

GIUSEPPETTI G., TADINI C.: *Raffinamento della struttura cristallina della Berillonite: NaBePO₄.*

Le costanti reticolari della berillonite, NaBePO₄ sono: $a = 8.178 \pm (3) \text{ \AA}$, $b = 7.818 \pm (2) \text{ \AA}$, $c = 14.114 \pm (6) \text{ \AA}$, $\beta = 90^\circ$, $Z = 12$, gruppo spaziale: $P2_1/n$.

Le intensità di 1388 riflessi osservati sono state misurate su fotogrammi di Weissenberg ripresi con la radiazione CuK α . Il raffinamento della struttura mediante minimi quadrati è stato ottenuto partendo dai parametri atomici dati dal Golovastikov che precedentemente (1962) si era occupato della struttura di questo minerale. Il fattore finale di discordanza è $R = 0.063$.

La struttura cristallina a concatenamento tridimensionale dei tetraedri del fosforo e del berillio, proposta dal precedente autore, è stata confermata. Nella struttura è presente una spiccata pseudosimmetria trigonale: $a\sqrt{3} = 14.16 \text{ \AA}$, circa uguale a c . Questa spiccata simmetria pseudotrigonale è conseguenza del fatto che l'impalcatura tetraedrica tridimensionale deriva dall'unione di strati formanti anelli di sei tetraedri a simmetria praticamente ditrigonale.

Le distanze medie P-O e Be-O sono rispettivamente di 1.528 e 1.632 \AA . Gli atomi di sodio giacciono nei canali formati da questi anelli: dei tre atomi di sodio indipendenti, due presentano coordinazione ottaedrica, il terzo coordina invece nove ossigeni; entrambi i poliedri risultano piuttosto distorti. Le distanze Na-O variano da 2.283 a 2.834 \AA .

(Il lavoro originale verrà pubblicato su «Tsch. Miner. u. Petrogr. Mitt.»).

DAL NEGRO A., SABELLI C., UNGARETTI L.: *La struttura cristallina della rivadavite.*

La rivadavite è un borato idrato di sodio e magnesio, $3\text{Na}_2\text{O} \cdot \text{MgO} \cdot 12\text{B}_2\text{O}_3 \cdot 22\text{H}_2\text{O}$, ritrovato per la prima volta a Tincalayu in Argentina da Hurlbut e Aristarain.

Le costanti reticolari da noi determinate sono le seguenti: $a = 15.870$, $b = 8.010$, $c = 22.256 \text{ \AA}$, $\beta = 116^\circ 26'$, gruppo spaziale $P2_1/c$ contrariamente a quello trovato dagli autori sopra citati che era il $P2_1/m$.

Sono state raccolte circa 4000 riflessioni, valutate al microdensitometro su fotogrammi integrati di Weissenberg (CuK α). Si è risolta la struttura con il metodo dell'addizione simbolica usando il programma MULTAN su 486

riflessioni con $E \geq 1.56$. Dalla mappa degli E si sono potute ricavare le coordinate del magnesio, dei sodi e di una parte degli ossigeni.

Partendo da queste coordinate con successive sintesi di Fourier tridimensionali è stato possibile individuare i rimanenti ossigeni e i bori. Un affinamento isotropo delle coordinate di tutti gli atomi, esclusi gli idrogeni, ha portato dopo tre cicli di minimi quadrati a un fattore di discordanza $R = 0.10$.

La caratteristica principale della struttura della rivadavite è la presenza di due polianioni indipendenti $[\text{B}_6\text{O}_7(\text{OH})_6]^{2-}$ già ritrovati in altri borati da noi studiati. La formula strutturale della rivadavite è perciò la seguente: $\text{Na}_6\text{Mg}[\text{B}_6\text{O}_7(\text{OH})_6]_4 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$.

Il collegamento tra i polianioni avviene sia attraverso l'ottaedro del magnesio che attraverso i poliedri dei tre atomi di sodio, anch'essi in coordinazione sei. Un ulteriore concatenamento tridimensionale è assicurato dagli idrogeni. Anche nella rivadavite come nella teruggite è presente una molecola d'acqua che non partecipa alla coordinazione di alcun catione ma è legata al resto della struttura solo attraverso legami d'idrogeno.

Le distanze e gli angoli di legame sono tutti paragonabili ai corrispondenti valori già noti in letteratura.

(Il lavoro originale verrà pubblicato su «Naturwissenschaften»).

DAL NEGRO A., SABELLI C., TAZZOLI V.: *La struttura cristallina della thomsonite.*

La thomsonite è una zeolite fibrosa di formula $\text{NaCa}_2\text{Al}_5\text{Si}_5\text{O}_{20}6\text{H}_2\text{O}$; le costanti reticolari sono: $a = 13.07$, $b = 13.09$, $c = 13.25 \text{ \AA}$; gruppo spaziale Pnna, $Z = 4$. La struttura era stata determinata nel 1933 da H. W. F. Taylor nella pseudocella con c dimezzato. Taylor però non era riuscito a stabilire la distribuzione dei cationi tetraedrici e a determinare con certezza la posizione degli atomi (sodio, calcio e molecole d'acqua) presenti nei canali. Esisteva inoltre incertezza sul gruppo spaziale poiché un autore aveva riscontrato nella thomsonite un sensibile effetto piroelettrico.

La risoluzione della struttura è stata ottenuta usando i metodi diretti con intensità ottenute da fotogrammi di Weissenberg. Il raffinamento, eseguito col metodo dei minimi quadrati nel gruppo spaziale centrosimmetrico Pnna, ha portato a un indice di discordanza $R = 0.063$ per 1580 riflessi osservati.

La determinazione strutturale di Taylor si è rivelata essenzialmente corretta. Le principali differenze si riscontrano nella distribuzione Si-Al nei tetraedri e nella posizione degli atomi nei canali. La distribuzione Si-Al è