

PERRIER C. e FUMI F.: a) **Energia di reticolato.**

Introdotta il concetto di energia di reticolato in base alla definizione datane da BORN, si passa ad esporre il principio dei metodi termodinamici di calcolo (cicli di BORN-HABER e di FAJANS).

Vengono quindi discussi i diversi termini che costituiscono l'espressione analitica dell'energia di reticolato allo zero assoluto e pressione nulla: l'energia potenziale elettrostatica attrattiva, l'energia potenziale elettrostatica repulsiva (nelle diverse forme date da BORN, PAULING, HUND e BORN-MAYER), l'energia potenziale connessa alle azioni di polarizzazione (BORN-HEISENBERG, HUND), la quale ha successivamente trovato la sua espressione più corretta nell'energia delle forze di Van der Waals o di coesione (LONDON, BORN-MAYER) ed infine la parte cinetica (BORN-MAYER).

Si accenna poi al calcolo delle energie allo 0° assoluto e pressione nulla per i diversi tipi di reticoli (jonici, molecolari ed a strati).

Nella parte finale della nota vengono prospettate le strette correlazioni tra il problema dell'energia di reticolato e la teoria degli orbitali di legame, completata col metodo di ibridizzazione di PAULING.

PERRIER C. e FUMI F.: b) **Stabilità dei reticoli.**

Esposta la caratterizzazione energetica delle condizioni di stabilità reticolare si precisa l'importanza dello studio di quest'ultima per i fondamentali problemi della cristallochimica (polimorfismo, isomorfismo, morfotropia) e si trattengono le analogie e le differenze esistenti tra questi.

Si passa poi a discutere la stabilità dei reticoli (jonici, molecolari ed a strati) tenendo conto delle espressioni analitiche dell'energia di reticolato che si hanno a disposizione, tutte valide a zero gradi assoluti e pressione nulla.

Trattando della stabilità relativa dei diversi tipi di reticoli jonici si considera dapprima soltanto l'energia potenziale elettrostatica attrattiva e si precisa il campo di

validità dei quozienti limiti di GOLDSCHMIDT per i diversi numeri di coordinazione; si tiene poi conto, con HUND, anche dell'energia potenziale elettrostatica repulsiva ed infine, con MAYER ed HELMHOLZ, di tutti i termini dell'energia di reticolato.

Per studiare poi la stabilità relativa dei reticoli molecolari ed a strati rispetto ai reticoli jonici si considera, con HUND, anche la polarizzabilità.

PERRIER C. e FUMI F.: c) Trasformazioni termodinamiche di ordine superiore in cristallografia.

Introdotta il concetto di trasformazione termodinamica di ordine superiore, secondo la definizione data da EHRENFEST, si discute quando, in base a certi caratteri, è possibile precisare l'ordine superiore di una trasformazione.

Si espongono poi le relazioni intercorrenti tra ordine delle trasformazioni e loro carattere omogeneo od eterogeneo (SMITS).

PERRIER C. e FUMI F.: d) Cause del polimorfismo.

Nella prima parte della memoria si tratta il problema del polimorfismo dal punto di vista macroscopico, esaminando l'influenza delle variabili termodinamiche, temperatura e pressione, sui diversi termini dell'espressione analitica dell'energia di reticolato e si giunge a comprendere la inversione di stabilità di due fasi cristalline di una data sostanza ad una determinata temperatura e pressione.

Nella parte finale della memoria si fa invece cenno al possibile sviluppo dello studio microfisico di tutti i problemi cristallografici ed in particolare di quello del polimorfismo, tramite la precisazione delle relazioni tra natura e stato dei leptoni da una parte e strutture cristalline e loro stabilità dall'altra, sulla base delle moderne concezioni quantistiche sui legami direzionali.