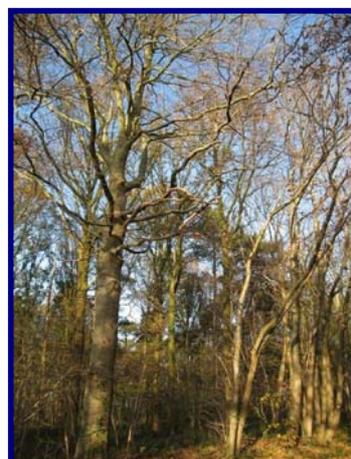


1er Curso de divulgación Los Avances de la Química y su Impacto en la Sociedad

Aplicaciones de la Química del Estado Sólido

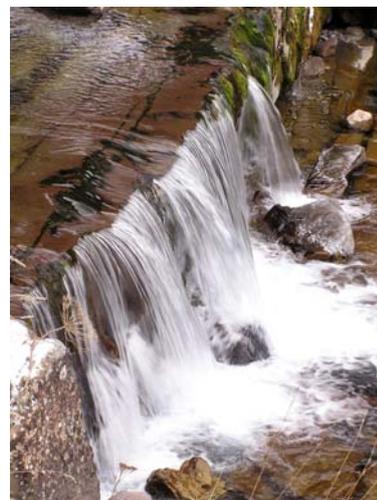


30 marzo 2009

Lourdes Infantes

Estados de la materia

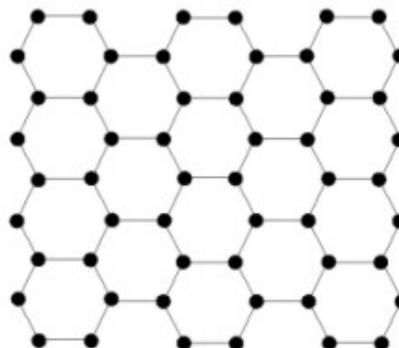
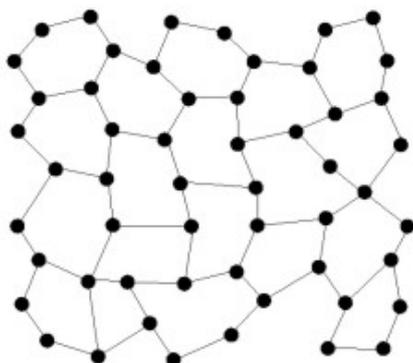
- Fase sólida
- Fase líquida
- Fase gaseosa
- Plasma
- Condensado de Bose-Einstein
- Condensado Fermiónico
- Supersolido
- Etc...



30 marzo 2009

Lourdes Infantes

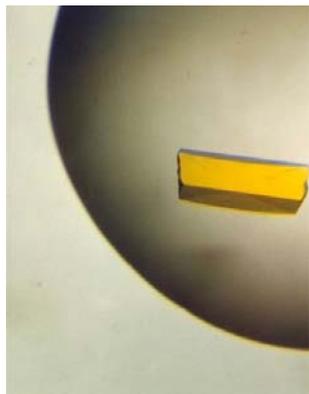
Amorfo → Cristal



Amorfo → Cristal



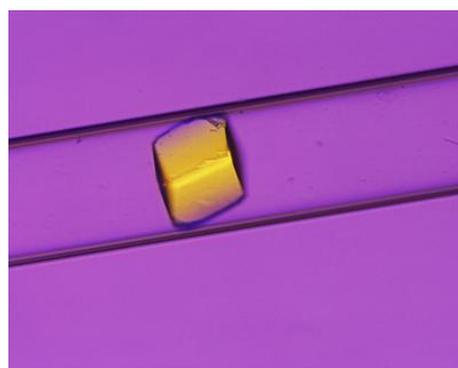
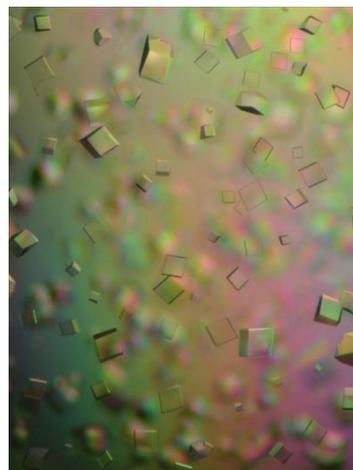
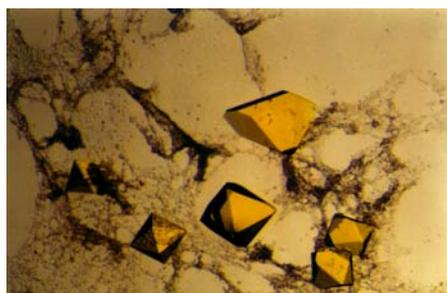
¿Qué es un cristal?



30 marzo 2009

Lourdes Infantes

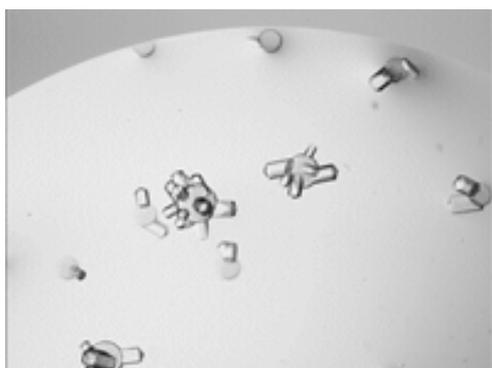
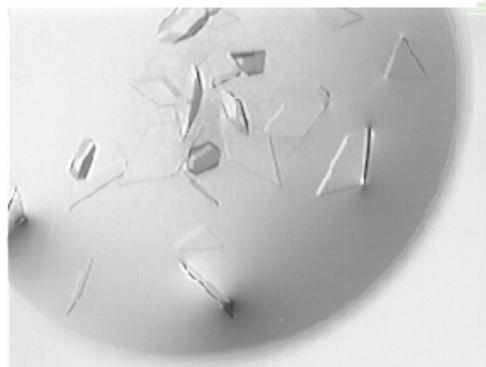
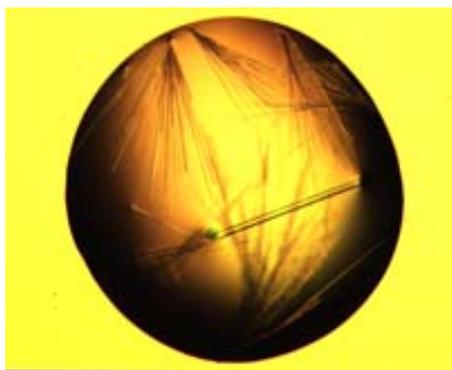
¿Qué es un cristal?



30 marzo 2009

Lourdes Infantes

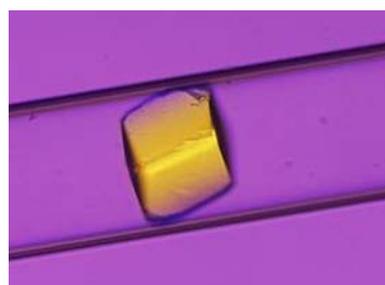
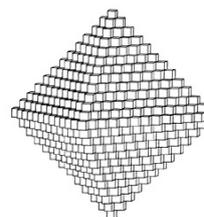
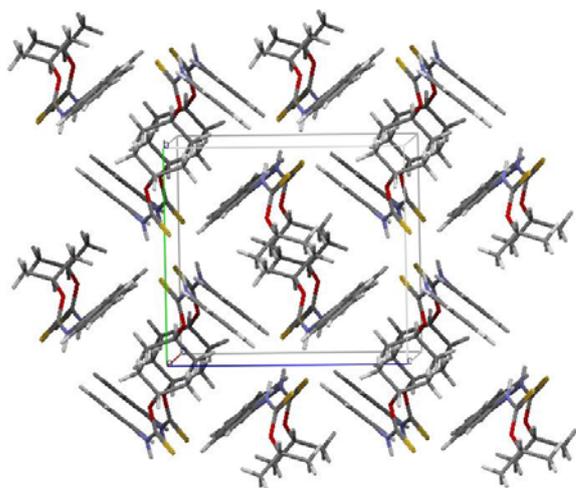
¿Qué es un cristal?



30 marzo 2009

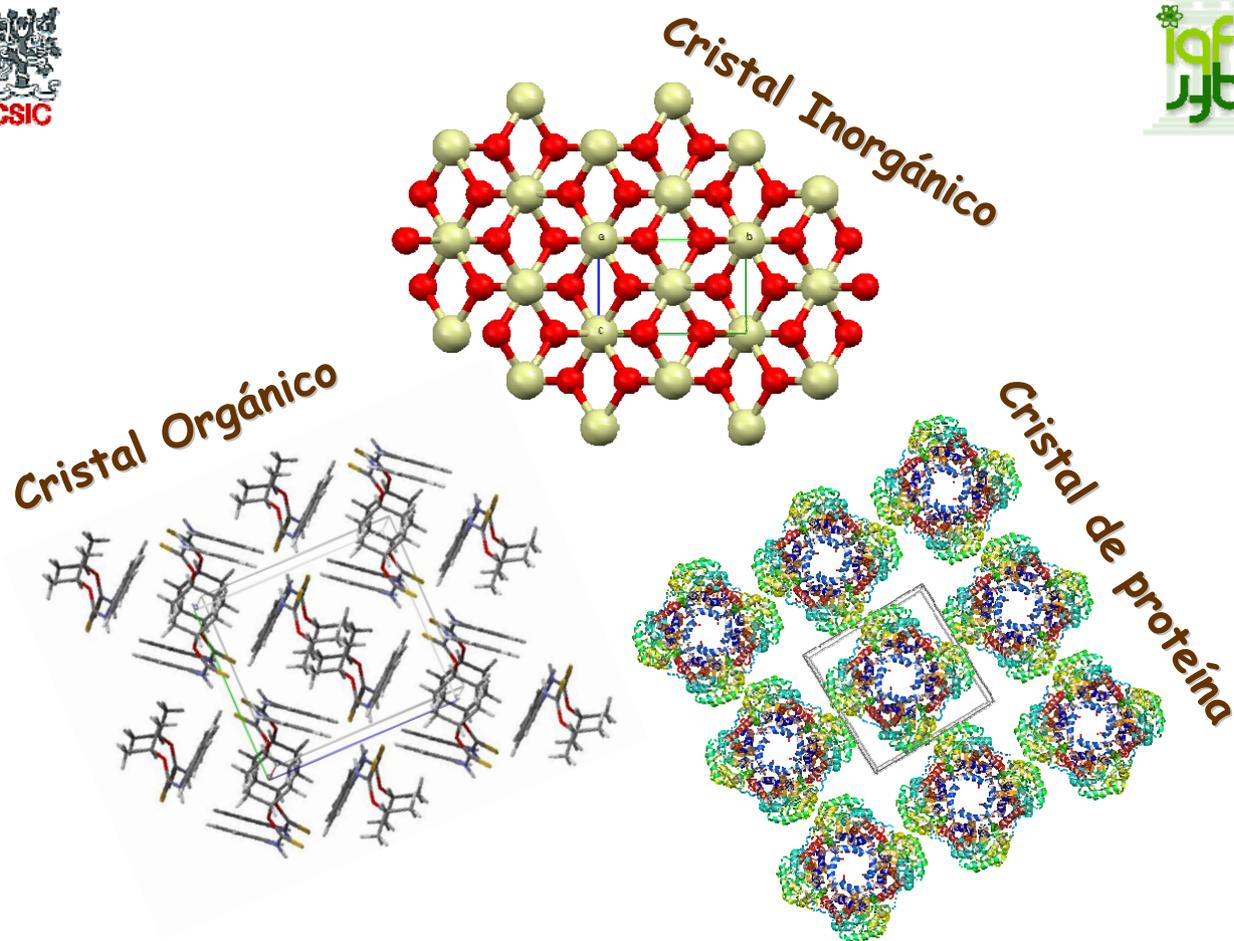
Lourdes Infantes

¿Qué es un cristal?



30 marzo 2009

Lourdes Infantes



30 marzo 2009

Lourdes Infantes

“El hábito no hace al monje”



Siderita acompañados de Apatito-(CaF) y Cuarzo



Cuarzo con Arsenopirita e inclusiones

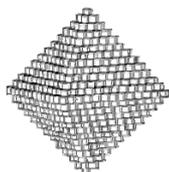
30 marzo 2009

Lourdes Infantes



Symmetry

→ Simetría es la repetición en el tiempo o el espacio.



Periodicidad y Simetría

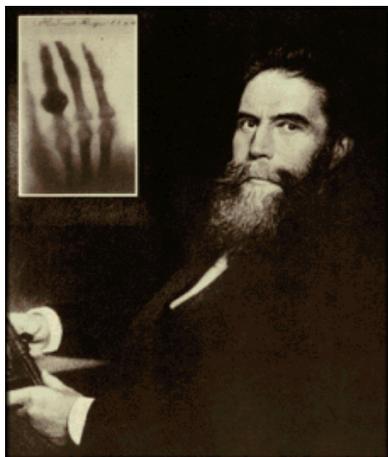
30 marzo 2009

Lourdes Infantes

¿Cómo descubrir la estructura a nivel atómico de los cristales?

Un poco de historia ...

Wilhelm Conrad Röntgen (1825-1923) y la mano de su esposa



1895 Descubrimiento Rayos-X
1901 Premio Nobel en Física

30 marzo 2009

Lourdes Infantes



Cristalografía: Más de 20 premios Nobel

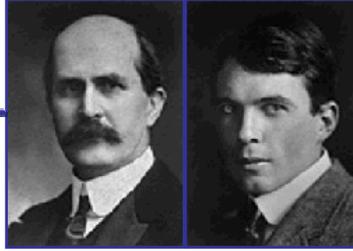


Naturaleza electromagnética de los rayos-X.
Difracción de los cristales



Von Laue (1914)

Difracción de rayos-X para analizar la estructura atómica de los cristales

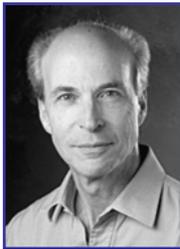


W.H.Bragg, W.L.Bragg (1915)

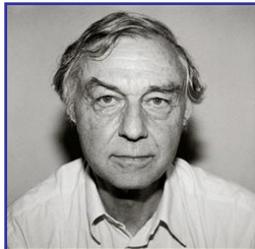
Desde principios del siglo XX



Hasta nuestros días



Kornberg (2006)



Huber (1988)



Mackinnon (2003)

30 marzo 2009

Lourdes Infantes



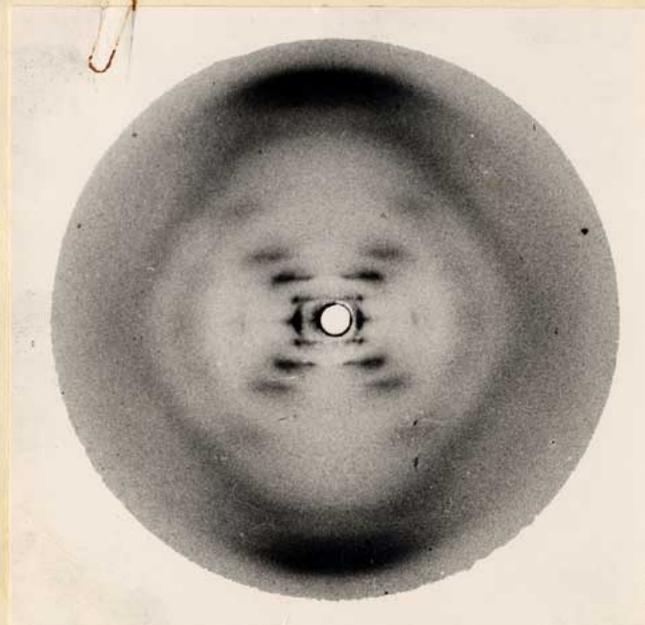
Rosalind Franklin: Cristalógrafa.



Los diagramas de difracción de ADN de Rosalind fueron bautizados por J.D. Bernal como *las fotos de rayos X más bellas hasta entonces obtenidas*, y sirvieron para el establecimiento de la estructura doblemente helicoidal del ADN.



(1920-1958)



Franklin & Gosling
DNA structure
Type I

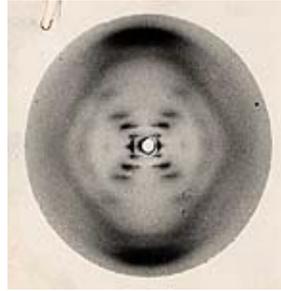
Plate 1

30 marzo 2009

Lourdes Infantes



James Watson
(1928-)



Francis Crick
(1916-2004)



Maurice Wilkins
(1916-2004)

Premio Nobel de Fisiología o Medicina en 1962
Crick, Watson, Wilkins

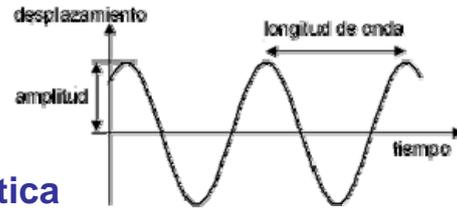
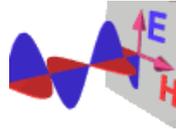
30 marzo 2009

Lourdes Infantes

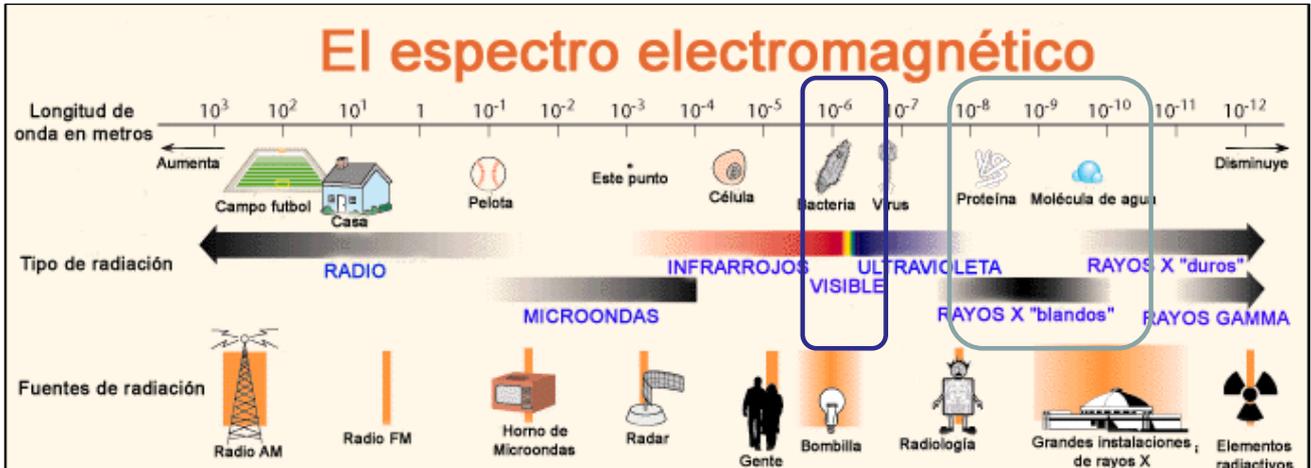
¿Qué son los Rayos-X?



Rayos X



Un tipo de radiación electromagnética



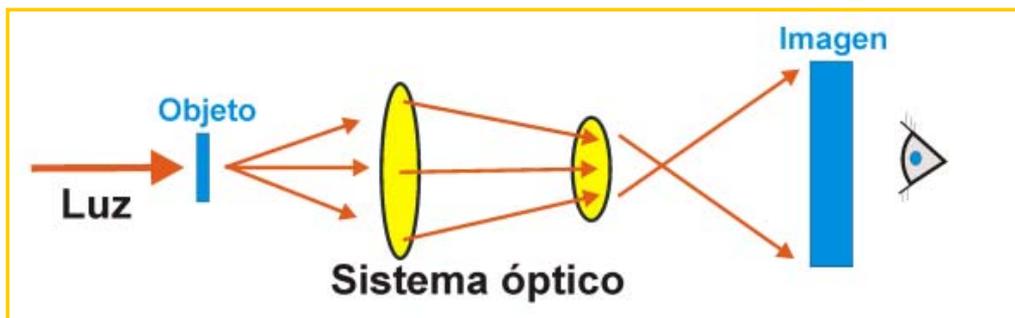
¿Podríamos usar un microscopio?

30 marzo 2009

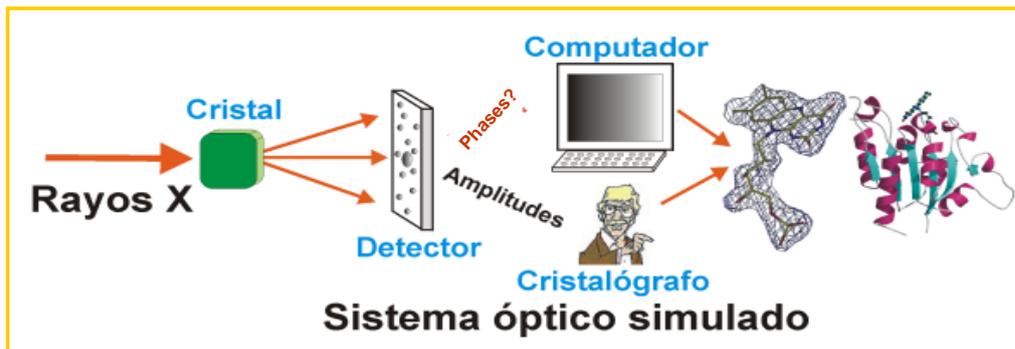
Lourdes Infantes



¿Podemos "ver" los átomos y las moléculas que están dentro de los cristales? ¡¡Si!!



Microscopio



Rayos-X

30 marzo 2009

Lourdes Infantes

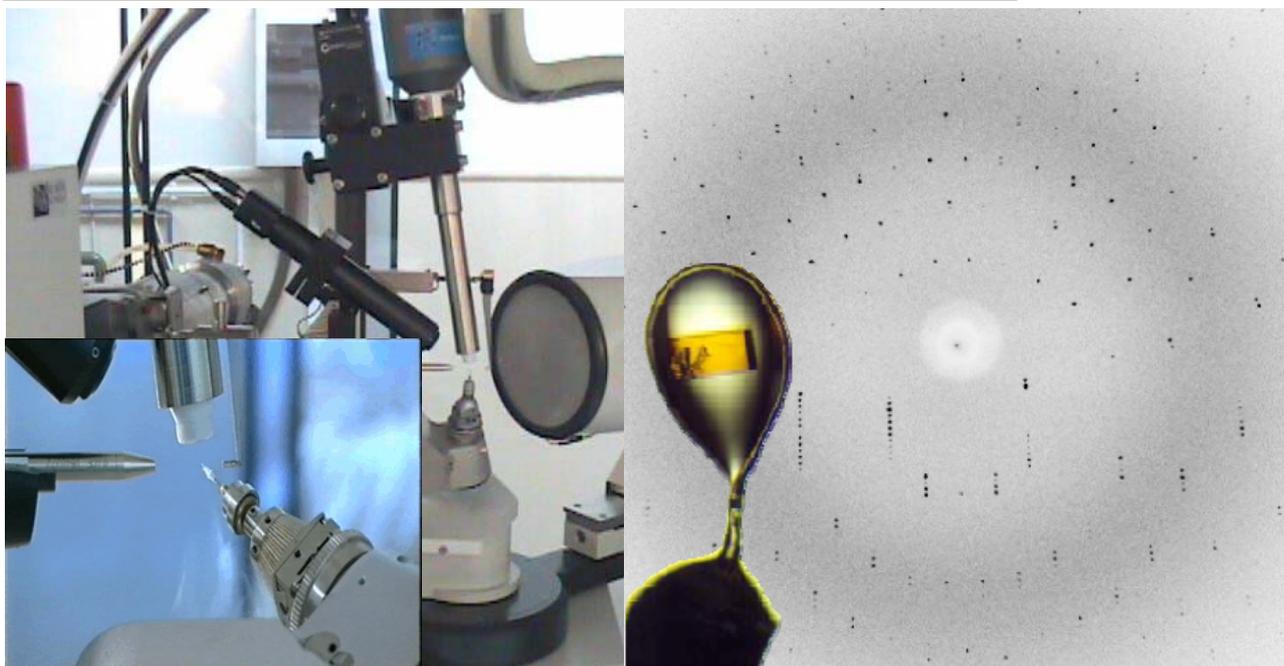
¿Cómo se realiza un experimento de difracción?

30 marzo 2009

Lourdes Infantes

Experimento de difracción

Goniómetro, Detector y sistema de Crioprotección

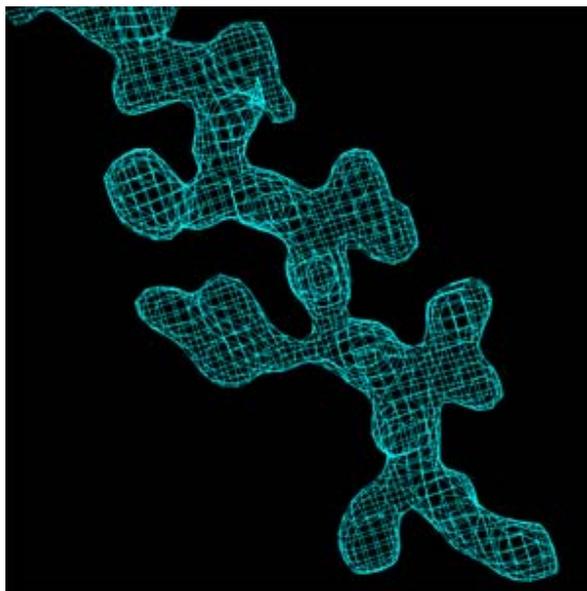


Goniómetro moderno y detector CCD

30 marzo 2009

Lourdes Infantes

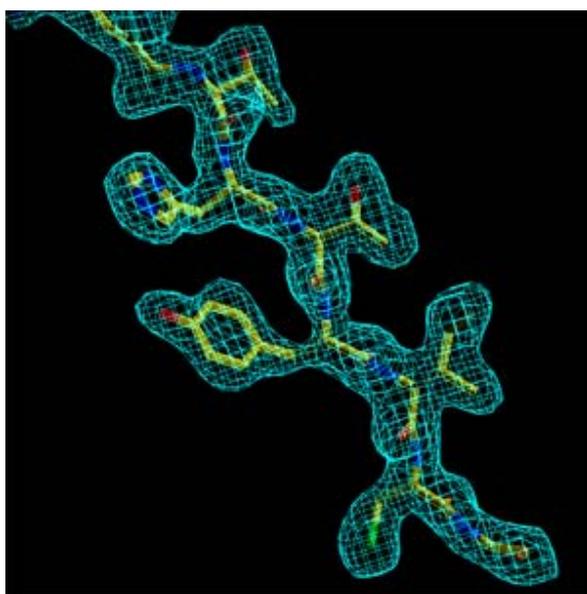
Densidad electrónica



30 marzo 2009

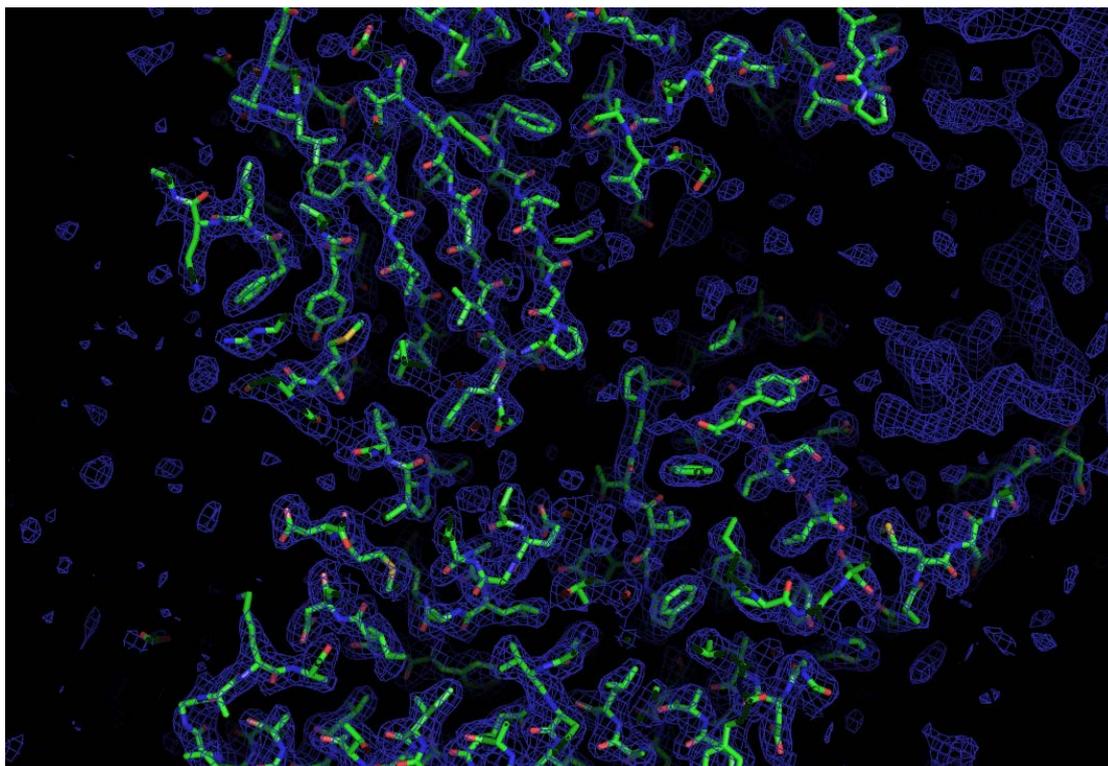
Lourdes Infantes

Densidad electrónica + modelo



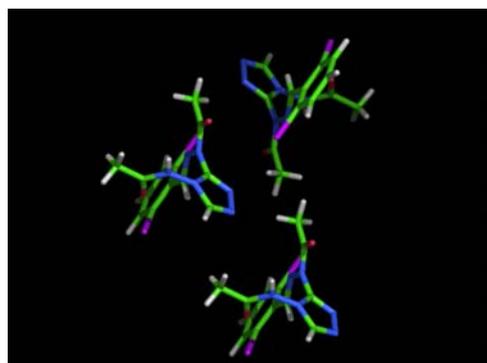
30 marzo 2009

Lourdes Infantes

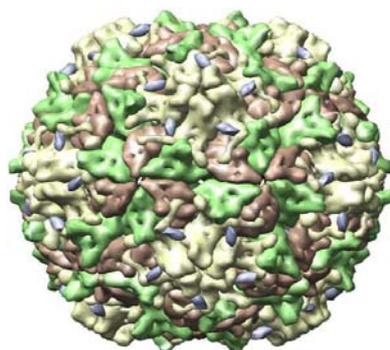


30 marzo 2009

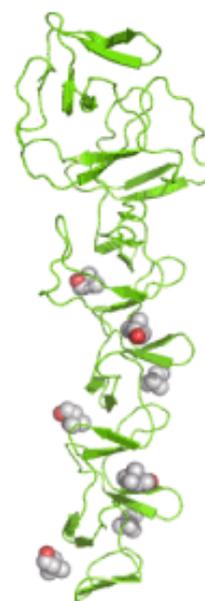
Lourdes Infantes



Estructura molecular de un compuesto orgánico



Estructura de la pared de un virus



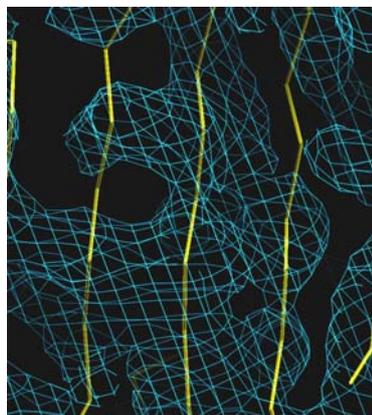
Estructura molecular de un enzima presente en la superficie del neumococo

30 marzo 2009

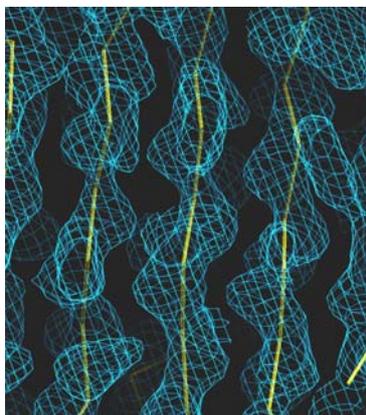
Lourdes Infantes

Calidad de los datos vs. Construcción del modelo

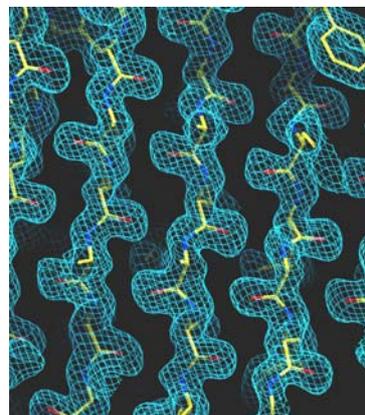
LOW: 5 Å



MEDIUM: 3 Å



HIGH: 1.7 Å



30 marzo 2009

Lourdes Infantes

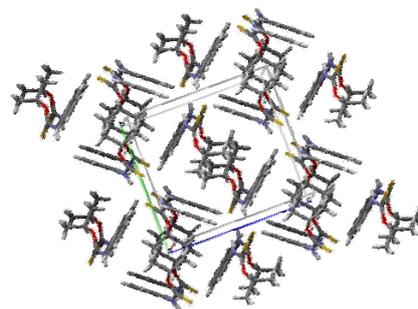
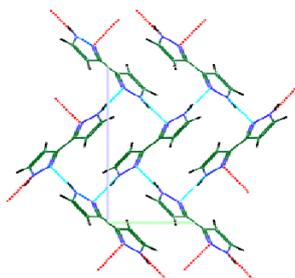
¿Qué mantiene unidas las moléculas en los cristales moleculares?

30 marzo 2009

Lourdes Infantes

Son las interacciones no-covalentes las que mantienen unidas las moléculas en las estructuras cristalinas y las responsables de los procesos de reconocimiento molecular

- ➔ Interacciones iónicas
- ➔ Fuerzas de London o de dispersión
- ➔ Fuerzas ion-dipolo
- ➔ **Enlace de Hidrógeno**
- ➔ Atracciones dipolo-dipolo
- ➔ Fuerza de Van der Waals



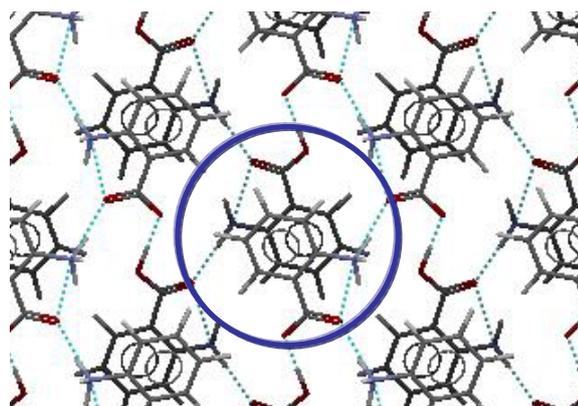
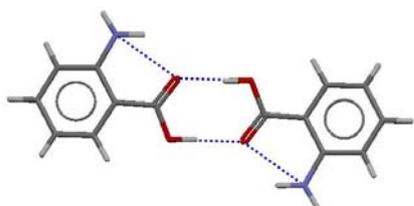
30 marzo 2009

Lourdes Infantes

Interacciones de enlace de hidrógeno en cristales orgánicos.



Se produce un enlace de hidrógeno cuando un átomo de hidrógeno se encuentra entre dos átomos más electronegativos, estableciendo un vínculo entre ellos.

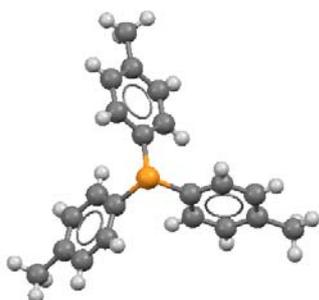


30 marzo 2009

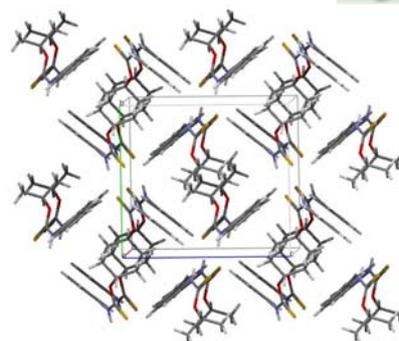
Lourdes Infantes

Rayos-X

Estructura Molecular



Estructura Cristalina

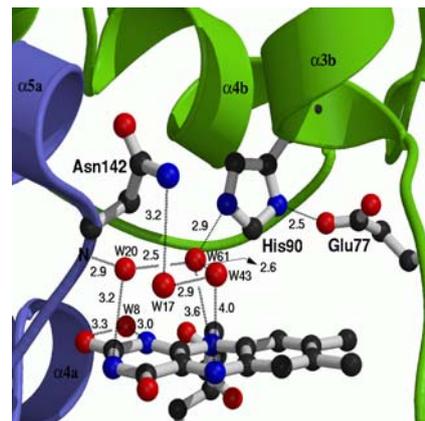


Plegamiento



Interacciones Intermoleculares

Reconocimiento Molecular



30 marzo 2009

Lourdes Infantes

¿Reconocimiento molecular estático?

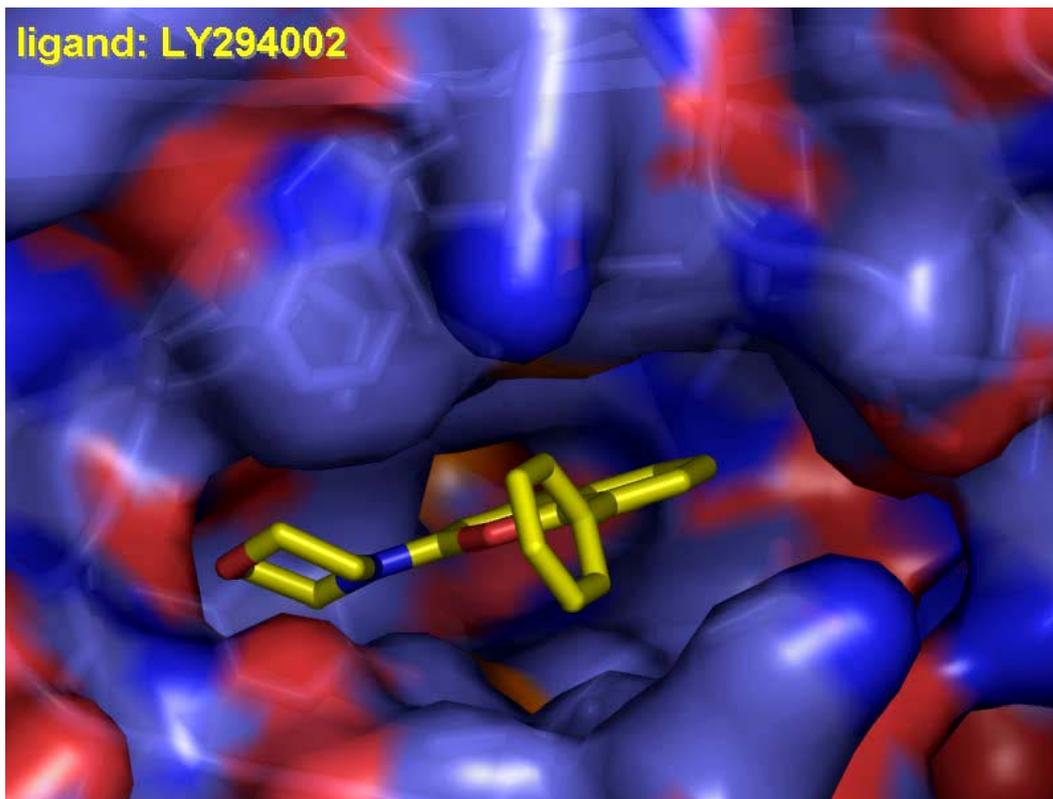
¡NO!

30 marzo 2009

Lourdes Infantes

PI3K quinasa

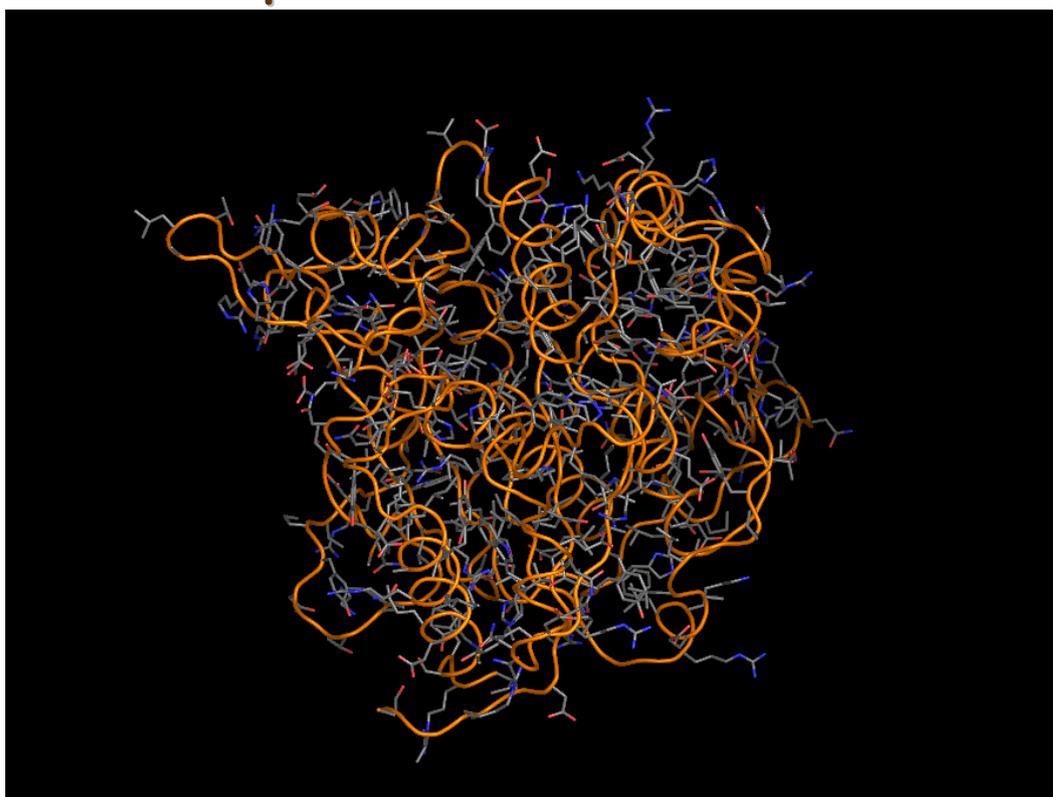
ligand: LY294002



30 marzo 2009

Lourdes Infantes

BTL2 Lipasa



30 marzo 2009

Lourdes Infantes

1 Estructura molecular



1 Estructura Cristalina

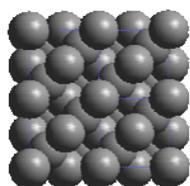
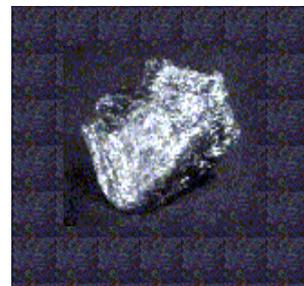
¡NO!

30 marzo 2009

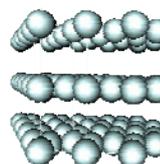
Lourdes Infantes

Polimorfismo

*Distintos modos de empaquetamiento de las moléculas.
Ej. Carbono (diamante, grafito, nanotubos y fullerenos)*



Transparente
Buen dispersor
Duro
Aislante eléctrico

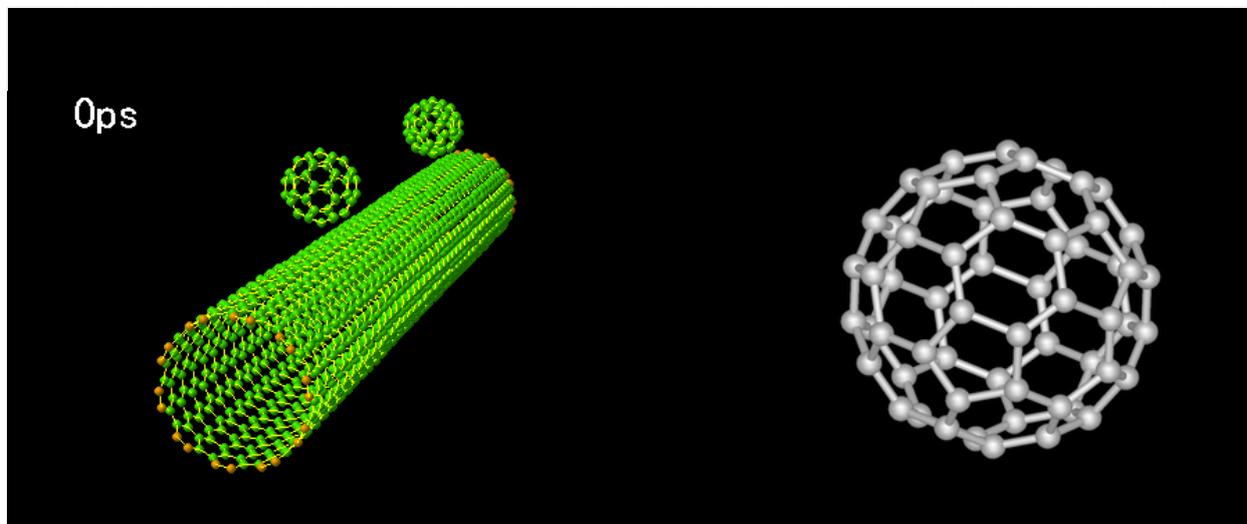


Opaco
Blando
Lubricante
Muy adsorbente

30 marzo 2009

Lourdes Infantes

*Distintos modos de empaquetamiento de las moléculas.
Ej. Carbono (diamante, grafito, nanotubos y fullerenos)*



Estructura ↔ **Función**

30 marzo 2009

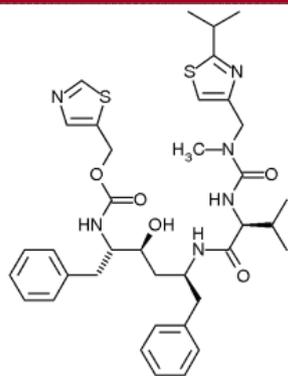
Lourdes Infantes

Propiedades que pueden variar entre los distintos polimorfos

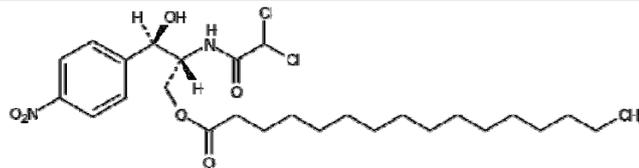
- ➔ **P. Físicas:** dureza, densidad, conductividad eléctrica o térmica
- ➔ **P. Fisicoquímicas:** adsorción, estabilidad, punto de fusión
- ➔ **P. Químicas:** reactividad, estabilidad, solubilidad, superficie específica
- ➔ **P. Tecnológicas:** piezoelectricidad, magnetismo, refracción, reflexión y absorción de la luz.
- ➔ **P. Farmacológicas:** biodisponibilidad, ineffectividad, toxicidad, contraindicaciones, efectos secundarios.
- ➔ **Etc...**

30 marzo 2009

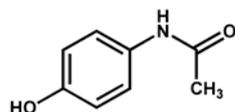
Lourdes Infantes



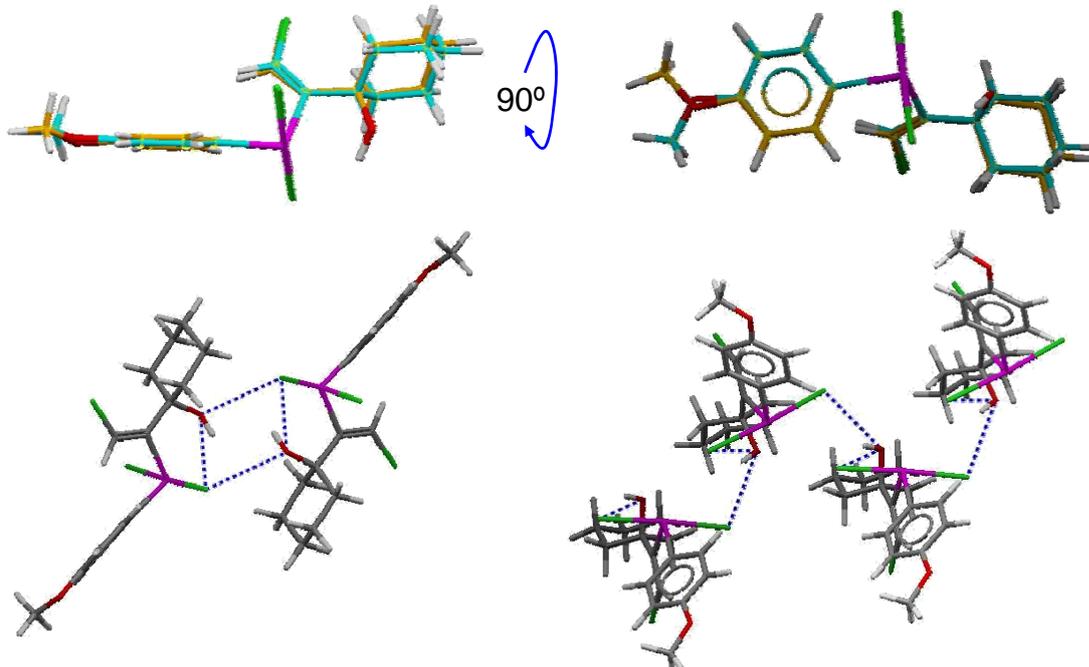
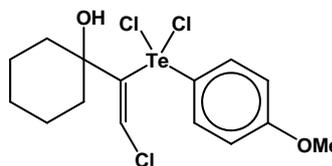
Ritonavir (inhibidor de la protease HIV)
Presenta 2 formas polimorfas siendo una de ellas indeseable

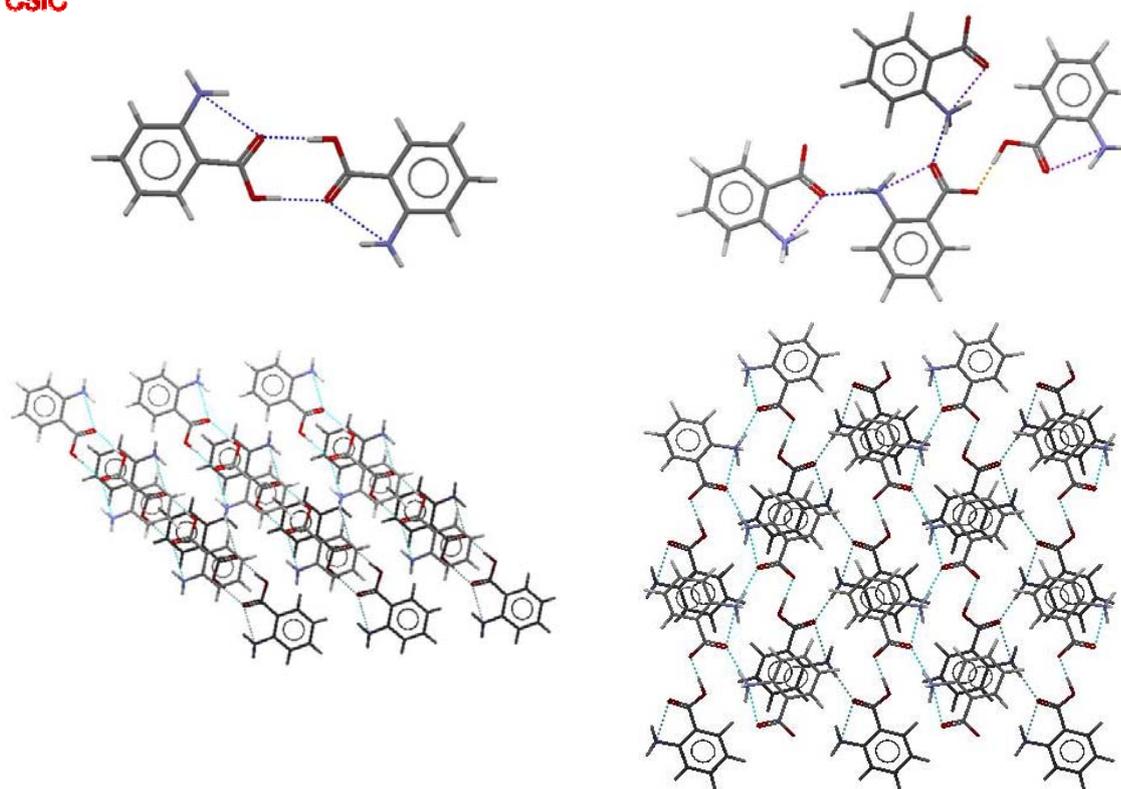


Palmitato de cloranfenicol (antibiótico)
Presenta 3 polimorfos: A, B y C más una forma amorfa
A es la única con características farmacocinéticas aceptables.
B es altamente biodisponible => sobredosificación
C y la **forma amorfa** no consiguen alcanzar concentraciones suficientes para que el tratamiento sea efectivo



Paracetamol (analgésico)
Presenta 2 polimorfos I y II





30 marzo 2009

Lourdes Infantes

Diferentes estructuras
moleculares



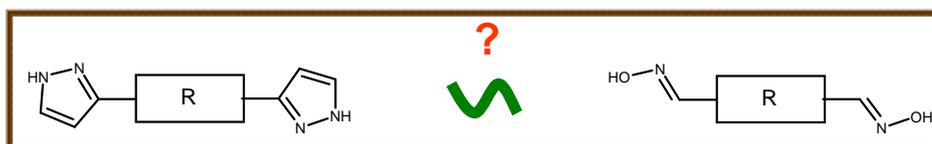
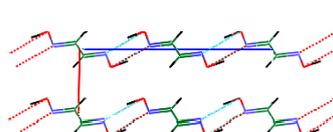
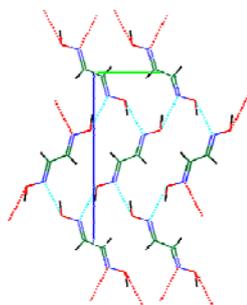
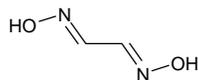
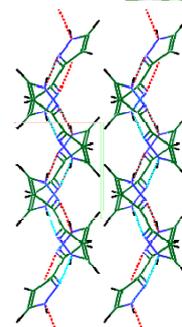
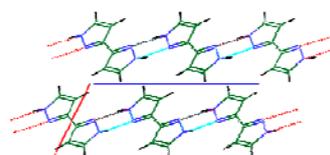
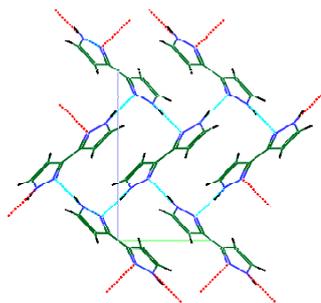
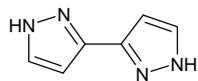
Diferentes estructuras
Cristalinas

¡NO!

30 marzo 2009

Lourdes Infantes

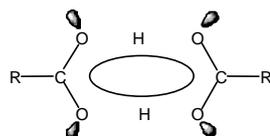
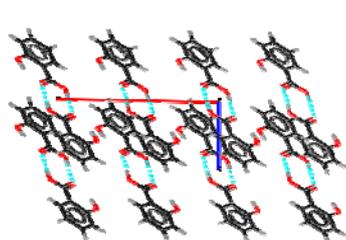
Isomorfismo



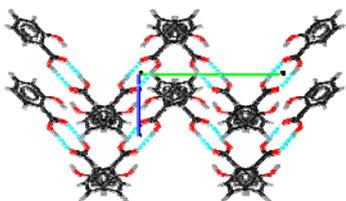
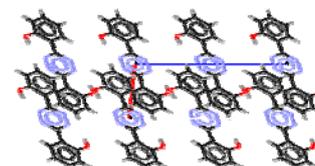
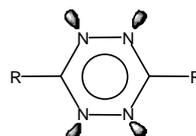
30 marzo 2009

Lourdes Infantes

Isomorfismo



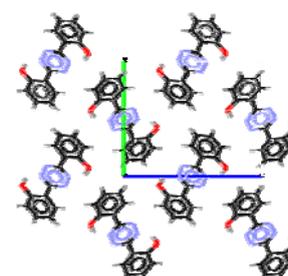
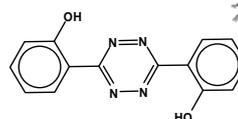
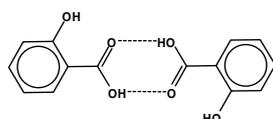
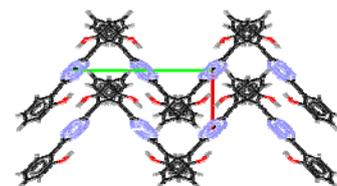
vs.



Interacción
de
Hidrógeno

vs.

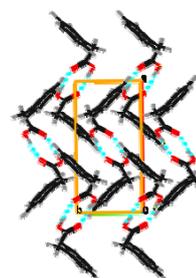
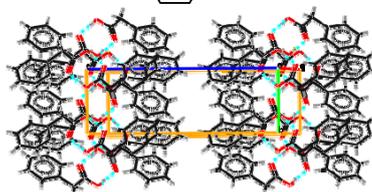
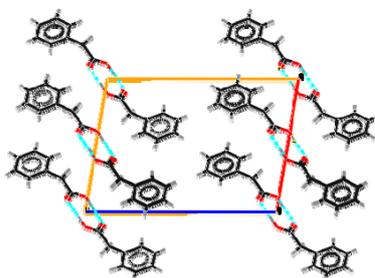
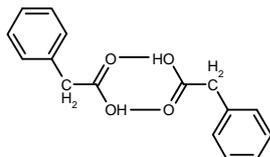
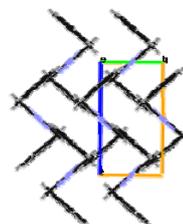
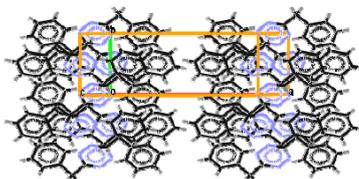
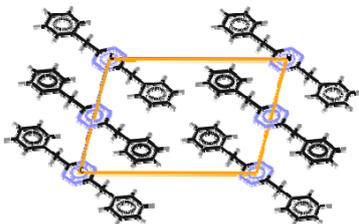
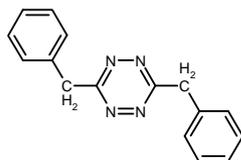
Enlace
Covalente



30 marzo 2009

Lourdes Infantes

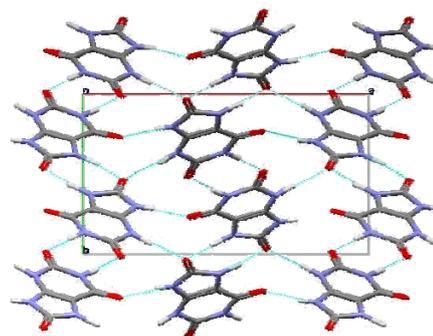
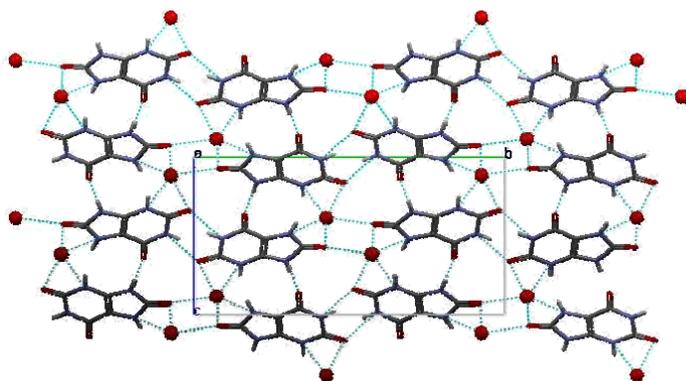
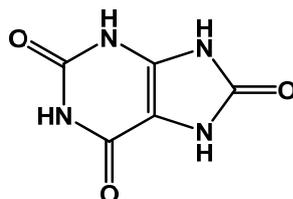
Isomorfismo



30 marzo 2009

Lourdes Infantes

Solvatos



30 marzo 2009

Lourdes Infantes



Recordemos:



- ➔ Los cristales se caracterizan por poseer estructuras internas periódicas y con simetría.
- ➔ Relación directa entre la estructura cristalina y las propiedades y funciones del material.
- ➔ Una estructura molecular puede presentar diferentes estructuras cristalinas.
- ➔ Diferentes estructuras moleculares pueden formar empaquetamientos isomorfos.
- ➔ Las interacciones intermoleculares observadas en los cristales son también las responsables del reconocimiento molecular *in vivo*.
- ➔ Los Rayos-X son la herramienta perfecta para abordar el análisis de las muestras cristalinas.

30 marzo 2009

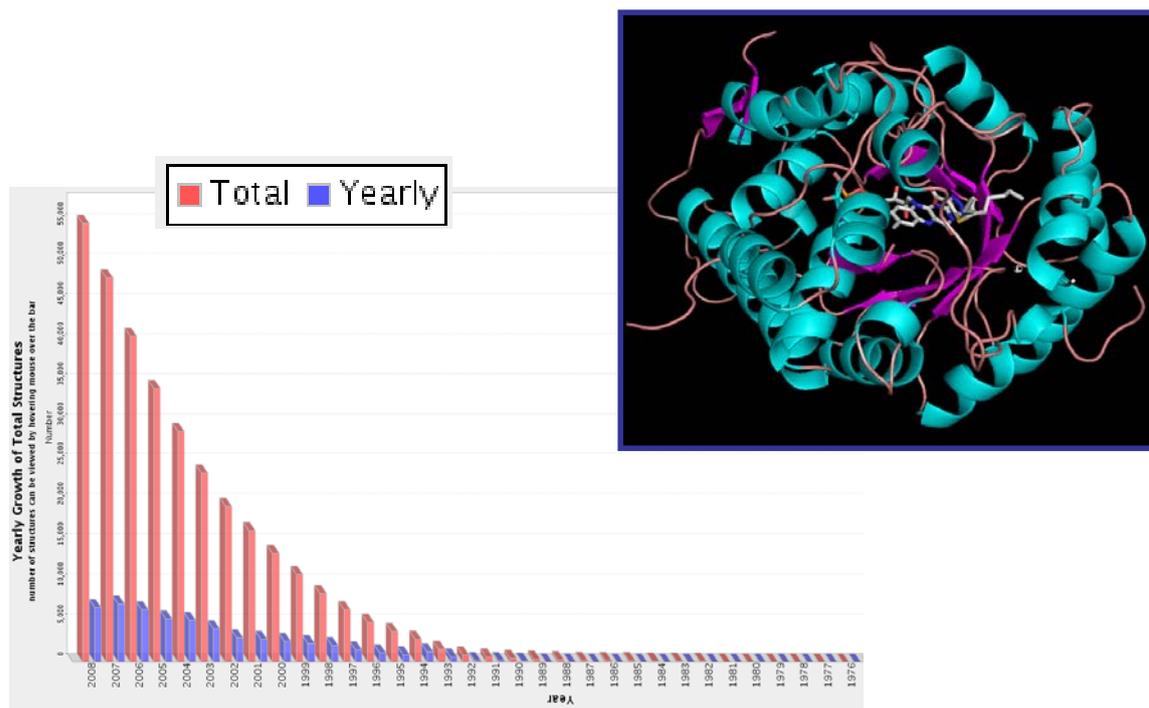
Lourdes Infantes



Bases de Datos

30 marzo 2009

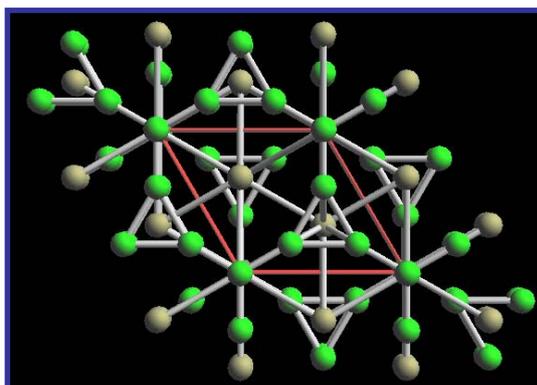
Lourdes Infantes



30 marzo 2009

Lourdes Infantes

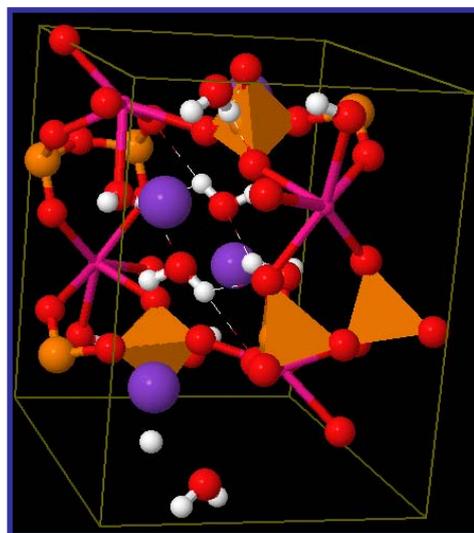
Base de Datos de Metales y Fases Intermetálicas



30 marzo 2009

Lourdes Infantes

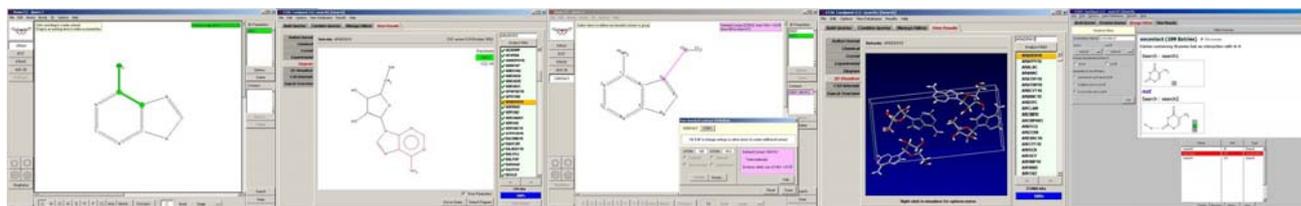
- Compuestos sin enlaces C-C ó C-H y que, además sean
- Estructuras que contienen, al menos, uno de los elementos:
H, He, B, C, N, O, F, Ne, Si, P, Cl, Ar, As, Se, Br, Kr, Te, I, Xe, At, Rn
- Aproximadamente 100.000 entradas en octubre 2007
- Es complementaria de CSD



Cambridge Structural Database (CSD)

<http://www.ccdc.cam.ac.uk>

- ➔ Base de datos que contiene información sobre más de 195.000 estructuras de cristales orgánicos resueltos hasta la fecha.
- ➔ Dispone de herramientas para la explotación de esta información: ConQuest, Mercury, Vista, Mogul, Isostar



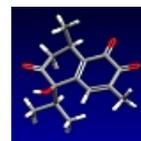
General Chemistry

- Aromaticity
- Shapes of molecules: VSEPR model
- Identifying functional groups (coming soon)



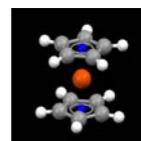
Organic Chemistry

- Aromaticity
- Halonium ions
- Stereochemistry
- Ring conformations
- Identifying functional groups (coming soon)



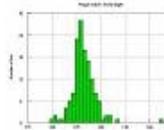
Inorganic Chemistry

- Shapes of molecules: VSEPR model
- Metal-carbonyl back-bonding
- Metal geometry interconversion
- Hapticity



Analytical Chemistry

- Analysing molecular dimensions



30 marzo 2009

Lourdes Infantes



Cristalografía

Departamento de Cristalografía - c/ Serrano 119 - E-28006 Madrid (España) - Telf: +34 91 561 94 00 - Fax: +34 91 564 24 31 - Viernes: 27 Marzo 2009
 Si encuentra errores e incoherencias en estas páginas, por favor, háganoslo saber. Gracias. Actualizado: 24 Mar. 2009

Bienvenido al mundo de la Cristalografía ...

Si a la izquierda de la pantalla no se muestra el menú de estos apuntes, use este enlace.

CRISTALOGRAFÍA

Estas páginas (*), probablemente nunca acabadas, pretenden guiar al lector interesado en el fascinante mundo de la Cristalografía, una parte del saber bien entroncada en la Ciencia actual y gracias a la cual hemos podido averiguar, a través del esfuerzo de muchas personas y durante muchos años, cómo son los cristales, cómo son las moléculas, las hormonas, los ácidos nucleicos, los enzimas, las proteínas ..., a qué se deben sus propiedades y cómo podemos entender su funcionamiento en una reacción química, en un tubo de ensayo, o en el interior de un ser vivo.

El descubrimiento de los rayos X revolucionó el antiguo campo de la Cristalografía, que hasta entonces había estudiado la morfología de los minerales. La interacción de los rayos X con los cristales demostró que los rayos X eran radiación electromagnética de longitud de onda del orden de 10^{-10} metros y que la estructura interna de los cristales era discreta y periódica, en redes tridimensionales, con separaciones de ese orden. Esto hizo que, ya desde el siglo pasado, la Cristalografía se convirtiera en una disciplina básica de muchas ramas científicas y en especial de la Física y Química de la materia condensada, de la Biología y de la Biomedicina.

Que lo disfrute!

(*). Trabajamos para completar estas páginas y poderlas ofrecer al lector interesado, pero como es obvio, no estamos a salvo de errores, ni de incoherencias, ni de omisiones. Cualquier cosa que advierta en este sentido, por

30 marzo 2009

Lourdes Infantes



Grupo de Cristalografía
Macromolecular y Biología
Estructural.

Instituto de Química-Física
Rocasolano. CSIC

Martín Martínez Ripoll

GRACIAS

30 marzo 2009

Lourdes Infantes