

ICMAB

INSTITUT DE CIÈNCIA DE MATERIALS DE BARCELONA



EXCELENCIA
SEVERO
OCHOA



CSIC

CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS

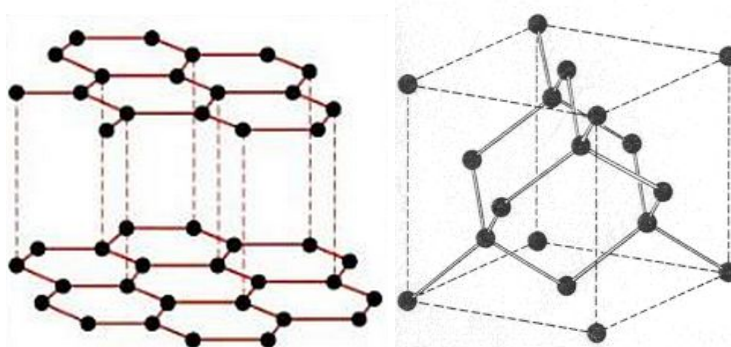


Cristal·lografia per difracció de raigs X

Arnau Sabater i Mezquita
Joves i Ciència, estiu 2018

Introducció:

Tothom, alguna vegada o una altra, ha sentit a parlar de l'analogia entre el grafit, principal constituent dels llapis d'escriure, i el diamant, una pedra preciosa d'elevadíssim valor, per la qual cosa costa imaginar l'estreta relació que comparteixen. El cas és que ambdós es redueixen només a àtoms de carboni enllaçats entre ells, però la seva gran diferència rau en les respectives *xarxes cristal·lines*: segons com s'agrupin els àtoms que les formen, sobretot a causa de les condicions de pressió en què es trobin, aquestes seran d'una manera o d'una altra i, conseqüentment, nosaltres ho apreciarem o bé com un tros de grafit (*imatge a l'esquerra*) o bé com un tros de diamant (*imatge a la dreta*).



Tot el món que ens envolta, els materials que utilitzem diàriament i fins i tot nosaltres mateixos estem formats de moltes i diferents molècules, orgàniques o inorgàniques. Quan aquestes s'enllacen per a formar els materials, teixits o substàncies que observem en el món macroscòpic ho poden fer seguint una regularitat més o menys complexa i formar els anomenats *cristalls* o, del contrari, d'una manera aparentment¹ arbitrària, com ocorre en els materials *amorfs*. La proporció entre uns i altres se situa al voltant del 50%, però les propietats entre uns i altres, tant físiques com químiques, són completament diferents. Conèixer com és l'estructura atòmica dels diferents materials ens permet, per tant, ser capaços d'explicar i/o el comportament d'aquests en determinades situacions atenent a la seva disposició molecular, resultant en la seva aplicació

Descobrir l'estudi dels materials cristal·lins per difracció de raigs X va ser el que se'm va permetre durant les setmanes del 9 al 20 de juliol d'aquest any. Vaig poder gaudir

¹ La raó d'aquest terme ve donada per l'existència de línies d'investigació, presents també a l'ICMAB, que es centren en el que s'anomena *desordre correlacionat*, que postula que l'arbitrarietat dels materials amorfs no és completa i la seva disposició segueix una pauta determinada per variables externes (com podria ser, per exemple, l'orientació d'una de les molècules que formen la xarxa).

d'involucrar-me dins l'equip de l'Institut de Ciències de Materials de Barcelona (ICMAB), treballant als seus laboratoris i intentant desxifrar l'estructura molecular de tot tipus de materials: des d'una aspirina fins a un pedaç d'aragonita, un mineral format per carbonat de calci (CaCO_3).

Fitxa tècnica:

- **Centre de Recerca:** Institut de Ciències de Materials de Barcelona (ICMAB-CSIC).
- **Adreça:** Campus de la UAB, 08193, Bellaterra.
- **Línia d'investigació:** Caracterització de materials cristal·lins per difracció de raigs X.
- **Àrea o departament:** Departament de Difracció.
- **Científic a càrrec:** Investigadors Anna Crespi i Carlos Frontera.
- **Projecte:** La cristal·lografia per difracció de raigs X.
- **Període de realització de l'estada:** Des del 9 de juliol de 2018 fins al 20 de juliol de 2018.

Objectius del projecte:

A causa de l'amplitud que comprenen els camps de la cristal·lografia i de les tècniques de difracció de raigs X que, en dues setmanes, és impossible de cobrir íntegrament, l'objectiu principal de l'estada va ser tenir un primer contacte dins aquestes àrees i conèixer quina és la feina dins un laboratori de difracció. Tot i així, com a coneixements que es volia que adquirís al final de l'estada trobem:

- La diferència entre un material *cristal·lí* i un material *amorf*.
- La diferència entre un *monocristall* i un *policristall*, dins els materials *cristal·lins*.
- La manera com interpretar els resultats d'una anàlisi amb difractòmetre de raigs X i caracteritzar un material segons les classificacions anteriors.
- Els fonaments del fenomen de la difracció.
- El funcionament dels difractòmetres de raigs X i la síntesi d'aquests.

Breu descripció de les activitats desenvolupades:

L'estada es van desenvolupar alternant sessions d'explicació teòrica sobre els fonaments de la difracció i de la cristal·lografia (complimentades amb material explicatiu d'aquestes àrees) amb treball manual i d'observació al laboratori, ajudant els investigadors i tècnics a prendre mesures de diferents materials i analitzar-ne els resultats. A més, el centre oferia xerrades dins les moltes àrees d'investigació que s'hi comprenen, entre les quals exposicions de tesis doctorals i postdoctorals, i visites explicades als diferents departaments i laboratoris que hi coexisteixen.

Així, després d'una introducció i familiarització amb el món de la cristal·lografia i la seva terminologia específica, els primers dies al laboratori van servir per aprendre com es podia diferenciar un sòlid cristal·lí d'un d'amorf, utilitzant un difractòmetre de raigs X, i saber com identificar la substància analitzada a partir de la base de dades de l'aparell. Després de convertir en pols un ibuprofè, per una banda, i una aspirina, per l'altra, i haver-la introduït al difractòmetre, vam poder diferenciar-les mitjançant els resultats de l'anàlisi i identificar si eren cristal·lins o bé amorfs (de fet, ambdues presenten fases que són cristal·lines i fases que no ho són). Aquesta pràctica, amb resultats ja coneguts, exemplifica una de les tasques bàsiques dins el laboratori de difracció.

Una aplicació directa d'aquesta tècnica (base d'estudi d'alguns dels investigadors que em van guiar l'estada) és utilitzar-la per determinar la composició i estructura atòmica de diferents minerals. Durant l'estada, vam poder identificar una mostra desconeguda com a aragonita, una de les formes cristal·lines del carbonat de calci (CaCO_3) i mineral abundant al país espanyol. A més, ha servit com a pilar fonamental en la resolució de l'estructura altament complicada, atribuïda a Jordi Rius, investigador de l'ICMAB, de l'aerinita (*imatge*), un mineral molt abundant a Catalunya i del qual històricament s'ha extret el pigment blau per a la realització d'obres d'art pictòriques (com és el cas del blau del Pantocràtor de Sant Climent de Taüll).



De les altres activitats realitzades al laboratori van ser molt interessants les anàlisis al difractòmetre d'una mateixa mostra d'aragonita, primer com a un pedaç sencer de mineral, i després trossejat fins estar en pols, per tal de poder diferenciar els resultats obtinguts. En el primer cas, es diu que el mineral està en forma de *monocristall*, ja que els raigs X només es troben amb els plans cristal·logràfics² paral·lels amb el de la superfície on incideixen, produint així un únic senyal en el difractòmetre. En el segon, en canvi, ja que cada granet del mineral està orientat d'una manera diferent, es pot arribar a veure tots els plans cristal·logràfics que pot tenir un cristall. En aquest cas, l'aragonita estava en forma de *policristall*.

Per acabar, també se'm va donar l'oportunitat d'examinar amb microscopi òptic làmines de diferents roques per poder identificar-ne les parts que fossin diferents i, així, poder descobrir per quins minerals i cristalls la formaven.

Valoració final de l'estada:

Després d'haver passat dues setmanes en aquest centre, la meva gratitud i satisfacció no podria ser major. L'oportunitat d'haver treballat en una àrea tan desconeguda per mi a l'inici i haver-la pogut descobrir ha estat un dels punts claus en la valoració altament positiva que faig de l'estada, juntament amb la companyia dels investigadors que van guiar-me i explicar com desenvolupen la seva feina, i el fet que la cristal·lografia sigui, malgrat força complexa, molt interessant.

Un projecte semblant, per tant, és altament recomanable per tots aquells que tinguin passió per la ciència i es sentin atrets, sobretot, per la física, la química o la geologia.

Finalment, m'agradaria agrair a tot l'equip de Joves i Ciència per haver-me donat aquesta oportunitat així com al personal de l'ICMAB que em va atendre i als investigadors que van acompanyar-me durant les estades, l'Anna Crespi i en Carlos Frontera. Moltes gràcies!

² Els plans cristal·logràfics, els quals són imaginaris però constitueixen una simplificació per explicar el fenomen que ocorre en difractar-hi raigs X, es constitueixen en unir diferents punts de la *cèl·lula unitat* (l'estructura bàsica a partir de la qual, per la seva repetició, es forma un cristall) i són els que difracten i reflecteixen els raigs X, obtenint un senyal en el difractòmetre.