

sono contenute quattro unità stechiometriche. Per la determinazione della struttura cristallina mediante i raggi X sono state raccolte, con camera di Weissenberg, oltre 1000 riflessioni non equivalenti, e le intensità delle stesse sono state misurate fotometricamente. La struttura è stata risolta attraverso lo studio di una proiezione di Patterson bidimensionale, che ha permesso di individuare le posizioni degli atomi di bario; le coordinate degli altri atomi sono state ricavate da una successiva sintesi tridimensionale della densità elettronica.

Il raffinamento è stato eseguito con il metodo dei minimi quadrati, utilizzando un programma di calcolo a matrice completa; sono state applicate le correzioni di dispersione anomala per il bario e di estinzione secondaria per tutti i fattori di struttura osservati. Sono stati anche ricavati e raffinati i parametri termici anisotropi. Il fattore di disaccordo finale relativo alle sole riflessioni osservate è:  $R = 0,047$ .

Dall'indagine strutturale si ricava che la krauskopfite appartiene agli inosilicati. Un ossigeno di ogni tetraedro  $[\text{SiO}_4]^{4-}$  satura una valenza con un atomo d'idrogeno: in altri termini ogni atomo di silicio è legato a un ossidrilico; la formula chimica può perciò essere scritta come:  $\text{Ba}[\text{Si}_2\text{O}_4(\text{OH})_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ . Nella struttura è presente un sistema di legami idrogenici e, in via d'ipotesi, ne è stato proposto un modello fondato sulla regola di Pauling delle valenze elettrostatiche; in questo modello ogni atomo d'idrogeno partecipa a un legame idrogenico.

La coordinazione degli atomi di bario è nove; essi appaiono, in prima approssimazione, adagiati in strati paralleli ai piani (100). Le distanze e gli angoli di legame relativi ai tetraedri  $[\text{SiO}_4]^{4-}$ , come pure le distanze Ba-O rientrano nella norma (le distanze Si-O variano fra 1,560 e 1,654 Å, le distanze Ba-O fra 2,743 e 3,010 Å, con deviazioni standard di 0,007 Å).

CODA A., GIUSEPPETTI G. e TADINI C.: *La struttura cristallina della wagnerite.*

La wagnerite con formula chimica  $\text{Mg}_2\text{PO}_4\text{F}$ , è monoclina prismatica con costanti:

$$a_0 = 9,44 \quad b_0 = 12,679 \quad c_0 = 11,957 \text{ \AA} \quad \beta = 108^\circ 18'$$

$$Z = 16; \text{ gruppo spaziale } P2_1/c.$$

La determinazione della struttura è stata realizzata per mezzo di fotogrammi Weissenberg dei livelli da 0 a 8 secondo l'asse di rotazione  $[010]$ , radiazione  $\text{CuK}\alpha$ . Dai fotogrammi ottenuti veniva notato che i riflessi  $(hkl)$  con  $k = 2n$  avevano una intensità media assai superiore a quelli con  $k = 2n + 1$ . Escludendo questi ultimi riflessi la struttura poteva riferirsi ai tre periodi reticolari:  $a_0$ ,  $b_0/2$ ,  $c_0$ , con una pseudocella appartenente al gruppo spaziale  $I2/c$ .

Basandosi su questa pseudocella di volume metà della vera e mediante sezioni Patterson normali a  $[010]$  si sono trovate le coordinate degli atomi di magnesio, fosforo e ossigeno. Sulle sezioni di densità elettronica, eseguite normalmente a  $[010]$ , mentre si notavano chiaramente i massimi corrispondenti alle posizioni degli atomi su scritti, si osservavano anche altri massimi attribuibili al fluoro però in numero doppio di quello degli stessi atomi presenti realmente nella pseudocella. Questo poteva far pensare che la differenza fra ognuna delle due porzioni di cella vera che costituivano la pseudocella a periodo  $b_0/2$  fosse unicamente data da una particolare distribuzione degli atomi di fluoro fra le posizioni dei massimi su riferiti, mentre gli atomi del magnesio, fosforo e ossigeno dovevano occupare all'incirca le stesse posizioni nelle due porzioni.

Su questa base venivano date le coordinate degli atomi per la cella vera relativa al gruppo spaziale  $P2_1/c$ . Furono quindi eseguite sezioni di densità elettronica utilizzando anche i riflessi con  $k = 2n + 1$ , i cui segni erano stati ricavati da un calcolo di fattori di struttura cui contribuivano i soli atomi di fluoro nelle posizioni previste. L'ipotesi si rivelò corretta e la struttura è stata successivamente raffinata con alcuni cicli di minimi quadrati raggiungendo un fattore di discordanza  $R$  di 0,064 per tutti i riflessi osservati eccetto quelli affetti da estinzione.

Nella struttura sono presenti ottaedri di coordinazione  $MgO_4F_2$  non regolari, poliedri a coordinazione cinque,  $MgO_4F$  riferibili a bipiramidi trigonali alquanto distorte ed infine gruppi tetraedrici  $PO_4$  abbastanza regolari. Tutti questi poliedri risultano fra di loro concatenati nelle diverse direzioni dello spazio. In particolare i poliedri del magnesio hanno in comune a seconda dei casi uno spigolo (dato da due atomi di ossigeno, oppure da un atomo di fluoro e da uno di ossigeno). Ogni atomo di ossigeno partecipa così alla coordinazione di due atomi di magnesio e di uno di fosforo, mentre ogni atomo di fluoro è coordinato a tre diversi atomi di magnesio.

Tutte le distanze di legame rientrano nella norma.

CODA A., ROSSI G. e UNGARETTI I.: *La struttura cristallina della aminoffite.*

L'aminoffite è un silicato avente la seguente formula chimica:  $Ca_3(BeOH)_2Si_3O_{10}$ . Le dimensioni della cella elementare sono:  $a = 9.865$ ,  $c = 9.930$  Å; il gruppo spaziale è  $P4_2/n$ ,  $Z = 4$ .

Per la determinazione della struttura cristallina è stato usato un frammento cristallino tolto da un campione proveniente da Långban (Svezia). Sono stati ripresi fotogrammi Weissenberg dei riflessi hkl con  $h$  compreso tra 0 e 5.