

Tècniques, Química computacional

## Cristal·lografia

La cristal·lografia és la ciència que estudia la forma i estructura dels cristalls. Els cristalls són sòlids en els quals els àtoms estan ordenats seguint una determinada disposició o geometria que es va repetint al llarg de l'espai tridimensional.

Molts compostos, tan orgànics com inorgànics, són sòlids cristal·lins, és a dir, formen cristalls.

Exemples de sòlids que existeixen a la natura com a cristalls són la sal comú (clorur sòdic, NaCl), que forma cristalls en forma de cub o el sulfat de coure (CuSO<sub>4</sub>), que forma cristalls en forma de romboide.

### A L'ICIQ

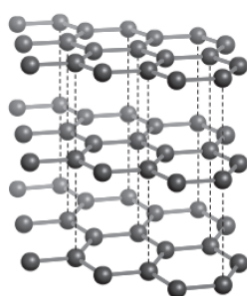
La Unitat de Difracció de Raig X de l'ICIQ disposa de dues tècniques de difracció de raig X: la difracció de monocristall i la difracció de pols. Mentre que en difracció de monocristall el que s'obté és l'estructura del cristall, la posició dels àtoms dins la molècula i en la xarxa cristal·lina, en difracció de pols el que s'obté és una sèrie de senyals que conformen una empremta dactilar corresponent a un determinat compost en una determinada forma cristal·lina.



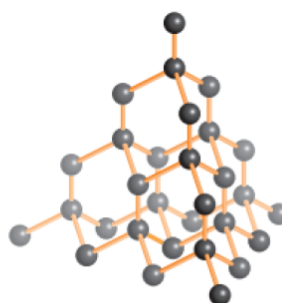
**Cristalls de sulfat de coure**

## Cristalls de clorur sòdic

De vegades un mateix compost químic pot adoptar diferents formes cristal·lines. Un exemple d'aquest fenomen es el carboni, que pot cristal·litzar com a grafit o bé com a diamant.

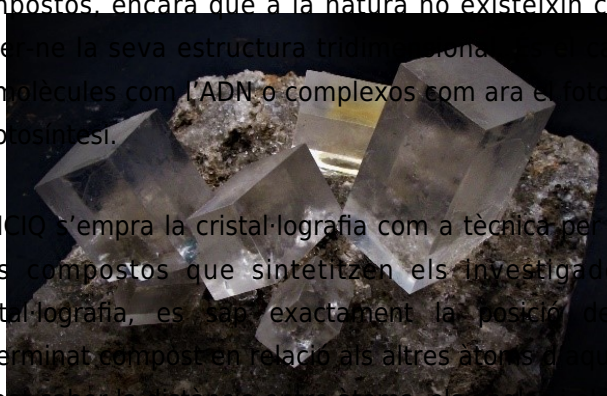


**Graphite**



**Diamond**

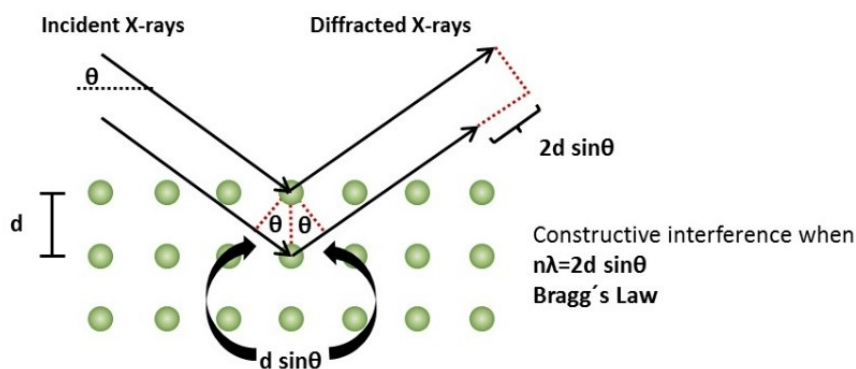
Alguns cops s'obté de forma artificial sòlids cristal·lins d'alguns compostos, encara que a la natura no existeixen com tal, per tal de saber-ne la seva estructura tridimensional. Alguns exemples de les proteïnes, biomolècules com l'ADN o complexos com ara el fotosistema II on té lloc la fotosíntesi.



A l'ICIQ s'empra la cristal·lografia com a tècnica per a saber l'estructura dels compostos que sintetitzen els investigadors. Mitjançant la cristal·lografia, es sap exactament la posició de cada àtom d'un determinat compost en relació als altres àtoms d'aquell compost. També es pot saber la distància entre àtoms, els angles i els angles diedres que formen els enllaços de la molècula. Així, s'obté el que seria l'equivalent a tenir una foto de la molècula que s'està estudiant.

La tècnica analítica més emprada en cristal·lografia és el que s'anomena la difracció de raig X.

La difracció de raig X es basa en irradiar la mostra a estudiar, un determinat cristall, amb rajos X. Els rajos X són un tipus de radiació electromagnètica amb una longitud d'ona que va de 0,1 a 10 nm, suficientment petita per a interaccionar amb els àtoms d'un cristall. Quan els rajos X interaccionen amb els àtoms d'un cristall, canvien de direcció segons unes determinades lleis de la física, es diu que difracten. D'aquesta manera, si recollim la informació dels rajos difractats, i amb els coneixements adequats de la tècnica, podem interpretar els senyals obtinguts i obtenir-ne informació.



El coneixement aportat per la cristal·lografia és utilitzat en química, física i biologia per a conèixer l'estructura de les molècules, i així poder-les identificar, interpretar-ne i entendre'n el comportament.

La UNESCO va declarar el 2014 com Any Internacional de la Cristal·lografia.

## Per saber-ne més

### Altres recursos

- [What is X-ray Diffraction?](#)
- [Intro to X-Ray Diffraction of Crystals](#)
- [X Ray Crystallography and X Ray Diffraction](#)