

**Técnicas, Química computacional**

## Cristallografía

La cristallografía es la ciencia que estudia la forma y estructura de los cristales. Los cristales son sólidos en los que los átomos están ordenados siguiendo una determinada disposición o geometría que se va repitiendo a lo largo del espacio tridimensional.

Muchos compuestos, tan orgánicos como inorgánicos, son sólidos cristalinos, es decir, forman cristales.

Ejemplos de sólidos que existen en la naturaleza como cristales son la sal común (cloruro sódico, NaCl), que forma cristales en forma de cubo o el sulfato de cobre (CuSO<sub>4</sub>), que forma cristales en forma de romboide.

### En el ICIQ

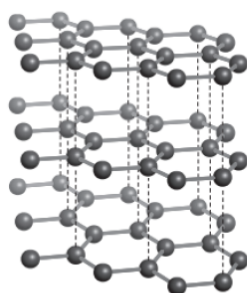
La Unidad de Difracción de Rayos X del ICIQ dispone de dos técnicas de difracción de rayos X: la difracción de monocristal y la difracción de polvo. Mientras que en difracción de monocristal lo que se obtiene es la estructura del cristal, la posición de los átomos en la molécula y en la red cristalina, en difracción de polvo lo que se obtiene es una serie de señales que conforman una huella dactilar correspondiente a un determinado compuesto en una determinada forma cristalina.



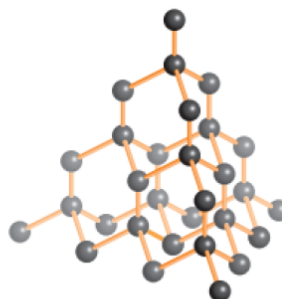
**Cristales de sulfato de cobre**

## Cristales de cloruro sódico

A veces un mismo compuesto químico puede adoptar diferentes formas cristalinas. Un ejemplo de este fenómeno es el carbono, que puede cristalizar como grafito o bien como diamante.



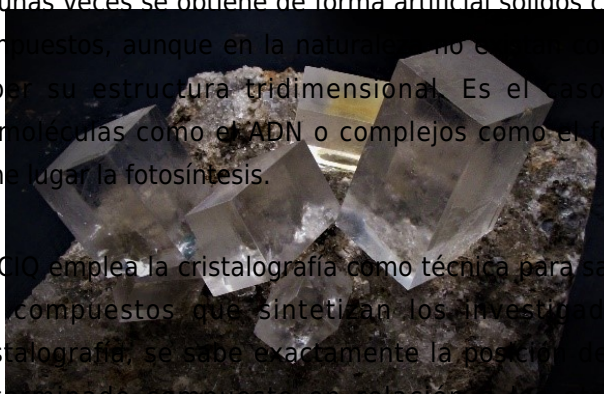
**Graphite**



**Diamond**

Algunas veces se obtiene de forma artificial sólidos cristalinos de algunos compuestos, aunque en la naturaleza no es así, con el fin de saber su estructura tridimensional. Es el caso de las proteínas, biomoléculas como el ADN o complejos como el fotosistema II donde tiene lugar la fotosíntesis.

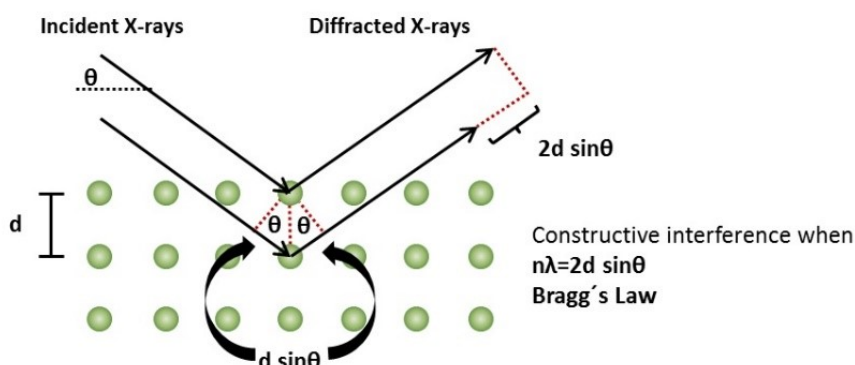
El ICIQ emplea la cristalografía como técnica para saber la estructura de los compuestos que sintetizan los investigadores. Mediante la cristalografía, se sabe exactamente la posición de cada átomo de un determinado compuesto en relación a los otros átomos de ese compuesto. También se puede saber la distancia entre átomos, los ángulos y los ángulos diedros que forman los enlaces de la molécula. Así,



se obtiene lo que sería el equivalente a tener una foto de la molécula que se está estudiando.

La técnica analítica más empleada en cristalografía es lo que se llama la difracción de rayos X.

La difracción de rayos X se basa en irradiar la muestra a estudiar, un determinado cristal, con rayos X. Los rayos X son un tipo de radiación electromagnética con una longitud de onda que va de 0,1 a 10 nm, suficientemente pequeña para interactuar con los átomos de un cristal. Cuando los rayos X interactúan con los átomos de un cristal, cambian de dirección según unas determinadas leyes de la física, se dice que difractan. De este modo, si recogemos la información de los rayos difractados, y con los conocimientos adecuados de la técnica, podremos interpretar las señales obtenidos y obtener información.



El conocimiento aportado por la cristalografía es utilizado en química, física y biología para conocer la estructura de las moléculas, y así poderlas identificar, interpretar y entender su comportamiento.

La UNESCO declaró el 2014 com Año Internacional de la Cristalografía.

## Para saber más

### Otros recursos

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

- **X Ray Crystallography and X Ray Diffraction**