

Sono discusse ed interpretate le distribuzioni di Fe, Mn, Zn, Pb, As, Cu, Cd, Ni, Cr. Dall'esame dei risultati si evidenzia che i tenori degli elementi considerati corrispondono ai livelli naturali e sono strettamente correlati alla litologia del bacino.

* ENEA - Centro Ricerche Energia Ambiente - S. Teresa (La Spezia). ** ENEA - Laboratorio di Geochimica Ambientale - Casaccia (Roma).

BONAZZI P.*, **MENCHETTI S.***, **SABELLI C.*** -
Kermesite, Sb^2S^2O : geometria reticolare, geminazione e struttura cristallina

I dati relativi alla geometria reticolare della kermesite presenti in letteratura, sono complessi e talvolta confusi. Sono state descritte per questo minerale varie celle elementari a simmetria triclina e pseudocelle monocline.

Lo studio roentgenografico condotto dagli autori ha messo in evidenza che la cella elementare è primitiva con $a = 8.147(1)$, $b = 10.709(1)$, $c = 5.785(1)$ Å, $\alpha = 102.78(2)$, $\beta = 110.63(2)$, $\gamma = 101.00(1)^\circ$.

La struttura della kermesite è stata determinata da Kupčík nel 1967 utilizzando una pseudocella monoclinica di volume 8 volte quello della primitiva triclina.

La tendenza alla pseudosimmetria monoclinica nella cella ottupla è in realtà legata all'esistenza di un geminato con piano di geminazione (010) che corrisponde al piano (411) nella simmetria triclina. Il raffinamento strutturale, $R = 0.057$, ha confermato nelle sue linee generali il modello precedentemente proposto. Due dei quattro Sb indipendenti coordinano tre ossigeni e uno zolfo con distanze da 2.00 a 2.48 Å. Gli altri due atomi di antimonio legano ciascuno cinque atomi di zolfo con una coordinazione $3 + 2$.

* Dipartimento di Scienze della Terra dell'Università di Firenze.

CANNILLO E.*, **OBERTI R.***, **UNGARETTI L.*** -
On the determination of the crystal-chemical composition of $C2/m$ amphiboles by means of multiple regression analysis of the result of X-ray structure refinements

A computer program has been set up which allows to determine the chemical composition and the site population of $C2/m$ amphiboles on the basis of the results of the X-ray structure refinements (XRef), independently from other chemical information. Its peculiarity is that all the variables in the crystal-chemical formula of an amphibole (e.g. the Na atoms p.f.u. in the M4 site) have been expressed as linear functions of a limited number of the final parameter obtained from XRef. The experimental data which have been used to achieve this goal are a) the results of the XRef on more than 400 amphiboles b) the chemical analyses of near 200 of this

400 samples, 70 of which carried out on the same crystal used for the structure refinement.

In the first step, the site population of A, M4 ($M1 + M2 + M3$), (T1 + T2), H, O3 have been determined for the 200 amphiboles for which a chemical analysis was available. They were calculated on the basis of a) the bulk chemical composition from EMP analysis b) the mean atomic number (m.a.n.) and the mean bond lengths (m.b.l.) obtained for each site from XRef c) our crystal-chemical knowledge on amphiboles, which allows us to confidently modify the EMP analyses when they are in disagreement with the m.a.n. and the m.b.l. obtained from XRef. When the determination of the crystal-chemical composition performed with this procedure was not straightforward (too large discrepancies between EMP and XRef), the sample was rejected, thus ending with a final set of 165 amphiboles.

A multiple regression analysis has been subsequently performed on this set of samples, evidentiating the correlation between the determined site populations and the final parameters of the structure refinement. A number of regression equations of the type $Na(M4) = m.a.n. K1 + (M4-O4) K2 + \dots + Kn$ has been therefore obtained; it allows us to calculate with correlation coefficients higher than 0.99, all the variables of the crystal-chemical formula as functions of some XRef results.

A new version of the CORANF computer program (CANNILLO et al., Rendiconti SIMP, 1981) has been eventually written; founding on these equations, it gives for any amphibole crystal on which XRef has been performed, a chemical composition in terms of the following sites and elements: A (K, Na, vacancy), M4 (Li, Na, Ca, Fe), $M1 + M2 + M3$ (Mg, Fe^{2+} , Fe^{3+} , Ti, Al), T1 + T2 (Al, Si, Ti), O3 (O, F), H (H, vacancy). The program, has been successfully tested on the amphiboles for which the EMP analysis was available, but which had not been inserted in the starting model.

Finally, considering only those amphiboles in which, on the basis of the T1-O and T2-O mean bond distances, Al^{IV} is completely ordered in T1, other equations have been obtained which allow us to calculate separate estimates of Al^{IV} in the T1 and T2 sites. Equations suitable to distribute the octahedral cations between the M1, M2 and M3 sites are now under investigation. The major difficulty consists in establishing the hierarchy of the high-charge octahedral cations (Ti, Fe^{3+} , Al) entering each site, when requested from an observed m.b.l. shorter than that calculated on the basis of a ($Fe^{2+} + Mg$) composition.

* C.N.R. Centro di Studio per la Cristallografia Strutturale, Pavia.

CRISCI G.M.*, **DE FRANCESCO A.M.*** -
Mineralogical study of lavas from Ischia (Southern Italy): evidence for magma mixing

The Ischia Island, related to the Phlegrean Fields System, is characterized by alcali-basalts to phonolites products that can be distinguished in pre-Epomeo

(130.000-56.000 y) and post-Epomeo series (56.000 y).

The pre-Epomeo series consist of evolved rocks, from trachytes to phonolites, whereas the post-Epomeo series is mostly composed of intermediate and evolved lavas with minor trachybasalt and latites.

A detailed mineral chemistry study of trachybasalts, latites and phonolites of post-Epomeo series has been carried out. In trachybasalts and latites the plagioclase phenocrysts, associated with Na-sanidine, range in composition from An_{94} to An_{40} , whereas the microlites have intermediate composition. Trachybasalts and latites contain two types of pyroxene phenocrysts showing diopside and salite composition. The pyroxene microlites and phenocrysts rims are salites significantly enriched in Al and Ti. The composition of olivine is strongly variable from Fo_{90} to Fo_{45} and in a latite sample three types of olivine (Fo_{80} , Fo_{70} , Fo_{45}) have been found. The phonolites contain plagioclase ($An_{40,50}$) associated with Na-sanidine and salitic px. The wide mineral compositional range in the same sample suggest that in the more basic rocks mixing of two magmas occurred: one magma was characterized by diopside, Mg-rich olivine and basic plagioclase, and the second one was characterized by the occurrence of Al-salite, Fe enriched olivine, intermediate plagioclase and Na-sanidine.

Data are still too poor to clarify if magma mixing occurred between two genetically different liquids or between similar liquids at different fractionation stages.

The crystallization of clinopyroxene with very high Al- and Ti- content can be related to the temperature drop and to the decrease of pressure during magma rising.

dati sia in scansione ω che $\omega/2\theta$. I raffinamenti sono comparati per ciascuna coppia di raccolte.

Il modello cristallografico (numero di elettroni dei siti, distanze ed angoli di legame, distorsioni dei poliedri) risulta riprodotto — entro le σ stimate dei minimi quadrati — in modo analogo nelle quattro coppie di raffinamenti. Come unica eccezione, in alcuni casi i parametri termici equivalenti isotropi risultano soggetti a significative variazioni. Per tre campioni le coppie di raffinamenti danno valori di R_{obs} e σ del tutto analoghi.

Solo per un campione, per i riflessi di controllo, la scansione $\omega/2\theta$ non rende possibile la raccolta di tutta l'intensità diffratta, anche con la massima apertura disponibile: il raffinamento mostra, rispetto alla scansione ω , valori peggiori di R_{obs} e delle σ . In questo caso, quindi, l'errore compiuto nella misura degli F_o risulta casualmente distribuito su tutti i riflessi e non determina errori sistematici nella valutazione del modello cristallografico — eccetto che per i parametri termici equivalenti isotropi, stimati più bassi. Analogo risultato si ottiene nei cristalli analizzati scegliendo una apertura minore di quella necessaria.

Un confronto sui valori di R_{sym} (fattore di accordo tra i riflessi equivalenti per simmetria) è stato compiuto per 14 cpx di forma approssimativamente prismatico prima e dopo l'applicazione della correzione semi-empirica di assorbimento secondo il metodo di North, Philips e Matthews (scansione ψ). Il miglioramento del fattore di accordo risulta spesso rilevante, ed il confronto sottolinea il buon uso di R_{sym} come parametro di stima della qualità ed autoconsistenza delle raccolte dati.

* Dipartimento di Scienze della Terra, Università della Calabria.

* Istituto di Mineralogia e Petrologia dell'Università di Modena.

DAVOLI P.* - Alcuni problemi metodologici nelle raccolte dati al diffrattometro a quattro cerchi

Nel corso di uno studio cristallografico della serie aegirina-augite, sono state compiute valutazioni ed indagini sperimentali su alcune modalità di raccolta e di correzione dei dati misurati al diffrattometro automatico a quattro cerchi (CAD4, ENRAF-NONIUS).

È stata compiuta una analisi dei principali contributi esistenti in letteratura sul problema della scelta dell'accoppiamento delle velocità del cristallo e del rivelatore nella scansione del nodo del reticolo reciproco (scansione ω , ω/θ , $\omega/2\theta$): essi non paiono sempre univoci sull'argomento. Per raccolte dati con cristallo monocromatore, radiazione $Mok\alpha$, $\theta \leq 30$], se la scansione del nodo del r.r. è fatta in $\omega/2\theta$ la scelta dell'apertura orizzontale del rivelatore risulta critica in funzione della mosaicità del cristallo.

Quattro clinopirosseni sono stati analizzati al diffrattometro a quattro cerchi. Per un certo numero di riflessi è stata verificata l'influenza di crescenti aperture orizzontali del rivelatore sull'intensità misurata, per i tre diversi tipi di scansione (ω , ω/θ , $\omega/2\theta$). I risultati sono comparati e discussi. Sono poi state effettuate raccolte

DAVOLI P.* - Uno studio cristallografico della serie aegirina-augite: risultati preliminari

È stato effettuato uno studio cristallografico sistematico della serie aegirina-augite. Circa una trentina di campioni di differenti rocce alcalino-intrusive sono state caratterizzate con analisi esplorative alla microsonda elettronica.

Sono state determinate le costanti di cella di numerose aegirina-augiti al diffrattometro a cristallo singolo CAD4 (ENRAF-NONIUS). Con 14 di questi cristalli che mostravano il miglior comportamento in diffrazione è stata effettuata la raccolta dei dati di diffrazione fino a $\theta = 30^\circ$ con radiazione $Mok\alpha$. Il raffinamento cristallografico — nel gruppo spaziale C2/c — ha dato valori finali di R_{obs} da 0.009 a 0.015 ($I > 5\sigma(I)$), e σ medie sulle distanze di legame inferiori a 0.001. Tra questi, è presente il secondo raffinamento di una aegirina praticamente pura con un valore finale di R_{obs} pari a 0.010 — precedente raffinamento di CLARK et al. (1969), $R_{obs} = 0.035$.

Le costanti di cella coprono i seguenti intervalli: $a = 9.653 \div 9.780$ (Å), $b = 8.790 \div 8.947$ (Å), $c = 5.295 \div 5.268$ (Å), $\beta = 107.41 \div 105.69$ (°), $V = 428.7 \div 443.8$ (Å³) (il secondo dato si riferisce al termine più povero in acmite).