

- 2) elements with the different valence and the equal coordination number;
- 3) elements with the equal valence and the different coordination number;
- 4) elements with the different valence and the different coordination number.

Dealing with the pairs of the first group, it has been possible to remark that some pairs have confirmed the requisite of the geochemical coherence, other have made it evident.

\* Dipartimento Georisorse e Territorio, Politecnico di Torino.

OMENETTO O.\*, MEGGIOLARO V.\*, SPAGNA P.\*, BRIGÒ L.\*\*, FERLA P.\*\*\*, GUION J.L.\*\*\*\* - *Scheelite-bearing metalliferous sequence of southeastern Peloritani Mountains (NE-Sicily)*

Polymetallic (Pb, Zn, Cu, Sb, Ni, As, F, Ag) and recently discovered (R & D programme EEC/Ente Minerario Siciliano) tungsten ores are widespread in the Hercynian metamorphic series of Mandanici Unit, outcropping on the southeastern slope of the Peloritani Mountains (Fiumedinisi - Tripi area). The Mondanici Unit consists of low-grade micaschists, phyllites and marbles, with some intercalated metabasites, affected by two principal deformation/metamorphic events. In the Fiumedinisi area, phyllites prevail and ores are essentially confined horizontal, comprised between an upper and a lower marble levels and characterized by noticeable thickness variations and lateral/vertical facies changes. At the base of this ore-bearing horizon, an ubiquitous marker is recognizable, in the form of a thick «crust» of Fe-Mn carbonates/oxides (with traces of galena, pyrite and barite) at the top of the lower marble. In the overlying sequence the mineralizations show different geochemical characterization and lithostratigraphic affinity:

— Pb, Zn, F (Ag) ores with locally increasing contents of Cu (Au) are linked to medium-thick ( $\geq 50$  m) series of graphitic phyllites and quartzites, with minor volcanogenic intercalations. The stratiform, pre-metamorphic character of the mineralization is preserved in the Tripi-Giampileri area. In the Fiumedinisi region, severe polyphasical post-S<sub>2</sub> deformation induced transposition of stratiform layers, folding and fragmentation into individual, subvertical lenses.

Capping these lenses, tourmaline + arsenopyrite  $\pm$  scheelite-bearing quartzites are observable, genetically related and subsequently affected by the same above mentioned polyphasical deformation processes. Connected are also some «mobilized» fluorite + sulfides stockworks and particular scheelite-wolframite assemblage;

— Sb (Cu, Pb) ores, included within thick ( $\geq 100$  m) sequences of phyllites, quartz-phyllites, quartzites (graphitic p.p.) grading downwards to mineralized

quartz-siderite calcshist facies and to iron carbonate phyllites;

— tungsten ores (with contents up to 50%) discovered within several outcropping sequences of reduced thickness ( $\leq 20$  m). Main lithologies are «black schists», graphitic and ankeritic phyllites. Ore paragenesis is monotonous (quartz, carbonate (Fe), Ca-plagioclase, apatite with traces of pyrite, graphite) but the textural features are quite variable, because of intense deformation/lamination endured by the primary ore when coming into tectonic contact with the overthrust upper Aspromonte Nappe.

Some mineralizations are also observable below and above the principal ore horizon: in the basal part of the lower marble, limited quartz  $\pm$  scheelite veinlets and karst cavities filled with Cu-Sb-sulphosalts and Fe-Mn oxides  $\pm$  barite; above the upper marble, in the basal section of upper green phyllites with metabasite intercalations, stockworks with Ni-As (gersdorffite)-Cu-Sb (Ag) ores.

The geodynamic and metallogenic significance and role of the Mandanici Unit in the framework of Hercynian crystalline basement of Calabrian-Peloritan Arc are briefly discussed.

\* Istituto di Mineralogia e Petrologia dell'Università di Padova.  
\*\* Istituto di Mineralogia, Università di Ferrara. \*\*\* Istituto di Mineralogia e Petrografia, Università di Palermo. \*\*\*\* Laboratoire de Minéralogie, Université Catholique de Louvain, Belgique.

PUGLISI D.\* - *I minerali pesanti delle successioni arenacee cretaccio-terziarie della catena maghrebide siciliana*

Il confronto delle associazioni di minerali pesanti riscontrate nelle arenarie di tutte le successioni torbiditiche della Sicilia nord-orientale evidenzia:

a) *una sostanziale omogeneità*, almeno sotto il profilo qualitativo, tra le associazioni di depositi eo-oligomiocenici delle unità strutturalmente più elevate della catena maghrebide siciliana (unità a falde di basamento riferite ad un dominio di sedimentazione interno, dominio «austroalpino» AUCT.), le associazioni delle torbiditi cretaccio-terziarie facenti parte invece delle unità tettoniche più profonde (Unità Sicilidi AUCT., riferite ad aree di sedimentazione più esterne),

b) *una comune provenienza* dei materiali costitutivi di entrambi i depositi dai terreni cristallini ercinici che attualmente costituiscono il massiccio dei Monti Peloritani. Si tratta nel complesso di associazioni mediamente mature (Indice ZTR pari in media a 25%) con abbondante granato e con costante presenza di specie mineralogiche indicative di una provenienza da metamorfiti di vario grado (cloritoide e straurolite) e da plutoniti (monazite, xenotime e titanite).

Inoltre le differenze osservate nelle associazioni di minerali pesanti dei depositi sicilidi permettono di avanzare alcune ipotesi sulle caratteristiche paleogeografiche dei bacini di drenaggio:

- l'elevato Indice ZTR delle associazioni di Flysch di Monte Soro può infatti essere indicativo di aree di alimentazione peneplanate e, comunque, non ancora deformate in tempi cretaci, e
- l'elevato contenuto in clinopirosseni e anfiboli nelle associazioni del Flysch di Troina-Tusa testimonia un'alimentazione anche da sorgenti vulcaniche, attive nell'Oligocene superiore e ubicate nelle zone dei massicci cristallini interni.

\* Istituto di Scienze della Terra, Università di Catania.

QUARTIERI S.\*, DEMONTIS P.\*\*, SUFFRITTI G.B.\*\*, FOIS E.S.\*\*\*, GAMBA A.\*\*\* - *Applicazioni della Dinamica Molecolare allo studio della zeolite A*

La tecnica della Dinamica Molecolare (DM) è stata utilizzata per uno studio della proprietà statiche e dinamiche di un sistema reale di grande interesse: la zeolite A.

Le simulazioni riguardano la fase anidra della zeolite A di sodio e sono state eseguite con due diversi modelli di potenziale atomo-atomo.

Il primo è un semplice modello armonico che utilizza distanze di equilibrio standard e costanti di forza valutate dagli spettri IR sperimentali. Il secondo è un modello di potenziale anarmonico espresso tramite serie di potenziale al 5° ordine.

Il sistema di DM utilizzato corrisponde ad una cella cristallografica di simmetria  $Fm\bar{3}c$  e lato di 24,555 Å, in cui tutti gli atomi dell'impalcatura aluminosilicatica e tutti gli ioni sodio sono liberi di muoversi privi di vincoli o restrinzioni di simmetria.

Dalle traiettorie di DM sono state calcolate le seguenti proprietà strutturali statiche e dinamiche:

- coordinate atomiche medie;
- fattori di temperatura atomici;
- spettro vibrazionale.

Quest'ultima proprietà è stata ottenuta seguendo la procedura di Berens e Wilson, basata sulla Teoria della Risposta Lineare, che deriva lo spettro dalla trasformata di Fourier della funzione di autocorrelazione del momento di dipolo del sistema.

Nonostante la semplicità dei potenziali adottati, i risultati ottenuti sono in buon accordo con i dati sperimentali.

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

\*\* Istituto di Chimica Fisica, Università di Sassari. \*\*\* Dipartimento di Chimica Fisica ed Elettrochimica, Università di Milano.

ROMANO R.\*, TADDEUCCI A.\*\*\*, VOLTAGGIO M.\*\*\* - *Datazione col metodo del Th-230 di alcuni travertini depositi sul versante sud-occidentale del M.te Etna*

Le datazioni sono state effettuate su materiali prove-

nienti da tre banchi di travertino sovrastanti le lave nella zona di Adrano.

Le età ottenute, comprese fra i 6.000 ed i 24.000 anni, tengono conto delle correzioni dovute alla presenza di Th-230 nella frazione non carbonatica. Attraverso una cronologia di dettaglio, e considerando le variazioni del rapporto U-234/U-238 nella frazione carbonatica dei travertini, è stato possibile correlare la deposizione di questi materiali e di un livello cineritico a questi intercalato, con alcuni importanti eventi tettonici culminati con l'inizio dell'attività del Mongibello antico e con il collasso della Caldera della Valle del Leone.

\* Istituto Nazionale Vulcanologia. C.N.R., Catania. \*\* Dipartimento Scienze della Terra, Università di Roma «La Sapienza». \*\*\* C.S. Geochimico Geocronologico formazioni recenti. C.N.R., Roma.

ROSSI G.\*, OBERTI R.\*, DAL NEGRO A.\*\*\*, MOLIN M.\*\*\*, MELLINI M.\*\*\* - *On the residual electron density at the M2 site in C2/c clinopyroxenes: a combined crystallographic and TEM approach*

Final difference Fourier maps obtained after X-ray single crystal refinements of clinopyroxenes frequently reveal a residual peak near the M2 site, shifted along the diad axis towards the position occupied by Mg in clinoenstatite. This feature (henceforth called M2') has been shown to be due to an asymmetric broadening of the electron density at the M2 site with respect to the symmetrical shape observed, for instance, in diopside and in fassaïtes.

A systematic crystallographic and TEM study has been carried out on natural clinopyroxenes of different chemical compositions belonging to rocks of different geological origin and on synthetic material, in order to evidenciate possible correlations between the height of the M2' residual peak and a) the site population in M2; b) the physico-chemical conditions of formation; c) the presence of microstructures such as exsolution phenomena, which can affect X-ray results.

The conclusion is that the presence of M2' is only inversely related to the Ca+Na content in the clinopyroxene, even if it is enhanced in volcanic samples than in metamorphic ones of similar composition. Incipient exsolution textures, when present, correlate well with the subsolidus evolution of the rocks (more advanced exsolution occurs in the more slowly cooled clinopyroxenes) and are absent in synthetic samples.

X-ray structure refinement performed at increasing resolution from 0.7 to 0.4 Å showed that the height of the residual peak and its apparent distance from M2 depend on resolution: as resolution increases, the height increases and the distance decreases. The true location of this peak should therefore be at less than 0.4 Å from M2, which is the experimental limit of our diffractometers using  $M\alpha$  radiation; the superimposition of the M2 and M2' peaks gives the asymmetric broadening observed in the final difference Fourier map.