

**Physical properties of minerals:
how and why to dive into their knowledge**



Proprietà fisiche dei minerali: Passato presente futuro

**Gabriella Salviulo
Università di Padova
Dipartimento di Geoscienze**

12-15 Febbraio 2018 Casa della Gioventù - Bressanone



WARM UP.....

Proprietà fisiche dei minerali:

Passato presente futuro

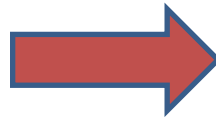


OBIETTIVO GENERALE

CONFIDENTI DEL CONTESTO



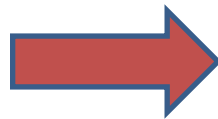
OBIETTIVO N 1: ALLINEATI ALLA PARTENZA



Concetti di base

Cristallografia

Linguaggio



Uso di un linguaggio condiviso

OBIETTIVO N 2:

Differenti tempi=differenti visioni?

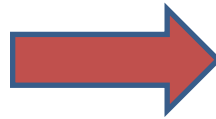


Minerali

Mineralogia

Mineralogisti

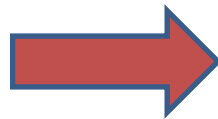
OBIETTIVO N 1: ALLINEATI ALLA PARTENZA



Concetti di base

Cristallografia

Linguaggio



Uso di un linguaggio condiviso

Proprietà fisiche e Anisotropia



- **RISPOSTE DEI MATERIALI A**
 - **SOLLECITAZIONE ESTERNA**
 - **RISPOSTE MISURABILI**

Proprietà fisiche e **Anisotropia**



- **dipendenza** di una proprietà fisica dalla direzione che si considera
- anisotropia è **condizione caratteristica** della materia allo stato cristallino

DESCRIVERE RELAZIONI

Causa **effetto**

CHE DETERMINANO

ANISOTROPIA



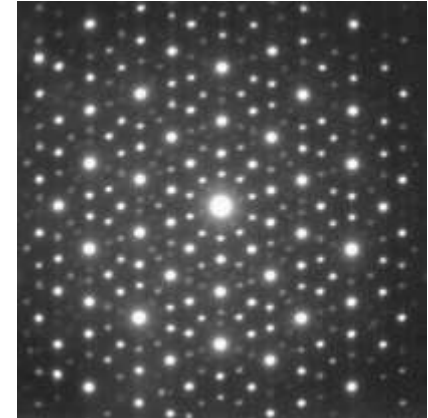
DELLE PROPRIETA' FISICHE NEI

CRISTALLI



CHE COS' E' UN CRISTALLO ?

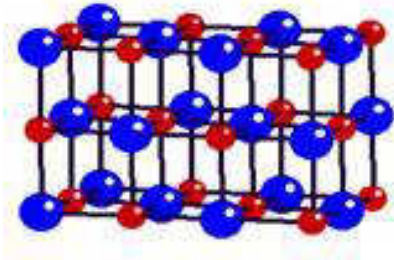
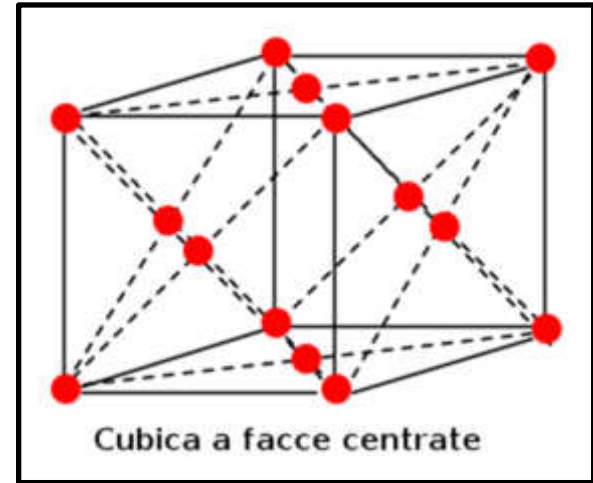
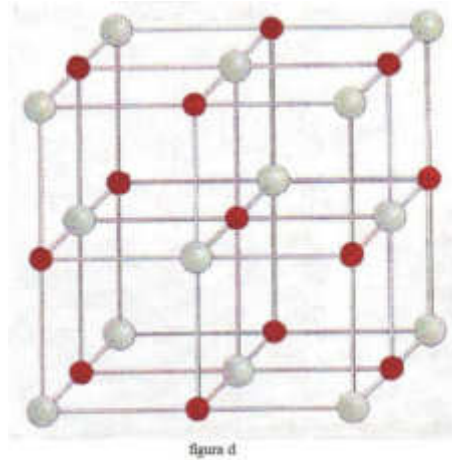
- Un materiale è un **cristallo** se esso ha **essenzialmente** un **pattern di diffrazione**.
- La parola "essenzialmente" indica che la maggior parte dell'intensità diffratta è relativamente concentrata in *picchi di Bragg*, a prescindere dalla intensità di scattering diffusa, sempre presente



A livello **macroscopico** un cristallo ben formato è caratterizzato da **forme geometriche regolari**, con facce, spigoli e vertici che ne determinano la **morfologia**



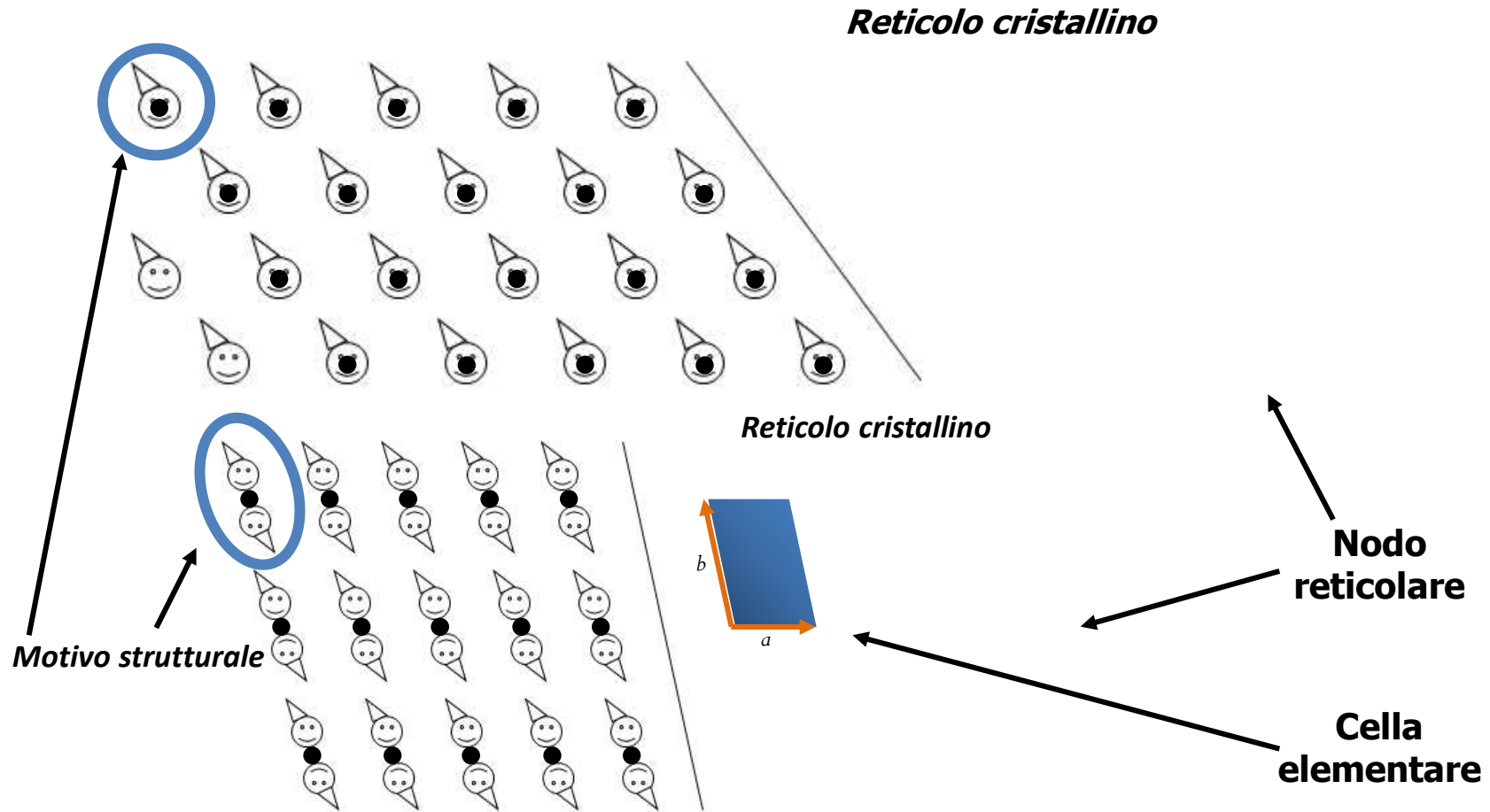
CHE COS' E' UN CRISTALLO ?



RIPETIZIONE PERIODICA

Struttura di un cristallo può essere descritta come ***combinazione di un reticolo geometrico costituito da nodi + un motivo che consiste di atomi o ioni,*** che si ripete per traslazione

CHE COS' E' UN CRISTALLO ?



E' possibile individuare una **cella elementare**, contenente il **motivo strutturale**, che **traslata** in due (o tre) direzioni, genera l'intera struttura.

Definizione

CRISTALLO = Reticolo + Motivo

Motivo = atomo o gruppi di atomi associati a ciascun nodo del reticolo

Reticolo insieme di **punti** che si ripetono per traslazione
Motivo entità associata ai **nodi** del reticolo

Reticolo ➤ come si ripete
Motivo ➤ che cosa si ripete

Reticolo

Ripetizione periodica
di punti

Cristallo

Ripetizione periodica
del motivo

SIMMETRIA


- **SIMMETRIA PUNTUALE** **MOTIVO**
- **7 sistemi 32 classi**
- **SIMMETRIA DI TRASLAZIONE** **RETICOLO**
- **14 Reticoli di Bravais**

Reticolo + Motivo = CRISTALLO

230 Gruppi Spaziali

	Sistema	Simmetria caratterizzante	Costanti cristallografiche
GRUPPO TRIMETRICO	Triclino	1	a b c α β γ
	Monoclino	2	a b c $\alpha = \gamma = 90^\circ$ β
	Rombico	2 2 2	a b c $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
GRUPPO DIMETRICO	Tetragonale	4	a a c $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
	Trigonale	3	a a c $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$
	Esagonale	6	a a c $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$
GRUPPO MONOMETRICO	Cubico	3 3 3 3	a a a $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

ANISOTROPIA E STRUTTURA

- **Struttura cristallina**
 - **Ordine e periodicità**
 - **Anisotropia**
- CAUSA**
- EFFETTO**
- 
- **GRADO DI ANISOTROPIA DIPENDE DALLA SIMMETRIA**

PROPRIETA' FISICHE

- **Scalari** non direzionali (densità, punto di fusione)
- **Vettoriali**
 - **Discontinue**
 - Sono diverse a seconda della direzione del cristallo , ma **non dipendono dalla direzione** (sfaldatura, durezza)
 - **Continue**
 - variano in modo continuo all'interno del cristallo e **dipendono dalla direzione** (ottiche)

PROPRIETA' FISICHE

- Dipendono da

–Struttura

–Composizione chimica

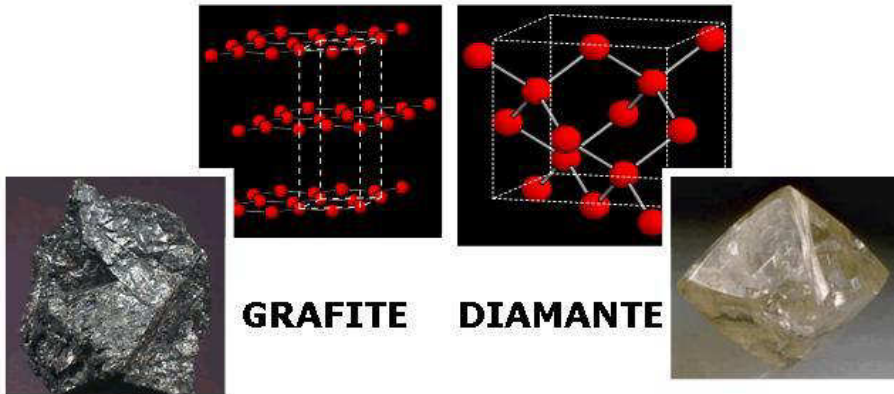
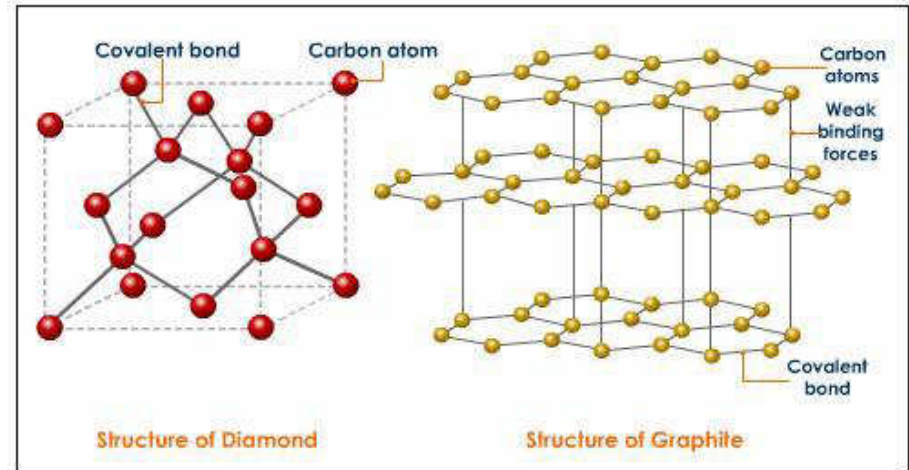
–Legami chimici

STRUTTURA E PROPRIETA' FISICHE

- RELAZIONE **CAUSA- EFFETTO**
 - ANISOTROPIA STRUTTURALE-
 - ANISOTROPIA PROPRIETA' FISICHE
- QUANDO E' SUFFICIENTE L'APPROCCIO **QUALITATIVO?**
- QUANDO E' NECESSARIO UN APPROCCIO **QUANTITATIVO?**

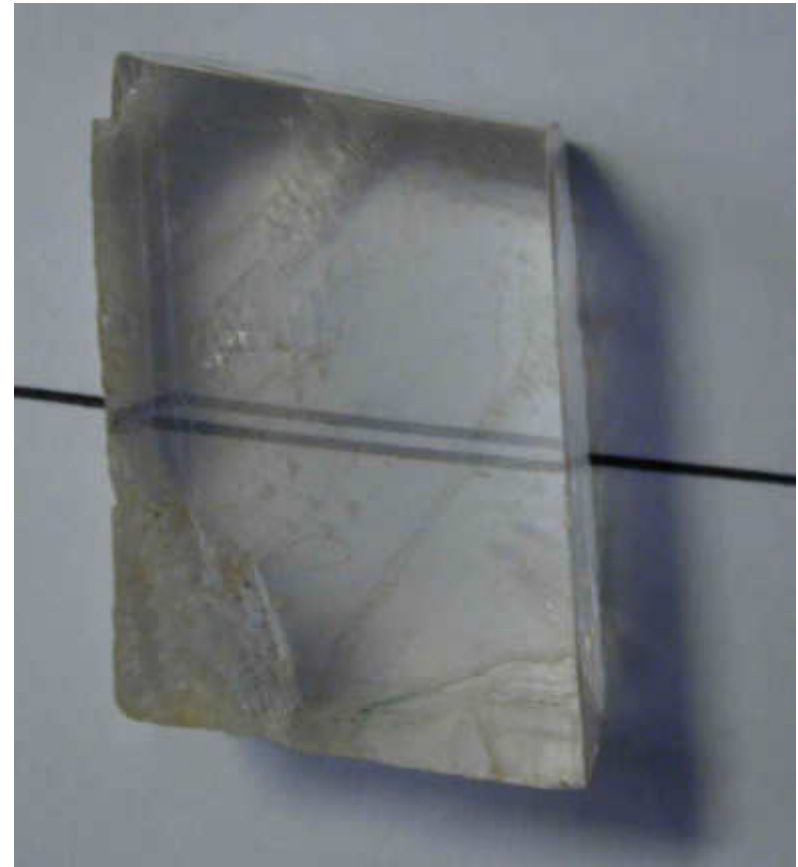
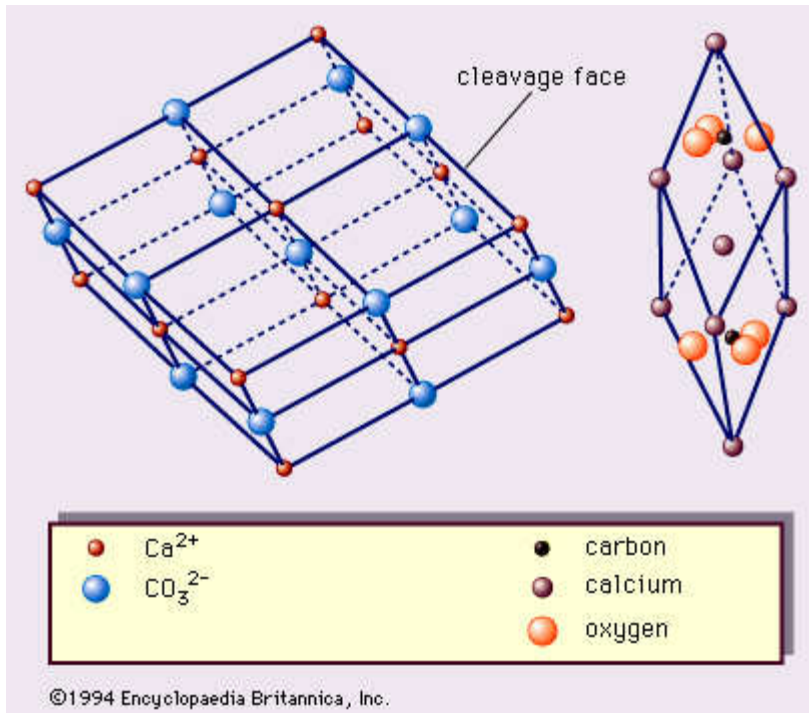
ANISOTROPIA E STRUTTURA

- **OVVIA**



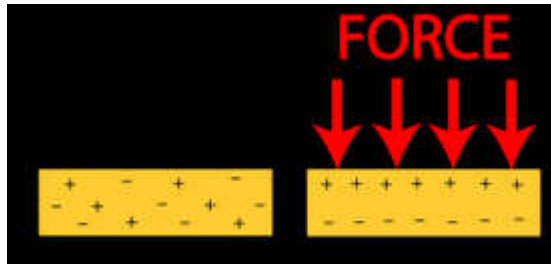
ANISOTROPIA E STRUTTURA

COMPRESSIBILE

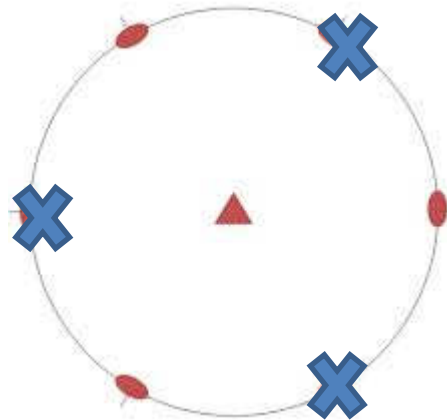
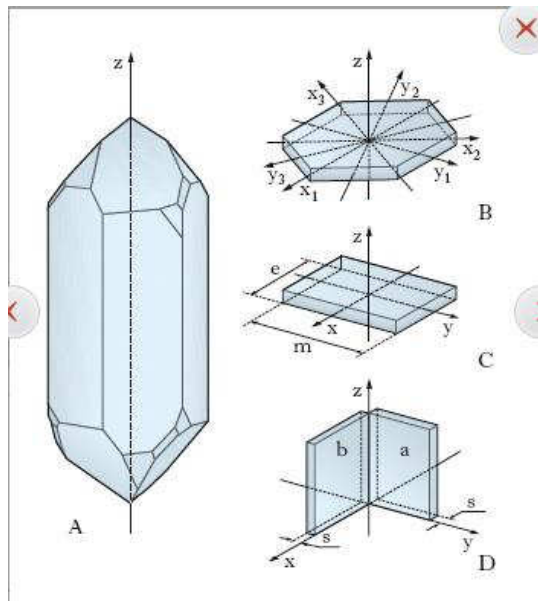
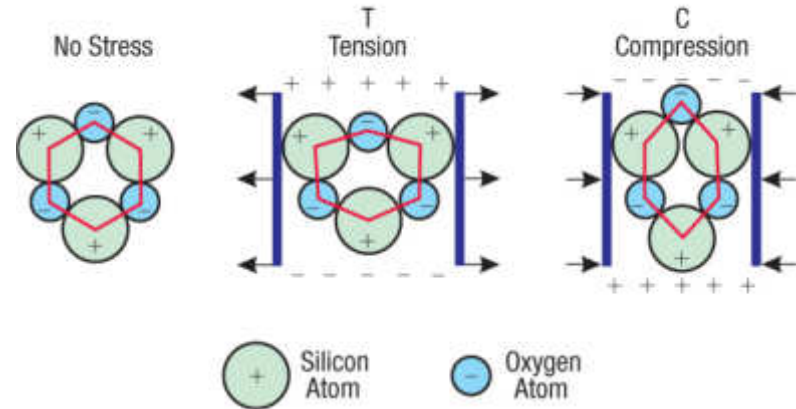


CONTROLLO PIU' EVIDENTE ANCORA DELLA SIMMETRIA SU PROPRIETA' FISICA

QUARZO E PIEZOELETTRICITA'



Piezoelectric Effect in Quartz



QUANDO E' NECESSARIO UN APPROCCIO **QUANTITATIVO**?

- **PER DESCRIVERE ANISOTROPIA**
- proprietà fisiche (termiche, meccaniche, elettriche, magnetiche, elastiche)
- **attraverso quantità matematiche:**
 - **TENSORI**

TENSORI

permettono di esprimere le proprietà fisiche come risultato dell'interazione del materiale con una forza “perturbatrice” (**causa**)

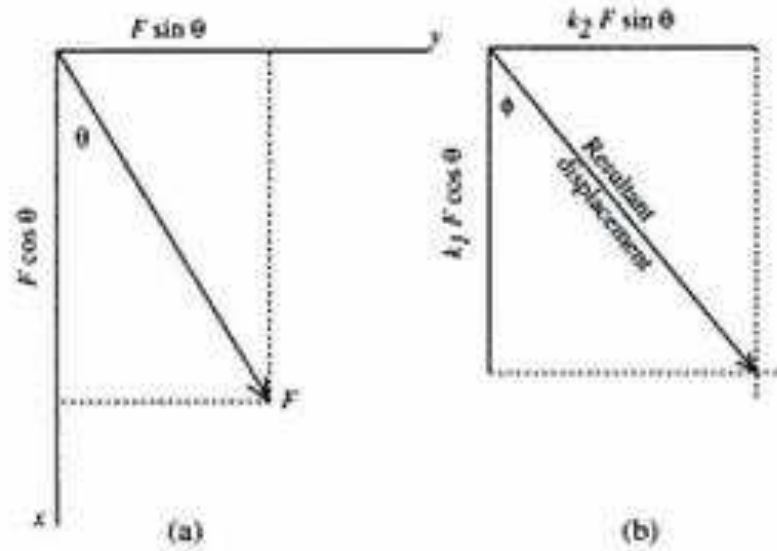
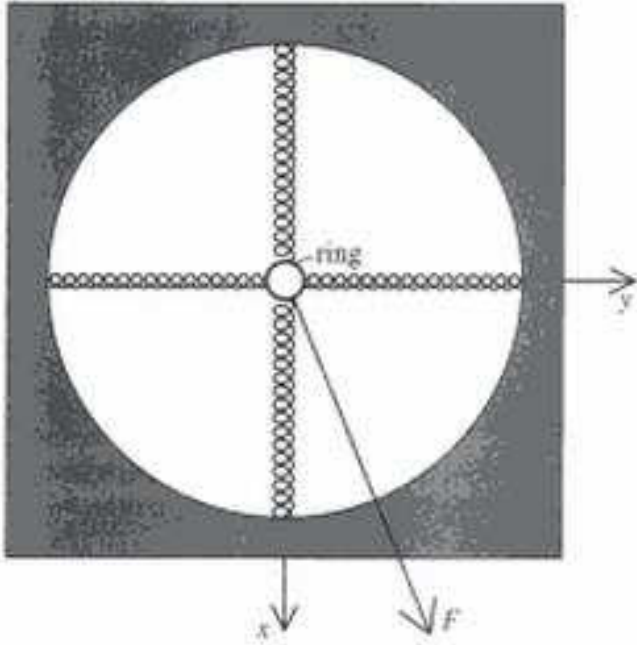
se è possibile misurare una risposta fisica (= **effetto**)

la proprietà fisica viene definita dalla **relazione** tra la forza e la risposta

Relazione di **CAUSA ED EFFETTO**

Analogia meccanica

Il sistema è costituito da 2 molle perpendicolari di coefficienti di elasticità **differenti** : K_1 e K_2 e da un anello centrale



La Forza F provocherà uno spostamento dell'anello secondo un angolo ϕ tale che

$$\operatorname{tg} \phi = \frac{K_2 F \operatorname{sen} \theta}{K_1 F \operatorname{cos} \theta} \quad \frac{K_2}{K_1} \operatorname{tg} \theta$$

Solo per $\theta=0$ o 90° il vettore causa e il vettore effetto avranno la stessa direzione

CAUSA Forza F
EFFETTO Spostamento

$F \operatorname{sen} \theta$
 $F \operatorname{cos} \theta$  Componenti della Forza
Sulle direzioni y e x

DIREZIONI PRINCIPALI

.....continua.....

In 3 dimensioni si ha che una direzione qualsiasi
È definita dai coseni direttori
Consideriamo un sistema nel quale una forza F
unitaria? sia applicata
Secondo una direzione qualsiasi e che provochi uno
spostamento

D

Allora si può scrivere che $D_F = D \cos \varphi$

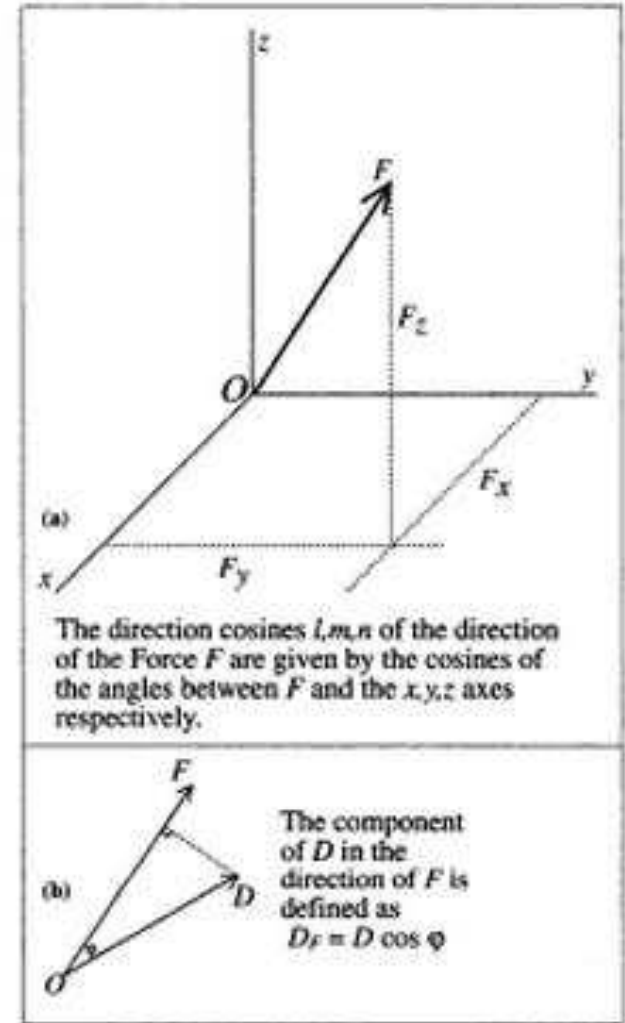
$$K = \frac{D \cos \varphi}{F}$$

K dipenderà da $K_1 K_2 K_3$

Allora

$$F_x = Fl$$
$$F_y = Fm$$
$$F_z = Fn$$

Dove $l m n$ sono i cos degli angoli tra F e gli assi $x y z$



.....continua

Le componenti dello spostamento lungo le tre direzioni principali sarà dato da

$$D_x = K_1 F l$$

$$D_y = K_2 F m$$

$$D_z = K_3 F n$$

Lo spostamento risultante sarà dato da

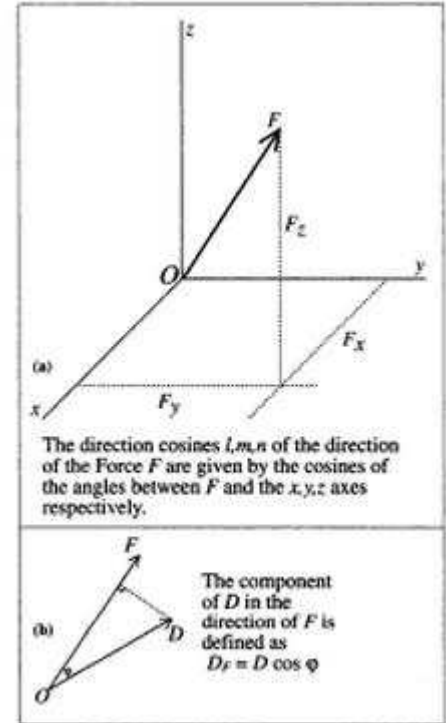
$$D_F = D_x l + D_y m + D_z n$$

$$D_F = K_1 F l^2 + K_2 F m^2 + K_3 F n^2$$

$$D_F = F(K_1 l^2 + K_2 m^2 + K_3 n^2)$$

$$K = \frac{D_F}{F} \quad \text{allora}$$

$$K = K_1 l^2 + K_2 m^2 + K_3 n^2$$



L'equazione definisce il valore di K secondo qualsiasi direzione, in funzione dei

3 valori principali

$K_1 K_2 K_3$

e dei coseni direttori

$l m n$

TENSORI

Oggetti matematici

utilizzati per descrivere le proprietà fisiche e la loro anisotropia

- **Generalizzazione del concetto di vettore**
- **caratterizzati da un ordine (RANK)**
 - Definito in relazione al **numero di coefficienti necessari per descrivere la proprietà stessa**

.....ricapitolando

Quantità **scalari** : numero e unità di misura T °C

Non subiscono variazioni per rotazioni e/o

Cambiamenti nel sistema di assi di riferimento

- **Tensore di ordine 0**

- **Vettori**

- modulo direzione (verso) $\mathbf{V} = a_i + b_j + c_k$

- Componenti = **proiezioni sugli assi di riferimento.**

- I **vettori** devono essere riferiti a uno specifico sistema di assi di riferimento

- **Tensore di ordine 1**



Tensori II ordine

=

Tensori

TENSORI

- Dati 2 vettori, \mathbf{p} Forza applicata e \mathbf{q} la risultante
- Si può scrivere
- $\mathbf{p} = p_1\mathbf{x} + p_2\mathbf{y} + p_3\mathbf{z}$ $\mathbf{q} = q_1\mathbf{x} + q_2\mathbf{y} + q_3\mathbf{z}$
- $\mathbf{T} = \mathbf{pq} = p_1q_1\mathbf{x}^2 + p_2q_2\mathbf{y}^2 + p_3q_3\mathbf{z}^2 + p_1q_2\mathbf{xy} + p_1q_3\mathbf{xz} + p_2q_1\mathbf{xy} + p_2q_3\mathbf{yz} + p_3q_1\mathbf{xz} + p_3q_2\mathbf{yz}$
- Il tenore risultante è espresso da **9 coefficienti**

TENSORI

Il tensore risultante è espresso da **9 coefficienti**

$$T = p_1 q_1 x^2 + p_2 q_2 y^2 + p_3 q_3 z^2 + p_1 q_2 xy + p_1 q_3 xz + p_2 q_1 xy + p_2 q_3 yz + p_3 q_1 xz + p_3 q_2 yz$$

$$\epsilon_{11} \epsilon_{22} \epsilon_{33} \epsilon_{12} \epsilon_{13} \epsilon_{21} \epsilon_{23} \epsilon_{31} \epsilon_{32}$$

9 coefficienti definiscono le **componenti del tensore** «**proprietà fisica**» nel sistema di riferimento prescelto

Risulta conveniente e pratico esprimerli in forma di matrice

Matrice=oggetto matematico contenente una sequenza di numeri, ordinati per righe e colonne .
I componenti di una matrice A si indicano con a_{ij} dove i si riferisce alle righe e j alle colonne

TENSORI

- La matrice che descrive il tensore risultante

sarà allora

$$\begin{matrix} \epsilon_{11} & \epsilon_{12} & \epsilon_{13} \\ \epsilon_{21} & \epsilon_{22} & \epsilon_{23} \\ \epsilon_{31} & \epsilon_{32} & \epsilon_{33} \end{matrix}$$

- In generale un tensore di grado ennesimo viene descritto da **3^n coefficienti**

TENSORI

- In pratica esiste una **grandezza fisica** in quanto tale e a **prescindere** dal sistema di assi di riferimento scelto per descriverla.
- Tuttavia una volta fissato un sistema di assi di riferimento la grandezza fisica è **univocamente determinata** da 9 grandezze scalari che sono le sue **componenti**

TENSORI

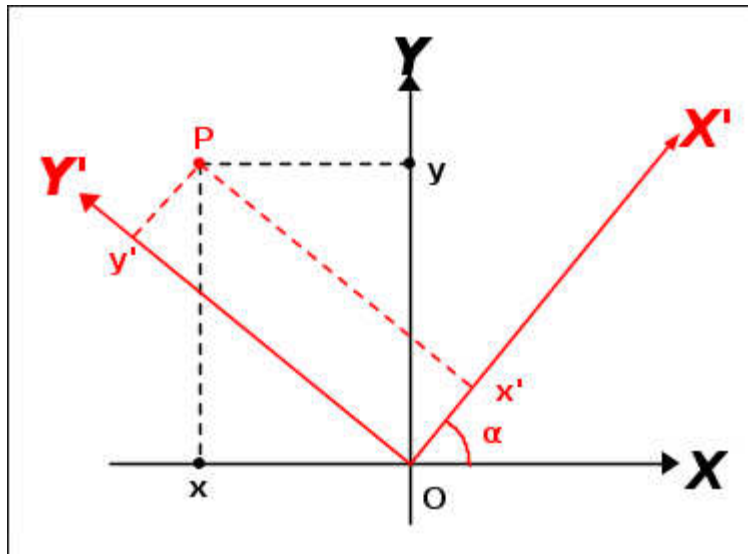
trasformazioni di assi:

ogni tensore è descritto rispetto a un sistema di riferimento

se cambia il sistema di riferimento

il **significato fisico non cambia**, ma cambieranno i coefficienti del tensore, per risolvere i problemi è importante conoscere la **legge di trasformazione**.

TENSORI...un passo indietro



Siano $P \equiv (x \ y)$ le coordinate di un punto in un sistema cartesiano X Y

La rotazione del sistema di assi di riferimento intorno all'origine in modo che gli assi X' Y' formino un certo angolo con X e Y comporta che il punto P rispetto al nuovo sistema avrà coordinate $(x' \ y')$

- Si opera cioè una **trasformazione di coordinate**
- $(x' \ y') = M(xy)$

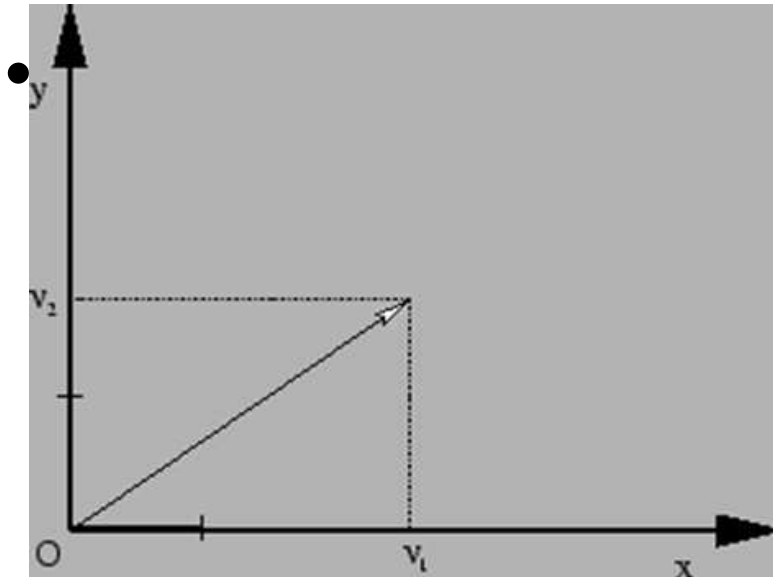
TENSORI...*un passo indietro*

- Se nel punto P si misura una **quantità scalare** le **coordinate** sono solo **etichette** , la proprietà non varia
- La trasformazione di coordinate si riduce a un **cambio di etichette**

TENSORI...un passo indietro

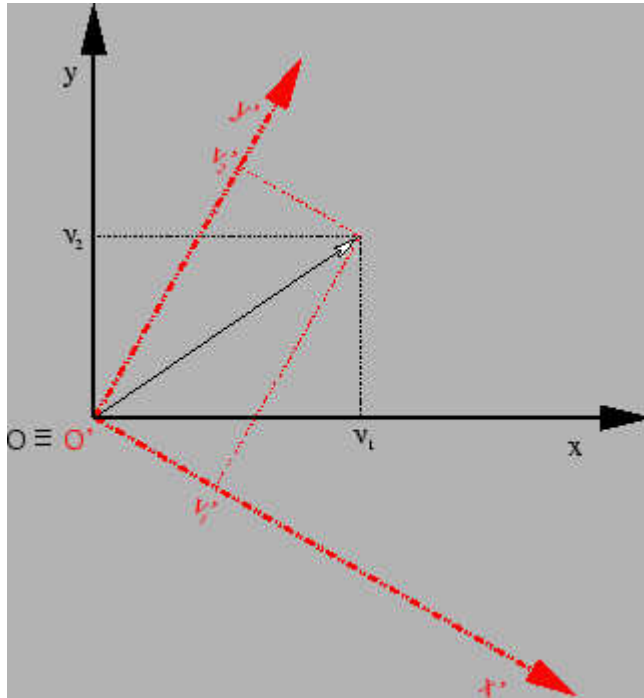
Data una **quantità vettoriale** (es. velocità)

le coordinate del vettore saranno le coordinate della sua estremità.



Le **componenti v_1 e v_2** indicheranno la velocità dell'oggetto lungo gli assi di riferimento

TENSORI...un passo indietro



Se il sistema di assi cartesiani viene ruotato (senso orario) le **componenti v_1 e v_2** diventano le nuove coordinate

$$v'_1 = v_1 \cos \theta + v_2 \sin \theta$$

$$v'_2 = -v_1 \sin \theta + v_2 \cos \theta$$

legge di trasformazione

$$\begin{bmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix}$$

TENSORI

Date 2 terne di assi di riferimento ortogonali, con origine comune si può scrivere

$$\begin{array}{r} X_1 \quad X_2 \quad X_3 \\ X_1' \quad a_{11} \quad a_{12} \quad a_{13} \\ X_2' \quad a_{21} \quad a_{22} \quad a_{23} \\ X_3' \quad a_{31} \quad a_{32} \quad a_{33} \end{array}$$

Se X_i e X_j sono i versori (vettori di modulo unitario), a_{ij} sono i coseni degli angoli compresi tra i 2 versori (coseni direttori)

TENSORI

La matrice **non** esprime un tensore di II ordine in quanto a_{ij} hanno senso solo se legate a 2 sistemi di assi di riferimento

Si potrebbe dimostrare che **dato** $q_i = T_{ij} p_j$

Cambiando il sistema di coordinate si avrà

$$T'_{ij} = a_{il} a_{jk} T_{lk}$$

legge di trasformazione di un tensore di rango 2 al variare del sistema di riferimento

TENSORI ...rappresentazione geometrica

rappresentazione geometrica del tensore= modo più immediato

per esprimere le variazioni di una proprietà fisica con la direzione

$$T_{ij}X_iX_j=1$$

T_{ij} rappresenta un versore di II ordine e $x_i x_j$ delle coordinate,

sviluppando si ha:

$$T_{11}X_1^2 + T_{12}X_1X_2 + T_{13}X_1X_3 + T_{21}X_2X_1 + T_{22}X_2^2 + T_{23}X_2X_3 + T_{31}X_3X_1 + T_{32}X_3X_2 + T_{33}X_3^2 = 1$$

TENSORI ...rappresentazione geometrica

- Per tensori simmetrici quanto sopra si riduce a
- **equazione di un ellissoide**

$$T_{11}X_1^2 + T_{22}X_2^2 + T_{33}X_3^2 + 2T_{12}X_1X_2 + 2T_{13}X_1X_3 + 2T_{23}X_2X_3 = 1$$

secondo gli assi principali:

$$T_{11}X_1^2 + T_{22}X_2^2 + T_{33}X_3^2 = 1$$

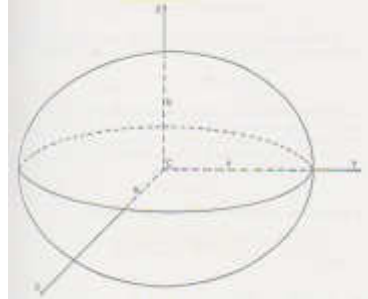
$$T_{11} \quad 0 \quad 0$$

$$0 \quad T_{22} \quad 0$$

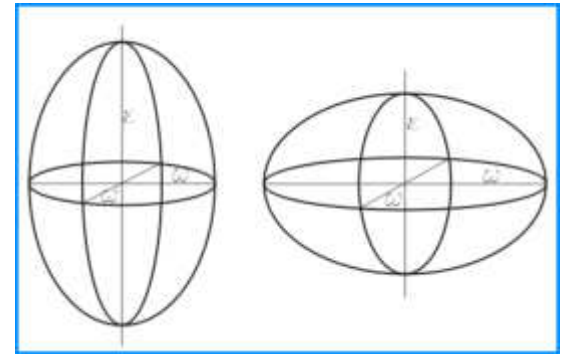
$$0 \quad 0 \quad T_{33}$$

TENSORI ...rappresentazione geometrica

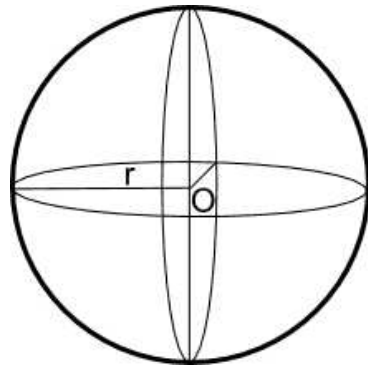
$$\begin{matrix} T_{11} & 0 & 0 \\ 0 & T_{22} & 0 \\ 0 & 0 & T_{33} \end{matrix}$$



$$\begin{matrix} T_{11} & 0 & 0 \\ 0 & T_{11} & 0 \\ 0 & 0 & T_{33} \end{matrix}$$



$$\begin{matrix} T_{11} & 0 & 0 \\ 0 & T_{11} & 0 \\ 0 & 0 & T_{11} \end{matrix}$$



TENSORI ...e simmetria

I tensori devono rispettare regole di simmetria:

La simmetria del tensore che descrive la proprietà

Tensore di II ordine ha 6 coefficienti indipendenti

La simmetria del cristallo che mostra la proprietà

TENSORI ...E simmetria cristallografica

- Secondo gli assi principali si ha

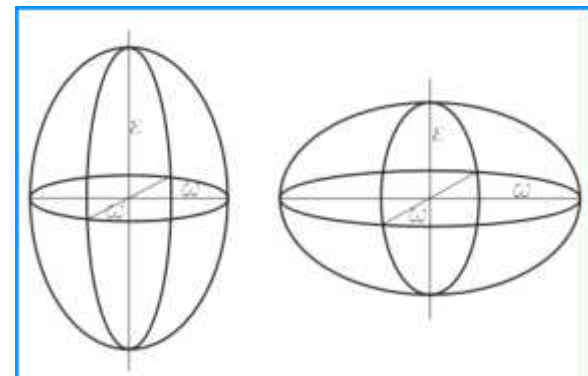
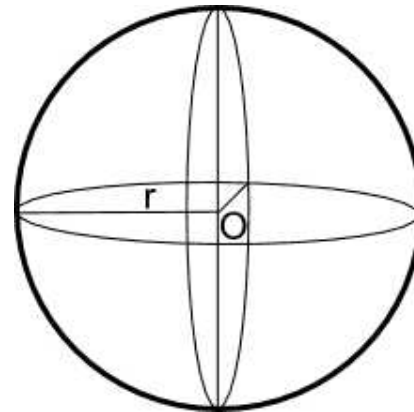
$$\begin{matrix} T_{11} & 0 & 0 \\ 0 & T_{22} & 0 \\ 0 & 0 & T_{33} \end{matrix}$$

- **Cubico**

$$\begin{matrix} T_{11} & 0 & 0 \\ 0 & T_{11} & 0 \\ 0 & 0 & T_{11} \end{matrix}$$

- **Tetragonale Tri- Esa-**

$$\begin{matrix} T_{11} & 0 & 0 \\ 0 & T_{11} & 0 \\ 0 & 0 & T_{33} \end{matrix}$$



TENSORI ...E simmetria cristallografica

- **Rombico**

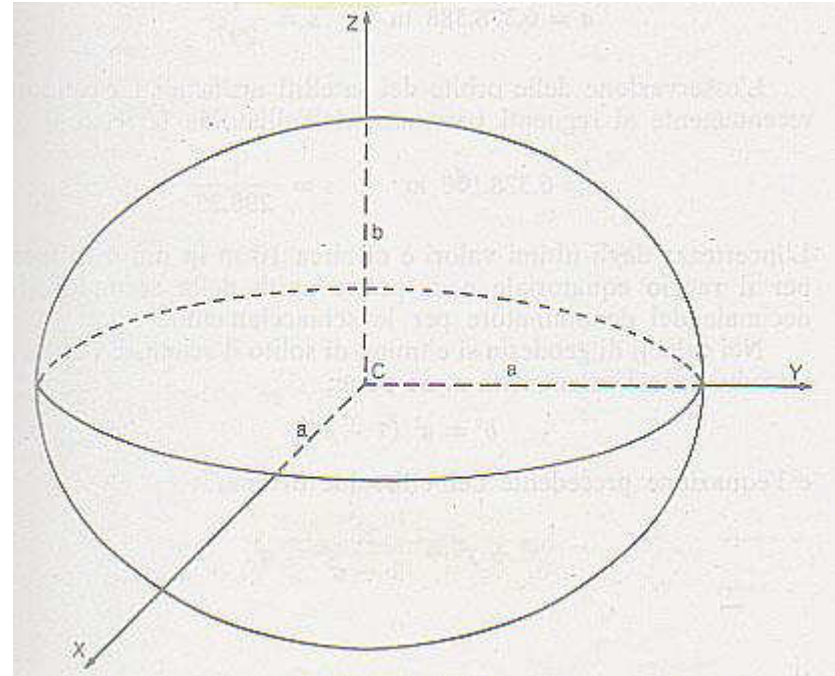
$$\begin{matrix} T_{11} & 0 & 0 \\ 0 & T_{22} & 0 \\ 0 & 0 & T_{33} \end{matrix}$$

- **Monoclino**

$$\begin{matrix} T_{11} & 0 & T_{13} \\ 0 & T_{22} & 0 \\ T_{31} & 0 & T_{33} \end{matrix}$$

- **Triclino**

$$\begin{matrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} \\ T_{21} & T_{22} & T_{23} \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} \end{matrix}$$



Principio di Neumann

- Esprime il **vincolo** che la simmetria cristallografica **impone** alla simmetria delle proprietà fisiche
- Enunciato:
- **gli elementi di simmetria di una proprietà fisica sono anche** elementi di simmetria puntuale **ma non viceversa.**
- Ovvero
- **la simmetria fisica deve essere maggiore o tutt'alpiù uguale** alla simmetria cristallografica

E' tutto nuovo? .. No

- le 3 superfici ricordano le **indicatrici ottiche**
- indicatrici ottiche = ellissoidi costruiti a partire da **vettori**
- le cui **direzioni** rappresentano direzioni di vibrazione del vettore campo elettrico nel cristallo e il **modulo** è proporzionale al valore dell'indice di rifrazione per la direzione di vibrazione considerata
- **Sono quindi tensori di II ordine**

Tensori e proprietà fisiche

tensore di II ordine

Conduttività termica

Permittività elettrica

tensore di III ordine

Piezoelettricità

tensori di IV ordine

Proprietà elastiche

Tensori es. *proprietà ottiche*

- **relazione di causa-effetto**

E = vettore campo elettrico

D = spostamento elettrico

ϵ = permittività dielettrica nel mezzo $K = \epsilon/\epsilon_0$

$$\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E}$$

$$n_i = (\epsilon_i/\epsilon_0)^{1/2}$$

$$\begin{bmatrix} D_1 \\ D_2 \\ D_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \epsilon_{11} & \epsilon_{12} & \epsilon_{13} \\ \epsilon_{21} & \epsilon_{22} & \epsilon_{23} \\ \epsilon_{31} & \epsilon_{32} & \epsilon_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_1 \\ E_2 \\ E_3 \end{bmatrix}$$

ESPANSIONE TERMICA

Espansione termica = **deformazione** causata da un aumento di temperatura

è una deformazione **omogenea**

(rette rimangono rette, piani rimangono piani, **sfere diventano ellissoidi a tre assi**)

Si potrebbe dimostrare che la deformazione (**strain**) è **tensore di II ordine**

ESPANSIONE TERMICA

- L'ESPANSIONE TERMICA è UNA «DEFORMAZIONE» (Strain effetto) causato da un aumento di temperatura
- Ed è un tensore di II ordine
- Riscrivo la matrice
$$\begin{matrix} \epsilon_{11} & \epsilon_{12} & \epsilon_{13} \\ \epsilon_{21} & \epsilon_{22} & \epsilon_{23} \\ \epsilon_{31} & \epsilon_{32} & \epsilon_{33} \end{matrix}$$
- Dove ϵ_{11} ϵ_{22} ϵ_{33} rappresentano i coefficienti di deformazioni «normali» o secondo le 3 direzioni principali x y z
- Gli altri sono i coefficienti di deformazione di taglio(?)

ESPANSIONE TERMICA

- $\epsilon_{11} = \frac{dx}{x}$
- Il tensore di espansione termica sarà lineare sarà
 $\frac{1}{x_{ij}} \frac{dx_{ij}}{dT} = \alpha_{ij} \quad \epsilon_{ij} = \alpha_{ij} \Delta T$
- $\alpha_{11} = \frac{1}{a} \frac{da}{dT} \quad \alpha_{22} = \frac{1}{b} \frac{db}{dT}$
- $\alpha_{33} = \frac{1}{c} \frac{dc}{dT}$

TENSORI ...*ancora una considerazione*

- **Field tensor:** tensori che possono essere applicati e misurati in maniera continua in qualsiasi orientazione rispetto al cristallo (strain, stress, campo elettrico)

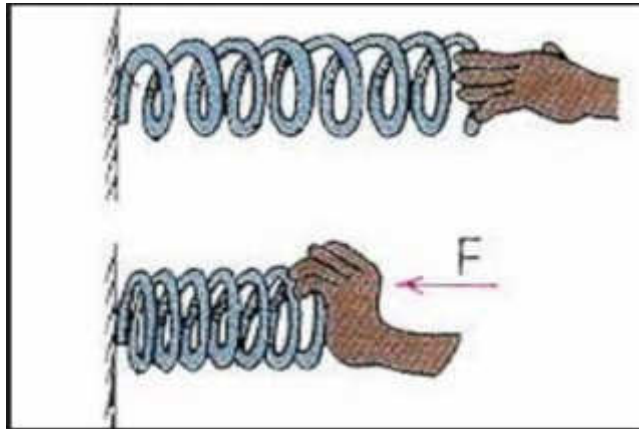
I coefficienti sono espressi come differenziali

- **Matter tensor:** esprimono le proprietà intrinseche di un materiale e devono essere coerenti con la simmetria (conducibilità termica)

Introduzione alle proprietà elastiche

- le proprietà elastiche esprimono la relazione tra una **forza esterna** applicata al cristallo e la **DEFORMAZIONE** che ne consegue.
- **Elasticità** descrive il regime della deformazione

- **Elastica**



- **Reversibile**

- **Plastica**

- **Irreversibile**



Introduzione alle proprietà elastiche

- La forza esterna ΔP , causa del fenomeno, è definita **-stress- = forza per unità di superficie**
- è una proprietà tensoriale che può essere descritta in termini delle 3 direzioni principali **$\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3$**
- L'effetto è la **deformazione -strain-** anch'essa proprietà tensoriale descritta in termini delle 3 direzioni principali **$\epsilon_1 \epsilon_2 \epsilon_3$**

Introduzione alle proprietà elastiche

- **Stress**

σ_{11}	σ_{12}	σ_{13}
σ_{21}	σ_{22}	σ_{23}
σ_{31}	σ_{32}	σ_{33}

- **Strain**

ϵ_{11}	ϵ_{12}	ϵ_{13}
ϵ_{21}	ϵ_{22}	ϵ_{23}
ϵ_{31}	ϵ_{32}	ϵ_{33}

- **Tensori di 2° ordine**

Introduzione alle proprietà elastiche

- **elasticità** è una proprietà del materiale e relaziona **stress e strain**,
- l'elasticità verrà espressa da un tensore di IV ordine.
- La sua descrizione sarà solo più complessa di quanto visto per i tensori di II ordine
- il numero massimo di coefficienti necessari per descriverla sarà **$3^4 = 81$** ,
- ma

Introduzione alle proprietà elastiche

Si potrebbe dimostrare che:

solo **36** sono indipendenti, perciò si può scrivere una matrice 6x6 i cui termini rappresentano proprio le **costanti elastiche**

$$c = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} & c_{15} & c_{16} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} & c_{24} & c_{25} & c_{26} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} & c_{34} & c_{35} & c_{36} \\ c_{41} & c_{42} & c_{43} & c_{44} & c_{45} & c_{46} \\ c_{51} & c_{52} & c_{53} & c_{54} & c_{55} & c_{56} \\ c_{61} & c_{62} & c_{63} & c_{64} & c_{65} & c_{66} \end{bmatrix}$$

tuttavia

Introduzione alle proprietà elastiche

La matrice è simmetrica

$$\lambda = \begin{bmatrix} \lambda_{11} & \lambda_{12} & \lambda_{13} & \lambda_{14} & \lambda_{15} & \lambda_{16} \\ \bullet & \lambda_{22} & \lambda_{23} & \lambda_{24} & \lambda_{25} & \lambda_{26} \\ \bullet & \bullet & \lambda_{33} & \lambda_{34} & \lambda_{35} & \lambda_{36} \\ \bullet & \bullet & \bullet & \lambda_{44} & \lambda_{45} & \lambda_{46} \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \lambda_{55} & \lambda_{56} \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \lambda_{66} \end{bmatrix}$$

I coefficienti
indipendenti
si riducono a
21

Introduzione alle proprietà elastiche

- ... E poi c'è la simmetria cristallografica

Sistema	Simmetria	Direzioni cristallografiche
Triclino	1	a b c α β γ
Monoclino	2	a b c $\alpha = \gamma = 90^\circ$ β
Rombico	2 2 2	a b c $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Tetragonale	4	a a c $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Trigonale	3	a a c $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$
Esagonale	6	a a c $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$
Cubico	3 3 3	a a a $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

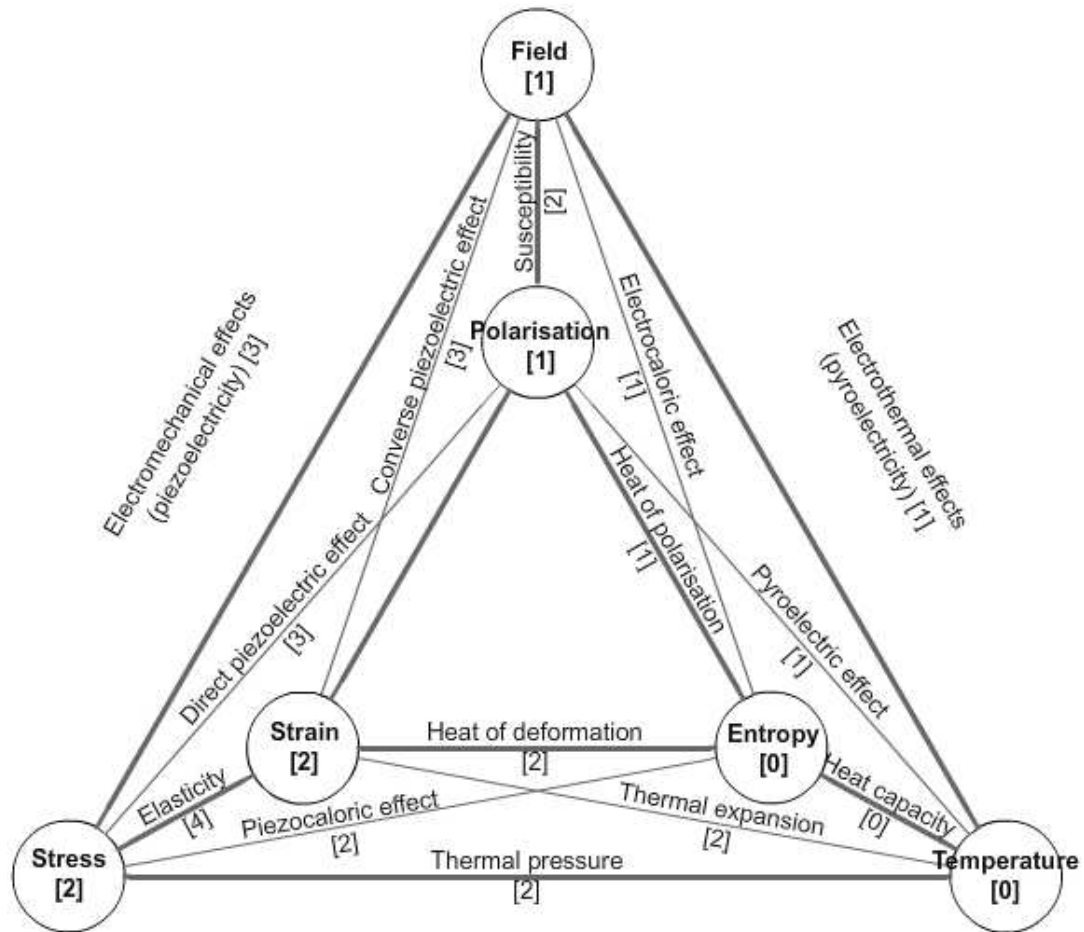
Table 15.1:
Number of independent elements of tensor properties of orders 1-4
for the 32 crystallographic point groups.

Bravais lattice	Group symbol		Tensor order			
	International	Schoenflies	1st order	2nd order	3rd order	4th order
triclinic	1	C ₁	3	6	18	21
	$\bar{1}$	S ₂	0	6	0	21
monoclinic	2	C ₂	1	4	8	13
	m	C _{1h}	2	4	10	13
	2/m	C _{2h}	0	4	0	13
orthorhombic	222	D ₂	0	3	3	9
	mm2	C _{2v}	1	3	5	9
	mmm	D _{2h}	0	3	0	9
tetragonal	4	C ₄	1	2	4	7
	$\bar{4}$	S ₄	0	2	4	7
	4/m	C _{4h}	0	2	0	7
	422	D ₄	0	2	1	6
	4mm	C _{4v}	1	2	3	6
	$\bar{4}2m$	D _{2d}	0	2	2	6
	4/mmm	D _{4h}	0	2	0	6
rhombohedral	3	C ₃	1	2	6	7
	$\bar{3}$	S ₆	0	2	0	7
	32	D ₃	0	2	2	6
	3m	C _{3v}	1	2	4	6
	$\bar{3}m$	D _{3d}	0	2	0	6
	hexagonal	6	C ₆	1	2	4
hexagonal	$\bar{6}$	C _{3h}	0	2	2	5
	6/m	C _{6h}	0	2	0	5
	622	D ₆	0	2	1	5
	6mm	C _{6v}	1	2	3	5
	$\bar{6}m2$	D _{3h}	0	2	1	5
	6/mmm	D _{6h}	0	2	0	5
	cubic	23	T	0	1	1
m3		T _h	0	1	0	3
432		O	0	1	0	3
$\bar{4}3m$		T _d	0	1	1	3
m3m		O _h	0	1	0	3
isotropic			0	1	0	2

IN SINTESI

**PHYSICAL PROPERTIES OF
MINERALS: How and why to dive
into their knowledge**

IN SINTESI



Proprietà fisiche dei minerali: Passato presente futuro



Proprietà fisiche dei minerali: Passato presente futuro

Né futuro né passato esistono

.....È inesatto dire che i tempi sono tre:

- **Passato**
- **Presente**
- **Futuro**



Forse sarebbe esatto dire che i tempi sono tre:

- **presente del passato**
- **presente del presente**
- **presente del futuro**

(Agostino d'Ippona, Confessioni, 397-400)



PASSATO PRESENTE FUTURO

253

BULLETIN DE L'ASSOCIATION MINERALOGIQUE DU CANADA

THE CANADIAN MINERALOGIST

JOURNAL OF THE MINERALOGICAL ASSOCIATION OF CANADA

Volume 31

June 1993

Part 2

Canadian Mineralogist
Vol. 31, pp. 253-296 (1993)



**MINERALS, MINERALOGY AND MINERALOGISTS:
PAST, PRESENT AND FUTURE***

FRANK C. HAWTHORNE

Department of Geological Sciences, University of Manitoba, Winnipeg, Manitoba R3T 2N2



MINERALS, MINERALOGY AND MINERALOGISTS: PAST, PRESENT AND FUTURE*

FRANK C. HAWTHORNE

Department of Geological Sciences, University of Manitoba, Winnipeg, Manitoba R3T 2N2

ABSTRACT

Minerals are the basic materials of the Earth, and virtually everything one does in the Earth Sciences involves minerals in one way or another. Minerals furnish a good part of the wealth that is the basis of our society, not just as commercial products but as the soils that support our agriculture and the aquifers that hold our water supplies. Minerals have played a key role in the development of humanity. One of our first scientific acts was to distinguish between different rocks and minerals, and use them as tools according to their properties. With the widespread development of mining and trade, it became important for people to recognize minerals, and writings on mineral recognition and properties were common in many societies: China, Greece, Rome, Persia, Arabia, Italy, Germany.

Extensive chemical work on minerals began in the late 18th century, resulting in the development by Berzelius of the "anionic" classification of minerals. The development of crystal-structure analysis had a major effect on Mineralogy; the work of W.L. Bragg gave an atomistic basis for our knowledge of mineral chemistry and properties, and the work of V.M. Goldschmidt gave a theoretical basis for the behavior of elements in geochemical processes. The last 30 years has seen a flood of new techniques into Mineralogy: electron-microprobe analysis and crystal-structure refinement were followed by numerous spectroscopic techniques, many new microprobe methods for both elemental and isotopic analysis, and both scanning and transmission electron microscopy. The immense amount of data stimulated the development of Theoretical Mineralogy. Atom ("ionic") and electron ("covalent") models are now capable of accurately calculating stereochemical details and a wide array of physical and dynamic properties. The first steps to understand the thermodynamic basis of element ordering, element exchange and mineral reactions have now led to geothermobarometers capable of determining equilibration conditions to $\pm 25^{\circ}\text{C}$ and ± 1 kbar. Recent initiatives in surface mineralogy have been encouraged by the importance of surface properties of minerals in environmental problems.

Mineralogy permeates every facet of Earth Sciences, and reaches out to many contiguous areas in Physics, Chemistry and Materials Science. Unfortunately, this great diversity has adversely affected the general view of Mineralogy within the Earth Sciences: many Earth Scientists are not conversant with the breadth and intellectual vitality of current work in Mineralogy. With pressure on University budgets, both from decreasing Government support and from the development of important new areas (e.g., Environmental Sciences), there is a danger that Mineralogy will be discarded as a specific core discipline of Earth Science research and teaching. If Mineralogy is taught haphazardly as parts of the other subdisciplines in Earth Sciences, students will not develop a feel for the diversity of minerals and their behavior in the wide variety of terrestrial environments. The end result will be a generation of Earth Scientists who lack fundamental understanding of the materials with which they work, and who will be incapable of adapting to new areas of expansion within and peripheral to Earth Sciences. It is up to Mineralogists to prevent this from happening.

Minerals, mineralogy and mineralogists: past present future

- Il lavoro considera ciò che è accaduto alla mineralogia dal 1900 in avanti
- È un buon riferimento di **passato**,
- ma anche di come questo **passato**
- vive il suo **presente** e
- allunga la vista verso il suo **futuro**
- **noi rappresentiamo il futuro di questo passato**



Minerals, mineralogy and mineralogists: past present future

- **I Minerali**

- sono i materiali fondamentali della terra e quindi tutte le cose che riguardano la terra coinvolgono i minerali in un modo o nell'altro
- I minerali hanno giocato un ruolo strategico nello sviluppo dell'umanità

- **La Mineralogia**

- interessa ogni ambito delle Scienze della Terra
- raggiunge gli ambiti della Fisica, Chimica e Scienze dei Materiali

Minerals, mineralogy and

mineralogists: past present future

- Sfortunatamente molti Scienziati della Terra non sono consapevoli del respiro e della vivacità intellettuale del lavoro in Mineralogia
- **Per i problemi finanziari governativi e lo sviluppo di altre importanti aree disciplinari, come le Scienze Ambientali, si corre il rischio che la Mineralogia venga cancellata come area specifica e centrale nell'ambito delle Scienze della Terra per ricerca e insegnamento**

Minerals, mineralogy and mineralogists: past present future

- Gli **Studenti** rischiano non acquisire la sensibilità e consapevolezza dell'importanza dei diversi **Minerali** e del loro comportamento
- Il **risultato finale** sarà una generazione di Scienziati della Terra, privi della necessaria conoscenza dei materiali con cui lavorano e incapaci di integrarsi in nuove aree del sapere, anche marginali rispetto alle Scienze della Terra
- **E' compito dei Mineralogisti evitare che questo accada!**

Minerals, mineralogy and mineralogists: past present future

- Il contenuto :
- tratta in una bella carrellata i tratti salienti della **storia dei Minerali e della Mineralogia** dalla preistoria in avanti
- Pone l'accento sulle **Proprietà fisiche dei minerali**

TABLE 2. IMPORTANT EARLY ADVANCES IN THE PHYSICS OF MINERALS

Lucretius	99-55 B.C.	Atomic hypothesis
J. Kepler	1611 A.D.	Symmetry of snowflakes close-packing of 'atoms'
N. Steno	1669 A.D.	Steno's hypothesis, constancy of interfacial angles in quartz
A. Werner	1750-1817 A.D.	Last great physical classification of minerals
L. Romé de l'Isle	1736-1790 A.D.	Law of constancy of interfacial angles
R.-J. Haüy	1743-1822 A.D.	Ideas on 'unit cell' and translational symmetry
C. Weiss	1815 A.D.	Crystallographic axes, symmetry axes
F. Mohs	1825 A.D.	Mohs hardness scale
J. Haase	1830 A.D.	Derivation of the 32 crystal classes
A. Bravais	1848 A.D.	Derivation of the 14 space lattices
E.S. Fedorov		Derivation of the 230 space groups;
A. Schoenflies	1880-1890 A.D.	close packing, proposed crystal structure of halite
W. Barlow		

Minerals, mineralogy and mineralogists: past present future

- La rivoluzione del XX secolo

THE CANADIAN MINERALOGIST

*The Structure of Some Crystals as Indicated by their Diffraction
of X-rays.*

By W. L. BRAGG, B.A.

(Communicated by Prof. W. H. Bragg, F.R.S. Received June 21,—Read
June 26, 1913.)

[PLATE 10.]

A new method of investigating the structure of a crystal has been afforded by the work of Laue* and his collaborators on the diffraction of X-rays by crystals. The phenomena which they were the first to investigate, and which have since been observed by many others, lend themselves readily to the explanation proposed by Laue, who supposed that electromagnetic waves of very short wave-lengths were diffracted by a set of small obstacles arranged on a regular point system in space. In analysing the interference pattern obtained with a zincblende crystal, Laue, in his original memoir, came to the conclusion that the primary radiation possessed a spectrum consisting of narrow bands, in fact, that it was composed of a series of six or seven approximately homogeneous wave trains.

FIG. 9. The beginning of W.L. Bragg's historic paper on the structure of crystals; after Bragg (1913).

- 1895 Scoperta Raggi X
- 1912 **Esperienza di Laue** :
- *raggi X producono diffrazione,*
- *cristalli diffrangono raggi X*
- *struttura ordinata e periodica*
- 1913 diffrazione secondo **Bragg** $2d \sin\theta = n\lambda$
-
- Primi anni 60 : **Microsonda Elettronica** (Analisi chimica puntuale)
- Anni 70 : Microscopio elettronico a trasmissione (TEM) **Diffrazione elettronica**



«Tempi moderni: mineralogia e metodi sperimentali....»

- Un avanzamento concettuale nello studio della cristallografia dei minerali fu fatto da Rossi et al., **1983** e Ungaretti et al., **1983**: essi realizzarono che lo studio cristallografico strutturale e cristallografico di (**X-Ray e EMPA**) famiglie di minerali complessi a larga scala **granati, olivine, pirosseni, anfiboli spinelli** e le relazioni con l'ambiente petrogenetico **AVREBBE DATO** un importante contributo alla caratterizzazione di processi petrologici e, più in generale, geologici

«**Tempi moderni: mineralogia e metodi sperimentali.....**»

«**Ciò che è chiaro è che oggi (1993) la capacità di caratterizzazione dei minerali è di gran lunga superiore di quanto non fosse trent'anni fa**»

«**Tempi moderni: mineralogia e metodi sperimentali.....**»

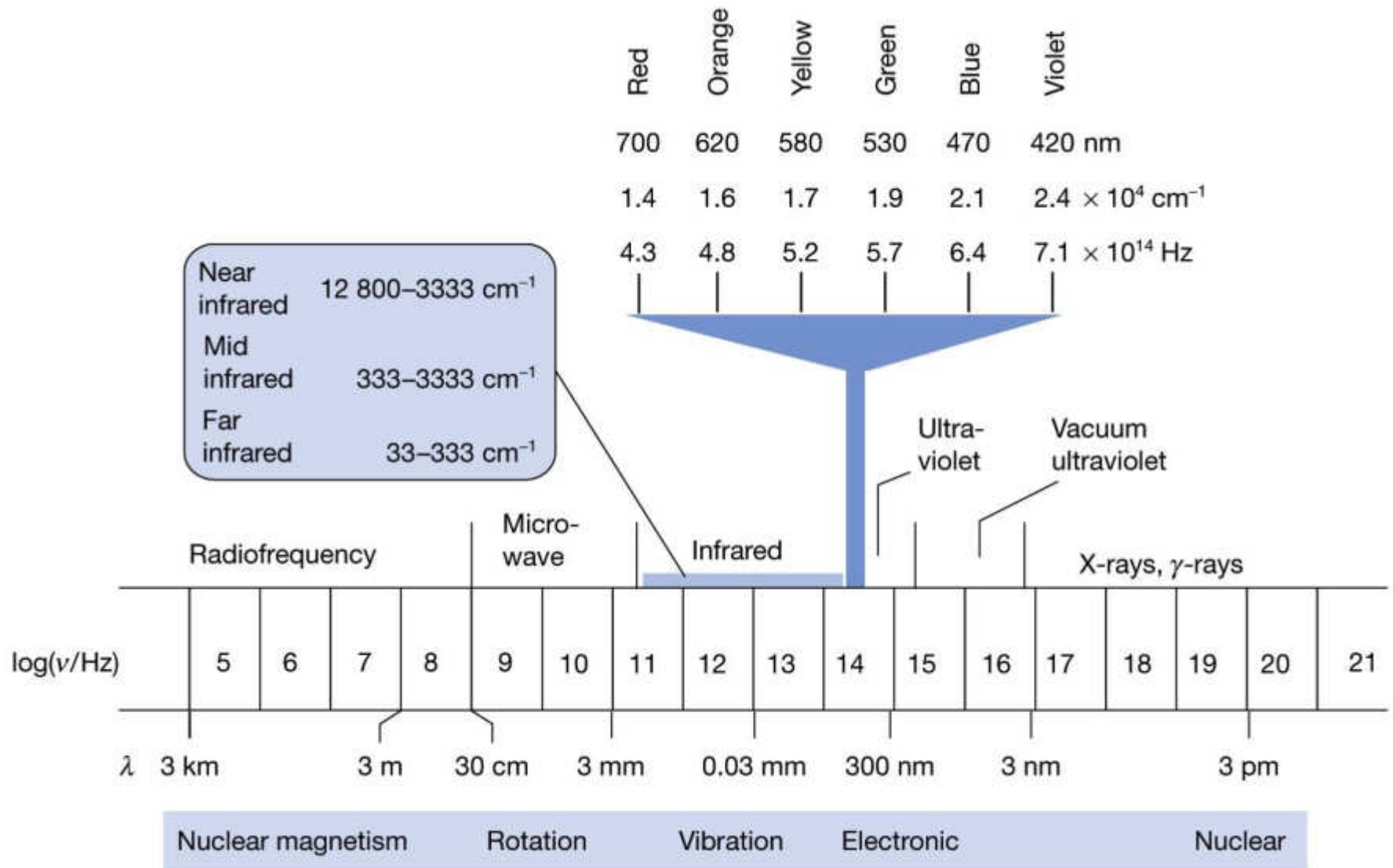
- Importanza dei **Metodi Spettroscopici** come tecniche complementari a XRD e EMPA
- **Principio generale**: in condizioni determinate un fascio incidente di radiazione può essere assorbito dalla materia oppure, in alternativa, può causare l'emissione di radiazione da parte della materia.
- In ogni caso il fenomeno avviene quando la radiazione incidente di appropriata frequenza induce variazioni nei livelli energetici del materiale

«Tempi moderni: mineralogia e metodi sperimentali.....»

- **Spettroscopia:** misura la differenza tra i livelli energetici in un materiale, misurando la differenza di energia della radiazione assorbita o emessa quando il materiale viene eccitato a uno stato di più elevata energia o quando decade al proprio stato fondamentale. L'intensità di assorbimento o emissione dipende dal numero di molecole, o atomi o elettroni coinvolti nel processo .
- **La radiazione incidente diventa una «sonda» della struttura locale**
Non è necessario che il materiale sia cristallino
- *Diffrazione: cambio di direzione della radiazione incidente , senza cambio di energia* *Periodicità, «long-range order»*

«**Tempi moderni: mineralogia e metodi sperimentali.....**»

- Spettroscopie di assorbimento (**XAS**-XANES EXAFS)
- Spettroscopie di emissione
- Spettroscopie rotazionali, vibrazionali ed elettroniche: IR **RAMAN UV/VIS**
- Spettroscopie di risonanza: NMR, **EPR/ESR**



PHYSICAL PROPERTIES OF MINERALS:
 How and why to dive into their
 knowledge

1993..... il prossimo futuro

- **Tecniche di microanalisi: aumento di precisione e accuratezza**
- **Acquisizione e interpretazione di dati soprattutto in relazione agli elementi in traccia e alla zonatura isotopica**
- **$\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ Mössbauer implementazione sperimentale per renderla una tecnica di microanalisi s.s.**

«Tempi moderni: mineralogia e metodi sperimentali..... «

- **1993**
- Sfida per i prossimi dieci anni:
- Uso di tecniche ad alta risoluzione per la determinazione degli elementi in traccia e isotopi
- Elementi di norma non misurati: H, Li, Be, B

«**Tempi moderni: mineralogia e metodi sperimentali.....**»

- **NMR grande prospettiva di sviluppo nel futuro**
- **ESR**
- **XAS spettroscopia di assorbimento dei raggi X**
- **XANES EXFAS Luce di SINCROTRONE**
- **Diffrazione elettronica**
-

PASSATO PRESENTE FUTURO

Ricerca bibliografica : obiettivo

quali i focus della Mineralogia nel tempo?

Focus periodo :



Hawthorne, 1993

Cosa si pubblicava nel **2002- 2004** **10 anni**

2012- 2014 **20 anni**

2015- 2018 **25 anni**

Bressanone 12 Febbraio 2018

esercitazione in tempo reale

- Scelta operativa : utilizzare la risorsa
- American Mineralogist
- perché ?
- Special temi
- Lavori a invito del centenario
-alla fine ricordare che.....



About IMA 2018

The International Mineralogical Association is an umbrella organisation uniting professional associations from 38 countries, and its quadrennial meeting is the largest global forum for making contacts and exchanging information with mineral scientists from around the globe. The 22nd meeting in Melbourne, Australia, will be the first such meeting held in Australia and only the second in the southern hemisphere. The meeting will be hosted by the Geological Society of Australia, and held in the Melbourne Convention and Exhibition Centre, between 13–17 of August, 2018.

Sponsorship and exhibition opportunities

Deliver exposure to your brand to our global network from now until IMA 2018. Opportunities are available now.

<https://www.ima2018.com>



[Home](#) [About](#) [Destinations](#) [Sponsorship and Exhibition](#) [Program](#) [Field trips](#) [Sightseeing Tours](#)
[Registration](#) [Contact](#)

[Home](#) / [Session – Mineralogy Past, Present and Future: Preparing for the Next 100 Years of the Mineralogical Society of America](#)

MSA will celebrate its 100th anniversary in 2019. IMA2018 is an appropriate venue to look at mineralogy historically and prospectively. Mineralogy continues to be a fundamental science for understanding the solar system, our planet, and how life interacts with minerals. Moreover, as minerals are fundamental materials required by our technologically rich society, enhanced study of them as resources and templates for technology will continue to be important. The future of mineralogy will be integrated into solutions of global scale challenges. This session provides an opportunity to synthesize the history, practice, and future of mineralogy broadly defined, including education, resource issues, challenges, frontiers, as a hobby, its greater role in and for society, and the role of mineralogical societies in supporting and enhancing Mineralogy.

Session convenor

Dr George Harlow (United States)

American Museum of Natural History, New York

<https://www.ima2018.com>

Proprietà fisiche dei minerali: Passato presente futuro

Né futuro né passato esistono

.....È inesatto dire che i tempi sono tre:

- **Passato**
- **Presente**
- **Futuro**

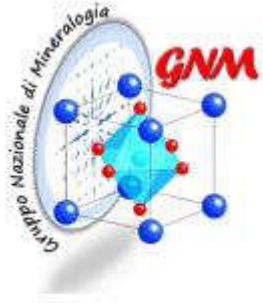


Forse sarebbe esatto dire che i tempi sono tre:

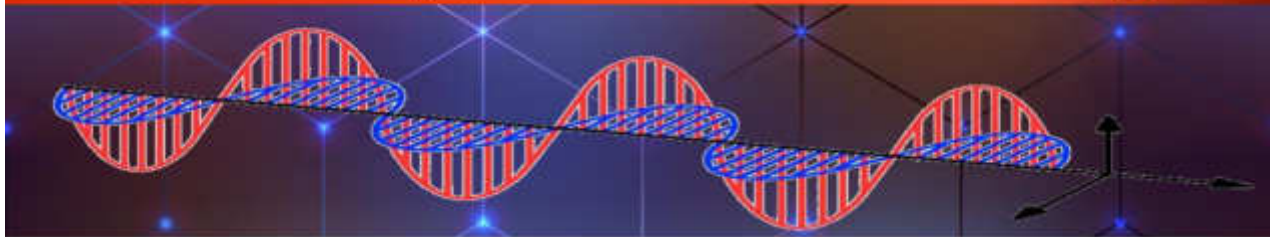
- **presente del passato**
- **presente del presente**
- **presente del futuro**

(Agostino d'Ippona, Confessioni, 397-400)





Physical properties of minerals: how and why to dive into their knowledge



Ringrazio per l'attenzione



Auguro

buona continuazione



12-15 Febbraio 2018 Casa della Gioventù - Bressanone



Per approfondire.....

- Hawthorne (1993) Minerals, mineralogy and mineralogist: past present future Can. Mineral. 31, 253-296
- Lovett D R (1999) Tensor properties of crystals , second edition - Institute of Physics Publishing, Bristol-
- Putnis A (1992) Introduction to Mineral Sciences - Cambridge University Press-
- <http://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/tensors>
- <http://www.ocw.mit.edu>
- <http://www.minsocam.org/msa/AmMin/TOC/>
- <https://www.ima2018.com/>