

RIGAULT G. e GRAZIOSI G.: *Utilità dell'algebra delle matrici nei calcoli cristallografici.*

Vengono discusse le applicazioni dell'algebra delle matrici nei calcoli cristallografici, dimostrandone l'utilità sia in campo didattico sia nell'esecuzione pratica dei calcoli.

Mediante una opportuna matrice M^* è possibile trasformare una qualunque terna di assi cristallografici in una terna di assi ortogonali unitari; i coefficienti di tale matrice si calcolano in base ai valori delle costanti del reticolo reciproco. Moltiplicando per M^* la matrice $\begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix}$ relativa agli indici

delle facce si ottengono dei valori $h' k' l'$: noti questi valori, così trasformati, si calcolano in modo molto semplice gli angoli tra le facce, l'equidistanza dei piani reticolari e gli angoli φ , χ , 2θ per un diffrattometro automatico.

Inoltre una relazione lega i valori di φ e ϱ , misurati al goniometro a due cerchi, a quelli di $h' k' l'$, che possono essere trasformati in $h k l$ mediante l'inversa di M^* : l'indicizzazione di una faccia risulta così praticamente immediata.

Mediante una matrice M , che è l'inversa della trasposta di M^* , si possono invece trasformare gli indici $u v w$ degli assi di zona: è quindi possibile calcolare l'angolo tra gli spigoli ed effettuare inoltre le proiezioni elinografiche. La trasformazione delle coordinate degli atomi mediante M permette infine di calcolare distanze ed angoli di legame.

(Il lavoro originale verrà pubblicato su «Periodico di Mineralogia»).

RIVA DI SANSEVERINO L.: *Osservazioni sull'uso di un programma per l'applicazione dei metodi diretti nei gruppi spaziali non centrosimmetrici.*

Benché proposti da circa 20 anni, i metodi diretti di soluzione del problema delle fasi dei fattori di struttura negli studi cristallografico-strutturali si sono imposti all'attenzione generale solo di recente. Se per le sostanze appartenenti a gruppi spaziali centrosimmetrici la divulgazione e l'entrata in uso della metodologia è ormai generale, le procedure da usarsi con sostanze non centrosimmetriche sono ancora poco diffuse.

Le esperienze compiute durante studi strutturali in gruppi spaziali come $P2_1$ e $P2_12_12_1$ vengono discusse insieme ai principi generali che regolano l'uso di un programma, basato sulla applicazione della formula della tan-

gente di Karle e Karle, che ha dato risultati positivi anche con gruppi spaziali centrosimmetrici.

Sono poi sottolineati i risultati e le cause di successi e insuccessi nella produzione di una serie di fasi che indichi, nella successiva sintesi tridimensionale Fourier, la struttura della sostanza senza sostanziale intervento umano.

(Il lavoro originale verrà pubblicato su « *Atti Acc. Naz. Lincei* », Giugno 1970).

SANTACROCE R.: *Assimilazione carbonatica negli inclusi litoidi delle pomici di Case Collina-Pitigliano (Grosseto).*

Vengono riferiti i risultati di uno studio sugli inclusi rinvenuti nelle pomici di Case Collina, nei pressi di Pitigliano (Grosseto).

Accanto a blocchi provenienti dal substrato vulcanico della zona ve ne sono altri di natura metamorfica e tutta una serie di inclusi di natura fonolitica a chimismo variabile.

Lo studio eseguito porta a ricostruire un processo di assimilazione carbonatica da parte del magma trachitfonolitico che ha dato origine alle pomici.

(Il lavoro originale verrà pubblicato su « *Periodico di Mineralogia* »).