

- 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 clinopyroxene. 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 fassaite.

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.

It is reasonable to assume that the splitting on the M2 site is only due to the smaller Fe, Mg cations, which tend to move along the diad axis towards the 1 and 02 oxygens, so as to form a distorted pyramid similar to that found in  $Zn_2Si_2O_6$ . The inverse correlation observed between the equivalent thermal factors of M2 and 02 and the Ca + Na content is in agreement with this hypothesis; high resolution difference Fourier maps performed on low Ca + Na samples show in fact the splitting of 02, which is strongly underbonded and tends to improve its charge balance by moving towards the divalent cations occurring in M2'.

X-ray refinements carried out by considering Ca + Na in the M2 position of diopside and hedenbergite and Mg + Fe in that of clinoenstatite and clinoferrrosilite resulted in final disagreement indexes lower than those previously obtained by using the position of the residual peak in the difference Fourier map. After this treatment, the final difference Fourier map is featureless.

\* C.N.R. Centro Studio Cristallografia Strutturale, Pavia. \*\* C.N.R. Centro Studio Orogeno Alpi Orientali, Padova. \*\*\* C.N.R. Centro Studio Geologia Strutturale Dinamica Appennino, Pisa.

### SCANDALE E.\* , STASI F.\* - *Sui difetti planari di crescita in monocristalli naturali di Berillo*

Vengono illustrati i risultati di una dettagliata analisi del contrasto di diffrazione di un difetto planare di crescita osservato in un monocristallo di Berillo brasiliano. L'interesse per il suddetto difetto planare consiste nel fatto che esso è un difetto di impilamento (stachin-fault) del tutto casuale, dipendendo unicamente da variazioni locali di accrescimento. Il difetto è caratterizzato attraverso il vettore reticolare  $R$  che rappresenta lo spostamento della porzione di cristallo al di sotto del difetto rispetto a quella al di sopra. Il contrasto di diffrazione è originato dallo sfasamento subito dai  $r.X$  nell'attraversamento del difetto planare, come risulta dall'espressione  $F^b = F^t \exp(i\delta)$  ove  $\delta = 2\pi g.R$ ,  $g$  è il vettore del reticolo reciproco corrispondente eccitata.

L'analisi del contrasto ha consentito di stabilire che i più piccoli vettori che descrivono il difetto sono  $\pm [0001]$ .

Questi vettori sono associati rispettivamente alla condensazione di uno strato di vacanze o di atomi interstiziali. È quindi importante ai fini della ricostruzione della storia di crescita la distinzione fra difetti intrinseci (+R) ed estrinseci (-R). Questa distinzione può essere fatta mediante lo studio della intensità diffratta  $I_{D(hkl)}$  alla superficie di uscita. L'esame delle frange di diffrazione consente di affermare che il difetto è dovuto all'inserzione di un ex-trapianto di atomi interstiziali condensati. La conclusione sulla natura estrinseca del difetto di impilamento è in perfetto accordo con la ricostruzione della storia di crescita del cristallo.

\* Dipartimento Geomineralogico, Università di Bari.

### SCUDELER BACCALLE L.\* - *Distribuzione del Mn in biostromi algali aquitaniani della fascia pedemontana tra Paderno del Grappa e Vittorio Veneto (Treviso)*

Per misurare il Mn legato al reticolo carbonatico, moduli algali (Rodoliti) aquitaniani sono stati analizzati secondo la metodologia di DUCHI e VINCI (1980).

I risultati suggeriscono che i campioni analizzati possono essere divisi in due gruppi geograficamente distinti: uno a Oriente del Piave con tenore medio in Mn di 47 ppm (28,4% in più rispetto a corrispondenti forme di Rodoficce attuali, MILLIMAN, 1974) e uno a Occidente del Piave con valori medi di 30 ppm (15,7% in meno rispetto alle attuali).

Nel tentativo di trovare una spiegazione a questi diversi contenuti, che, a prima vista, sembrano indipendenti dalle caratteristiche sedimentologiche del deposito, dal residuo insolubile e comunque non influenzate dall'associata frazione silico-clastica (L. SCUDELER BACCALLE e F. MARUSSO, 1982), è in preparazione lo studio per gli stessi campioni della distribuzione di Mg, Sr, Fe, Na e K. Se anche questi elementi in traccia rivelassero comportamenti distinti nelle due zone, potrebbero suggerire differenti apporti e/o diverse modalità di circolazione dei fluidi diagenetici.

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

### UNGARETTI L.\* , OBERTI R.\* , CANNILLO E.\* , SMITH C.D.\*\* - *Discrimination of petrogenetic conditions by means of X-ray single crystal refinements on clin amphiboles*

Crystal-chemical parameters (cell dimensions, bond distance and angles, mean atomic numbers per site) have been obtained with high confidence levels from over 400 X-ray single crystal refinements performed in our laboratory on an amphibole sampling which is representative of the possible physico-chemical conditions of crystallization. Site populations have been accurately determined by using an updated version of the program CORANF (CANNILLO et al., this meeting). In order to exploit this considerable amount of data, a systematic study has been undertaken in an attempt to determine the ranges of structural parameters and chemical compositions consistent with some specific P, T conditions of crystallization and also to find some reliable interrelationships between these factors.

Multiple discriminant analysis has been used to achieve this goal. 276 amphiboles from rocks of well known geological origin were used to calculate the discriminant equations which allow distinction between different populations. Founding on the promising results of a preliminary and less detailed work (UNGARETTI et al. IMA 1986, Abstract, p. 252), this starting set has been now divided into five groups: Ef = effusive and In = intrusive igneous rocks, excluding all samples with