

COCCO G., CORAZZA E. e SABELLI C.: *La struttura cristallina della glauberite.*

La struttura della Glauberite $\text{CaNa}_2(\text{SO}_4)_2$ è stata determinata da fotogrammi di precessione, presi su un cristallo sfericizzato, secondo le due serie di livelli da $0kl$ a $5kl$ e da $hk0$ ad $hk4$. Il minerale è monoclinico, gruppo spaziale $C2/c$, $Z = 4$. I parametri reticolari, determinati per mezzo di dati diffrattometrici e raffinati con il metodo dei minimi quadrati, sono:

$$a = 10,158 \text{ \AA}; \quad b = 8,333 \text{ \AA}; \quad c = 8,551 \text{ \AA}; \quad \beta = 112^\circ 20'$$

Alle intensità sono state apportate le correzioni di Lorentz-polarizzazione e di assorbimento per mezzo di un programma scritto per l'elaboratore elettronico 1620 IBM. Da una Patterson tridimensionale sono state riconosciute le posizioni dell'atomo di Ca e del gruppo SO_4 ; la posizione del Na è stata determinata per mezzo di una Fourier tridimensionale. Il raffinamento ha condotto ad un indice R finale del 9,0%. I tetraedri SO_4 sono regolari. Gli atomi di Ca coordinato otto O secondo un antiprisma quadrato distorto, con distanze Ca-O variabili da 2,36 a 2,74 Å. Il Na coordina sette O disposti secondo un ottaedro molto distorto, con una faccia centrata; le distanze Na-O variano da 2,34 a 2,80 Å.

COCCO G., FANFANI L. e ZANAZZI P. F.: *La struttura cristallina della tarbuttite.*

La struttura cristallina della tarbuttite è stata determinata con i dati raccolti all'apparecchio di Weissenberg e alla camera di Buerger.

Il minerale è triclino e i parametri della cella elementare, raffinati con il metodo dei minimi quadrati sfruttando dati diffrattometrici, sono:

$$\begin{array}{ll} a = 5,50 \text{ \AA} & \alpha = 102^\circ 51' \\ b = 5,65 \text{ \AA} & \beta = 102^\circ 46' \\ c = 6,46 \text{ \AA} & \gamma = 86^\circ 50' \end{array}$$

Il gruppo spaziale è il centrosimmetrico $P\bar{1}$, come risulta anche dall'assenza di piezoelettricità e dalla applicazione del metodo statistico di Howells e C. alle sezioni basali $h0l$ e $0kl$.

La cella contiene due unità $\text{Zn}_2(\text{OH})\text{PO}_4$. Le posizioni degli atomi della unità asimmetrica sono state determinate mediante le proiezioni basali $h0l$ e $0kl$ della funzione di Patterson e parallelamente con l'applicazione di un metodo statistico per la determinazione della fase dei fattori di struttura.

La struttura risulta essere molto compatta. Lo zinco coordina 5 ossigeni secondo una bipiramide trigonale molto distorta, con distanze Zn-O da 1,95 Å

a 2,15 Å. Il tetraedro PO_4 è leggermente distorto, con distanze P-O da 1,52 Å a 1,55 Å e angoli O-P-O tra 106° e 112° .

E' stato eseguito un affinamento con dati tridimensionali e l'indice finale di discrepanza, calcolato su 412 riflessi osservati, è 0,12.

CORAZZA E., GIUSEPPEZZI G. e SABELLI C.: *La struttura cristallina della lecontite.*

La Lecontite, $\text{NaNH}_4\text{SO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, appartiene al sistema rombico, gruppo spaziale $P2_12_12_1$. Le costanti reticolari, determinate in retrodiffrazione con un diffrattometro automatico a quattro cerchi, sono:

$$a = 8,216 \text{ \AA} \quad b = 12,854 \text{ \AA} \quad c = 6,232 \text{ \AA}$$

Alle intensità, raccolte con il metodo Weissenberg equi-inclinazione, è stata applicata la correzione di assorbimento per cristalli cilindrici, disponendo di un campione portato a tale forma per abrasione. Dall'esame della Patterson tridimensionale è emersa la posizione del gruppo SO_4 . Per mezzo di tre Fourier tridimensionali sono state ricavate le posizioni degli altri O, del Na, del N. Sono stati quindi eseguiti tre cicli di affinamento, che hanno condotto ad un indice R del 13,6%. La struttura consiste di catene di ottaedri del Na parallele a c ; tali ottaedri hanno in comune una faccia. I tetraedri $\text{SO}_4=$, regolari, costituiscono delle appendici a tali catene, tra le quali fanno da ponte gli atomi di N, in coordinazione sette, e gli H delle due molecole di acqua. Delle sette distanze utili N-O quattro sono disposte tetraedricamente, e quindi attribuibili a ponti N-H-O.

CORAZZA E. e SABELLI C.: *La struttura cristallina della kaliborite.*

Le costanti reticolari della Kaliborite, $\text{HKMg}_2\text{B}_{12}\text{O}_{16}(\text{OH})_{10} \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ sono state determinate con metodi fotografici e diffrattometrici:

$$a = 18,53 \pm 0,03 \text{ \AA} \quad b = 8,43 \pm 0,02 \text{ \AA} \quad c = 14,665 \pm 0,007 \text{ \AA} \quad \beta = 100,13^\circ \pm 0,12^\circ$$

Il gruppo spaziale è il $C2/c$; $Z = 4$.

Dai fotogrammi Weissenberg, 7 livelli, sono stati raccolti circa 1500 effetti di diffrazione. Lo studio strutturale è stato affrontato sia per mezzo di una Patterson tridimensionale, sia utilizzando un metodo statistico. Ambedue i metodi hanno dato le posizioni degli atomi di K e del Mg con il suo ottaedro. I rimanenti O ed i B sono stati determinati con due Fourier tridimensionali successive. L'indice R finale, dopo alcuni cicli di affinamento, risulta di 9,7%.