

La cristalografía en nuestras vidas

María Elena Villafuerte y José Á. Chávez Carvayar

Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM

Vivimos en un siglo en el que el avance tecnológico ocurre día a día, es tan acelerado que no lo percibimos, ya estamos acostumbrados. Es común relacionar tecnología con dispositivos electrónicos, sin embargo, hay áreas de estudio de la ciencia que están íntimamente asociadas con tecnología que no se reconocen de forma tan inmediata, en esta ocasión se hablará de la cristalografía, ciencia que se dedica al estudio de estructuras cristalinas. Para sensibilizar al lector al respecto, basta pensar en los minerales, la mayoría de los cuales adoptan formas cristalinas cuando se forman en condiciones favorables. La cristalografía es, entonces, el estudio del crecimiento, la forma y la geometría de estos cristales.

La cristalografía está presente en cada uno de los aspectos de nuestra vida cotidiana. Según palabras del experto en el área Juan Manuel García-Ruiz, del Instituto Andaluz de Ciencias de la Tierra (CSIC): “Todo está basado en la tecnología del cristal. Abres los ojos y ves que el despertador marca las 6:30 en

unos números dibujados por cristales líquidos, te levantas de la cama gracias a un esqueleto de cristales de fosfato cálcico, tomas un café, lo endulzas con cubos de azúcar cristalizada y te cepillas los dientes con una pasta basada en nanocristales”. A continuación mencionaremos aspectos específicos de nuestras vidas en los que los cristales y la cristalografía juegan un papel importante.

Los cristales en los seres vivos

Podría pensarse que los cristales están asociados sólo con materiales inertes, sin embargo, están presentes de muchas maneras en los seres vivos.

En el cuerpo humano podemos encontrar muchos ejemplos de cristales: la hidroxiapatita $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$, mineral que contiene calcio y que constituye los huesos; carbonato de calcio CaCO_3 , contenido en el oído y responsable del equilibrio, por ejemplo.

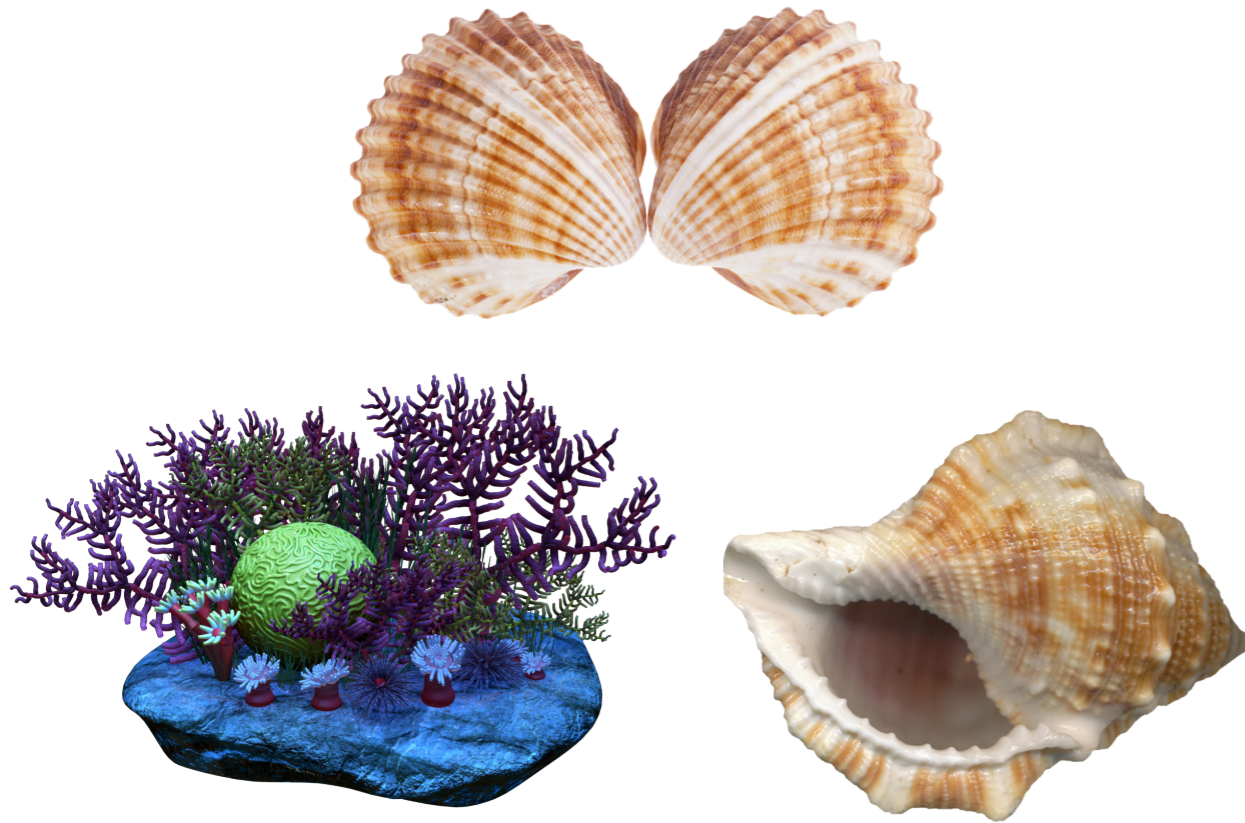
Existe también un grupo de compuestos conocidos como biocerámicas —son un tipo de material biocompatible—, diseñados específicamente para utilizarse en la fabricación de implantes quirúrgicos, prótesis y órganos artificiales, así como para cumplir una determinada función fisiológica en el cuerpo humano, que es la base fundamental de un material biocerámico. De estas biocerámicas, la hidroxiapatita es una

de las más importantes, ya que es el principal mineral del que están compuestos el esqueleto humano y los dientes. Así, los biomateriales tratan de imitar la estructura de la hidroxiapatita para construir prótesis.

Vale la pena mencionar que, a pesar del gran número de estructuras minerales que se han identificado en los organismos vivos, existen cuatro formas de minerales de calcio que son las más frecuentes: aragonita, calcita, dahlita e hidroxiapatita.

El carbonato de calcio, en diversas formas cristalinas, está presente en el reino animal: en los cascarones de huevo, en las conchas de los animales marinos, en los corales de los arrecifes, en las perlas. En todos estos ejemplos, el carbonato de calcio es parte de un proceso llamado biomineralización, que puede definirse como una secuencia de eventos en los cuales los minerales secretados en solución por células especializadas cristalizan y se estructuran según un plan de construcción determinado. Todos los elementos resultantes de este proceso tienen una característica común, están compuestos por una fase inorgánica, frecuentemente sales de calcio, y una fase orgánica que puede estar compuesta por proteínas (fosfoproteínas, glicoproteínas), polisacáridos, lípidos y con frecuencia por una mezcla de ellos.

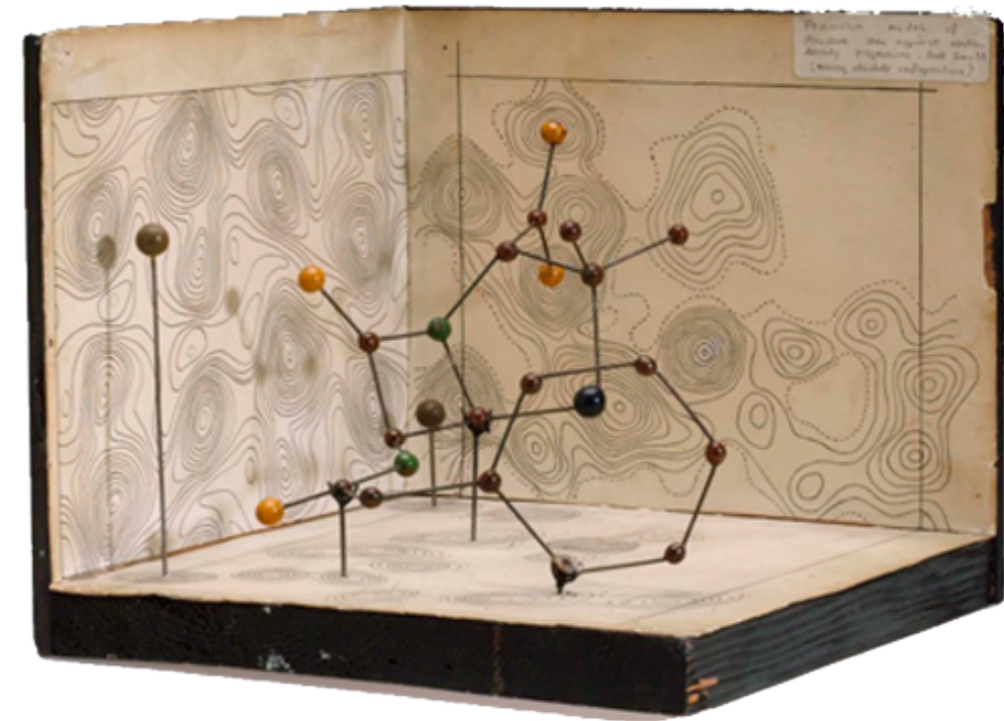
En todo sistema biomineralizado se encuentran dos fases: una matriz orgánica y una fase mineral cristalina, razón por la cual



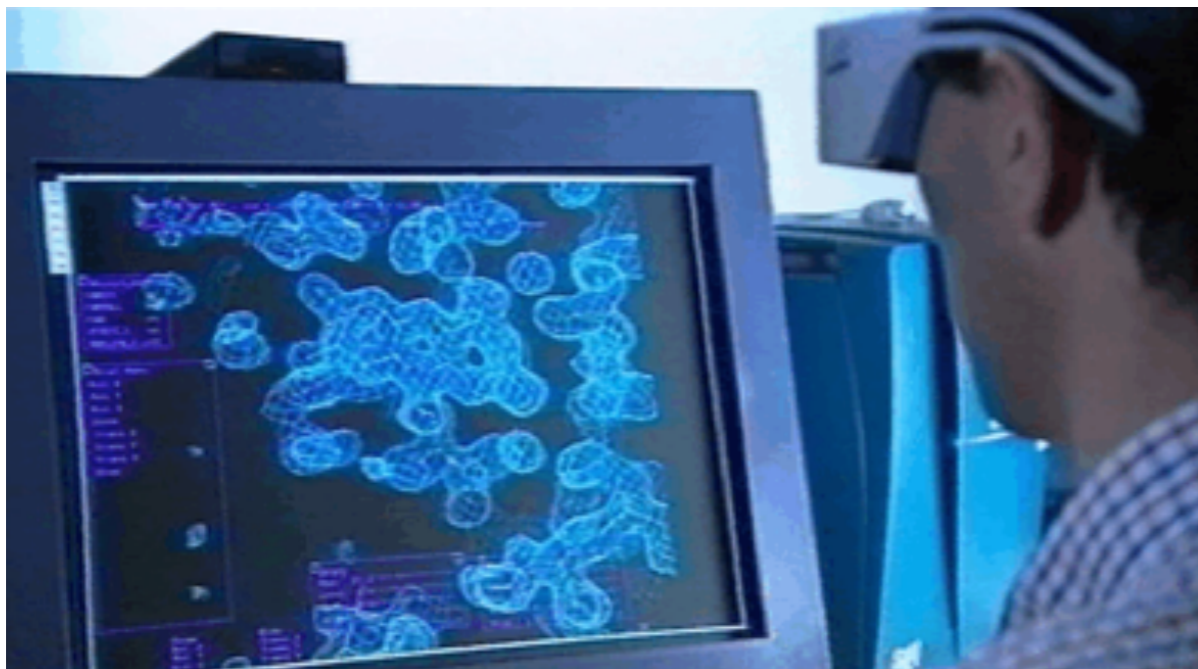
los sistemas biomineralizados se consideran como biocerámicas.¹ Generalmente, estas biocerámicas se forman en un medio acuoso, a temperaturas relativamente bajas y en todos los casos estudiados su formación está regulada por una matriz orgánica. La velocidad de depósito de la parte inorgánica de estas biocerámicas varía desde unos pocos gramos al año, como ocurre en la formación del nácar de la concha de los moluscos, hasta el extremo de cinco gramos de calcio al día como ocurre en la cáscara de huevo. Esto hace de la cáscara de huevo un modelo muy conveniente para el estudio del apasionante tema de la biomineralización,² que forma parte del desarrollo de los embriones, en el huevo, y en la transformación de los alimentos en los crustáceos y caracoles, entre otros.

Los cristales en la formación de la vida

¿Cómo se descifró la molécula de la vida, el ADN? Gracias al desarrollo de técnicas de difracción para entender las macromoléculas biológicas se pudo resolver la estructura cristalina de los ácidos nucleicos y las proteínas. Y ese fue el primer paso del entendimiento de procesos biológicos, como el funcionamiento de la insulina, la resistencia metabólica de la malaria a los insecticidas, el centro activo de la proteína involucrada en el virus del sida y el descubrimiento de nuevos fármacos inhibidores de virus, por ejemplo.



Modelo tridimensional de la estructura de la penicilina basado en el uso de tres mapas bidimensionales de densidad electrónica, como lo usó Dorothy C. Hodgkin, laureada con el Premio Nobel en 1964.



Aspecto de un procesador gráfico para visualizar estructuras moleculares en tres dimensiones. El procesador y la pantalla gráfica se complementan con un transmisor de radiación infrarroja (caja negra sobre la pantalla) y unos lentes que utiliza el cristalógrafo.

Los cristales en la belleza y el arte

Desde el antiguo Egipto, entre 2000 y 1200 a.C., hay evidencia del uso de cosméticos. Análisis químicos y cristalográficos realizados en polvos cosméticos que fueron encontrados en contenedores de alabastro permitieron la identificación de dos compuestos naturales: la galena (PbS) y la cerusita (PbCO_3). Además se caracterizaron dos compuestos no esperados: la laurionita (PbOHCl) y la fosgenita ($\text{Pb}_2\text{Cl}_2\text{CO}_3$), ya que no son de origen natural sino que son sintéticos, manufacturados por química “húmeda”.³

Además, en el periodo grecorromano se usaban técnicas para tintes de cabello que aún se usan actualmente, reportados también por autores árabes durante el medievo como mezclas de PbO con Ca(OH)_2 con pequeñas cantidades de agua para formar una pasta o cristales de galena, donde el azufre proviene de los aminoácidos de la queratina del cabello.⁴ En los cosméticos actuales se emplean pigmentos de monocristales en forma de plaquetas de óxidos metálicos (de hierro) y monocristales de hexaferrita de bario y de estroncio que ejercen un efecto estimulante sobre la circulación sanguínea; también se utilizan nanoesferas de cerámica en pinturas para uñas y en cremas para el cutis.

Ya que tanto en los cosméticos como en el arte el color es importante, en estas áreas se utiliza una diversidad de pigmentos con estructuras cristalinas, como el ocre rojo (Fe_2O_3) y el ocre amarillo ($\text{Fe}_2\text{O}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$) en pinturas rupestres. El carbonato de plomo (PbCO_3) $_2\text{Pb(OH)}_2$, conocido como “blanco de plomo” y el azul egipcio, silicato de calcio y cobre se fabricaron a partir de un cristal coloreado con un mineral de cobre, como la malaquita; estos pigmentos fueron usados al menos desde el segundo milenio a.C. Es posible ahondar mucho más en el tema de los pigmentos al hablar de su aplicación en los textiles y en el área del diseño en general.

En el reino animal, la interferencia de la luz con la estructura cristalina de la quitina de las alas de las mariposas o de las plumas de las aves produce sus maravillosos colores.

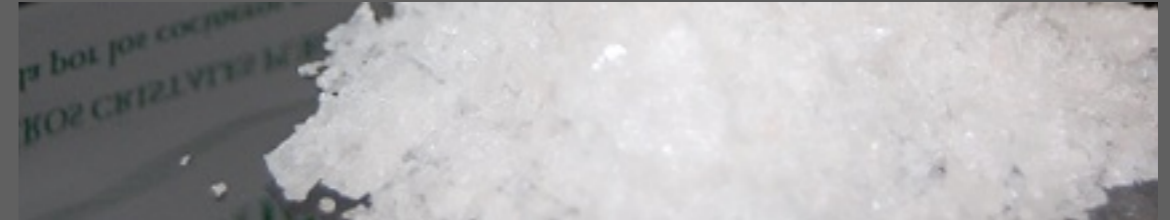
Los cristales en los alimentos

En la actualidad se sabe que el uso de la sal en los alimentos es costumbre desde la prehistoria. Los romanos la utilizaban como moneda, de ahí la palabra “salario”, sin embargo no fue sino hasta principios del siglo XX cuando se conoció su estructura cristalina, gracias a los estudios realizados por sir William Henry Bragg y su hijo William Lawrence Bragg, quienes fueron galardonados con el Premio Nobel en 1915 por la determinación de las estructuras cristalinas del NaCl y el diamante. Las variedades de sal que se conocen, como la sal común, la Maldon o la Fleur de sel, difieren en los precios debido a que cristalizan en forma diferente. De igual manera, el azúcar, ya sea de caña o de remolacha, puede cristalizar como azúcar blanca o, al variar el proceso, como azúcar morena, con sabor y precio diferentes.

La manteca de cacao, que se usa para la fabricación del chocolate, está compuesta por triglicéridos, que solidifican en formas variadas dependiendo de la velocidad y la temperatura. Existen seis formas polimórficas en las cuales los cristales individuales se pueden empaquetar, sin embargo, sólo una de esas seis es la indicada para obtener un buen sabor y brillo en el chocolate, lo cual es más atractivo para el consumidor.



Sal de mar



Sal tipo “Maldon”



Fleur de sel



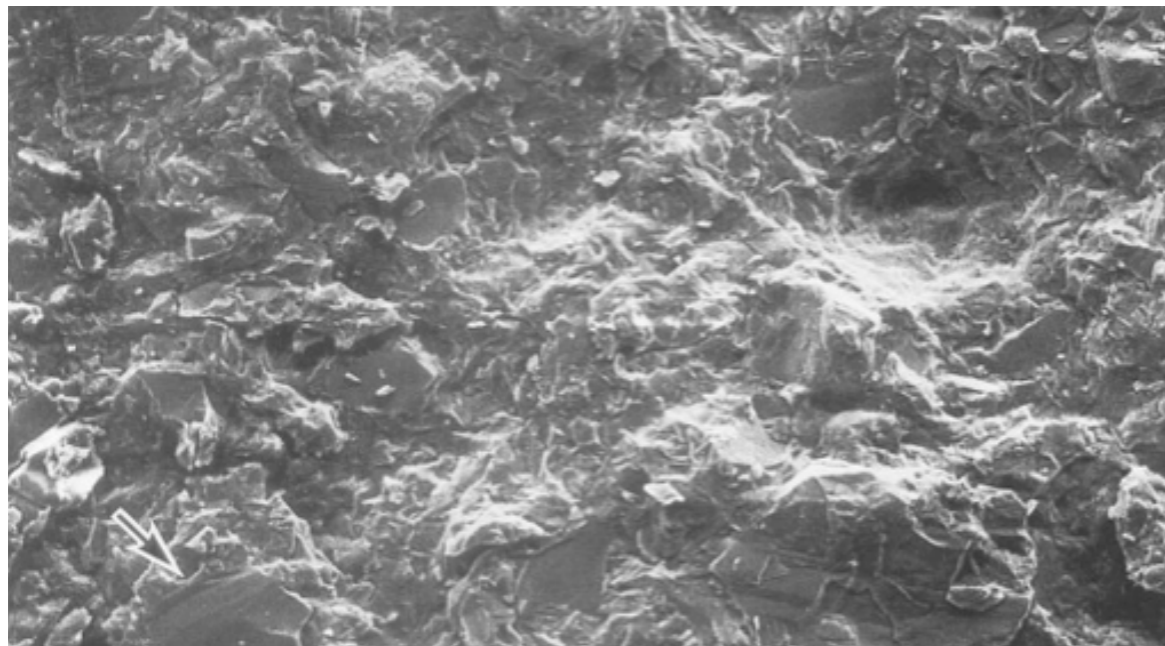
Azúcar refinada



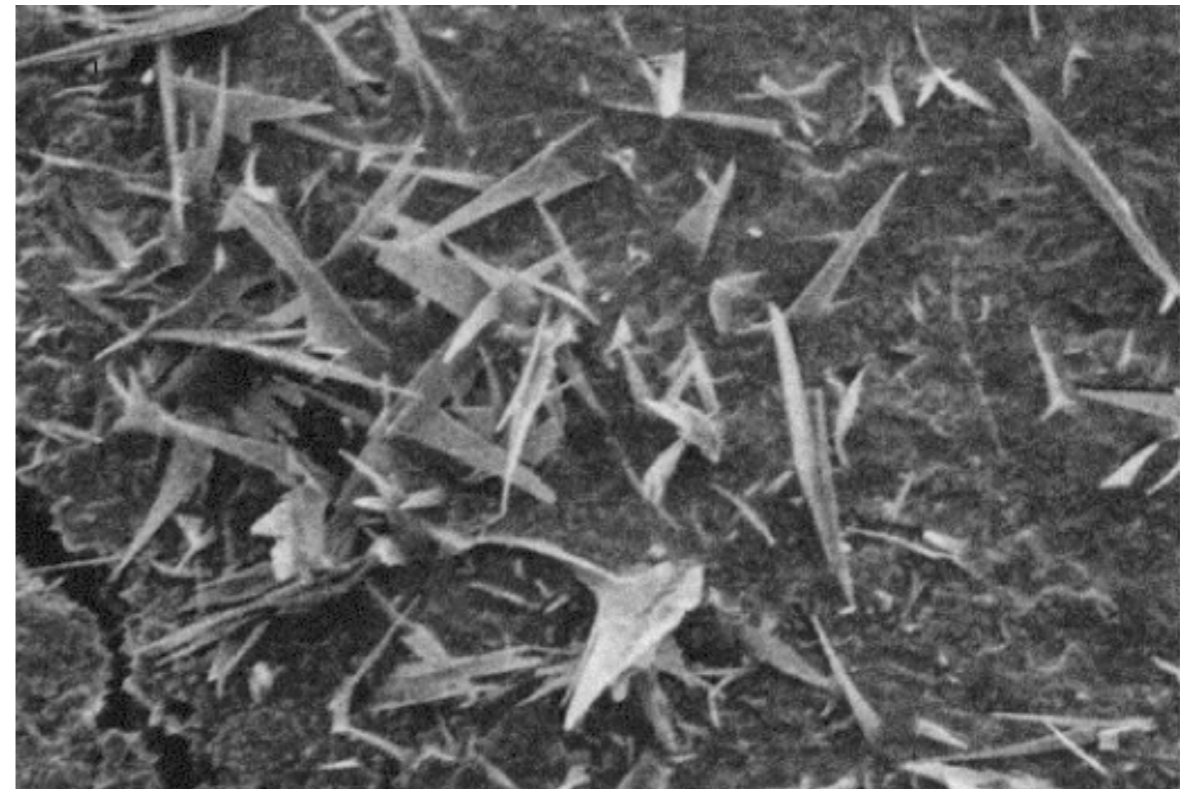
Azúcar morena

Un factor muy importante en la fabricación del chocolate es la temperatura. El polimorfo V, que es el adecuado, se funde a 33.8 °C; si la temperatura rebasa este punto de fusión, la manteca de cacao se transforma en grasas no deseadas que alteran el sabor y el aspecto del chocolate.^{5,6}

Se puede decir que el chocolate es un compuesto terciario de tres sólidos en disolución: los sólidos de cacao, el azúcar cristalizada y la manteca. Tiene un punto de fusión entre 34 y 38 °C (93 y 100 °F), que le proporciona al chocolate solidez a temperatura ambiente pero se derrite fácilmente en la boca. Cuando la grasa no es la adecuada o el chocolate está viejo o no se cristalizó en la forma apropiada, aparece un polvo blanquecino conocido como eflorescencia o *fat bloom*, que en realidad son cristales de grasa. Los chocolates que están expuestos al sol desarrollan este fenómeno muy rápidamente.



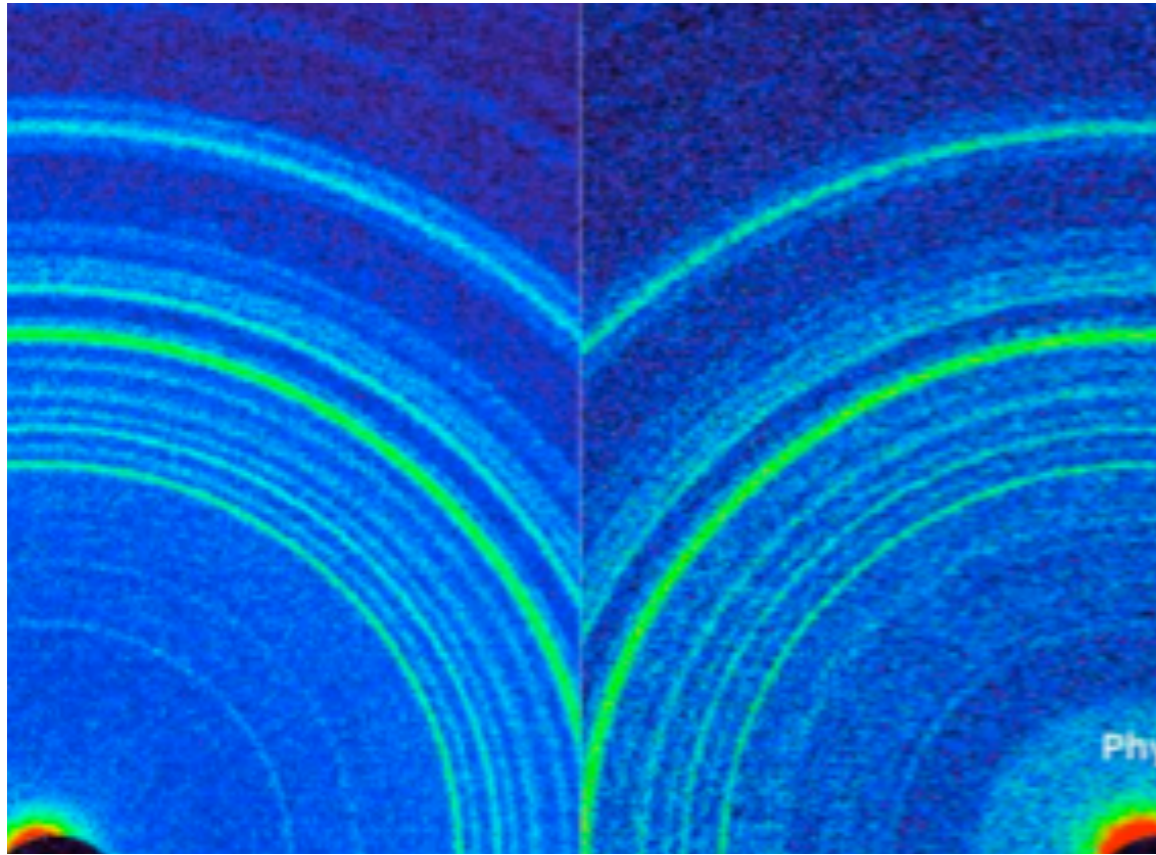
Cristales de cacao



Eflorescencias de grasa que reducen la calidad del chocolate.
(Profesor Sato, Universidad de Hiroshima).

La cristalografía en Marte

En la inauguración del Año Internacional de la Cristalografía en la sede de la UNESCO en París, el doctor David Bish, de la Universidad de Indiana en Bloomington, impartió una interesantísima conferencia sobre su trabajo en la Administración Nacional de Aeronáutica y el Espacio (NASA, por sus siglas en inglés) dentro el proyecto del *Curiosity* en Marte. Éste consistió en la adecuación de un difractómetro de rayos X, compacto, en el *Curiosity*. En este proyecto el interés principal no era conocer la composición de los minerales del suelo marciano, sino su estructura cristalina, porque es la



Primer difractograma enviado desde el espacio.

estructura cristalina la que determina sus propiedades y provee información de las condiciones en las que éstos se formaron, es decir la historia del mineral.

El difractómetro en el *Curiosity* proporcionó el primer análisis del suelo marciano y envió el primer patrón de difracción de polvo y arena extraterrestre al que llamaron rocknest. Los polvos estudiados fueron similares al mineral basáltico, con cantidades significantes de feldespato, piroxeno y olivina, además de un material no cristalino como vidrio volcánico (http://www.nasa.gov/mission_pages/msl/news/msl20121030.html).

Los cristales en el láser

En 1969 Theodore Maiman construyó el primer láser, con un cristal de rubí sintético como medio activo. El rubí es un cristal compuesto por óxido de aluminio (Al_2O_3) con una concentración de 0.05% de Cr^{3+} en solución sólida.

El diamante sintético

El diamante sintético lo obtuvo por primera vez en 1954 la General Electric utilizando altas presiones, de 50 a 50 kbar, y altas temperaturas de 1300 a 1600 °C. Otro método de síntesis que no requiere de presiones y temperaturas tan elevadas es el de deposición química en fase de vapor (CVD), en este caso como fuente de carbono se utiliza gas metano, que se mezcla con hidrógeno y se ioniza mediante un plasma. Los iones de carbono se depositan sobre una superficie para crear una capa muy fina de diamante. Estas películas de diamante tienen importantes aplicaciones tecnológicas.



Los monocristales de silicio

El silicio es el elemento más abundante en la Tierra después del carbono. Suele estar presente como silicato y se encuentra en varios suelos, rocas y arcillas. El silicio se obtiene por reducción del sílice (arena, SiO_2), con carbono. El silicio existe en dos formas alotrópicas: el silicio marrón es un polvo y el silicio cristalino (metálico) de color gris que es el más utilizado debido a las diferentes aplicaciones industriales; por ejemplo, en la industria de los semiconductores se utiliza silicio de ultra alta pureza (pureza superior a 1×10^9). También se emplea en la elaboración de algunas aleaciones (por ejemplo ferrosilicio, aleación de hierro y silicio que se utiliza para introducir silicio en acero y en fundición). También tiene aplicaciones en la fabricación del vidrio.

Circuitos monolíticos: Están fabricados en un solo monocristal, habitualmente silicio, pero también existen de germanio, arseniuro de galio y silicio-germanio, entre otros.



Referencias

- 1 A.H. Heuer, D.J. Fink, V.J. Laraia *et al.*, “Innovative Materials Processing Strategies: A Biomimetic Approach”, *Science*, 255(5048), (1992): 1098-1105.
- 2 J.L. Arias, D.J. Fink, S.Q. Xiao, A.H. Heuer, A.I. Caplan, “Biom mineralization and Eggshells: Cell-mediated Acellular Compartments of Mineralized Extracellular Matrix”, *Int. Rev. Cytol.*, 145 (1993): 217–250.
- 3 P. Walter, P. Martinetto, G. Tsoucaris, R. Brniaux *et al.*, “Making Make-up in Ancient Egypt”, *Nature*, 397 (1999): 483-484.
- 4 P. Walter, E. Welcomme, P. Hallégotet *et al.*, “Early Use of PbS Nanotechnology for an Ancient Hair Dyeing Formula”, *Nano Lett.*, 6 (10) (2006): 2215-2219.
- 5 C. Loisel, “Phase Transitions and Polymorphism of Cocoa Butter”, *Journal of the American Oil Chemists' Society* (SpringerLink), 75(4) (2000): 425-439. DOI:10.1007/s11746-998-0245-y,
- 6 T. Beckett, Stephen (ed.), *The Science of Chocolate*, Londres, Royal Society of Chemistry, 2000, ISBN 0-85404-600-3.

josech@unam.mx