

sympo = 0809293

ASSIMÉTRICO

nicamp)-

e 2 feixes (000)(113)
iza por se ter o fei-
rfície da amostra.
Bragg-superfície

e primário (perpen-
te e γ o ângulo for-

desenvolvida uma no-
forma o ângulo χ com
 $\tan \chi = \sin \beta \cdot \tan \gamma$,
ração múltipla usual,
r:

gramas de computação
ndas planas, na con-
ar qualitativamente
como: superfície de
nda, densidade de
o e refletido, tanto

o do comportamento
ria Dinâmica.

Estrutura cristalina da Furcalita, $\text{Ca}_2(\text{UO}_2)_3\text{O}_2(\text{PO}_4)_2 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$

Silva, A.J.G.C. (IFQSC-USP); Mascarenhas, Y.P. (IFQSC-USP); Atêncio, D. (Inst. de Geociências-USP) & Neumann, R. (Inst. de Geociências-USP).

O estudo estrutural do mineral de urânio denominado furcalita foi feito com um monocristal proveniente do distrito de Perus, cidade de São Paulo. Para a determinação foi usado o difratômetro automático CAD-4 (Enraf Nonius) do IFQSC-USP. A cela unitária é ortorrômbica, grupo espacial Pbca , $a = 17.415(2) \text{ \AA}$, $b = 16.035(3) \text{ \AA}$, $c = 13.598(3) \text{ \AA}$, $V = 3797(2) \text{ \AA}^3$, $Z = 8$. As coordenadas atômicas dos átomos de U foram determinadas através de métodos diretos e os átomos restantes (excluindo H) foram localizados a partir de mapas de Fourier diferença. Para a solução da estrutura foram utilizadas 2065 reflexões observadas ($|I| > 3\sigma(I)$) com o refinamento por mínimos quadrados chegando a $R = 3.8\%$ (matriz completa - 261 parâmetros refinados). Como os átomos de hidrogênio não puderam ser localizados, a distinção entre íons O^{2-} , hidroxilas e moléculas de H_2O foi feita utilizando-se o método das valências de ligação^{1,2}.

A estrutura consiste de camadas de $[(\text{UO}_2)_3\text{O}_2(\text{PO}_4)_2]^{4-}$, paralelas a (010) e conectadas por íons Ca^{2+} e H_2O . Os poliedros de coordenação são: para U(1), bipirâmide hexagonal; para U(2) e U(3), bipirâmides pentagonais; para o Ca(4), prisma trigonal monocapuzado; para o Ca(5), dodecaedro triangular; e para P(6) e P(7), tetraedros. Como consequência deste trabalho, a fórmula química da furcalita, anteriormente apresentada por Piret & Declercq (1978)³ como $\text{Ca}_2(\text{UO}_2)_3(\text{PO}_4)_2(\text{OH})_4 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$, deve ser mudada para $\text{Ca}_2(\text{UO}_2)_3\text{O}_2(\text{PO}_4)_2 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$.

¹ Donnay, G. & Allman, R. (1970) - Am. Min. **55**, 1003.

² Brown, I.D. (1981) - In: O'keeffe, M. & Navrotsky, A. Structure and Bonding in Crystals, vol. II, pp.1-30.

³ Piret, P. & Declercq, J.-P. (1978) - Acta Cryst. **B34**, 1677.

Reunião da Sociedade Brasileira de Cristalografia, 11, 1990,
Campanas. Resumos, p. 39.