

strate in questo lavoro hanno consentito di poter stabilire con certezza che il minerale è un vero carbonato doppio di calcio e bario (con una certa possibilità di vicarianza di questi due elementi da parte dello stronzio). Inoltre hanno accertato che la cella ortorombica data da Gossner e Mussnug $a' = 4,99 \text{ \AA}$, $b' = 8,77 \text{ \AA}$, $c' = 6,11 \text{ \AA}$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ è soltanto una pseudocella possibile del reticolo; la cella vera è invece triclina pseudorombica, con lati che sono multipli interi di quelli della cella di Gossner e Mussnug $a = 30,14 \text{ \AA}$, $b = 17,40 \text{ \AA}$, $c = 6,12 \text{ \AA}$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$; i gruppi spaziali possibili per questo minerale risultano essere il C_1 ed il C_1 . Le estinzioni sistematiche osservate sono tuttavia assai più complesse di quelle richieste dalla sola centratura delle basi; le regole seguite da tali estinzioni, unitamente alle singolari caratteristiche di simmetria rilevate nei vari strati del reticolo reciproco, inducono a ritenere che il minerale sia da considerarsi un membro ordinato di una famiglia di possibili strutture OD (strutture ordine-disordine di Dornberger-Schiff).

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

M. CATTI, G. FERRARIS e A. FILHOL, *Simmetria e legami idrogeno in CaHPO_4 (monetite). Studio mediante diffrazione neutronica.*

Studi precedenti di diffrazione di raggi X e di neutroni (dati parziali) sulla monetite non sono riusciti a chiarire la simmetria della struttura ($P1$ o $P\bar{1}$) e, conseguentemente, la distribuzione dei legami idrogeno. Nell'ipotesi $P\bar{1}$ un atomo di idrogeno si troverebbe sul centro d'inversione, formando un legame idrogeno simmetrico con i due ossigeni interessati; un altro atomo d'idrogeno sarebbe distribuito statisticamente su due posizioni centrosimmetriche. Un analogo problema esiste anche per il minerale isostrutturale weilite (CaHAsO_4).

Presso il reattore ad alto flusso dell'Istituto Laue-Langevin di Grenoble, si sono misurate le intensità diffratte di 2101 riflessi su di un cristallo cilindrico di 11 mm^3 , montato su di un diffrattometro a quattro cerchi: $\lambda = 1,217 \text{ \AA}$ e $2\theta \leq 120^\circ$. Si è quindi proceduto al trattamento dei dati (1749 riflessi osservati) parallelamente nelle due ipotesi $P1$ e $P\bar{1}$, mediante l'uso combinato di mappe di Fourier e di affinamento con minimi quadrati. L'affinamento in $P1$ ha portato a un valore di R significativamente più basso che in $P\bar{1}$; tuttavia il fatto che i due modelli non differiscano sostanzialmente (anche in $P1$ è presente l'atomo d'idrogeno disordinato), unito a considerazioni cristallografiche sulle distanze e angoli di legame ottenuti nei due casi, conduce a concludere che il modello $P\bar{1}$ sia più attendibile.

(Il lavoro originale verrà pubblicato su «Acta Crystallographica»).