
ATTI ACCADEMIA NAZIONALE DEI LINCEI
CLASSE SCIENZE FISICHE MATEMATICHE NATURALI

RENDICONTI

EGIZIO CORAZZA, CESARE SABELLI

Dati diffrattometrici sulla glauberite

*Atti della Accademia Nazionale dei Lincei. Classe di Scienze Fisiche,
Matematiche e Naturali. Rendiconti, Serie 8, Vol. 38 (1965), n.2, p. 223–226.*
Accademia Nazionale dei Lincei

<http://www.bdim.eu/item?id=RLINA_1965_8_38_2_223_0>

L'utilizzo e la stampa di questo documento digitale è consentito liberamente per motivi di ricerca e studio. Non è consentito l'utilizzo dello stesso per motivi commerciali. Tutte le copie di questo documento devono riportare questo avvertimento.

*Articolo digitalizzato nel quadro del programma
bdim (Biblioteca Digitale Italiana di Matematica)
SIMAI & UMI*

<http://www.bdim.eu/>

Cristallografia. — *Dati diffrattometrici sulla glauberite*^(*). Nota di EGIZIO CORAZZA e CESARE SABELLI, presentata^(**) dal Socio G. CAROBBI.

Nell'ambito del programma di ricerche della II Sezione del Centro Nazionale di Cristallografia del C.N.R. è stato intrapreso già da qualche tempo lo studio cristallografico della glauberite, $\text{CaNa}_2(\text{SO}_4)_2$. Riportiamo sinteticamente i risultati fino ad ora conseguiti nella risoluzione della struttura e, allo scopo di contribuire all'aggiornamento dell'indice A.S.T.M., pubblichiamo i dati diffrattometrici.

Nel 1931 Cardoso, Garrido e García de la Cueva [1] hanno studiato, essenzialmente dal punto di vista morfologico ed ottico, alcuni cristalli di glauberite provenienti dalla «Mina del Consuelo». In seguito Pardillo [2] [3], in due lavori del 1934 e 35, ha ripreso ed approfondito lo studio di questo minerale; questo autore confermò l'appartenenza della glauberite al sistema monoclinico e riportò i seguenti dati: $a_0 = 9,98 \text{ \AA}$; $b_0 = 8,20 \text{ \AA}$; $c_0 = 8,43 \text{ \AA}$; $\beta = 112^\circ 11'$; gruppo spaziale $C2/c$; peso specifico $2,85 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$.

Il peso specifico determinato da altri Autori su campioni di varie località, oscilla da $2,73$ a $2,85 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$.

Per il presente lavoro sono stati utilizzati cristalli provenienti da Cinchon (Madrid), al n° d'inventario 8405/315 del Museo di Mineralogia dell'Università di Firenze.

Usando b come asse di rotazione sono state eseguite riprese roentgenografiche su cristallo singolo, sfericizzato per apportare una appropriata correzione di assorbimento. I fotogrammi ottenuti con il metodo di precessione, compatibilmente con i limiti meccanici dell'apparecchio, vanno dallo $0kl$ al $5kl$ e dall' hko all' $hk4$. Sono state inoltre effettuate riprese Weissenberg dei livelli $h0l$ ed $h1l$.

Dalle estinzioni sistematiche risultano le seguenti condizioni:

$$\begin{array}{ll} hkl & h + k = 2n \\ h0l & l = 2n \end{array}$$

per le quali sono possibili i due gruppi spaziali: $C2/c$ ed il corrispondente non centrosimmetrico Cc . Poiché il minerale non presenta effetti di piezoelettricità, il gruppo spaziale più probabile è il $C2/c$.

(*) Lavoro eseguito presso la II Sezione del Centro Nazionale di Cristallografia del C.N.R., Istituto di Mineralogia di Firenze.

(**) Nella seduta del 13 febbraio 1965.

TABELLA I.

<i>h k l</i>	Campione Chinchon			A.S.T.M. n° 2-0556	
	<i>d</i> _{calc}	<i>d</i> _{oss}	I/I ₀	<i>d</i> _{oss}	I/I ₀
1 1 0	6,234	6,258	18	6,22	80
2 0 0	4,698	4,707	11	4,67	50
1 1 1	4,388	4,396	28	4,38	60
0 2 0	4,166	4,165	6	—	—
0 0 2	3,955	3,962	100	3,93	60
$\bar{1}$ 1 2	3,801	3,804	10	3,77	30
	—	—	—	3,49	40
$\bar{2}$ 2 1	3,187	3,183	53	—	—
$\bar{3}$ 1 1	3,137	3,130	40	} 3,13	100
2 2 0	3,117	3,120	37		
1 1 2	3,014	3,016	29	3,00	60
3 1 0	2,932	2,930	8	—	—
0 2 2	2,868	2,868	29	2,84	60
$\bar{2}$ 2 2	2,818	2,814	23	2,80	70
$\bar{1}$ 1 3	2,683	} 2,681	45	2,66	80
2 2 1	2,679				
	—	—	—	2,56	10
$\bar{4}$ 0 2	2,477	} 2,476	11	2,47	70
3 1 1	2,474				
$\bar{3}$ 1 3	2,439	2,437	5	—	—
4 0 0	2,349	2,348	11	2,33	70
2 2 2	2,194	2,194	4	2,19	40
$\bar{3}$ 3 1	2,147	2,144	5	2,13	50
$\bar{2}$ 0 4	2,136	2,141	4	—	—
		2,122	3	—	—
1 3 2	2,107	2,105	1	—	—
$\bar{3}$ 3 2	2,067	2,071	3	2,09	40
$\bar{1}$ 1 4	2,039	2,039	19	} 2,02	30
3 1 2	2,034	2,034	14		
0 4 1	2,014	2,012	6	} 1,99	70
$\bar{3}$ 1 4	2,003	2,002	3		
$\bar{1}$ 3 3	1,984	1,997	3		

Segue: TABELLA I.

<i>h k l</i>	Campione Chinchon			A.S.T.M. n° 2-0556					
	<i>d</i> _{calc}	<i>d</i> _{oss}	<i>I</i> / <i>I</i> ₀	<i>d</i> _{oss}	<i>I</i> / <i>I</i> ₀				
0 0 4	1,977	1,979	2	—	—				
$\bar{5}$ 1 2	1,964	}	}	}	}				
$\bar{4}$ 2 3	1,960					1,960	2	1,95	40
$\bar{2}$ 4 1	1,957					1,916	2	—	—
$\bar{4}$ 0 4	1,913	1,911	4	1,90	50				
$\bar{2}$ 2 4	1,901	}	}	}	}				
3 3 1	1,896					1,894	2	—	—
$\bar{3}$ 3 3	1,879					1,879	1	—	—
0 4 2	1,843	}	}	}	}				
4 2 1	1,839					1,840	3	—	—
5 1 0	1,833					1,833	4	1,82	40
$\bar{2}$ 4 2	1,830	1,803	6	—	—				
2 2 3	1,801	1,800	4	—	—				
1 3 3	1,780	1,781	7	}	}				
		1,772	6			1,78	60		
4 0 2	1,749	1,751	1	—	—				
	—	—	—	1,74	20				
3 1 3	1,685	1,690	3	1,67	20				
$\bar{1}$ 3 4	1,677	}	}	}	}				
3 3 2	1,674					1,675	< 1	—	—
$\bar{3}$ 3 4	1,656					1,659	1	—	—
5 1 1	1,656	}	}	}	}				
0 4 3	1,635					1,636	8	1,62	70
$\bar{1}$ 1 5	1,635					1,626	6	—	—
$\bar{1}$ 5 1	1,628								

La struttura della glauberite è, come ci si doveva aspettare per l'alta densità del minerale, molto compatta. I tetraedri SO_4 sono regolari sia per forma che per distanze S—O. Il calcio, situato sull'asse binario, coordina otto ossigeni, con distanze da 2,4 a 2,7 Å, approssimativamente secondo un antiprisma quadrato. Il sodio, in posizione generale, coordina sette ossigeni, con distanze da 2,3 a 2,8 Å, secondo una bipiramide quasi quadrata, in cui uno dei vertici è sostituito da uno spigolo parallelo ad un lato della base. A questo stadio della ricerca l'indice di attendibilità della struttura, riferito a circa 600 riflessi realmente osservati è di 0,12.

Utilizzando le informazioni dei fotogrammi di cristallo singolo, per confronto sia fra i 2Θ che fra le intensità, sono stati attribuiti gli indici agli effetti di diffrazione di un diagramma di polvere. I dati diffrattometrici sono stati quindi introdotti in un raffinamento delle costanti reticolari con il metodo dei minimi quadrati, impiegando inizialmente le costanti ricavate dai fotogrammi di cristallo singolo. Dopo tre cicli di raffinamento si è giunti ai seguenti valori definitivi:

$$\begin{aligned} a_0 &= 10,158 \text{ \AA} \\ b_0 &= 8,333 \text{ \AA} \\ c_0 &= 8,551 \text{ \AA} \\ \beta &= 112^\circ 20'. \end{aligned}$$

Nella Tabella I sono riportati i d_{hkl} (in Å), gli indici e le intensità relative delle righe del diffrattogramma, ottenuto con un apparecchio General Electric XRD-5, radiazione CuK_α filtrata con Ni, velocità angolare del goniometro $0,2^\circ$ al minuto, standard interno NaF. Nella stessa Tabella è riportata per confronto la scheda A.S.T.M. n° 2-0556 (in cui è assente la indicizzazione).

La densità, misurata con il metodo dei liquidi pesanti, è risultata di $2,77 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$; quella calcolata utilizzando le costanti sopra riportate, per 4 molecole nella cella elementare, è di $2,74 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$.

BIBLIOGRAFIA.

- [1] M. CARDOSO, J. GARRIDO, J. GARCÍA DE LA CUEVA, *El grupo estereocristalino de la glauberita*, « Bol. de la Soc. Esp. de Hist. Nat. », XXXI, 547 (1931).
- [2] F. PARDILLO, *Nueva investigación de la estructura cristalina de la glauberita*, « Mem. de la Acad. de Cienc. y Artes », XXV, num. I (1934).
- [3] F. PARDILLO, *La distribución atómica en la estructura cristalina de $[\text{SO}_4]_2\text{CaNa}_2$ (glauberita)*, « Bol. de la Soc. Esp. de Hist. Nat. », XXXV, 6, 333 (1935).