

CATTI M., FERRARIS G.: *Sulla determinazione di tutti i parametri reticolari da fotogrammi di Weissenberg e di rotazione intorno ad un solo asse.*

Spesso, a causa della morfologia dei cristalli e per la mancanza di strumenti adeguati, è possibile ottenere solo fotogrammi di Weissenberg e di rotazione eseguiti intorno ad una sola direzione. Risulta in tal caso assai problematica la determinazione di tutti i parametri della cella elementare per cristalli triclini o monoclini.

Abbiamo sviluppato una relazione che collega quantità misurabili su fotogrammi di Weissenberg di ordine superiore con gli spostamenti dei livelli superiori rispetto all'asse di rotazione (level offsets); da questi, come è noto, si ricavano direttamente gli angoli della cella elementare. Le quantità da misurarsi sono costituite dalle distanze tra i punti di minimo di opportuni festoni sui fotogrammi Weissenberg di ordine superiore. Il vantaggio del metodo consiste essenzialmente nel fatto che non sono richiesti riferimenti estranei al fotogramma.

(Il lavoro originale verrà pubblicato su «*Zeitschrift für Kristallographie*», 1973).

CANNILLO E., ROSSI G., UNGARETTI L.: *La struttura cristallina dell'elpidite.*

Una rozza determinazione della struttura cristallina dell'elpidite  $ZrNa_2Si_6O_{15} \cdot 3H_2O$ , era stata fatta nel 1964 da autori russi usando cristalli provenienti da Lovozero. A causa della cattiva qualità del materiale usato (i cristalli erano geminati polisinteticamente) gli autori russi non riuscivano a ottenere un fattore di discordanza inferiore al 21%, nonostante avessero attribuito al minerale un gruppo spaziale non centrosimmetrico; inoltre le distanze di legame da essi pubblicate erano fuori dai limiti di accettabilità.

Un recente ritrovamento di elpidite nei prodotti delle manifestazioni tardo-magmatiche della sienite nefelinica del Monte St. Hilaire (Canada) ha suggerito una revisione della struttura di questo silicato. I cristalli del M. St. Hilaire non sono geminati e presentano uno dei lati della cella elementare (il lato  $b$ ) raddoppiato rispetto all'elpidite di Lovozero:  $a = 7.14$ ,  $b = 14.68$ ,  $c = 14.65$  Å; gr. sp. Pbcm,  $Z = 4$ . Un problema particolare era costituito dalla determinazione della vera struttura, dato che i riflessi con  $k = 2n + 1$  erano molto deboli.

La struttura determinata dai russi si rivelava corretta nelle grandi linee e attraverso l'applicazione dei metodi diretti si riusciva a determinare anche

la struttura nella cella doppia. Il raffinamento, eseguito mediante l'applicazione del metodo dei minimi quadrati, portava a un R finale del 7% su 700 riflessi osservati ripresi mediante camera di Weissenberg.

La struttura dell'elpidite è costituita da catene doppie di tetraedri  $\text{SiO}_4$ , dello stesso tipo di quelle presenti nell'epididimite; tali catene (parallele ad  $a$ ) sono unite tra loro da atomi di zirconio in coordinazione ottaedrica. Gli atomi di sodio trovano posto in cavità presenti nell'impalcatura costituita dagli ottaedri dello zirconio e dalle catene di tetraedri. Leggere distorsioni presenti nelle catene tetraedriche danno luogo al raddoppiamento del lato  $b$  della cella elementare.

(Il lavoro originale verrà pubblicato su « American Mineralogist », 1973).

CANNILLO E., DAL NEGRO A., UNGARETTI L.: *La struttura cristallina della ezcurrite.*

L'ezcurrite, borato idrato di formula chimica  $2\text{Na}_2\text{O} \cdot 5\text{B}_2\text{O}_3 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ , è stato descritto come nuovo minerale da Muessig e Allen nel 1957; è stato successivamente studiato da Aristarain e Hurlbut (1967) che ne determinarono il gruppo spaziale, i parametri della cella elementare, ne fecero un'accurata analisi chimica e ne dettero le principali proprietà ottiche. Il presente studio strutturale ha confermato i risultati cristallografici di Aristarain e Hurlbut che vengono qui riportati:

$$a = 8,598(2), b = 9,570(2), c = 6,576(2), \alpha = 102^\circ 45'(3'), \\ \beta = 107^\circ 30'(3'), \gamma = 71^\circ 31'(3'), P1^1, Z = 2, D_{\text{mis}} = 2,053, D_{\text{calc}} = 2,049.$$

Un piccolo frammento prismatico è stato montato su una camera di Weissenberg, mediante la quale è stato raccolto circa il 90% dei riflessi (1974) presenti nella sfera limite del rame. La struttura è stata risolta mediante i metodi diretti. Il raffinamento anisotropo, effettuato su tutti gli atomi all'infuori degli idrogeni, ha condotto ad un indice di discordanza  $R = 0,06$ . Su una sintesi di Fourier delle differenze sono stati localizzati i cinque atomi di idrogeno (su sette presenti nella cella elementare) implicati in legami ad idrogeno. L'indice di discordanza finale è risultato essere  $R = 0,050$  per i riflessi osservati.

La caratteristica principale della struttura cristallina della ezcurrite è data dalla presenza di catene sviluppantesi nella direzione dell'asse  $c$  e formate dal ripetersi dell'unità  $[\text{B}_5\text{O}_7(\text{OH})_3]^{2-}$ . Tale polianione è costituito da due anelli a sei membri (quasi perpendicolari fra loro) formati da atomi di boro e di ossigeno; un atomo di boro tetraedrico è in comune ai due anelli. Nel primo di questi sono presenti due atomi di boro tetraedrici ed uno triangolare, mentre l'altro anello è costituito da un boro tetraedrico e da due bori triangolari. Fra le catene boro-ossigeno si trovano gli atomi di sodio, uno con coordinazione sette, l'altro con coordinazione sei. Le due molecole d'acqua pre-