

CRISTALOFÍSICA

TEMA 10

RELACIÓN ENTRE SIMETRÍA Y PROPIEDADES FÍSICAS

ÍNDICE

10.1 Introducción

10.2 Propiedades escalares: Densidad, peso específico. Calor específico

10.3 Principio de Curie-Neumann

10.4 Expresión tensorial de las propiedades físicas de un cristal

Celia Marcos Pascual

10.1 PROPIEDAD FÍSICA

Una propiedad física es cualquier respuesta medible u observable de un cristal mineral a alguna causa externa.

Además de la forma, que puede faltar por completo en los fragmentos de minerales, las propiedades físicas son muy útiles para su reconocimiento. Algunas de estas propiedades pueden apreciarse por simple observación, otras requieren sencillas medidas y finalmente existen parámetros que requieren de una instrumentación más compleja y costosa.

Las propiedades físicas de los sólidos en estado cristalino se dividen en:

- direccionales
- no direccionales

Las primeras incluyen las propiedades

- *Tensoriales*: dependen de la dirección según la cual se miden.
 - Se agrupan según la forma de la superficie geométrica que pueda representarlas.
 - Propiedades que pueden representarse por un **elipsoide**

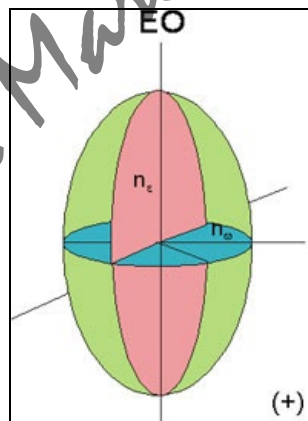


Figura 10.1.- Elipsoide de los índices

- Un caso particular es una esfera
- Propiedades que se representan por **superficies** de orden superior al elipsoide no sólo requieren un valor numérico para su correcta expresión (módulo) sino que debe especificarse también la dirección en la que se ha realizado la medida, tal como la cohesión, tenacidad, piezoelectricidad y piroelectricidad.

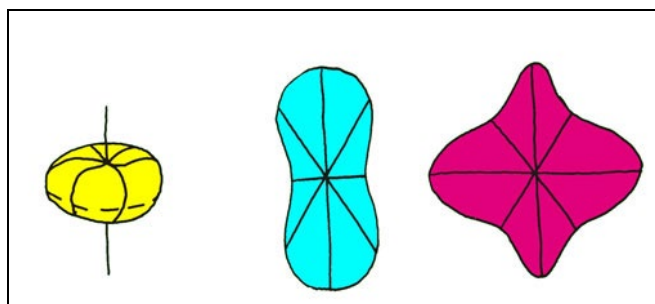


Figura 10.2.- Superficies de representación de orden superior al del elipsoide

- El segundo tipo de propiedades son
 - *Escalares*: no dependen de la dirección en la que se miden.
 - calor específico, la densidad, etc. se expresan en forma numérica.

10.2 PROPIEDADES ESCALARES

DENSIDAD

La densidad de un cuerpo representa el valor de su masa por unidad de volumen (g/cm^3) y su valor numérico es igual al *peso específico*, que a su vez indica cuántas veces el cuerpo en cuestión pesa más que un volumen idéntico de agua destilada.

La densidad está en relación directa con la densificación de los átomos en la celda reticular y por tanto es elevada en los compuestos con un número de coordinación alto (metales) y baja en los compuestos con una coordinación menor (compuestos con enlaces residuales o covalentes).

En general no se procede a realizar medidas de densidad sino de peso específico, basándose en el conocido principio de Arquímedes y mediante un instrumental muy sencillo, como

- picnómetro
- balanza hidrostática
- líquidos con peso específico previamente determinado.

Resulta también cómodo asignar un valor estimativo por comparación con una sustancia como patrón.

La determinación precisa de la densidad no siempre supone un diagnóstico seguro ya que muy pocas muestras de minerales carecen de oquedades, impurezas o fracturas que alteran de tal modo los valores de la densidad que hace que sólo sea cualitativa

La densidad

$$\rho = M/V$$

Ecuación 10.1

también se expresa como

$$\rho = \frac{Z \times M}{N \times V}$$

Ecuación 10.2

Donde:

Z es el número de fórmulas contenidas en la celda elemental

M es el peso molecular

N es el n° de Avogadro = $6,02338 \times 10^{23}$

V es el volumen de la celda elemental. Se obtiene a partir de los parámetros de celda mediante la expresión:

$$V = a \cdot b \cdot c \sqrt{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma}$$

Ecuación 10.3

PESO ESPECÍFICO

Es un número que expresa la relación entre su peso y el peso de un volumen igual de agua a 4°C. El peso específico de una sustancia cristalina depende de dos factores:

- 1) clase de átomos
- 2) empaquetado de los átomos

En los compuestos isoestructurales el empaquetamiento es constante y los elementos con peso atómico más elevado, tienen por lo general, mayor peso específico como ocurre en los carbonatos rómbicos.

mineral	fórmula	peso tómico del catión	peso específico
aragonito	CaCO ₃	40,08	2,95
estroncianita	SrCO ₃	87,62	3,76
witherita	BaCO ₃	137,34	4,29
cerusita	PbCO ₃	207,19	6,55

En los compuestos polimorfos permanece constante la composición química pero varía el empaquetamiento. Un ejemplo lo constituye los polimorfos del C, el diamante tiene peso específico 3,5 y estructura con empaquetamiento compacto mientras que el grafito tiene peso específico 2,23 y el empaquetamiento es menos denso que en el diamante.

La variación del peso específico con la composición se manifiesta claramente en las series de solución sólida.

Ejemplo: el peso específico en la serie de los olivinos varía entre 3,3 de la forsterita y 4,4 de la fayalita.

Determinación del peso específico mediante la pesada hidrostática

Material:

- balanza
- puente de madera (se coloca sobre platillo izquierdo)
- vaso de precipitados de unos 100 ml
- alambre para suspender el mineral en el agua

Procedimiento:

- Se pesa el mineral. Peso del mineral en aire = M_a

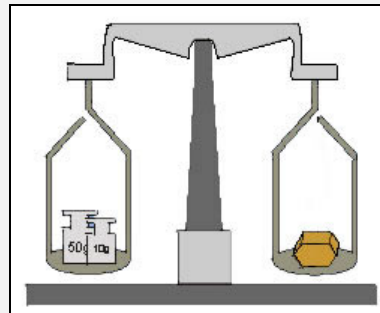


Figura 10.3.- Foto (izquierda) y esquema (derecha) representando el procedimiento de pesar el mineral en aire

- Colocar puente sobre platillo izquierdo.
- Llenar el vaso hasta las $\frac{3}{4}$ partes de agua destilada o hervida.
- Colocar el vaso sobre el puente de madera.
- Suspender el alambre en la parte izquierda del brazo y sumergirlo en el líquido.
- Anotar el peso del alambre sumergido = A_s



Figura 10.4.- Foto mostrando la pesada del alambre sumergido en agua

- Retirar con cuidado el vaso y el alambre y se coloca el mineral sobre la espiral del alambre, que nuevamente se introduce en el agua y se suspende del brazo.

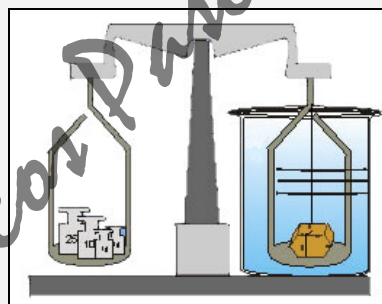


Figura 10.5.- Foto (izquierda) y esquema (derecha) representando el procedimiento de pesar el mineral en agua

- Anota el peso del alambre con el mineral sumergido = AM_s
- Peso del mineral sumergido $M_s = AM_s - A_s$

$$\text{Peso específico del mineral} = \frac{M_a}{M_a - M_s}$$

CALOR ESPECÍFICO O CAPACIDAD CALORÍFICA ESPECÍFICA

Es una magnitud física que indica la capacidad de un material para almacenar energía interna en forma de calor. Formalmente puede decirse que es la energía

necesaria para incrementar en una unidad de temperatura una cantidad de sustancia. Se expresa como:

$$C_p = \left(\frac{\Delta Q}{m \cdot \Delta T} \right)_p$$

Ecuación 10.4

Donde:

ΔQ es la cantidad de calor suministrada,

ΔT es el incremento de temperatura

m es la masa

P la presión constante a la que se lleva a cabo el experimento.

10.3 PRINCIPIO DE CURIE-NEUMANN

Principio que relaciona la simetría de un efecto observable con la simetría de la causa y la simetría del cristal.

La simetría mínima de un efecto es igual a la simetría combinada que existe tanto en la causa como en el cristal.

Por lo tanto, la simetría de una propiedad física ha de incluir la simetría del grupo puntual del cristal.

La simetría de una propiedad física corresponde a la de un elipsoide, lugar geométrico de los extremos de los vectores que representan el valor de la propiedad en cada una de las direcciones del cristal

La idea geométrica de este principio puede observarse en esta figura.

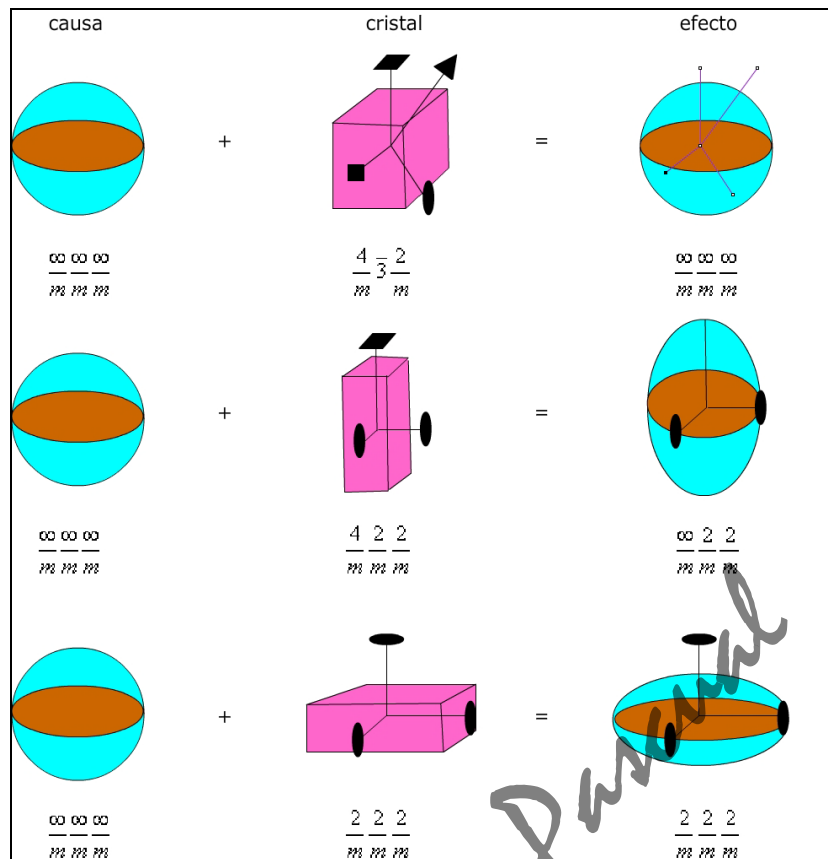


Figura 10.6.- Esquema representando el principio Curie-Neumann

10.4 EXPRESIÓN TENSORIAL DE LAS PROPIEDADES FÍSICAS DE UN CRISTAL

Tensor:

- Cantidad caracterizada por la existencia de varios números (componentes) que tienen determinados valores para un sistema de referencia dado.
- Dicha cantidad no puede variar, aunque lo haga el sistema de referencia del tensor y sus componentes.
- Conociendo la ley de transformación al nuevo sistema de referencia se pueden calcular las nuevas componentes.

Tipos de tensores

- **Tensores de 1^{er} orden: Propiedades vectoriales.** Se representan por:

$$A_i = a_i B$$

Ecuación 10.5

y vienen caracterizadas por tres componentes según los ejes de referencia:

a_1
a_2
a_3

Ecuación 10.6

- A este tipo corresponden la **PIROELECTRICIDAD** y el **PIROMAGNETISMO**. No aparecen en cristales centrosimétricos.
- **Tensores de 2º orden** vendrán representados por:

$$A_i = a_{ij} B_j$$

Ecuación 10.7

están caracterizadas por nueve coeficientes, cada uno de ellos asociado a un par de ejes tomados en determinado orden

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

Ecuación 10.8

- A este tipo pertenece la **TERMoelectricidad**
- Hay otras propiedades físicas representadas por un tensor de 2º orden caracterizado porque los componentes $a_{ij} = a_{ji}$, es decir, es un tensor simétrico, en cuyo caso los coeficientes se reducen a seis.

a_{11}	a_{12}	a_{13}
	a_{22}	a_{23}
		a_{33}

Ecuación 10.9

- A este grupo pertenecen la **DILATACIÓN TÉRMICA**, **COMPRESIBILIDAD**, **CONDUCTIVIDAD ELÉCTRICA**, **CONDUCTIVIDAD CALORÍFICA**, **INDUCCIÓN ELÉCTRICA**, **INDUCCIÓN MAGNÉTICA** y **PROPIEDADES ÓPTICAS**.
- Cuando un tensor de 2º orden simétrico se refiere a sus ejes principales, los coeficientes se reducen a tres:

$$\begin{vmatrix} a_{11} & & \\ & a_{22} & \\ & & a_{33} \end{vmatrix}$$

Ecuación 10.10

- **Tensores de 3^{er} orden** se expresan por:

$$A_i = a_{ijp} B_{jp}$$

Ecuación 10.11

- La matriz representativa consta de 27 coeficientes

$$\begin{vmatrix} a_{111} & a_{121} & a_{131} & a_{112} & a_{122} & a_{132} & a_{113} & a_{123} & a_{133} \\ a_{211} & a_{221} & a_{231} & a_{212} & a_{222} & a_{232} & a_{213} & a_{223} & a_{233} \\ a_{311} & a_{321} & a_{331} & a_{312} & a_{322} & a_{332} & a_{313} & a_{323} & a_{333} \end{vmatrix}$$

Ecuación 10.12

- A este grupo pertenecen la **PIEZOELECTRICIDAD** y **PIEZOMAGNETISMO**.
- **Tensores de 4^o orden** vienen caracterizadas por 81 coeficientes, de la forma:

$$A_{ij} = a_{ijmp} B_{mp}$$

Ecuación 10.13

- A este grupo pertenecen los **COEFICIENTES ELÁSTICOS ASIMÉTRICOS**, **AMORTIGUAMIENTO DE ONDAS ACÚSTICAS**, **COEFICIENTES FOTOELÁSTICOS**, **COEFICIENTES FOTOMAGNÉTICOS**.
- Cuando el tensor de 4^o orden es simétrico el número de coeficientes se reduce a 21.
- A este grupo pertenece la **ELASTICIDAD**.