

Questo tipo di determinazione consente di ottenere, specie se associato all'aspetto geometrico della diffrazione, la composizione cristallografica dei minerali. Questo è un dato molto più ricco di informazioni rispetto alla semplice conoscenza della composizione chimica ottenibile con altre tecniche analitiche. Inoltre, quando sia stato studiato, con il raffinamento cristallografico, un sufficiente numero di strutture di minerali appartenenti alla stessa serie isomorfa, è possibile ricavare la composizione cristallografica di qualunque altro termine della serie in esame dalla misura delle intensità di pochi riflessi opportunamente selezionati, senza più ricorrere al raffinamento cristallografico.

Verranno illustrati esempi di applicazione della diffrattometria a cristallo singolo all'analisi dei minerali relativamente sia alle determinazioni di tipo A sia a quelle di tipo B, con ampi riferimenti ai tempi e ai costi di esecuzione, alle possibilità di applicazione e ai limiti di impiego.

Il lavoro originale verrà stampato su «Physics and Chemistry of Minerals».

* C.N.R. - Centro di Studio per la Cristallografia Strutturale e Istituto di Mineralogia, Pavia.

MENCHETTI S.*, SABELLI C.* - La struttura cristallina di $Sb_4O_4(OH)_2SO_4$, minerale di antimonio trovato a Pereta, Grosseto.

La specie in oggetto, solfato basico di antimonio che corrisponde alla composizione in ossidi $2Sb_2O_3 \cdot SO_3 \cdot H_2O$, è stata ritrovata a Pereta (Gr) sotto forma di ciuffi di aghetti incolori o gialli, di lucentezza vitrea, impiantati sia su cristalli di stibina, sia sulla matrice quarzosa portante la stibina stessa. I cristalli, allungati secondo [100] hanno un aspetto simile a quello dell'onoratoite, ma rappresentano chiaramente una specie del tutto diversa, sia nella composizione chimica sia nel diffrattogramma di polvere e quindi nella struttura cristallina.

La simmetria è rombica piramidale, gruppo spaziale $Pca2_1$, con $a = 5,766(1)$, $b = 11,274(2)$, $c = 14,887(2)$ Å. Le intensità dei riflessi sono state raccolte con un diffrattometro a 4 cerchi. La struttura è stata risolta in base alla Patterson e ai metodi diretti ed è stata raffinata fino ad un R di 0,046 per circa 1500 riflessi. È attualmente in corso un ulteriore raffinamento al fine della localizzazione degli atomi di idrogeno.

I quattro atomi indipendenti di antimonio coordinano ciascuno 4 atomi di ossigeno con distanze variabili da 1,93 a 2,52 Å. Due atomi appartengono ai due gruppi ossidrilici presenti nella formula. Dalla letteratura è noto che, tenendo conto anche del doppietto solitario dell'antimonio, i poliedri $Sb^{III}-O$ più comuni possono essere schematizzati come una bipiramide trigonale o come un tetraedro, con il doppietto occupante in ambedue i casi uno dei vertici. I poliedri di coordinazione della struttura in esame hanno un carattere intermedio fra questi due tipi limite e sono strettamente legati l'un l'altro per mezzo di spigoli in modo da formare strati. Tali strati, paralleli a (001), sono tenuti insieme tramite i tetraedri SO_4 che partecipano due dei quattro vertici con altrettanti poliedri di antimonio. Ulteriori collegamenti sono probabilmente realizzati tramite legami idrogeno.

Il lavoro originale verrà stampato su «The American Mineralogist».

Nota aggiunta — Questo minerale è quasi sicuramente da identificare con la klebelsbergite, la cui descrizione completa è in corso di stampa da parte di studiosi americani dello Smithsonian Institution, con i quali abbiamo avuto recentemente uno scambio di informazioni.

* Istituto di Mineralogia, Petrologia e Geochimica, C.N.R., Firenze.