Bol. Soc. Geol. Mexicana, t. XXX, n. 1, p. 5-14, 2 figs. (1967)

MACLAS

Francisco J. Fabregat Guinchard*

Los cristales pueden hallarse libres en la naturaleza; mas con frecuencia se encuentran agrupados por coincidencia de una, de dos o de tres de sus direcciones. A esos agregados se les llama uniáxicos, biáxicos o triáxicos, según el número de direcciones comunes que posean.

Todos ellos son de gran interés cristalográfico; empero, los más estudiados son los agregados biáxicos o *maclas* (gemelos, twinning, zwillinge).

La interpretación geométrica de que han sido objeto es la más completa; no así sus interpretaciones dinámica, casual,. . . aunque son muy importantes los trabajos que se han ocupado de ellas (Kern, 1958). La red cristalina de un individuo I pasa a la del segundo individuo II por un plano de contacto o "red de macla" que satisface a las condiciones reticulares de ambos.

Ley de macla. Los dos cristales (I, II) que forman una macla pueden ser congruentes o enantiomorfos y pueden llegar a coincidencia uno con otro o con su enantiomorfo, mediante una rotación; su grupo de simetría de orientación es siempre centrosimétrico. Tratándose de cristales triclínicos sólo es posible uno de esos giros; mas en cristales de simetría superior puede haber varios.

Los dos individuos constituyentes de una macla pueden llegar a coincidencia al girar uno de ellos 180°, 120°, 90° ó 60° en derredor de una fila reticular, o de 180° en torno de la normal a una red de puntos. Ni el eje de giro ni el plano de macla han de ser elementos de simetría del cristal, pues entonces sería propiamente el conjunto un cristal único con su aspecto externo de agregado holoáxico o triáxico.

---

* Investigador Titular. Instituto de Geología. Universidad Nacional Autónoma de México.

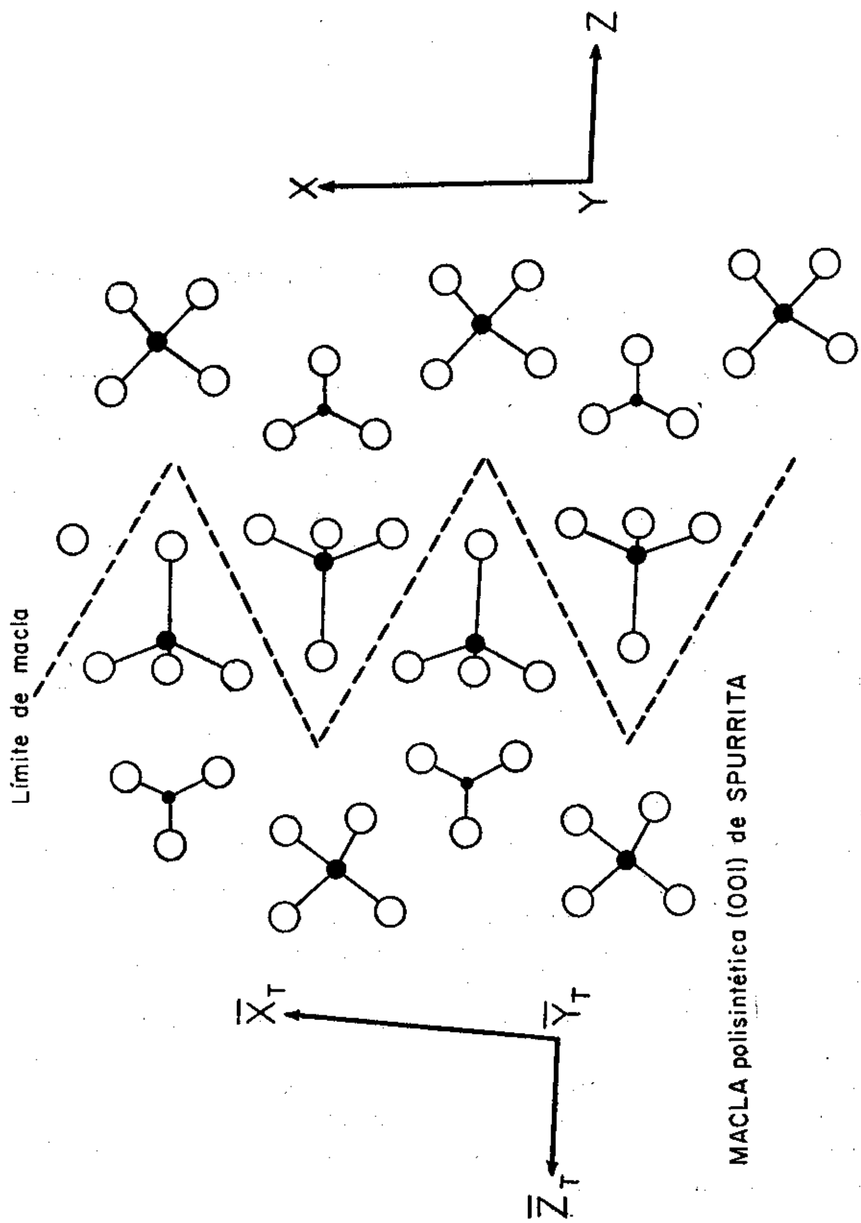
Z
X
Y
Límite de macla
MACLA polisintética (001) de SPURRITA
$\bar{X}_T$
$\bar{Y}_T$
$\bar{Z}_T$

Figura 1

En el primer caso, la fila reticular o eje de giro se llama *eje de macla;* la red de puntos del segundo caso se llama *plano de macla.* El llamado "plano de composición" o "cara de unión" de la macla, es la superficie aparente de contacto de ambos individuos, que muchas veces coincide con el plano de macla o le es paralelo.

A los agregados cristalinos con eje de macla se les suele llamar *maclas paralelas,* y a las que tienen plano de macla, *maclas normales.*

Para que un eje de giro sea un eje de macla, sus índices u, v, w, deberán ser números enteros. De no serlo, se habría de calcular si existe un plano (hkl) perpendicular a [uvw]. La condición de perpendicularidad para cristales triclínicos, es:

$$\frac{a}{h}(au + bv\cos\gamma + cw\cos\beta) = \frac{b}{k}(au\cos\gamma + bv + cw\cos\alpha)$$

$$= \frac{c}{l}(au\cos\beta + bv\cos\alpha + cw)$$

simplificable para las otras singonías.

De resultar la red (hkl) con índices enteros, será efectivamente perpendicular al eje de giro [uvw], y se tratará de un plano de macla; en caso contrario no habría de tenerse como macla, sino como heteromacla.

Eje de giro T y ángulo de rotación τ: Sean (x y z) los ejes coordenados positivos del cristal I, y (x' y' z') los del cristal II. Toda rotación que lleve al individuo II a coincidencia con el I, hará coincidir con sus respectivos octantes homólogos x' con x, y' con y, z' con z —lo cual se simboliza (x'x, y'y, z'z)— o en octantes equivalentes en casos no triclínicos, como ($x'\bar{x}$, y'y, $z'\bar{z}$).

Con el esterograma de esos 6 polos, para determinar un eje de giro T y el ángulo de giro τ que lleve a tres de ellos x'y'z' a coincidencia con los $\bar{x}$ y $\bar{z}$, por ejemplo, se trazan los meridianos perpendiculares a los puntos bisectores de los ángulos interior y exterior en los arcos $x'\bar{x}$ y'y, $z'\bar{z}$: su intersección común será T, y su ángulo de giro τ cualquiera de los tres iguales $\bar{x}Tx'$, yTy', $\bar{z}Tz'$.

Berek (1924) hace explícita la construcción anterior mediante las siguientes reglas: para trazar los elementos de la macla (xx', yy', zz'),

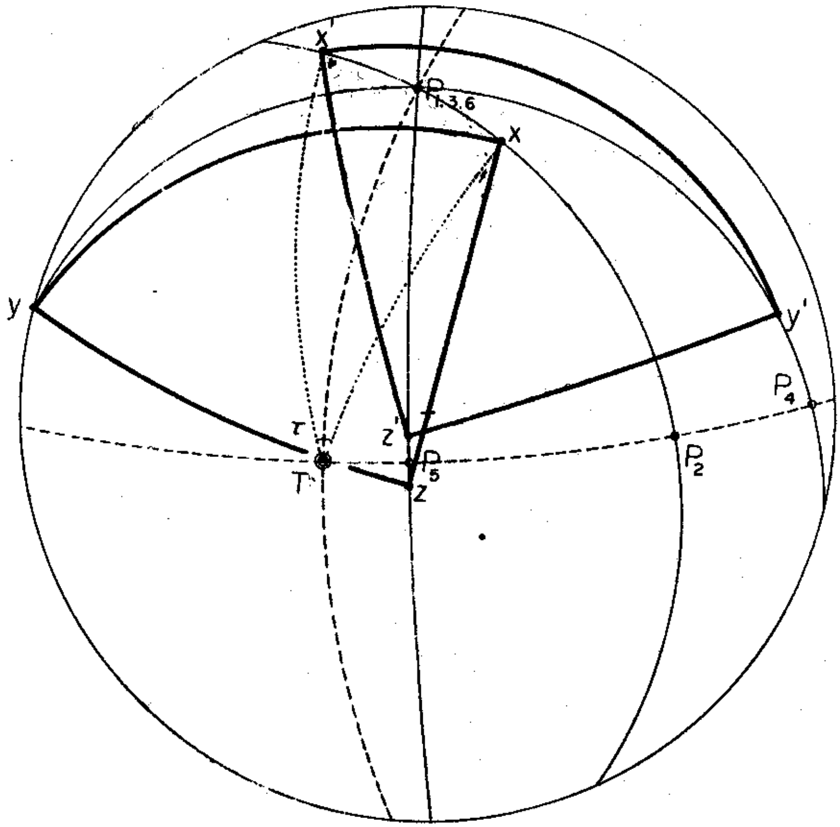

Fig. 2

a) Gírese el estereograma hasta que un par de polos equivalentes, como los x x' coincidan con un meridiano de la red de Wulff y señálese el punto bisector P_1 entre ellos. Trácese el otro punto bisector externo P_2 distante 90° de P_1.

b) Girar el estereograma hasta que P_1 quede en el diámetro E-W de la red y trazar el arco secundario que pase por el polo P_2.

c) Repítase la operación b) con P_2 sobre el diámetro E-W y trácese un arco que pase por P_1.

d) Repetir las operaciones b y c con y y', con z z', para localizar los polos P_3 P_4 P_5 y P_6 en sus arcos.

e) Tres de los arcos secundarios se cortarán en un punto, que será el polo del eje de macla.

Antes de elegir la rotación o rotaciones apropiadas que definan la ley de macla, se habrán de calcular todos los giros posibles.

Estas clases de construcciones geométricas son muy útiles para lograr una representación de la macla, mas resultan poco precisas cuando se desean determinaciones exactas, por las dificultades de localización de los polos mediante la plantilla de Wulff; así que se recomienda el recurso del cálculo en los problemas de investigación.

Si [u v w] son los índices de una fila en el sistema I y [u'v'w'] los índices de la misma en el sistema II,

$$\begin{aligned} u'a &= ua \cos xx' + vb \cos yx' + wc \cos zx' \\ v'b &= ua \cos xy' + vb \cos yy' + wc \cos zy' \\ w'c &= ua \cos xz' + vb \cos yz' + wc \cos zz' \end{aligned}$$

El eje de giro de la operación $(x'\bar{y}, y'x, z'z)$ se obtendrá sustituyendo $u' = \bar{v}$, $v' = u$, $w' = w$ en las ecuaciones anteriores y resolviendo u v w, que serán los índices de T, no necesariamente enteros.

El ángulo τ de giro es

$$\operatorname{sen} \frac{\tau}{2} = \frac{\operatorname{sen} \frac{xx'}{2}}{\operatorname{sen} Tx} = \frac{\operatorname{sen} \frac{yy'}{2}}{\operatorname{sen} Ty} = \frac{\operatorname{sen} \frac{zz'}{2}}{\operatorname{sen} Tz}$$

y si se trata de ejes x y z ortogonales,

$$\operatorname{sen} \tau = \frac{1}{2} (\cos xx' + \cos yy' + \cos zz' - 1)$$

O b l i c u i d a d d e m a c l a . La oblicuidad de macla es el menor ángulo ω formado por la normal al plano de macla (hkl) y el eje de macla [uvw] subnormal a (hkl).

Sean [u'v'w'] los índices de la fila perpendicular al plano (hkl), y (h'k'l') los del plano normal al eje [uvw]. Los índices no apostrofados son enteros; mientras los apostrofados no suelen serlo. La oblicuidad de macla (en casos triclínicos) es

$$\cos \omega = \frac{uh + vk + wl}{\sqrt{(uh' + vk' + wl')}\ \sqrt{(u'h + v'k + w'l)}} \sqrt{\frac{N}{N'}}$$

en donde,

$$N = \frac{a}{h} (au' + bv' \cos \gamma + cw' \cos \beta)$$

$$N' = \frac{a}{h'} (au + bv \cos \gamma + cw \cos \beta)$$

Cualquier cristal triclínico que tenga (010) como plano de macla, tendrá una oblicuidad ω = [010]: [010]*,

$$\cos \omega = \frac{1}{bb^*} = \frac{1}{b} \frac{ca \operatorname{sen} \beta}{V} = \frac{\Delta}{\operatorname{sen} \beta}$$

en donde,

$$\Delta = \operatorname{sen} \alpha^* \operatorname{sen} \beta \operatorname{sen} \gamma$$

o las equivalentes con asterisco en los otros ángulos.

I n d i c e d e m a c l a . La rotación que lleva al retículo cristalino de un individuo hasta el de su gemelo maclado, acarrea la coincidencia de cierta fracción 1/n de puntos reticulares, cuyo inverso n se llama *índice de macla*.

CUADRO para el cálculo del INDICE DE MACLA en función de S=|hu+kv+lw|
Plano de macla (hkl) subnormal a la fila [uvw] ó
eje de macla [uvw] subnormal al plano reticular (hkl)

<table>
<tr><td>Tipo de red cristalina</td><td colspan="2">PRIMITIVA
P</td><td colspan="5">UNA CARA CENTRADA
(Sea la C)</td><td colspan="5">CENTRADA
I</td><td colspan="5">CARAS CENTRADAS
F</td></tr>
<tr><td rowspan="5"></td><td colspan="2" rowspan="3"></td><td colspan="5">h + k</td><td colspan="5">h + k + l</td><td colspan="5">u + v + w</td></tr>
<tr><td rowspan="4">impar</td><td colspan="4">par</td><td rowspan="4">impar</td><td colspan="4">par</td><td rowspan="4">impar</td><td colspan="4">par</td></tr>
<tr><td colspan="4">u + v , w</td><td colspan="4">u, v, w</td><td colspan="4">h, k, l</td></tr>
<tr><td colspan="2">S</td><td colspan="2">uno par</td><td colspan="2">ambos pares</td><td colspan="2">alguno par</td><td colspan="2">todos impares</td><td colspan="2">alguno par</td><td colspan="2">todos impares</td></tr>
<tr><td>impar</td><td>par</td><td colspan="2">S</td><td colspan="2">S/2</td><td colspan="2">S</td><td colspan="2">S/2</td><td colspan="2">S</td><td colspan="2">S/2</td></tr>
<tr><td></td><td></td><td></td><td></td><td>impar</td><td>par</td><td>impar</td><td>par</td><td></td><td>impar</td><td>par</td><td>impar</td><td>par</td><td></td><td>impar</td><td>par</td><td>impar</td><td>par</td></tr>
<tr><td>Indice de macla</td><td>S</td><td>S/2</td><td>S</td><td>S</td><td>S/2</td><td>S/2</td><td>S/4</td><td>S</td><td>S</td><td>S/2</td><td>S/2</td><td>S/4</td><td>S</td><td>S</td><td>S/2</td><td>S/2</td><td>S/4</td></tr>
</table>

La celda de la "red de macla" puede ser una celda primitiva de la red cristalina (caso llamado de seudomeroedría) y el índice de macla es 1; o ser una celda múltiple de ella (caso de seudomeroedría reticular). Su índice de macla es una función sencilla de los índices del plano reticular y de la fila de puntos.

Sea V el volumen de la celda de la red de macla y v el de la celda menor del retículo cristalino. El índice de macla es V/v ó V/2v según que la celda múltiple sea primitiva o centrada (de algún modo).

Aplicación: Una vez establecida la ley de macla del cristal que se estudia, se determinará calculando la subnormal a un plano de macla, para poder obtener la oblicuidad de ésta y su índice.

Según la teoría geométrica de maclas (Friedel, 1926) serán éstas posibles sobre (hkl) si su oblicuidad es menor de 6° y sus índices presentan valores bajos, no superiores a 5.

Por las facilidades que ofrece el cálculo electrónico, se puede obtener una lista completa de todas las combinaciones de filas reticulares que sean subnormales a posibles planos de macla (Wolten, 1966).

Así, para el cálculo de las posibles maclas de BADDELEYITA, ZrO_2, monoclínica holoédrica, P $2(1)/a$, según ese autor,

$$a_0 = 5.3107; \quad b_0 = 5.2075; \quad c_0 = 5.1454$$
$$\beta = 99.23°$$

	(hkl)	[uvw]	Oblicuidad ω
Indice de macla 1:			
	0 1 0	0 1 0	0
	1 0 1	1 0 1	1.83
	$\bar{1}$ 0 1	$\bar{1}$ 0 1	1.84
Indice de macla 2:	0 0 1	1 0 4	5.65
	1 0 0	4 0 1	4.74
	$\bar{4}$ 0 1	1 0 0	5.65
Indice de macla 3:	0 0 1	1 0 6	0.67
	1 0 0	6 0 1	0.06
	1 1 1	1 1 1	4.75
	1 1 2	1 1 2	4.98

	1 2 1	1 2 1	4.63
	$\bar{1}$ 1 1	$\bar{1}$ 1 1	4.48
	$\bar{1}$ 2 1	$\bar{1}$ 2 1	4.35
	$\bar{2}$ 1 1	$\bar{2}$ 1 1	4.84
	6 0 1	1 0 0	0.67
Indice de macla 4:	0 1 1	1 4 4	4.20
	1 0 2	2 0 3	4.20
	1 1 0	4 4 1	3.38
	1 3 1	1 2 1	5.98
	2 0 1	3 0 2	0.99
	$\bar{1}$ 4 4	0 1 1	3.44
	$\bar{2}$ 0 3	$\bar{1}$ 0 2	1.00
	$\bar{3}$ 0 2	$\bar{2}$ 0 1	4.20
Indice de macla 5:	0 0 1	1 0 5	2.67
	0 1 1	1 5 5	2,35
	0 1 2	1 2 4	5,16
	0 2 1	0 2 1	4.23
	0 3 1	0 3 1	3.00
	1 0 0	5 0 1	1.93
	1 0 2	1 0 2	4.11
	1 1 0	5 5 1	1.42
	1 2 0	1 2 0	4.19
	1 2 1	2 3 2	3.57
	1 3 0	1 3 0	2.97
	2 1 0	4 2 1	4.25
	3 4 3	1 1 1	3.67
	$\bar{1}$ 1 1	$\bar{3}$ 4 3	3.95
	$\bar{1}$ 2 4	0 1 2	4.28
	$\bar{1}$ 5 5	0 1 1	1.54
	$\bar{2}$ 0 1	$\bar{2}$ 0 1	4.11
	$\bar{2}$ 3 2	$\bar{1}$ 2 1	3.86
	$\bar{5}$ 0 1	1 0 0	2.67
Indice de macla 6:	0 1 1	1 6 6	1.51
	0 1 2	1 2 5	4.44
	0 5 2	0 2 1	5.50
	1 1 0	6 6 1	0.38

1 2 0	2 5 0	0.67
2 0 5	1 0 2	0.
2 1 0	5 2 1	5.35
5 0 2	2 0 1	2.74
$\bar{1}$ 0 2	$\bar{2}$ 0 5	2.75
$\bar{1}$ 2 5	0 1 2	5.57
$\bar{1}$ 6 6	0 1 1	0.69
$\bar{2}$ 0 1	$\bar{5}$ 0 2	0.06

En total, 53 combinaciones de planos y ejes de macla posibles. Realmente, entre la baddeleyita son raros los cristales no maclados, de cuyas agrupaciones biáxicas se citan la (100) a veces polisintética, como más común; también la (110) es frecuente y a veces polisintética; la (201) es rara.