

Antecedentes de la cristalografía

José A. Chávez Carvayar

Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM

La mayoría de los sólidos posee una estructura cristalina conformada por el arreglo interno de sus átomos, iones o moléculas que, salvo algunas excepciones, se repiten de manera ordenada en el espacio y cuya distribución muestra relaciones de simetría de acuerdo con determinados tipos de redes cristalinas. Este orden, que da a estos materiales su consistencia y la mayor parte de sus propiedades, constituye el campo de estudio de la cristalografía.

Qué es la cristalografía

La cristalografía es la ciencia que se ocupa del estudio de la materia cristalina, de las leyes que rigen su formación, así como de sus propiedades geométricas, químicas, físicas y la resolución de estructuras cristalinas. Es posible clasificar la cristalografía en cristalografía geométrica, cristalografía química o cristalografía física o cristalofísica.

La cristalografía geométrica se encarga del estudio de la morfología externa de los cristales y su simetría, así como de la geometría y simetría de las redes. Si bien desde el punto de vista macroscópico se considera la materia cristalina como un medio homogéneo y continuo, anisótropo y simétrico, desde el punto de vista microscópico es un medio homogéneo, discreto, anisótropo y simétrico.

La cristalografía química estudia la relación entre la composición química, el ordenamiento atómico y las fuerzas de enlace entre átomos, al considerar el concepto de cristal real, ya que se deben tomar en cuenta sus imperfecciones.

En la cristalofísica se estudian las propiedades físicas de los cristales y su relación con la composición química y la estructura.

Algunos de los métodos de análisis más importantes para la cristalografía son la difracción de rayos X, difracción de electrones y de neutrones. Estas poderosas técnicas permiten conocer la disposición de los átomos en un material para determinar su estructura cristalina y aún más, entender y, bajo ciertas condiciones, predecir sus propiedades. “¿Por qué el agua hierve a 100°C y el metano a -161°C ? ¿Por qué la sangre es roja y la hierba es verde? ¿Por qué el diamante es duro y la cera es blanda? ¿Por qué los glaciares fluyen y el hierro se endurece al golpearlo? ¿Cómo se contraen los músculos? ¿Cómo la luz del sol hace que las plantas crezcan y cómo los organismos vivos han sido capaces de evolucionar

hacia formas cada vez más complejas? Las respuestas a todas estas preguntas se obtienen del análisis estructural”, según dijo Max Perutz en 1996.

Surgimiento de la cristalografía

La cristalografía, al igual que el origen de los elementos químicos y su ordenamiento, tanto microscópico como macroscópico, está relacionada con el génesis del cosmos. Desde los primeros intentos por conocer el Universo, un aspecto fundamental en la investigación científica realizada por el hombre se refiere a la elaboración de modelos que conduzcan a una descripción del mundo físico en términos de átomos y moléculas. Estos modelos intentan incluir no sólo arreglos atómicos espaciales sino también su comportamiento dinámico, que permita describir las propiedades físicas y químicas de los materiales. Esto ha sido logrado, en buena medida, gracias a la cristalografía.

Sin embargo, surge una serie de preguntas: ¿Cómo se crearon las partículas elementales, los átomos, los elementos, los arreglos u ordenamientos atómicos que observamos en las sustancias cristalinas y que les confieren sus propiedades físicas?

Los primeros instantes del Universo... y de la cristalografía

En cosmología física, la teoría del Big Bang, o de la gran explosión, trata de explicar, a partir de una singularidad espaciotemporal, el origen y evolución del Universo. Según esta teoría nuestro Universo empezó como un punto que poseía una densidad y una energía inconcebibles, 10^{38} Kg/dm³ y T 10^{32} K, y en el cual las cuatro fuerzas fundamentales — gravitacional, nuclear fuerte, débil y electromagnética— constituían una sola, la superfuerza. En cierto instante, el Big Bang suscita la expansión de la materia en todas direcciones, surgen el tiempo, el espacio, la energía, el origen mismo de nuestro Universo.

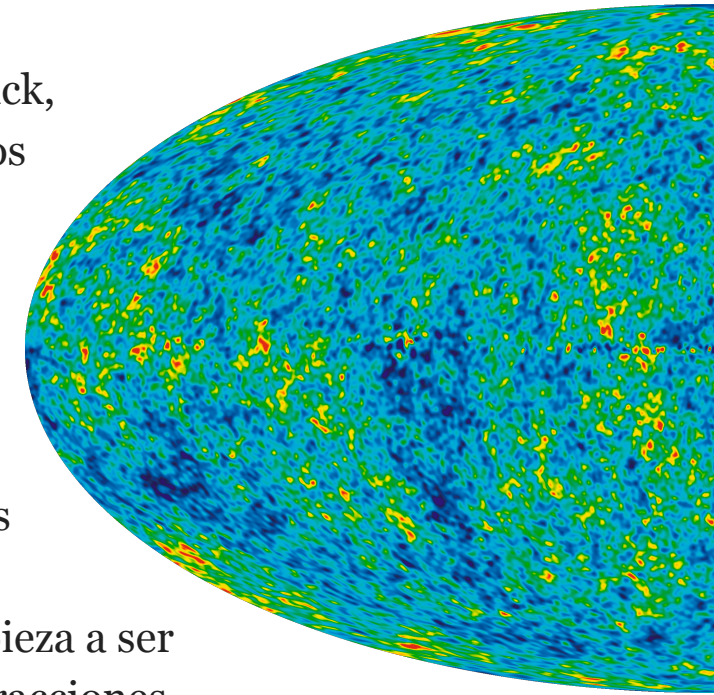


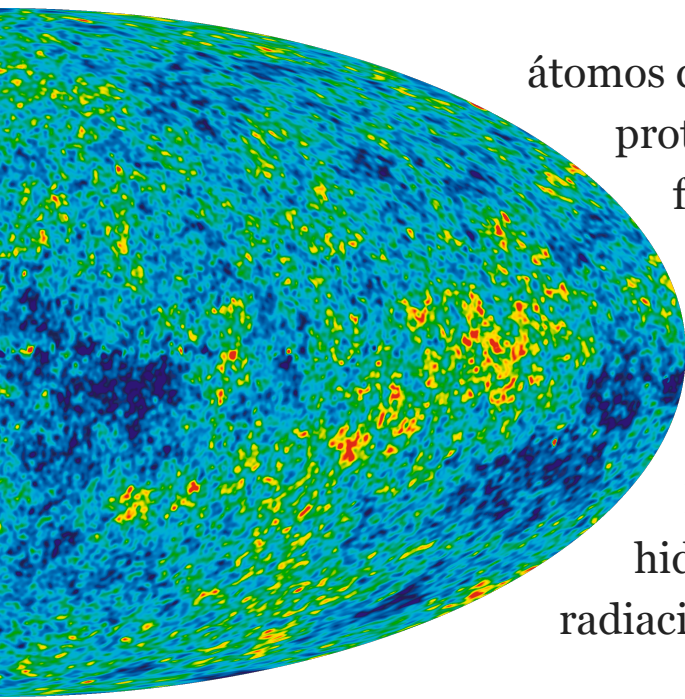
Figura 1. Recreación del Big Bang, ocurrido hace unos 13 810 millones de años.

Durante la era o tiempo de Planck, aproximadamente 10^{-43} segundos después del Big Bang, el Universo primigenio tenía una temperatura característica de 10^{32} K, con un volumen esférico de unos 10^{-33} cm de radio, casi 100 trillones de veces más pequeño que un átomo. En estos instantes la gravedad empieza a ser una fuerza relevante en las interacciones cuánticas.

Posteriormente, en el instante 10^{-36} segundos se produce la ruptura espontánea de la simetría, las fuerzas nuclear fuerte y electromagnética se separan; la temperatura es de unos 10^{27} K. El volumen del Universo sufre una rapidísima expansión, a una velocidad mayor que la de la luz, instante conocido como periodo inflacionario.

A los 10^{-32} segundos termina la época inflacionaria y surge plasma ionizado de materia y radiación. En el instante 10^{-12} segundos ocurre la separación de la fuerza débil del electromagnetismo. La temperatura es 10^{15} K. Al llegar a 10^{-6} segundos, grupos de tres quarks se unen para formar los primeros protones, neutrones y electrones, a continuación se forman los núcleos y finalmente los átomos, $T = 10^{13}$ K. Posteriormente, protones y electrones forman los primeros





átomos de hidrógeno, $T = 10^9$ K. Los protones y los neutrones se unen y forman núcleos de helio. En este instante, 10^2 segundos, el Universo está compuesto de 25% de núcleos de helio y 75% de hidrógeno, $T = 10^8$ K. Entonces la formación de hidrógeno neutro dio origen a la radiación cósmica de fondo.

Figura 2. Radiación de fondo (microondas) en nuestro Universo.

Trescientos mil años después, 10^{12} segundos, se inició la época de las formaciones estructurales: la materia se condensa en galaxias y estrellas. Mil millones de años después, 10^{16} segundos, aparecen las protogalaxias y se forman los cúmulos globulares, $T = 10^5$ K. En las estrellas se forman los elementos

químicos restantes: carbono, oxígeno, nitrógeno, silicio, magnesio, hierro, etc., los cuales son esparcidos por estrellas moribundas en forma de supernovas. Comienza la época de los cuásares y se forman los supercúmulos.

Además del *Big Bang* han surgido otras teorías para explicar el origen y evolución del Universo; Afshordi y su equipo, en el año 2000, propusieron un modelo completamente diferente al afirmar que nuestro Universo es una membrana tridimensional que fue expulsada de un agujero negro de cuatro dimensiones. Sin embargo, el lunes 17 de marzo de 2014, John Kovac, del Centro de Astrofísica de la Universidad de Harvard y del Instituto Smithsonian, jefe del equipo BICEP2 (Background Imaging of Cosmic Extragalactic Polarization 2) anunció la primera observación de ondas gravitacionales que recorrieron el espacio durante la fase llamada inflación cósmica, e indicó que éste es “un

Figura 3. Estrellas y galaxias en nuestro Universo.



BICEP2 B-mode signal

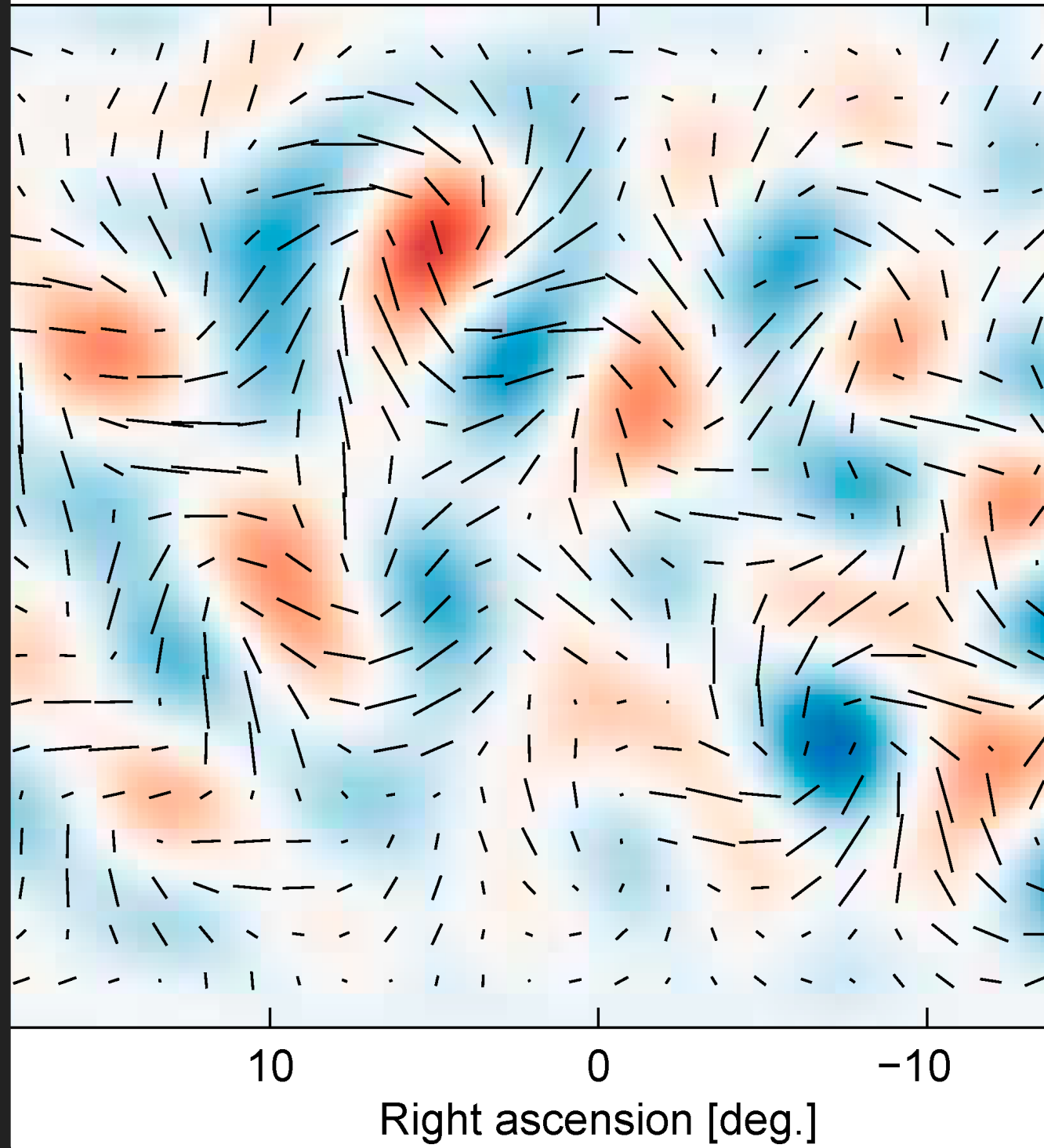


Figura 5. Instantes posteriores al Big Bang, captados por el Telescopio BICEP2.

descubrimiento histórico que consolida la teoría del origen del Universo (*Big Bang*) ocurrido hace unos 14 mil millones de años”.

En la actualidad, unos 13 810 millones de años después del *Big Bang*, la temperatura en el Universo es de unos 2.725 K, la esfera que lo envuelve —cuyo radio era de unos 10^{-33} cm en la era de Planck— ahora tiene un radio de unos 10^{29} cm, unos 100 000 millones de años luz y, lo más importante, conocemos algo más de un centenar de elementos químicos, de los cuales la mayoría presenta un ordenamiento atómico estructural intrínseco bajo condiciones normales de laboratorio. De hecho, la Unión Internacional de Química Pura y Aplicada (IUPAC) reconoce 109 aun cuando se han obtenido 118 elementos.



Figura 6. Campo ultra profundo del Hubble el cual exhibe: a) Galaxias de alguna era antigua y b) Una joven galaxia en formación, lo cual indica que nuestro Universo continúa con su evolución.