Mineralogia i krystalografia mają wspólne korzenie. Przez wieki głównym przedmiotem badań krystalograficznych były badania minerałów. Dopiero na początku XX-go wieku obie te nauki rozdzieliły się. Krystalografia zajęła się głównie rozwojem nowych metod badawczych (w tym także tych opartych na dyfrakcji promieniowania X), natomiast mineralogia skoncentrowała się na właściwościach minerałów. Obie te nauki łączą się w rentgenowskich badaniach struktury i właściwości minerałów. Prawie wszystkie (*ok.* 99,7%) z wyznaczonych dotychczas ok. 1,5mln struktur krystalicznych uzyskano poprzez udokładnienie sferycznego modelu gęstości elektronowej atomów zwanego modelem niezależnych atomów (IAM) względem rentgenowskich danych dyfrakcyjnych. W ten sposób uzyskano także struktury praktycznie wszystkich znanych minerałów (ok. 5500 struktur). IAM został zaproponowany w roku 1914-tym przez W.H. Bragga. Paradoksalnie można więc rejestrować dane na najnowocześniejszej aparaturze i jednocześnie korzystać z ponad stuletniego modelu gęstości elektronowej. Tylko kilka tysięcy struktur kryształów (ok.0.3%) uzyskano stosując w udokładnieniu nowoczesne asferyczne modele atomowe takie jak udokładnienie multipolowe (MR) czy też udokładnienie za pomocą atomów Hirshfelda (HAR). Wśród takich struktur jest tylko ok. 35 struktur minerałów. Wśród tych struktur jest także opublikowany przez nas ilościowy rozkład gęstości elektronowej fluorytu, oraz będzie przygotowany już do druku ilościowy rozkład gęstości elektronowej w grossularze w warunkach normalnych jak i pod ciśnieniem 1GPa. **To jest pierwsza udana próba udokładnienia ilościowego rozkładu gęstości elektronowej pod ciśnieniem na świecie.** Poprzez porównanie z gęstością elektronową w warunkach normalnych uzyskujemy nowe możliwości śledzenia skutków użycia ciśnienia (lub/i temperatury lub innych bodźców) w strukturach minerałów na poziomie subatomowym. Jest to możliwe dzięki zastosowaniu przez nas nowego typu celki diamentowej z szerszym kątem rozwarcia (do 120^{o}) niż ten w dotychczas używanych celkach. Dostajemy znacznie więcej informacji z eksperymentów rentgenowskich oraz udokładniamy bardziej zaawansowane modele gęstości elektronowej niż dotychczas to robiono.

Celem tego projektu są absolutnie pionierskie zastosowania eksperymentalnych badań gęstości elektronowej do badania przejść fazowych w minerałach w warunkach wysokiego ciśnienia oraz/i w funkcji temperatury. Otwieramy w ten sposób nowe pole badawcze. Nowe podejście umożliwia symulowanie procesów mineralogicznych zachodzących w skorupie ziemskiej w warunkach laboratoryjnych. Proponujemy badania typu studium wykonalności (*ang.:* feasibility studies). Chcemy zbadać takie minerały, które wykazują przejścia fazowe poniżej ok. 50GPa, rozpraszają promieniowanie rentgenowskie przy wysokich kątach dyfrakcyjnych oraz w których przejścia fazowe były już badane metodami rutynowymi. **Chcemy praktycznie pokazać o ile głębsze wejrzenie w naturę oddziaływań i przejść fazowych w minerałach można uzyskać stosując udokładnienie multipolowe w porównaniu do badań dotychczas wykonywanych.** Te nowe metody badawcze umożliwiają uzyskanie ilościowych rozkładów gęstości elektronowej w minerałach, uzyskanie znacznie lepszych (bardziej dokładnych i precyzyjnych) parametrów geometrycznych (odległości międzyatomowych i kątów walencyjnych) oraz parametrów termicznych atomów/jonów, dają możliwość **śledzenia zmian rozkładu gęstości elektronowej (transferu ładunku) między jonami** w sieci krystalicznej minerałów pod wpływem ciśnienia i temperatury. Można także uzyskiwać wiarygodne wartości **ładunków i objętości atomowych/jonowych,** uzyskiwać i wizualizować odstępstwa od sferyczności atomów/jonów w sieciach krystalicznych minerałów oraz **wiarygodne wartości energii oddziaływań elektrostatycznych, potencjału elektrostatycznego, pola elektrycznego, i - w ogólności - wszelkich jednoelektronowych właściwości gęstości elektronowej**. Te parametry mogą być korelowane z różnymi właściwościami mineralogicznymi i fizykochemicznymi. Proponuję zbadanie przejść fazowe w następujących minerałach: **Kyanit** [Al_2SiO_5], **Diopsyd** [$CaMgSi_2O_6$], **Enstatyt** [$Mg_2Si_2O_6$], **Pyrop** [$Mg_3Al_2(SiO_4)_3$], **Oliwin, Forsteryt** [z wulkanu Wezuwiusz oraz z Norwegii, Mg_2SiO_4], **Wollastonit** [$Ca_3Si_3O_9$], **Brucyt** [$Mg(OH)_2$, Trygonalny], **Grafit, Diament**, **Kwarc** (forma α i β) [SiO_2], **Boracyt** [$Mg_3B_7O_{13}Cl$] oraz inne interesujące minerały, i nowe fazy minerałów, wykazujące przejścia fazowe.

Projekt ten jest ważny z powodów czysto naukowych związanych ze zrozumieniem natury zjawisk zachodzących w minerałach ale także ważna dla geofizyków opisujących sposoby rozchodzenia się fal sejsmicznych w płaszczu skorupy ziemskiej oraz zajmujących się różnymi modelami zjawisk grawitacyjnych, mineralogów zajmujących się modelowaniem dystrybucji domieszek pierwiastków śladowych w minerałach i sposobów ich redystrybucji podczas zmian fazowych. Ponad 100 lat po badaniach Braggów, proponujemy nowe możliwości w badaniach mineralogicznych.