



SOCIEDAD QUÍMICA
DE MÉXICO, A.C.

Notas Relevantes de la Difracción en Química.

Gustavo Tavizón. Facultad de Química, UNAM.

La idea de que un ordenamiento de partículas pudiera ser el origen de los cristales, surgió casi paralelamente con las teorías atomísticas de los antiguos pensadores griegos. Quizás un salto muy importante pueda establecerse entre las ideas de Aristóteles, propias y compiladas, y las de Johannes Kepler de 1661, quien ya pretendía explicar la forma de los cristales de nieve con base en el empaquetamiento de partículas esféricas. Con todo y las dificultades de cada época, antes del descubrimiento de Max von Laue de la difracción de rayos X por cristales, y de los estudios sobre las estructuras cristalinas del diamante y de la sal de roca por parte de W. H. Bragg y W. L. Bragg, hubo muy brillantes aportaciones que explicaban la geometría y las propiedades de algunos cristales.

En lo que a la cristalografía refiere, quizás la primera publicación, con la que se inaugura ésta, fue de W. L. Bragg "The arrangement of atoms in crystals", en la que se establecían relaciones empíricas basadas en las distancias atómicas en las estructuras cristalinas recientemente determinadas, muchas veces por ellos mismos en sus grupos de trabajo. A este trabajo pionero siguió el de Víctor M. Goldschmidt, quien en 1926, introduciendo el concepto de radio iónico, establece las primeras reglas de la cristalografía que referían principalmente al tamaño de los iones y a las relaciones entre la composición química y la estructura de los cristales. Entre 1927 y 1929 Linus Pauling publica tres trabajos en los que de manera muy sustanciosa resume lo que se sabía de la estructura cristalina de los sólidos y su composición química, además de introducir los nuevos conceptos que él necesitaba para establecer un conjunto de reglas de la química estructural y sus componentes, que a la fecha siguen estando muy presentes, aunque la mayor parte de las referencias han sido acreditadas a "The Nature of the Chemical Bond" que sigue siendo un libro de referencia (25525 citas, 17/07/2014).

En este mismo tenor, y a juzgar por el número de referencias de las que da cuenta en Google Scholar, existen otras contribuciones muy importantes en la determinación de estructuras cristalinas, entre ellas están las de Hugo Rietveld, sobre refinamientos estructurales (9422 citas y muchas más); el trabajo de R.D. Shannon y C.T. Prewitt (suman 37000 citas).

En la presentación de este trabajo se hace una exposición de algunos trabajos "relevantes" en lo referente a la cristalografía, principalmente en lo que hace a la química inorgánica de sólidos.