A study of optimal twin boundaries the ideal composition planes of the feldspar twins

Author(s):
Pellegrini, Sergio

Publication Date:
1971

Permanent Link:
https://doi.org/10.3929/ethz-a-000092380

Diss. No. 4652

A STUDY OF OPTIMAL TWIN BOUNDARIES

Part A. Composition planes of pericline and albite twins and slight deviations thereof

Part B. The ideal composition planes of the feldspar twins

Thesis presented to
The Swiss Federal Institute of Technology
Zurich

for the degree of Doctor of Natural Science

by

SERGIO PELLEGRINI
Dipl. Phys. ETH (Zurich)
born January 31, 1942
citizen of Stabio (Ct. Ticino) and Basle

Accepted on the recommendation of
Prof. Dr. F. H. Laves, referent
P.-D. Dr. W. Bollmann, correferent

Juris Druck + Verlag Zurich
1971

ZUSAMMENFASSUNG

Zwillingsgesetze werden konventionellerweise beschrieben durch Angabe der Symmetrieoperation, welche die beiden Zwillingsindividuen ineinander überführt. Mögliche Symmetrieelemente sind "Zwillingsachsen", d.h. zweizählige Rotationsachsen, oder "Zwillingsebenen", d.h. Spiegelebenen. In der allgemeinen Theorie der Korn- und Phasengrenzen von BOLLMANN wird die Grenzfläche zwischen den Zwillingspartnern als Fläche maximaler Koinzidenz der beiden Translationsgitter interpretiert, wobei Koinzidenzen von Gitterpunkten und - um Stetigkeit zu erreichen - von Punktlagen mitberücksichtigt werden müssen. Die Berechnung dieser zur Deckung gelangenden Punkte verlangt nun aber, dass die Transformation, welche die gegenseitige Lage der Kristallzwillinge beschreibt, nächste Nachbarn erfasst. Dies geschieht nicht mehr durch die Symmetrieoperationen, sondern durch eine Scherung in Richtung der Zwillingsachse bzw. parallel zur Zwillingsebene. Die Schertransformation ist abhängig vom Typ der Verzwillingung und von den Gitterkonstanten der Kristalleinheitszelle. Die optimale Grenze, d.h. die Verwachsungsfläche der Zwillinge, ist gegeben durch die invariante Ebene der linearen Schertransformation.

In Teil A wird diese Methode am Beispiel des "Periklingesetzes" der Feldspäte (Verzwillingung nach [010] bzw. Scherung in [010]-Richtung) dargestellt. Die Verwachsungsebene ist hier der irrational indizierte "rhombische Schnitt", dessen Lage durch den Winkel σ, gemessen auf (010) zwischen der Spur des "rhombischen Schnittes" und der [100]-Achse, charakterisiert wird. Die Abhängigkeit des Winkels σ von den Gitterkonstanten kann analytisch aus der Darstellung des Zwillingsgesetzes durch eine Scherung abgeleitet werden, mit der einzigen Voraussetzung maximaler Koinzidenz in der Verwachsungsebene.

Die theoretisch geforderte Lage des "rhombischen Schnittes" wird jedoch sehr oft nicht eingehalten. Möglicherweise lassen sich solche Unregelmässigkeiten aus Abweichungen von der idealen Zwillingsorientierung der beiden Kristalle verstehen. Jede Abweichung von der energetisch optimalen Lage bringt Verzerrungen mit sich, die der Kristall durch Versetzungen auszugleichen trachtet. Der "verdrehte" Zwilling kann in diesem Fall beschrieben werden durch eine Transformation, welche nebst der Scherung noch eine kleine Rotation um eine beliebige Achse enthält. Die koinzidierenden Punkte sind wiederum die invarianten Elemente der Transformation.

Zusammenfassend ergibt sich für die genaue Zwillingslage eine Koinzidenz über eine ganze Ebene. Wenn zur Scherung noch eine Drehung hinzukommt, gibt es zwei Ebenen für die Drehachse, für die die beiden Kristallgitter in einer Schar paralleler Geraden in Koinzidenz treten. Für alle andern Orientierungen der Drehachse sind diese Koinzidenzen in einem Punktgitter verteilt. Aus der Kenntnis dieser Koinzidenzen werden die Versetzungsstrukturen möglicher Grenzen berechnet.

Die Darstellung des Albitgesetzes (Verzwillingung nach (010)) im reziproken Gitter lässt sich formal auf die Beschreibung des Periklingesetzes zurückführen. Daraus ergibt sich, dass der Tangens des Winkels in der Ebene (010) zwischen der Scherrichtung und der [100]-Achse die gleiche Abhängigkeit von den Gitterkonstanten zeigt wie der Cotangens des Winkels σ beim Periklingesetz.

In Teil B werden zunächst allgemeine analytische Formeln abgeleitet für die Darstellung von Zwillingsgesetzen durch Schertransformationen. Diese erlauben eine Diskussion der Verwachsungsebenen sämtlicher Feldspatzwillingsgesetze. Es zeigt sich eine weitgehende Uebereinstimmung zwischen den beobachteten und den so berechneten Grenzflächen, welche somit im allgemeinen versetzungsfreie Ebenen sind. Bei einzelnen Zwillingsgesetzen wird nachgewiesen, dass die Verwachsungsebene eine Gleitspiegelebene sein muss. Die Häufigkeit der Zwillingsgesetze ist korreliert mit der Grösse des Scherwinkels: Der Scherwinkel ist minimal für die häufigsten Gesetze, Periklin, Albit und Karlsbad. Bei den Komplexgesetzen, für welche nie eine versetzungsfreie Verwachsungsebene existieren kann, wird vorgeschlagen, diese generell als Triplets zu deuten. Dies würde ihre relative Häufigkeit in Abhängigkeit der chemischen Zusammensetzung, ihre oft beobachtete Nachbarschaft zu einfachen Zwillingsgesetzen und die Form oft beschriebener Lamellen zwischen den "Zwillingspartnern" erklären.

Aeltere Bezeichnungen von Zwillingsgesetzen in der Literatur werden auf Grund der theoretisch berechneten Verwachsungsebenen überprüft, acht neue Zwillingsgesetze mit idealen Verwachsungsebenen werden vorgeschlagen.

ABSTRACT

Conventionally twin laws are described by indicating the symmetry operation which relates the two twin individuals. Permissible symmetry elements are "twin axes", i.e. twofold rotational axes, or "twin planes", i.e. mirror planes. In the general theory of grain and phase boundaries by BOLLMANN the boundary between the two twin partners is interpreted as a face with maximal coincidence of the two translation lattices, where coincidences of lattice points and - for the sake of continuity - of general positions have to be taken into account. For the evaluation of these coinciding points, however, it is necessary that the transformation describing the orientation of the twinned crystals relates nearest neighbours. This does not apply to the symmetry operations but only to a shear in the direction of the twin axis or parallel to the twin plane, respectively. This shear transformation depends on the type of twinning and on the lattice constants. The optimal interface, i.e. the twin junction, is given by the invariant plane of the linear shear transformation.

In Part A this method is used to describe the "pericline law" in feldspars (twinning on [010] or shear in the [010] direction). The composition plane then is the irrational "rhombic section", the orientation of which is characterized by the angle σ defined on (010) between the trace of the "rhombic section" and the [100]-axis. Assuming maximal coincidence in the composition plane, the angle σ depending on the lattice constants may analytically be derived from the description of the twin law by a shear transformation.

However, the calculated orientation of the "rhombic section" often does not correspond to observations. Such irregularities might be understood by slight deviations from the ideal twin orientation. But every variation from the energetically optimal position requires dislocations in order to compensate the inevitable distortions.

The "deviated" twin can be described by a transformation containing a rotation about an arbitrary axis through a small angle in addition to the shear transformation. The coinciding points again are the invariant elements of the transformation.

To sum up, coincidence in a whole plane is obtained for the precise twin position. If in addition to the shear there is a

rotation then two planes exist for the rotational axis so that the two crystal lattices coincide in a system of parallel lines. For all the other orientations of the rotational axis a lattice of coinciding points is obtained. Knowing the coincidences the structures of dislocation networks in possible boundaries can be calculated. The description of the albite twin law (twinning on (010)) in the reciprocal lattice may be formally traced back to the one of the pericline law. Thereof it follows that the tangent of the angle in the plane (010) between the shear direction and the [100]-axis results in the same dependece on the lattice constants as the cotangent of the angle σ in the pericline law.

Part B - first general analytical formulae are derived for the description of twin laws by shear transformations. They allow a discussion of the composition planes of all the feldspar twin laws. A vast correspondence is confirmed between observed and calculated boundaries which thus generally are planes without dislocations. For some twin laws it is shown that the composition plane has to be a glide reflection plane. The frequency of occurrence of twins is correlated to the magnitude of the angle of shear: this angle is minimal for the most common laws, pericline, albite, and Carlsbad.

The complex laws for which a composition plane without dislocations never exists are suggested to be generally formed by triplets. This would explain their relative frequency depending on the chemical composition, their often reported vicinity to simple twin laws, and the shape of occasionally described lamellae between the "twin partners".

Former defintions of twin laws in the literature are revised on the basis of the theoretically required composition planes, eight new laws with ideal twin junctions are proposed.