých ploch

n_T – počet zdvojitých lamel

n_{TU} – počet všech lamel

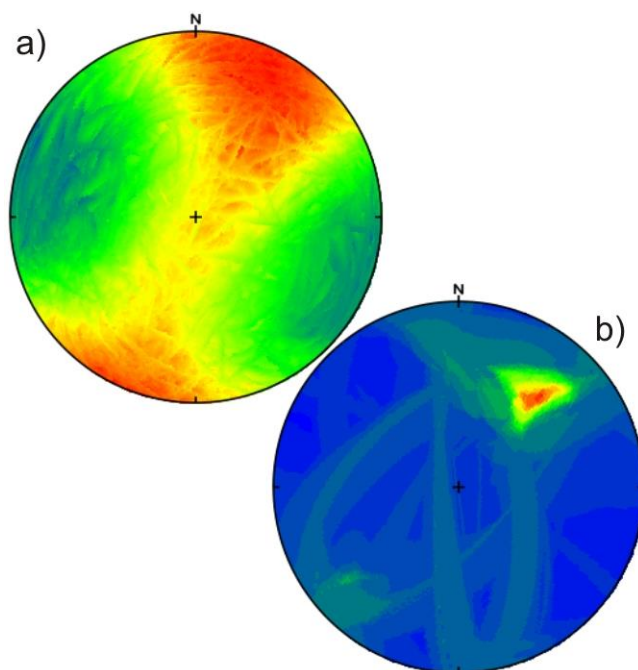


Obr. 4.13: Bodové diagramy numericky generovaných dat použitých pro testování - stejný soubor zrn deformovaný jednou (a), dvěma (b) a třemi (c) fázemi (tab. 4.1).



Obr. 4.14: Distribuční diagramy funkcí f_L (a) a f_R (b) pro numericky generovaný soubor zrn deformovaný dvěma blízkými fázemi (diferenciální napětí obou fází bylo 50 MPa, tvarový parametr byl 0,3). Orientace hlavních normálových napětí je vyznačena puntíky (F_1) a čtverečky (F_2).

Základní distribuční diagramy funkce f_R jsou na obr. 4.11b a 4.12b. f_R je maximalizační funkcí – hledáme tenzor s co nejvyšší hodnotou penalizační funkce, tedy tenzor s nejvyšším počtem kompatibilních zdvojitých a nezdvojitých ploch a s co nejmenším počtem nekompatibilních nezdvojitých ploch. Není tedy třeba filtrovat špatná řešení, protože nemohou být zaměněna za řešení správná. Další její výhodou je, že nevyužívá napětí podél nekompatibilních nezdvojitých ploch, takže k jejímu výpočtu lze použít τ_b místo τ_a (v případě použití τ_b pochopitelně odpadá poslední člen rovnice 4.2). Díky tomu lze u funkce f_R dosáhnout velmi ostrých maxim a tím také větší rozlišitelnosti blízkých napjatostních fází. Velmi dobře to dokumentuje obr. 4.14. Z diagramu je sice patrné, že také dochází k diskutovanému „slinutí“ maxim (protože soubor dat byl záměrně generován na samotné hranici rozlišitelnosti funkce f_R), takže výpočet také nalezne jeden „průměrný“ tenzor místo dvou blízkých, ale na řezu $\Phi=0,3$ jsou jasně patrná maxima korespondující se směry σ_1 tenzorů použitých při generování souboru. Kontrolou distribučních diagramů lze takové situace rozpoznat a lze „ručně“ opravit nalezené řešení. Tento postup sice není ideální a cílem metod napjatostní analýzy je tyto



Obr. 4.15: Srovnání distribučních diagramů funkcí f_L (a) a f_R (b) na reálných datech z lomů Mokrá.

subjektivní zásahy eliminovat, nicméně v případech velmi blízkých napjatostí je takový postup opodstatněný.

Výhody použití τ_b pro výpočet penalizační funkce jsou zřejmé. Nevýhody však také. Jak vyplývá z předcházející diskuse, hlavním limitem použití τ_b pro analýzu jsou právě nekompatibilní nezdvojitelné plochy. Po několika cyklech prohledávání a separace není již možno nalézt tenzor bez nekompatibilních nezdvojitých ploch a analýzu je třeba ukončit, i když v souboru dat zůstává ještě vysoké množství zdvojitých lamel. Při použití τ_a jsou sice téměř všechny zdvojitelné lamely separovány do homogenních souborů, ovšem za cenu vysokého počtu nekompatibilních nezdvojitých ploch. Jak je již diskutováno výše, reálná hodnota τ_c se nachází někde mezi τ_a a τ_b , je ovšem numericky nejistitelná. Přijatelným východiskem je použití τ_b pouze pro výpočet penalizační funkce a optimalizace velikosti napětí nalezeného best-fit tenzoru místo použití τ_a nebo τ_b . Při optimalizaci se postupně zvyšuje diferenciální napětí nalezeného tenzoru (TwinCalc používá krok 1 MPa) a určí se tenzor s nejlepším poměrem kompatibilních zdvojitých nekompatibilních nezdvojitých ploch. Tenzor napjatosti je optimalizován na původním (kompletním) souboru dat, nikoliv na souboru dat používaném přímo při analýze, z něhož jsou při každém cyklu odseparovány zdvojitelné lamely kompatibilní s danou fází, protože dvojčatné lamely mohou být velmi snadno reaktivovány v několika napjatostních fázích a mohou tedy být kompatibilní s několika tenzory. Tímto způsobem se dosáhne přesnějších výsledků hlavně v pozdějších cyklech, pro které v souboru dat většinou zbývá relativně malé množství zdvojitých lamel.

5. Závěry

Reologické chování kalcitu je předmětem intenzivního studia již po celé generace a již od padesátých let minulého století je kalcit používán pro napjatostní analýzu. V současnosti je stále ještě nepoužívanější metoda totálního prohledávání (Etchecopar et al. 1981, Laurent et al. 1981, Rocher et al. 2003), která pro výběr nejvhodnějšího tenzoru napjatosti používá penalizační funkci.

V programovacím prostředí Delphi 7 byl vytvořen program TwinCalc (www.eltekto.cz), který umožňuje provádět analýzy všemi v literatuře dostupnými metodami. Jako vstupní data slouží měření z univerzálního stolku. Pro účely testování byl do TwinCalcu naprogramován generátor dat, který se při tvorbě této práce ukázal jako velmi užitečný. Z metodického hlediska velmi přínosné se ukázaly distribuční diagramy penalizačních funkcí, které nejenže umožnily kontrolu výsledků napjatostní analýzy, ale hlavně chování penalizační funkce v σ -prostoru v závislosti na různých typech souborů a tenzorů napjatosti, kterým byly vystaveny. Toto testování vytvořilo poměrně solidní teoretický základ pro kritické zhodnocení stávající metodiky, umožnilo její vylepšení a poskytlo odrazový můstek k dalšímu vývoji.

Metoda Laurenta a Lacomba je založena na výběru nejvhodnějšího, tzv. best-fit tenzoru ze souboru náhodně generovaných redukovaných tenzorů napjatosti pomocí penalizační funkce f_L . Testování ovšem odhalilo, že testovaný počet je nedostatečný. Pokud byl analyzovaný agregát deformován polyfázově, má výsledná funkce několik maxim (minim). Analýzou malého množství tenzorů můžeme lehce některá maxima minout, nebo kombinací několika maxim vytvořit maximum umělé. Takové výsledky mohou být přinejmenším zavádějící. Současná výpočetní technika umožňuje analýzu systematicky generovaného mnohamilionového souboru tenzorů napjatosti. Výsledná penalizační funkce je velmi detailně prokreslena a za použití distribučních diagramů penalizační funkce lze výsledky analýzy ověřit i vizuálně.

Pro výpočet penalizační funkce f_L a diferenciálního napětí nalezeného tenzoru napjatosti se využívá střížného napětí τ_a , což je nejnižší napětí podél zdvojitě lamely směrově kompatibilní s aplikovaným napětím S . Tato podmínka může být zavádějící, protože ne všechny směrově kompatibilní zdvojitě lamely musely být danou napjatostí aktivovány. Vypočtené napětí tedy může být mnohonásobně vyšší, než jaké bylo během deformace, což se projevuje vysokým procentem nekompatibilních nezdvojitě ploch v separovaném homogenním souboru dat. Alternativně lze použít τ_b , které je definováno jako nejvyšší střížné napětí podél nezdvojitě plochy

směrově kompatibilní s aplikovaným tenzorem napjatosti. Použitím tohoto napětí jsou automaticky blokovány tenzory s nekompatibilními nezdvojitě plochami (celkové diferenciální napětí je nižší, takže i počet kompatibilních zdvojitě lamel je nižší), avšak výsledky jsou velmi citlivé na chybná měření. Jedna nezdvojitě plocha s velkou chybou měření dokáže „vyblokovat“ správná řešení a algoritmus nenalezne řešení, i když v souboru dat zůstává ještě velké množství neseparovaných zdvojitě lamel. Nicméně již při měření na univerzálním stolku by měl uživatel kontrolovat chybu měření, např. přímo v TwinCalcu, který při vložení dat spočte úhly změřených prvků a jejich chybu. Zrna s vysokou chybou měření by neměla být do analýzy zahrnuta, čímž se nevýhoda použití τ_b značně zmírňuje. Reálná hodnota τ_c leží někde mezi τ_a a τ_b a lze se jí alespoň částečně přiblížit optimalizací diferenciálního napětí nalezeného tenzoru, aby separovaná fáze měla co nejvyšší poměr kompatibilních zdvojitě lamel a nekompatibilních nezdvojitě ploch.

Testování odhalilo některé nedostatky penalizační funkce f_L . Největším problémem je, že některé tenzory nemají řešení (nemají žádné kompatibilní zdvojitě lamely), a tak dosahují hodnoty $f_L = 0$, což vzhledem k tomu, že se jedná o minimalizační funkci, vede k záměně se správným řešením. Tyto tenzory je třeba během výpočtu filtrovat. Pro výpočet f_L také nelze použít τ_b , takže její maxima nejsou ostrá, což vede ke snížené schopnosti rozlišit blízké napjatosti. Mnohem ostřejší maxima má nově navržená penalizační funkce f_R , která je prostým váženým součtem kompatibilních lamel mínus nekompatibilní nezdvojitě plochy (4.2). Tato funkce využívá výhod τ_b a vzhledem k tomu, že je maximalizační, nemůže být jako best-fit tenzor vybrán tenzor bez řešení. Testování na numericky generovaných a reálných datech ukazuje výhody použití této penalizační funkce.

6. Literatura

- Angelier, J. & Mechler, P. 1977. Sur une méthode graphique de recherche des contraintes principales élagement utilisable en tectonique at séismologie: la méthode des diedres droits. *Bulletin de la Société Géologique de France* **19**(6), 1309–1318.
- Barber, D. J. 1977. Defect microstructures in deformed and recovered dolomites. *Tectonophysics* **39**, 193–213.
- Barber, D. J., Heard, H. C. & Wenk, H. R. 1981. Deformation of dolomite single crystals from 20–800°C. *Physics and Chemistry of Minerals* **7**, 271–286.
- Barber, D. J. & Wenk, H. R. 1979. Deformation twinning in calcite, dolomite, and other rhombohedral carbonates. *Physics and Chemistry of Minerals* **5**(2), 141–165.
- Baumhauer, H. 1879. Über künstliche Kalkspath-Zwillinge nach $\frac{1}{2}$ R. *Zeitschrift für Kristallographie* **3**, 558–591.
- Bestmann, M. & Prior, D. J. 2003. Intragranular dynamic recrystallization in naturally deformed calcite marble: diffusion accommodated grain boundary sliding as a result of subgrain rotation recrystallization. *Journal of Structural Geology* **25**, 1597–1613.
- Borg, I. & Handin, J. 1967. Torsion of calcite single crystals. *Journal of Geophysical Research* **72**, 641–669.
- Buerger, M. J. 1930. Translation gliding in crystals. *American Mineralogist* **15**, 45–64.
- Burkhard, M. 1993. Calcite twins, their geometry, appearance and significance as stress-strain markers and indicators of tectonic regime: a review. *Journal of Structural Geology* **15**, 351–368.
- Cahn, R. W. 1964. Survey of recent progress in the field of deformation twinning. In: *Deformation twinning* (edited by Reed-Hill, R. E., Hirth, P. J. & Rogers, H. C.). Gordon and Breach Science Publishers.
- De Bresser, J. H. P. 1991. Intracrystalline deformation of calcite. *Geologia Utraiectina* **79**, 191.
- De Bresser, J. H. P. 1996. Steady state dislocation density in experimentally deformed calcite materials: single crystals vs. polycrystals. *Journal of Geophysical Research* **101**, 189–201.
- De Bresser, J. H. P. & Spiers, C. J. 1990. High-temperature deformation of calcite single crystals by r+ and f+ slip. In: *Deformation Mechanisms, Rheology and Tectonics, Geological Society special publication* (edited by Knipe, R. J. & Rutter, E. H.) **54**, 285–298.
- De Bresser, J. H. P. & Spiers, C. J. 1993. Slip systems in calcite single crystals deformed at 300–800°C. *Journal of Geophysical Research* **98**, 6397–6409.
- De Bresser, J. H. P. & Spiers, C. J. 1997. Strenght characteristics of the r, f and c slip systems in calcite. *Tectonophysics* **272**, 1–23.
- Dietrich, D. & Song, H. 1984. Calcite fabrics in a natural shear environment, the Helvetic Nappes of western Switzerland. *Journal of Structural Geology* **6**, 19–32.
- Dove, H. W. 1860. Optische Notizen. *Annalen der Physik* **110**, 286–290.
- Etchecopar, A. 1884. Etude des tats de contrainte en tectonique cassante et simulation de déformations plastiques (approche mathématique). Thesis, Univ. Sci. Technique du Languedoc, Montpellier.
- Etchecopar, A., Vasseur, G. & Daignieres, G. 1981. An inverse problem in microtectonics for determination of stress tensors from fault striation analysis. *Journal of Structural Geology* **3**, 51–65.
- Evans, B. & Dunne, W. M. 1991. Strain factorization and partitioning in the North Mountain thrust sheet, Central Appalachians, U.S.A. *Journal of Structural Geology* **13**, 21–35.
- Fairbairn, H. W. & Hawkes, N. E. 1941. Dolomite orientation in deformed rocks. *American Journal of Science* **239**, 617–632.
- Fediuk, F. 1961. *Fjodorovova mikroskopická metoda*. Nakladatelství Československé akademie věd, Praha.
- Ferrill, D. A. 1991. Calcite twin widths and intensities as metamorphic indicators in natural low-temperature deformation of limestone. *Journal of Structural Geology* **13**, 667–675.
- Ferrill, D. A. 1998. Critical re-evaluation of differential stress estimates from calcite twins in coarse-grained limestone. *Tectonophysics* **285**, 77–86.
- Ferrill, D. A., Morris, A. P., Evans, M. A., Burkhard, M., Groshong, R. H. & Onasch, C. M. 2004. Calcite twin morphology: a low-temperature deformation geothermometer. *Journal of Structural Geology* **26**, 1521–1529.
- Friedel, G. 1926. *Leçons de Cristallographie*. Berger-Levzault, Paris.
- Friedman, M. & Heard, H. 1974. Principal stress ratios in Cretaceous limestones from Texas Gulf Coast. *Bulletin of the American Association of Petroleum Geologists* **50**, 71–78.
- Fry, N. 2001. Stress space: striated faults, deformation twins, and their constraints on paleostress. *Journal of Structural Geology* **23**, 1–9.
- Griggs, D. T., Turner, F. J. & Heard, H. C. 1960. Deformation of rocks at 500–800°C. *Geological Society of America Memoirs* **79**, 39–105.
- Groshong, R. H. 1972. Strain calculated from twinning in calcite. *Geological Society of America Bulletin* **82**, 2025–2038.
- Groshong, R. H. 1974. Experimental test of least-squares strain gage calculation using twinned calcite. *Geological Society of America Bulletin* **58**, 1855–1864.
- Groshong, R. H. 1988. Low-temrerature deformation mechanisms and their interpretation. *Geological Society of America Bulletin* **100**, 1329–1360.
- Groshong, R. H., Pfiffner, O. A. & Pringle, L. R. 1984a. Strain partitioning in the Helvetic thrust belt of eastern Switzerland from the leading edge to the internal zone. *Journal of Structural Geology* **6**, 5–18.
- Groshong, R. H., Teufel, L. W. & Gasteiger, C. 1984b. Precision and accuracy of the calcite strain gage technique. *Geological Society of America Bulletin* **95**, 357–363.

- Handin, J. & Fairbairn, H. W. 1955. Experimental deformation of Hasmark dolomite. *Geological Society of America Bulletin* **66**, 1257-1274.
- Handin, J. W. & Griggs, D. 1951. Deformation of Yule marble. Part II. Predicted fabric changes. *Geological Society of America Bulletin* **62**, 863–886.
- Heilbronner, R. 2000. Optical Orientation Imaging. *Journal of the Virtual Explorer* **2**.
- Higgs, D. V. & Handin, J. W. 1959. Experimental deformation of dolomite single crystal. *Geological Society of America Bulletin* **70**, 245–278.
- Jamison, W. R. & Spang, J. H. 1976. Use of calcite twin lamellae to infer differential stress. *Geological Society of America Bulletin* **87**, 868–872.
- Johnsen, A. 1902. Beigungen und Translationen. *Neues Jahrbuch für Mineralogie* **2**, 133-153.
- Klassen-Neklyudova, M. V. 1964. *Mechanical twinning of crystals*. Consultants Bureau, New York.
- Lacombe, O. & Laurent, P. 1996. Determination of deviatoric stress tensors based on inversion of calcite twin data from experimentally deformed monophase samples: preliminary results. *Tectonophysics* **255**, 189–202.
- Laurent, P., Bernard, P., Vasseur, G. & Etchecopar, A. 1981. Stress tensor determination from the study of e-twins in calcite. A linear programming method. *Tectonophysics* **78**, 651–66.
- Laurent, P., Kern, H. & Lacombe, O. 2000. Determination of deviatoric stress tensors based on inversion of calcite twin data from experimentally deformed monophase samples. Part II. Axial and triaxial stress estimates. *Tectonophysics* **327**, 131–148.
- Laurent, P., Tournieret, C. & Laborde, O. 1990. Determining deviatoric stress tensors from calcite twins: applications to monophased synthetic and natural polycrystals. *Tectonics* **9**, 79–389.
- Melichar, R. & Kernstocková, M. 2010. 9D Space – The Best Way to Understand Paleostress Analysis. *Trabajos De Geologia* **30**, 69-74.
- Mügge, O. 1883. Beiträge zur Kenntnis der Strukturflächen des Kalkspathes. *Neues Jahrbuch für Mineralogie* **1**, 71-158.
- Mügge, O. 1898. Über Translationen und verwandte Erscheinungen in Krystallen. *Neues Jahrbuch für Mineralogie* **1**, 32-54.
- Nemcok, M., Kováč, D. & Lisle, R. J. 1999. A stress inversion procedure for polyphase calcite twin and fault/slip data sets. *Journal of Structural Geology* **21**, 597–611.
- Newman, J. 1994. The influence of grain size and grain size distribution on methods for estimating paleostresses from twinning in carbonates. *Journal of Structural Geology* **16**, 1589–1601.
- Nissen, H. U. 1964. Dynamic and kinematic of crinoids stems in a graywacke. *Journal of Geology* **72**, 346–360.
- Pabst, A. 1955. Transformation of indices in twin gliding. *Geological Society of America Bulletin* **66**, 897–912.
- Pfaff, F. 1859. Versuche über den Einfluss des Drucks auf die optischen Eigenschaften doppeltbrechender Krystalle. *Annalen der Physik* **107**, 333-338.
- Pfiffner, O. A. & Ramsay, J. G. 1982. Constraints on geological strain rates: Arguments from finite strain states of naturally deformed rocks. *Journal of Geophysical Research* **87**, 311-321.
- Pokluda, J., Kroupa, F. & Obdržálek, L. 1994. *Mechanické vlastnosti a struktura pevných látek (kovy, keramika, plasty)*. PC-DIR, Brno.
- Reusch, E. 1867. Über eine besondere Gattung von Durchgängen in Steinsalz und Kalkpat. *Annalen der Physik* **132**, 441-451.
- Rez, J. 2010. Strukturně-geologický vývoj jižní části Moravského krasu. MS, Dizertační práce, Přírodovědecká fakulta Masarykovy univerzity, Brno.
- Rez, J. & Melichar, R. 2010. Peek Inside the Black Box of Calcite Twinning Paleostress Analysis. *Trabajos De Geologia* **30**, 163-168.
- Robertson, E. C. 1951. New mechanical twinning in calcite. *Geological Society of America Bulletin* **62**, 1472.
- Rocher, M., Baize, S., Jaillet, S., Cushing, E. M., Lozac'h, Y. & Lemeille, F. 2003. Quaternary stresses revealed by calcite twinning inversion: insights from observations in the Savonnieres underground quarry (eastern France). *C. R. Geoscience* **335**, 701–708.
- Rocher, M., Cushing, M., Lemeille, F., Lozac'h, Y. & Angelier, J. 2004. Intraplate paleostresses reconstructed with calcite twinning and faulting: improved method and application to the eastern Paris Basin (Lorraine, France). *Tectonophysics* **387**, 1–21.
- Rowe, K. J. & Rutter, E. H. 1990. Paleostress estimation using calcite twinning: experimental calibration and application to nature. *Journal of Structural Geology* **12**, 1–17.
- Rutter, E. H. 1974. The influence of temperature, strain rate and interstitial water in the experimental deformation of calcite rocks. *Tectonophysics* **22**, 311–334.
- Sato, K. & Yamaji, A. 2006. Uniform distribution of points on a hypersphere for improving the resolution of stress tensor inversion. *Journal of Structural Geology* **28**, 972-979.
- Shelley, D. 1992. Calcite twinning and determination of paleostress orientations: three methods compared. *Tectonophysics* **206**, 193-201.
- Schwartz, A. J., Kumar, M. & Adams, B. L. 2000. *Electron backscatter diffraction in materials science*. Springer.
- Spang, J. H. 1972. Numerical method for dynamic analysis of calcite twin lamellae. *Geological Society of America Bulletin* **83**, 467–472.
- Spiers, C. J. 1979. Fabric development in calcite polycrystals deformed at 400°C. *Bulletin de Minéralogie* **102**, 282–289.
- Tournieret, C. & Laurent, P. 1990. Paleo-stress orientations from calcite twins in the North Pyrenean foreland, determined by the Etchecopar inverse method. *Tectonophysics* **180**, 287–302.
- Tschermak, G. 1881. Über die Isomorphie der rhomboedrischen Karbonate, etc. *Tschermaks Mineralog. u. Petrograph. Mitt. (Neue Folge)* **4**, 99-121.

- Tullis, T. E. 1980. The use of mechanical twinning in minerals as a measure of shear stress magnitudes. *Journal of Geophysical Research* **85 B**, 6263–6268.
- Turner, F. J. 1953. Nature and dynamic interpretation of deformation lamellae in calcite of three marbles. *American Journal of Science* **251**, 276–298.
- Turner, F. J., Griggs, D. T., Heard, H. & Weiss, L. E. 1954a. Plastic deformation of dolomite rock at 380°C. *American Journal of Science* **252**, 477–488.
- Turner, F. J., Griggs, D. T. & Heard, H. C. 1954b. Experimental deformation of calcite crystals. *Geological Society of America Bulletin* **6**, 883–934.
- Turner, F. J. & Heard, H. 1965. Deformation in calcite crystals at different strain rates.
- Wagner, F., Wenk, H. R., Kern, H., VanHoutte, P. & Esling, C. 1982. Development of preferred orientation in plane strain deformed limestone: Experiment and theory. *Contributions to Mineralogy and Petrology* **80**, 132–139.