

Año Internacional de la Cristalografía



Publicación Cuatrimestral

Comité Editorial

Guillermo Delgado Lamas (UNAM, México)
Andoni Garritz Ruiz (UNAM, México)
Jesús Valdés Martínez (UNAM, México)
Julia Verde Star (UNAM, México)
Bernardo Frontana Uribe (UNAM, México)
Carolina Godoy Alcántar (UAEMor, México)
Jorge Ibáñez Cornejo (U. Iberoamericana)
Miguel Ángel Méndez Rojas (U. de las Américas)
Olga Margarita Padilla Bernal (U.A. Zacatecas)
Kira Padilla Martínez (UNAM)
Aarón Pérez Benítez (BUAP, Puebla)
Catalina María Pérez Berumen (Universidad Autónoma
de Coahuila)
Leticia Lomas Romero (Universidad Autónoma
Metropolitana)
Ignacio Rivero Espejel (Instituto Tecnológico de Tijuana)

Editor en Jefe: Guillermo Delgado Lamas (Instituto
de Química, UNAM)

Asistencia Editorial: Adriana Vázquez
Editor técnico: Formas e Imágenes
Diseño editorial: Lizbeth Méndez y Marion Huerta
Corrección de estilo: Adriana Cataño

Certificado de Reserva otorgado por el Instituto
Nacional de Derecho de Autor: en trámite.

Certificado de Licitud de Contenido: en trámite.

Registro postal de impresos depositados por sus
editores o agentes otorgado por SEPOMEX: IM09-0312

Derechos reservados Sociedad Química de México, A.C.

La reproducción total o parcial del contenido de esta
publicación está prohibida sin el consentimiento del
titular de los derechos.

Las ideas y opiniones contenidas en esta publicación
son total responsabilidad de los autores.

Editada y distribuida por:
Sociedad Química de México, A.C.

Barranca del Muerto 26,
Col. Crédito Constructor,
Del. Benito Juárez, C.P. 03940,
Ciudad de México
Tel. +5255 56626837; +5255 56626823

soquimex@sqm.org.mx

http: www.sqm.org.mx

Impreso en: Formas e Imágenes

Tiraje: 600 ejemplares



Directorio

Gerencia ejecutiva
Mtra. Olivia Sparza
gerenciaejecutiva@sqm.org.mx

Comunicación y membresía
comunicacionymembresia@sqm.org.mx

Administración
Mauricio Vargas Hernández
soquimex@sqm.org.mx

Asistente administrativo
IED Marion Huerta
E-mail: admon@sqm.org.mx

Editor del Journal of the Mexican Chemical Society
Dr. Ignacio González Martínez
chief.editor.jmcs@sqm.org.mx

Asistencia editorial
MVZ. Adriana Vázquez A.
editor.jmcs@sqm.org.mx

Acervo histórico
Lic. Estefanie L. Ramírez Cruz
archivohistorico@sqm.org.mx

Capacitación y extensión académica
Lic. Lizbeth Méndez M.
capacitacioneducativa@sqm.org.mx

Planeación y desarrollo de congresos
Lic. Lizbeth Méndez M.
MVZ. Adriana Vázquez A.
Lic. Daffne A. Ortega Hernández
congresos@sqm.org.mx

Diseño e imagen
IED Marion Huerta

Webmaster/ Social Media Manager
Lic. Lizbeth Méndez M.
M. Julio César López Martínez
Lic. Daffne Ortega Martínez
socialmedia@sqm.org.mx

49° Congreso Mexicano de Química
Sociedad Química de México
**Simposio de Cristalografía
“100 Años de Cristalografía y Difracción”**

Dra. María Elena Montero Cabrera
CIMAV, Chihuahua, México
Dra. Alejandra Hernández Santoyo
Instituto de Química, UNAM
Dr. Gustavo Tavizón Alvarado
Facultad de Química, UNAM
Dr. Lauro Bucio Galindo
Instituto de Física, UNAM

En 1912, en la Universidad de Múnich, Max von Laue, Walter Friedrich y Paul Knipping mostraban el fenómeno de difracción, al hacer pasar un haz de rayos X sobre muestras de sulfato de cobre, blenda de zinc (ZnS) y NaCl. En 1914 Von Laue fue galardonado con el Premio Nobel de Física. Alrededor de esos mismos años, William Henry Bragg, padre, había ideado lo que llamaba *espectrómetro de rayos X*. Trabajando conjuntamente con su hijo, William Lawrence Bragg, y con ayuda de este espectrómetro, a partir de 1913, dieron cuenta de uno de los trabajos en equipo más importantes que padre e hijo jamás hayan realizado en la historia de las ciencias. Como consecuencia de estos trabajos y de una ingeniosa interpretación para la determinación de los patrones de difracción de algunos sistemas cristalinos muy bien definidos, como el diamante y los cloruros de los metales alcalinos, W. H. Bragg y W. L. Bragg recibieron la notificación de que recibirían el Premio Nobel de Física en 1915 por “el uso de rayos X para la determinación de estructuras cristalinas”. Así, con las aportaciones de Von Laue, W. H. Bragg y W. L. Bragg en la difracción de rayos X, tiene inicio una de las metodologías más importantes y fructíferas para la determinación estructural de un gran número de sustancias químicas; al mismo tiempo, la metodología de dispersión de rayos X por gases y líquidos ha contribuido a establecer elementos muy importantes en lo referente a su estructura microscópica.

En la opinión de una gran cristalógrafa, Dame Kathleen Lonsdale (1903-1971), la difracción de rayos X surge como un recurso de las ciencias ante los atávicos cuestionamientos de los que Isaac Newton dio cuenta en su *Opticks* (3a. ed., págs. 364 y 369) y que refieren a las fuerzas de cohesión que mantienen unidas a las partículas que forman todos los cuerpos. Ciertamente, en los inicios de 1900 ya existían problemas muy importantes que resolver. Había experimentos de la fisicoquímica de átomos y moléculas

que necesitan urgentemente de los finos parámetros experimentales que fueron accesibles a través de la difracción de rayos X. Por estos tiempos también el avance de las espectroscopias tuvo momentos muy memorables (Moseley, por ejemplo, publica sus principales trabajos alrededor de 1914). En la teoría de sólidos se registraron fenómenos eléctricos y magnéticos (de los hermanos Curie y la superconductividad de H. K. Onnes, por ejemplo) y en la teoría de sólidos, la formulación de Born y Von Karman sobre la dinámica de redes cristalinas, era la piedra angular de trabajos por venir; y lo mismo pasaba con tratamientos termodinámicos de sólidos.

En muchas disciplinas científicas, el espectacular desarrollo que han mostrado está muy ligado al avance de la cristalografía. Podría decirse que en los últimos cien años, veinticinco Premios Nobel han sido concedidos por trabajos directamente relacionados con la cristalografía. El quehacer científico en muchas disciplinas es ahora inimaginable sin los recursos que la difracción de rayos X proporciona.

En el desarrollo del Simposio “100 años de Cristalografía y Difracción” en el 49° Congreso Mexicano de Química, la doctora María Elena Montero realiza una exposición que da cuenta de sus investigaciones sobre el sistema de cuevas de Naica y su formación, y se muestran resultados originales de sus investigaciones relacionadas con los procesos físico-químicos que tienen lugar en la superficie de los cristales de las diferentes cuevas.

La Dra. Alejandra Hernández Santoyo hace una exposición de la relación entre las formas oligoméricas de las proteínas y de la manera en las que éstas han de cambiar para cumplir con una función determinada. Nos explica también cómo este proceso de asociación puede provocar un efecto positivo o negativo en las propiedades de las proteínas. Por un lado, puede regular su función, favorecer su estabilidad y actividad, y por el otro, puede generar proteínas no funcionales y la formación de depósitos en fibras, dando lugar a un gran número de enfermedades degenerativas como el Alzheimer, Creutzfeld-Jacob, Parkinson, Huntington, amiloidosis sistémica, diabetes de tipo II, esclerosis lateral amiotrófica y angiopatía cerebral, entre otras.

Finalmente el Dr. Gustavo Tavizón hace una presentación de algunos de los trabajos más relevantes para la elucidación de estructuras cristalinas de los sólidos inorgánicos. La exposición se centra en los trabajos de Víctor Goldschmidt, Linus Pauling, R. D. Shannon-C. T. Prewitt y Hugo Rietveld.

Dr. Gustavo Tavizón Alvarado
Facultad de Química, UNAM

CONTENIDO



FE DE ERRATAS	5
CIRCULAR PARA LOS ASOCIADOS Y AMIGOS DE LA SOCIEDAD QUÍMICA DE MÉXICO 2015	10
50° ANIVERSARIO DEL CONGRESO MEXICANO DE QUÍMICA ESTEFANIE LUZ RAMÍREZ CRUZ	12
AÑO INTERNACIONAL DE LA CRISTALOGRAFÍA: RESOLUCIÓN ONU	17
100 AÑOS DE DIFRACCIÓN, ELEMENTOS IMPORTANTES. RADIOS IÓNICOS GUSTAVO TAVIZÓN	20
INFLUENCIA DEL AMBIENTE SOBRE LA SUPERFICIE DE LOS CRISTALES GIGANTES DE SELENITA DE NAICA MARÍA ELENA MONTERO CABRERA, ISAÍ CASTILLO SANDOVAL, LUIS E. FUENTES COBAS, HILDA E. ESPARZA PONCE, MARÍA ELENA FUENTES MONTERO, MANUEL REYES CORTÉS	25
DETERMINANTES ESTRUCTURALES DE LA OLIGOMERIZACIÓN EN PROTEÍNAS ALEJANDRA HERNÁNDEZ SANTOYO	29
CALENDARIO DE LA SOCIEDAD QUÍMICA DE MÉXICO EN CONMEMORACIÓN DEL "AÑO INTERNACIONAL DE LA CRISTALOGRAFÍA"	32

FE DE ERRATAS

Boletín de la Sociedad Química de México, volumen 8, número 3

Artículo: *El Premio Nacional de Química “Andrés Manuel del Río” 50 años después de haber sido establecido por la Sociedad Química de México*

Autor: Víctor M. Loyola Vargas, Unidad de Bioquímica y Biología Molecular de Plantas, CICY, Calle 43 núm. 130, Col. Chuburná de Hidalgo, C.P. 97200, Mérida, Yucatán.

Páginas: 23 y 24

Cuadro 2. Ganadores del Premio Nacional de Química “Andrés Manuel Del Río”.

Año	Nombre	Adscripción	Categoría		
			Doc	Inv	Ind
1964	Q. Manuel Guillermo Madrazo Garamendi	FQ UNAM	X		
1965	Dr. Jesús Romo Armería	IQ UNAM		X	
	Dr. Guillermo Carvajal Sandoval	ENCB IPN		X	
1966	Q. Tec. Rafael Illescas Frisbie	FQ UNAM	X		
1967	Q. José Ignacio Bolívar Goyanes	Laboratorios Zapata			X
	I.Q. Rafael Pardo Grandison	Bufete Industrial	X		
1969	I.Q. José Emilio Amores Cañals	ITESM	X		
	I.Q. Miguel G. Arce Santamaría	CYDSA			X
1970	Dr. José Francisco Herrán Arellano	FQ UNAM	X		
	I.Q. José Mendoza Fernández	Bufete Industrial			X
1971	Dr. Carlos Casas Campillo	CINVESTAV		X	
	Dr. José Luis Mateos Gómez	FQ UNAM	X		
1975	I.Q. Pascual Larraza Smith	Alkamex	X		
	Ing. Hilario Ariza Dávila	ESIQIE IPN	X		
	I.Q. Héctor R. Lara Sosa	PEMEX			X
1976	Dr. Francisco Giral González	FQ UNAM		X	
	I.Q. Adolfo Patrón Lujan	Resistol			X
1977	Dr. Alfonso Romo de Vivar	IQ UNAM		X	
	I.Q. Alberto Urbina del Raso	FQ UNAM	X		
	Ing. José Luis de las Fuentes	IMP			X

Año	Nombre	Adscripción	Categoría		
			Doc	Inv	Ind
1978	Dr. José Iriarte Guzmán	Sintex		X	
	Dr. Fernando Orozco Díaz	FQ UNAM	X		
	I.Q. Benito Bucay Faradji	FQ UNAM			X
1979	Dr. Fernando Walls Armijo	IQ UNAM		X	
	Dr. Humberto Estrada Ocampo	FQ UNAM	X		
	I.Q. Fernando Manzanilla Sevilla	IMP			X
1980	Dr. Jaime Keller Torres	FQ UNAM		X	
	Dr. Javier Padilla Olivares	FQ UNAM	X		
	I.Q. Alberto Bremauntz Monge	Sosa Texcoco			X
1981	Dr. Francisco Javier Garfias y Ayala	FQ UNAM		X	
	I.Q. Alfonso Bernal Sahagún	Inst. Est. Sup. Edo. Mex.	X		
	I.Q. José Luis García-Luna Hernández	IMP			X
1982	Dr. Armando Manjarrez Moreno	IMP		X	
	Dr. Ernesto Domínguez Quiroga	Univ. Iberoamericana	X		
	Ing. Héctor Lara Sosa	PEMEX			X
1983	Dra. Estela Sánchez de Jiménez	FQ UNAM		X	
	Dr. Xorge Alejandro Domínguez Sepúlveda	ITESM	X		
	I.Q. Federico Ortiz Álvarez	Celanese Mexicana			X
1984	Dr. Ángel Guzmán Sánchez	Sintex		X	
	I.Q.I. Jesús Ávila Galinzoga	ESIQIE IPN	X		
	I.Q. José Giral Barnés	CMGE UNAM			X
1985	Dr. Tirso Ríos Castillo	IQ UNAM		X	
	Dr. Raúl Cetina Rosado	IQ UNAM	X		
	I.Q. Lars R. Christianson	Christianson S.A. C.V.			X
1986	Dr. Pedro Joseph-Nathan	CINVESTAV		X	
	Dr. Jacobo Gómez Lara	IQ UNAM	X		
	I.Q. Luis E. Miramontes Cárdenas	IQ UNAM			X
1987	Dr. Federico García Jiménez	IQ UNAM		X	
	M.C. Pilar Rius de Belausteguigoitia	FQ UNAM	X		
	Dra. Elvira Santos Santos	FQ UNAM	X		
	I.Q. Eduardo Rojo y de Regil	FQ UNAM			X



Año	Nombre	Adscripción	Categoría		
			Doc	Inv	Ind
1988	Dra. Lydia Rodríguez Hahn	IQ UNAM		X	
	Dr. Andoni Garritz Ruiz	FQ UNAM	X		
	I.Q. Leopoldo Rodríguez Sánchez	Resistol			X
	Dra. Susana Chow Pangtay	IMP			X
1989	Dr. Manuel Soriano García	IQ UNAM		X	
	Dr. Barbarín Arreguín Lozano	IQ UNAM	X		
	Q. Alfonso Graf Garduño				X
1990	Dr. Luis Ángel Maldonado Graniel	IQ UNAM		X	
	Dr. Octavio Paredes López	CINVESTAV		X	
1991	Dr. Eduardo Díaz Torres	IQ UNAM		X	
	M.C. Ángela Sotelo López	FQ UNAM	X		
	I.Q. Cesar Octavio Baptista Montes	Com. Nac. Energéticos			X
	I.Q. Carlos López Mora	PEMEX			X
1992	Dr. Miguel Antonio Costas Basín	FQ UNAM		X	
	M.C. Ramón de la Peña Manrique	ITESM	X		
	I.Q. José Parroquín Barrera	Canacintra			X
	M.C. Arnulfo M. Canales Gajá	Cervecería Cuauhtémoc			X
1993	Dr. Raúl Guillermo Enríquez Habib	IQ UNAM		X	
	Dr. Francisco José Barnés de Castro	FQ UNAM	X		
	I.Q. Jaime Lomelín Guillén	Peñoles			X
	I.Q.I. Víctor Manuel Alcérreca Sánchez	IMP			X
	I.Q. José Alberto Celestinos Isaacs	PEMEX			X
1994	Dr. Eusebio Juaristí Cosío	CINVESTAV		X	
	Dr. José Antonio Chamizo Guerrero	FQ UNAM	X		
	Dr. Isaac Schifter Secora	IMP			X
	Eduardo Prieto Sánchez Mejorada				X
1995	Dr. José Ricardo Gómez Romero	UAM Iztapalapa		X	
	Dr. Enrique Rodolfo Bazúa Rueda	FQ UNAM	X		
	Ing. Oscar Humberto Bermúdez Mendizábal	IMP			X
	Ing. Antonio Sacristán Roy	PEMEX			X
1996	Dr. Leovigildo Quijano	IQ UNAM		X	
	M.I. Alejandro Anaya Durand	FQ UNAM	X		
	Dr. Martin Guillermo Hernández Luna	FQ UNAM			X
	Dr. Enrique Campos López	CIATEJ			X

Año	Nombre	Adscripción	Categoría		
			Doc	Inv	Ind
1997	Dra. Lena Ruiz Azuara	FQ UNAM		X	
	Dr. Antonio Valiente Barderas	FQ UNAM	X		
	Dr. Luis Francisco Ramos de Valle	CIQA			X
	I.Q. Andrés Cohen Barki	Resinas y Materiales			X
1998	Dr. Jorge Guillermo Ibáñez Cornejo	Univ Iberoamericana		X	
	I.Q. José A. Germán Espinosa Chavarría	Bufete Químico			X
	Dr. Víctor M. Loyola Vargas	CICY	X		
1999	Dr. Francisco Xavier Soberón Mainero	IBT UNAM		X	
	Dr. Jesús Guzmán García	FQ-UNAM	X		
	Dr. Leonardo Ríos Guerrero	Resistol			X
	I.Q. Eusebio Rubio Valbuena				X
2000					
	I.Q. Rafael Decelis Contreras	FES, Cuautitlán, UNAM			X
	I.Q. Ricardo Viramontes Brown	HYLSA S.A. C.V.			X
	Dr. Rene Miranda Ruvalcaba	FES, Cuautitlán, UNAM	X		
	Dr. Mauricio Terrones Maldonado	IPICYT		X	
2002	Dr. Eduardo Bárzana García	FQ UNAM	X		
	Dr. Octavio Manero Brito	IIM UNAM		X	
	Ing. Jorge Ebrard Maure	Laboratorios Mixim			X
2003	M.C. Enrique Aguilar Rodríguez	IMP			X
	Dr. Guillermo Delgado Lamas	IQ UNAM		X	
	Dra. Ma. Antonia Dosal Gómez	FQ UNAM	X		
2004	Dr. Armando Cabrera Ortiz	IQ UNAM	X		
	Dr. Manuel de Jesús Salmón Salazar	IQ UNAM		X	
	I.Q. Víctor Manuel Urbina Bolland	Química Foliar			X
	M. en C. Filiberto Vázquez Dávila	ENCB IPN			X
2005	Dr. Cecilio Álvarez Toledano	IQ UNAM		X	
	Dr. Antonio Hinojosa Martínez	CYDSA			X
	M. en C. José Manuel Méndez Stivalet	FQ UNAM	X		
	M. en C. Juan Antonio Villarreal Treviño	HYLSA S.A. C.V.			X
2006	Dr. Takeshi Ogawa Murata	IIM UNAM	X		
2007	Dr. Gabriel Gojón Zorrilla	THERMAFAT			X
	Dr. Ignacio González Martínez	UAM Iztapalapa		X	
	Dr. Joaquín Tamariz Mascarúa	ENCB IPN		X	

Año	Nombre	Adscripción	Categoría		
			Doc	Inv	Ind
2008	Dr. José Luis Gázquez Mateos	UAM Iztapalapa		X	
	I.Q.I. José Clemente Reza García	ESIQIE IPN		X	
2009	Q. Guillermo Barraza Ortega	FQ UNAM	X		
	I.Q. Gerardo Rafael Bazón Navarrete	FQ UNAM			X
	Dr. Alberto Marcial Vela Amieva	CINVESTAV		X	
2010	I.Q. Gustavo Adolfo Berea Lagarda	FARMAQUIMIA			X
	Dr. Raymundo Cea Olivares	IQ UNAM		X	
	Dr. José Norberto Farfán García	FQ UNAM		X	
	Dr. Juventino José García Alejandre	FQ UNAM	X		
2011	Ing. Sergio Enrique Cervantes Rodiles	Canacintra			X
	Dr. Roberto Martínez	IQ UNAM		X	
	Dr. Alberto Rojas Hernández	UAM Iztapalapa	X		
	Dr. Luis Camilo Ríos Castañeda	UAM Xochimilco		X	
	Dr. Omar Solorza Feria	CINVESTAV		X	
2012	Dra. Elisa Leyva Ramos	FCQ UASLP	X		
	Dr. Jorge Ancheyta Juárez	IMP		X	
	Ing. Víctor Manuel López Bolaños	Canacintra			X
2013	Dra. Norah Yolanda Barba Behrens	FQ UNAM	X		
	Dra. Rachel Mata Essayag	FQ UNAM		X	
	Dr. Alfredo Ortega Hernández	IQ UNAM		X	
2014	Dr. Héctor Manuel Zuccolotto Palacios	Canancintra			X
	Dr. Jesús Gracia Fadrique	FQ UNAM	X		
	Dr. Francisco Miguel de Jesús Castro Martínez	FQ UNAM		X	



Circular para los Asociados y Amigos de la Sociedad Química de México 2015

El Comité Ejecutivo Nacional de la SQM, por este conducto envía a ustedes un saludo, con el deseo de que este próximo 2015 sea próspero y exitoso. Para la SQM este año tiene importancia significativa ya que celebraremos el quincuagésimo Congreso Mexicano de Química del 7 al 10 de octubre en la ciudad de Querétaro.

Para celebrar esta fecha significativa se está preparando un programa académico y cultural muy atractivo tanto para los actuales socios de la SQM como para aquellos miembros de la comunidad química del país que aún no son socios de nuestra organización.

El comité organizador del 50° Congreso Mexicano de Química y 34° Congreso Nacional de Educación Química contará con la colaboración de la Universidad Autónoma de Querétaro y del Centro de Investigación y Desarrollo Tecnológico en Electroquímica, instituciones que lideran el comité local. La ciudad de Querétaro y sus alrededores ofrecen, además de su belleza, una infraestructura muy diversa que permite el desarrollo cabal de las actividades académicas de nuestros congresos anuales.

Por otra parte, aprovechamos este medio para extender nuestro agradecimiento a todos aquellos que participaron como asistentes, participantes de simposios, plenaristas y expositores en los congresos realizados en Mérida, Yucatán en 2014. En particular, reconocemos las actividades del comité local integrado por el CICY, el CINVESTAV Unidad Mérida, la UADY y la UNAM Unidad Sisal. Además agradecemos el apoyo del CONACYT, con su ayuda tuvimos la oportunidad de ofrecer 63 becas para estudiantes tanto de licenciatura como de maestría. Contamos además con la participación de un total de 73 estudiantes voluntarios en las diferentes actividades realizadas en los congresos. Muchas gracias a estos jóvenes por su trabajo y apoyo a la SQM. Agradecemos también el apoyo ofrecido por el Gobierno del Estado de Yucatán y el municipio de Mérida. Su participación fue muy importante en el desarrollo de las actividades de los congresos.

Sin duda, los logros de la SQM son el resultado de la participación de sus miembros, que año con año se suman a los esfuerzos de la organización por fortalecer a la química en el contexto científico de México.

Este año ajustamos nuestras cuotas de inscripción y simplificamos las categorías a fin de facilitar el pago de las mismas. Gracias a los apoyos económicos de sus miembros, la SQM puede desarrollar sus actividades. Se están preparando algunas actividades para ofrecer a los miembros de la SQM sin costo o con costos preferenciales, de las cuales se les informará oportunamente a través de la página web de la SQM. Para aprovechar la ventaja de ser socio y tener un ahorro sustancial en su participación en los congresos de la SQM, le sugerimos que realice su pago de cuota anual e inscripción al congreso a más tardar el mes de mayo de 2015.

Nuestras cuotas de inscripción a la SQM para el 2015 son las siguientes:

Categorías de asociados	Vigente hasta mayo 2015	A partir de 1 de junio de 2015
Profesionales	\$1,500.00	\$1,800.00
Estudiantes de posgrado	\$1,200.00	\$1,400.00
Estudiantes de licenciatura	\$ 800.00	\$1,000.00

El pago de la membresía no considera el envío de la revista impresa; si estás interesado en recibir el JMCS impreso deberás agregar a tu cuota \$200.00 pesos con lo cual recibirás los cuatro números de la revista.

Como en años anteriores, estamos convocando a empresas y personas que deseen apoyar la operación de la Sociedad como patrocinadores. Éstas son las categorías y montos sugeridos.

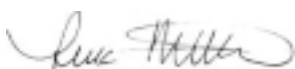
Categorías de patrocinadores	Aportaciones
Argentum	\$5,000.00
Aurum	\$10,000.00
Platinum	\$20,000.00 en adelante

Cuotas de inscripción a los Congresos de Química, Querétaro 2015

Con la intención de que tengan oportunidad de programar su asistencia al 50° Congreso Mexicano de Química y el 34° Congreso Nacional de Educación Química a celebrarse del 7 al 10 de octubre en Querétaro, a continuación pueden revisar las cuotas que estarán vigentes hasta el 30 de mayo de 2015. A partir del 1 de junio las cuotas aumentan 500 pesos en todas las categorías.

Categoría	Cuota de inscripción hasta mayo 2015	A partir de 1 de junio de 2015
Profesional socio vigente ¹	\$3,000.00	\$3,500.00
Estudiante de posgrado socio vigente ¹	\$2,000.00	\$2,500.00
Estudiante de licenciatura socio vigente ¹	\$1,400.00	\$1,900.00
Profesional no socio	\$5,000.00	\$5,500.00
Estudiante de posgrado no socio	\$3,600.00	\$4,100.00
Estudiante de licenciatura no socio	\$2,600.00	\$3,100.00

¹ Son socios vigentes aquellos que hayan cubierto el costo de su membresía hasta el 30 de mayo de 2015.



Dra. Lena Ruiz Azuara
Presidente de la Sociedad Química de México

50° Aniversario del Congreso Mexicano de Química

Estefanie Luz Ramírez Cruz

El 2015 es un año especial para la Sociedad Química de México: se celebra el quincuagésimo aniversario del Congreso Mexicano de Química. Durante estos años, el congreso ha sido un espacio ideal para el intercambio de conocimientos, tendencias, avances y opiniones entre los científicos mexicanos y del mundo.

El primer Congreso de la Sociedad Química de México se realizó en 1967, en las instalaciones del Instituto Tecnológico de Monterrey y de la Universidad de Nuevo León, con la presentación de 55 trabajos originales y la participación de 456 personas en mesas redondas, conferencias generales y simposios.

A partir de entonces se estableció como un acuerdo que este congreso se realizaría anualmente y la sede se alternaría entre las diferentes ciudades del país, para así dar mayor alcance a sus actividades.

A lo largo de estos 50 años, han sido 20 las entidades del país donde se ha realizado el Congreso Mexicano de Química, es decir, se ha cubierto 62.5% del territorio nacional, procurando siempre la difusión de la química a nivel local y la promoción cultural de las ciudades sede [Figura 1].

Congreso Mexicano de Química			
#	Entidad	Ciudad	Año
5	Nuevo León	Monterrey	1967, 1979, 1983, 1990, 1999
5	Guanajuato	Guanajuato	1976, 1982, 1996, 2013
		Irapuato	1984
5	Quintana Roo	Cancún	1993, 1994, 2002, 2010, 2012
4	Jalisco	Guadalajara	1958, 1968, 2007
		Puerto Vallarta	1992
4	Querétaro	Querétaro	1973, 1988*, 2011, 2015
4	Guerrero	Acapulco	1980
		Ixtapa-Zihuatanejo	1991, 2001, 2003
3	Distrito Federal		1969, 1975, 2006
3	Yucatán	Mérida	1970, 2004, 2014
2	Sinaloa	Cullacán	1971
		Mazatlán	1995
2	Michoacán	Morelia	1972, 2005
2	Baja California	Tijuana	1978, 2008
2	Oaxaca	Oaxaca	1986, 1998
1	Zacatecas	Zacatecas	1974
1	Estado de México	Toluca	1977
1	Morelos	Cuernavaca	1981
1	Tlaxcala	Tlaxcala	1985
1	Veracruz	Veracruz	1987
1	Aguascalientes	Aguascalientes	1989
1	San Luis Potosí	San Luis Potosí	2000
1	Puebla	Puebla	2009
1	Canadá	Ontario	1988*

Figura 1. Cuadro cronológico del Congreso Mexicano de Química

Actualmente, el Congreso Mexicano de Química incluye diversas actividades en su programa: cursos precongreso, conferencias plenarias, simposios, presentaciones orales, exposición de carteles profesionales, concurso de carteles estudiantiles, mesas redondas, talleres, presentaciones de libros, talleres de divulgación para niños y actividades culturales.

El programa de este año cuenta con la participación de académicos mexicanos con prestigio internacional: los doctores Jorge Peón Peralta, director del Instituto de Química de la UNAM y Luis Arturo Godínez Mora-Tovar, director del Centro de Investigación y Desarrollo Tecnológico en Electroquímica; el doctor Vicente Talanquer Artigas de la Universidad de Arizona; el doctor Alán Aspuru-Guzik de la Universidad de Harvard y la doctora Mónica Lira Cantú del Instituto Catalán de Nanociencia y Nanotecnología. Además, participará como plenarista el doctor Thomas E. Cheatham III de la Universidad de Utah [Figura 2].



Figura 2. Cartel de Congreso Mexicano de Química, 2015

UN POCO DE NÚMEROS

El primer congreso que organizó la Sociedad Química de México se denominó como “Segundo”, ya que en 1967, cuando se invitó a la Sociedad Química de Guadalajara, sus socios comentaron que en 1958 ellos habían realizado el “Congreso Nacional de Química y sus Aplicaciones” [Figura 3].



Figura 3. Cartel de Congreso Mexicano de Química, 1958

Por lo tanto, se decidió que, en recuerdo y honor de aquel congreso, se llamaría al nuevo II Congreso de Química Pura y Aplicada, contribuyendo así al fortalecimiento del espíritu de grupo y a la creación de una conciencia histórica de los profesionales de la química.

EXPOQUÍMICA

La primera exposición comercial de química en México, de la que se tiene noticia, fue organizada en 1958 como parte del VII Congreso Latinoamericano de Química, organizado por la Sociedad Química de México. Esta exposición se realizó en las instalaciones del Auditorio Nacional y se le llamó Primera Exposición Internacional Química en México.

Rafael Illescas Frisbie fue el presidente del Comité Organizador de este evento, el cual, según su reglamento de operación, representó “una oportunidad excepcional de difundir entre el pueblo latinoamericano y muy especialmente entre el mexicano el conocimiento de las técnicas empleadas por los químicos y los beneficios que esta ciencia está reportando al hombre”. Por esa razón, el Congreso Mexicano de Química retomó la idea de organizar este tipo de exposiciones.

La Expoquímica se realiza como actividad paralela al Congreso Mexicano de Química para mostrar el desarrollo de equipo y materiales de interés para los químicos, útiles tanto en la docencia como en la investigación. Acuden a ella empresas, industrias, universidades y editoriales del ramo, ofreciendo nuevos productos, equipos, métodos y capacitación. Las universidades, por su parte, ofrecen información acerca de las licenciaturas, especialidades y posgrados con los que cuentan, además de enterar sobre programas de becas, intercambios estudiantiles y de investigación y actividades extracurriculares. Las editoriales ofrecen nuevas publicaciones sobre temas científicos y en este marco realizan presentaciones de libros.



Figura 4. Participantes del Congreso Mexicano de Química, 1967



Figura 5. *Expoquímica*



Figura 6. *Congreso Mexicano de Química, Yucatán, 2014*

CONCURSO NACIONAL DE CARTELES ESTUDIANTILES

Con el propósito de fomentar la participación de los estudiantes de ciencias químicas, el Congreso Mexicano de Química convoca cada año a estudiantes universitarios para participar en el Concurso Nacional de Carteles Estudiantiles, cuyo objetivo es reconocer y estimular el esfuerzo de los estudiantes de química por medio de la presentación de carteles científicos que describan en forma gráfica un trabajo de investigación.

Durante el congreso se exponen los carteles presentados por sus autores, lo que permite evaluar la originalidad, creatividad y el enfoque de sus trabajos.

Participan en el concurso estudiantes de nivel licenciatura de las diferentes universidades del país en dos categorías: a) estudiantes de primero hasta 7° semestre, y b) estudiantes de 8° y 9° semestres o en proceso de titulación. Los trabajos son evaluados por especialistas de cada área y los ganadores reciben un diploma y un reconocimiento económico.

PLATAFORMA DE DIFUSIÓN

El Congreso Mexicano de Química también es considerado como un medio de difusión para dar a conocer a la comunidad científica y a la sociedad en general el trabajo que se realiza en el país y en el mundo en Ciencias Químicas.

Desde 1990 cada año, durante el congreso, se realiza la ceremonia de entrega del Premio Nacional de Química “Andrés Manuel del Río”, que rinde homenaje a los profesionales que contribuyen de manera notable al avance general de conocimiento en el ejercicio de la profesión química.

A partir de 2009 se ha entregado el Premio de la Sociedad Química de México en honor al Dr. Mario J. Molina, que reconoce bianualmente la trayectoria de los profesionistas de la química en aspectos de investigación, docencia, divulgación científica y desarrollo de la química en el país.

También se entrega el Premio a las Mejores Tesis de Licenciatura, Maestría y Doctorado en Ciencias Química, con el propósito de estimular a los futuros profesionales de la química al premiar los mejores trabajos de tesis.

En todos los casos, los galardonados se presentan en conferencia para conversar acerca de su trayectoria profesional o para presentar el trabajo de tesis con el que obtuvieron alguno de los premios.

ACTIVIDADES DE DIVULGACIÓN DE LAS CIENCIAS QUÍMICAS

Una de las actividades que ha resaltado por su impacto en el público es la exhibición de la Tabla Periódica Monumental, la cual está construida con cubos de 1m³. Fue diseñada en 2011 como parte de las celebraciones del Año Internacional de la Química por iniciativa de la Sección Valle de México de la Sociedad Química de México.



Figura 7. Congreso Mexicano de Química, Quintana Roo, 2012

Este proyecto tiene el objetivo de promover la enseñanza y el aprendizaje de la química mediante su exhibición en plazas públicas, universidades y otros centros educativos.

El contenido de cada una de las caras de los cubos pretende favorecer el conocimiento de los elementos químicos, los aspectos históricos sobre su descubrimiento y aislamiento, sus propiedades fisicoquímicas, sus usos y aplicaciones en la vida diaria y su presencia en la naturaleza, así como en el cuerpo humano.

En el Congreso Mexicano de Química, la Tabla Periódica Monumental se ha presentado en diferentes ocasiones: en 2012 en la Plaza Reforma en Cancún, Quintana Roo y en 2013 en la Plaza de las Ranas en Guanajuato, Guanajuato.

Este año se presentará en las instalaciones del Centro Educativo y Cultural del Estado de Querétaro (CECEQ) "Manuel Gómez Morín", recinto público que será la sede del 50° Congreso Mexicano de Química y 34° Congreso Nacional de Educación Química.

Además, como parte de las actividades del 50 aniversario del Congreso Mexicano de Química, la Sociedad Química de México y la Universidad Autónoma de Querétaro han programado recorridos guiados que brindarán a los visitantes una explicación didáctica y recreativa de la Tabla Periódica.

Otras actividades conmemorativas serán los talleres dirigidos a estudiantes de diferentes niveles educativos y para el público en general denominados Festival de Química, organizados en colaboración con la American Chemical Society.

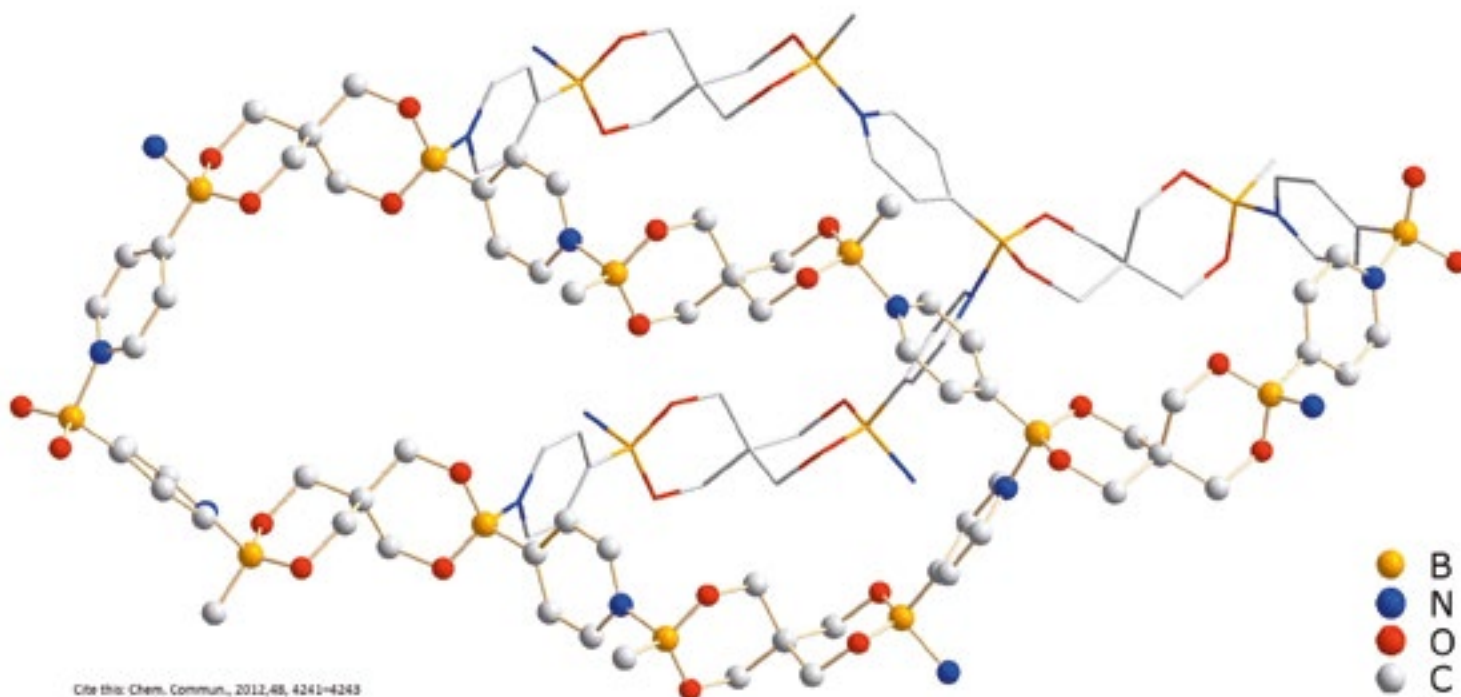
De esta manera, se hace evidente el imprescindible papel que desempeña el Congreso Mexicano de Química en la difusión de conocimientos en el público especializado y en la sociedad en general, pues en él se propician las relaciones entre los diferentes sectores de la química, se intercambian experiencias y se presenta la posibilidad de crear nuevos grupos de trabajo.

Sin duda, podemos asegurar que hoy en día el Congreso Mexicano de Química se define como un espacio comprometido con los científicos mexicanos para fomentar el trabajo colaborativo y, a su vez, el desarrollo de las ciencias químicas en nuestro país.

Año Internacional de la Cristalografía

El mundo de los cristales es, como todo el universo, bello y, sin duda alguna, de una perfección que fácilmente se entiende, atrae nuestra atención y entra por nuestros ojos. Esta belleza conquistó a un número de curiosos e investigadores de todos los tiempos, cautivados por la contemplación de minerales cristalizados. Esta fascinación les llevó a tratar de comprender qué tipo de orden es necesario para que un cristal tenga existencia. De este estudio nació en el transcurso de los tiempos una ciencia basada en la investigación del orden y de la simetría, la cristalografía, que se dedica al análisis de las estructuras cristalinas y las propiedades, a veces mágicas, de los cristales.

La Asamblea General de Naciones Unidas proclamó 2014 el Año Internacional de la Cristalografía, IYCr2014, conmemorando de esta manera no sólo el centenario de la difracción de rayos X como herramienta para el estudio de la materia cristalina, sino también el 400 aniversario de la observación de simetría en los cristales de hielo (Kepler, 1611), que dio comienzo al estudio profundo de la simetría en los materiales. Entre otros puntos, la resolución reconoce que la comprensión material de nuestro mundo se debe en particular a esta ciencia y subraya que la enseñanza y aplicación de la misma es fundamental para hacer frente a múltiples desafíos esenciales para el desarrollo de la humanidad





Asamblea General

Distr. general
12 de julio de 2012

Sexagésimo sexto período de sesiones
Tema 14 del programa

Resolución aprobada por la Asamblea General el 3 de julio de 2012

[sin remisión previa a una Comisión Principal (A/66/L.51 y Add.1)]
66/284. Año Internacional de la Cristalografía

La Asamblea General,

Recordando la resolución 1980/67 del Consejo Económico y Social, de 25 de julio de 1980, relativa a los años y aniversarios internacionales, y las resoluciones de la Asamblea General 53/199, de 15 de diciembre de 1998, y 61/185, de 20 de diciembre de 2006, relativas a la proclamación de años internacionales,

Reconociendo que la comprensión que tiene la humanidad de la naturaleza material de nuestro mundo se basa, en particular, en nuestro conocimiento de la cristalografía,

Destacando que la educación en materia de cristalografía y su aplicación son fundamentales para hacer frente a desafíos como las enfermedades y los problemas ambientales, ya que determinan las estructuras proteicas y de moléculas pequeñas utilizadas en el diseño de medicamentos esenciales para la medicina y la salud pública, así como las soluciones para la contaminación de las plantas y del suelo,

Considerando que los efectos de la cristalografía se hacen sentir en todos los aspectos de la vida cotidiana, la concepción de medicamentos modernos, la nanotecnología y la biotecnología, y que en ella se sustenta la creación de todos los materiales nuevos, desde los dentífricos hasta los componentes de aviones,

Considerando también la significación de los logros científicos de la cristalografía, como demuestran los veintitrés Premios Nobel concedidos en esta disciplina, y que la cristalografía sigue siendo un terreno abonado para la investigación fundamental nueva y prometedora,

Considerando además que en 2014 se cumple el centenario del inicio de la cristalografía moderna y de su reconocimiento como el instrumento más poderoso en la determinación estructural de la materia,

Consciente de que 2014 ofrece una oportunidad para promover la colaboración internacional en el marco del 65° aniversario de la fundación de la Unión Internacional de Cristalografía,

Observando que la comunidad cristalográfica de todo el mundo ha acogido favorablemente la idea de que 2014 sea designado Año Internacional de la Cristalografía,

Reconociendo la destacada función rectora de la Unión Internacional de Cristalografía, que es miembro del Consejo Internacional para la Ciencia, en la coordinación y promoción de las actividades cristalográficas a nivel internacional, regional y nacional en todo el mundo,

1. Decide proclamar 2014 Año Internacional de la Cristalografía;
2. Invita a la Organización de las Naciones Unidas para la Educación, la Ciencia y la Cultura a que, teniendo presentes las disposiciones que figuran en el anexo de la resolución 1980/67 del Consejo Económico y Social, facilite la ejecución del Año Internacional de la Cristalografía, en colaboración con los gobiernos, la Unión Internacional de Cristalografía y sus organizaciones asociadas de todo el mundo, las organizaciones competentes del sistema de las Naciones Unidas y el Consejo Internacional para la Ciencia, así como otras organizaciones no gubernamentales competentes, invita también a la Organización de las Naciones Unidas para la Educación, la Ciencia y la Cultura a que la mantenga informada sobre los progresos realizados a este respecto y destaca que el costo de todas las actividades que puedan derivarse de la aplicación de la presente resolución, aparte de las actividades ya abarcadas por el mandato del organismo principal, deberá sufragarse mediante contribuciones voluntarias, incluso del sector privado;
3. Alienta a todos los Estados miembros, al sistema de las Naciones Unidas y a todos los demás agentes a que aprovechen el Año Internacional de la Cristalografía para promover actuaciones a todos los niveles destinadas a aumentar la conciencia del público sobre la importancia de la cristalografía y promover el acceso generalizado a los conocimientos nuevos y a las actividades en el ámbito de la cristalografía.

*121ª sesión plenaria
3 de julio de 2012*

100 años de Difracción. Elementos importantes. Radios iónicos

Gustavo Tavizón*

En ocasión de la celebración del Año Internacional de la Cristalografía en 2014, las más diversas organizaciones editoriales convocaron a realizar trabajos y reflexiones sobre la trascendencia del fenómeno de la difracción en las disciplinas más cercanas a la física y la química. La revista *Nature*, una de las publicaciones periódicas más importantes del orbe, dedicó en agosto un fascículo especial, *Nature Milestones*, en el que los editores de la revista refieren 25 acontecimientos significativos en la historia de la cristalografía [1]. En octubre de ese mismo año, en un trabajo editorial de *Nature*, "The Top 100 Papers", la revista hace una lista de las 100 publicaciones más citadas "de todos los tiempos" [2]. Entre los acontecimientos más importantes que la mencionada publicación reseña [1], destacan: antes de 1912, la periodicidad; en 1912, el experimento de Von Laue; en 1913, la ley de Bragg; en 1949, la difracción de neutrones; en 1953, la estructura molecular de los ácidos ribonucleicos; en 1968, la cristalografía de electrones; en 1969, el método de refinamientos estructurales de Rietveld; en 1984, los cuasicristales y en 2000 la elucidación de estructuras de moléculas complejas a través de pulsos de radiación de muy corta duración, del orden de 10 femtosegundos.

En la edición del 30 octubre de 2014 del artículo de *Nature* puede notarse cómo la lista de las publicaciones más citadas ha estado dominada durante las últimas décadas, por mucho, por los trabajos en bioquímica de proteínas. En lo que refiere a cristalografía, el trabajo más citado es el de G. M. Sheldrick en la revista *Acta Crystallographica*, en el que se reseña el código computacional SHELX para la elucidación de estructuras cristalinas [3]. Este trabajo, además de ser el más referido en las últimas dos décadas, guarda la posición 13 entre los más citados de la literatura científica [2]. En el sitio 22, se encuentra una publicación muy cercana a los químicos inorgánicos de sólidos, en la que Robert D. Shannon compiló de manera exhaustiva una lista de los radios iónicos que muestran los elementos en diferentes compuestos típicamente iónicos [4]. Esta revisión es, sin duda, uno de los trabajos que más ayuda brinda en la comprensión del comportamiento estructural y las propiedades físicas de los sólidos cristalinos (y amorfos).

En la siguiente parte del presente trabajo se exponen algunas de las ideas más importantes que, en relación con la estruc-

tura local de los átomos en sistemas cristalinos, han sido de más ayuda en la comprensión de la estructura de los sólidos. Así, se hace una breve descripción de los trabajos de W. H. Bragg y W. L. Bragg, que condujeron a las primeras ideas sobre los radios atómicos en 1920; se reseñan las aportaciones de Victor Moritz Goldschmidt a la cristalografía; las primeras ideas de Linus Pauling sobre las estructuras de los cristales iónicos; la trascendencia del método de Hugo M. Rietveld en los refinamientos estructurales; y concluye con una descripción de los trabajos de R. D. Shannon y C. T. Prewitt para la determinación de los radios iónicos y los radios cristalinos. En cada uno de los casos se comenta el impacto de sus trabajos y la manera en la que éstos se han traducido en "el número de citas" en la literatura científica, según da cuenta Google Scholar (<http://scholar.google.com/>).

a) William Henry Bragg y William Lawrence Bragg

Poco antes de abril de 1912, Max von Laue y Paul Peter Ewald discutían sobre la propagación de la luz en los cristales. Es generalmente aceptado que éste fue el debate que condujo a Von Laue a utilizar los rayos X, descubiertos por Wilhelm Conrad Röntgen 17 años antes, para hacer los primeros experimentos de difracción sobre un cristal de blenda de zinc (ZnS). A partir de este momento los experimentos de difracción de rayos X en cristales han permitido dilucidar la estructura interna de los más variados tipos de cristales, entre ellos de minerales, compuestos orgánicos e inorgánicos y moléculas de interés en la biología como son las proteínas y los ácidos nucleicos. A partir de 1912, poco tiempo después del reporte científico de Von Laue, William Henry Bragg y William Lawrence Bragg, padre e hijo, hicieron contribuciones muy importantes para la determinación de las estructuras cristalinas de muchos compuestos, entre los que están la sal común (NaCl) y el diamante. Los Bragg, en el Reino Unido, estaban muy bien preparados para emprender un largo camino en la cristalografía. El padre, W. H. Bragg, había desarrollado los primeros y más exactos espectrómetros de su época; con ellos era capaz de experimentar con rayos X de diferente origen. Su hijo, un joven de apenas 22 años, tenía todo el talento y creatividad para dar un tremendo impulso a la naciente cristalografía de la difracción (ver la figura 1). Por sus contribuciones, Max von Laue recibió en 1914 el premio Nobel de Física, en tanto que W. H. Bragg y W. L. Bragg lo recibieron en 1915.

* Facultad de Química, UNAM.

El trabajo de W. H. Bragg y W. L. Bragg en cristalografía, entre 1913 y 1920, los condujo a la determinación de más de 50 diferentes estructuras cristalinas de compuestos inorgánicos [5]. A partir de éste, W. L. Bragg, en 1920, anunció una relación empírica en la que él consideró una regla aditiva de los radios atómicos a partir de las distancias entre los átomos en un cristal [6]. Bragg consideraba esta regla como una ayuda importante en los análisis de estructuras más complejas, ya que al tratar a las estructuras formadas por esferas rígidamente empaçadas, se establecería un límite para el número de posibles arreglos geométricos. Los valores inicialmente asignados por Bragg para Mg y O, a partir de los datos de distancias interatómicas en MgO, fueron Mg(1.42Å) y O(0.65Å), para dar una distancia interatómica de 2.07Å. Los valores más aceptados ahora son Mg²⁺(0.72Å) y O²⁻(1.40Å) para sumar 2.12 Å, que se compara muy bien con el valor experimental de 2.11Å para la celda del tipo halita de MgO [5, 7].

De acuerdo con Google Scholar, los artículos científicos de W. H. Bragg y W. L. Bragg, publicados entre 1913 y 1930, que más han trascendido en términos del número de citas, son "The Reflection of X-rays by Crystals" [8] con 497 citas; "The structure of some crystals as indicated by their diffraction of X-rays" [9] con 305 citas; "The analysis of crystals by the X-ray spectrometer" [10] con 204 citas; "The structure of the diamond" [11] con 193 citas, y así hasta referir otros trabajos con menos citas. El primer trabajo que W. L. Bragg publicó en *Nature*, "The Specular Reflection of X-rays" [12] alcanza un centenar de citas enumeradas por Google Scholar. Más adelante, al revisar algunas contribuciones importantes en cristalografía, se dará una visión particular sobre las citas y sus números.

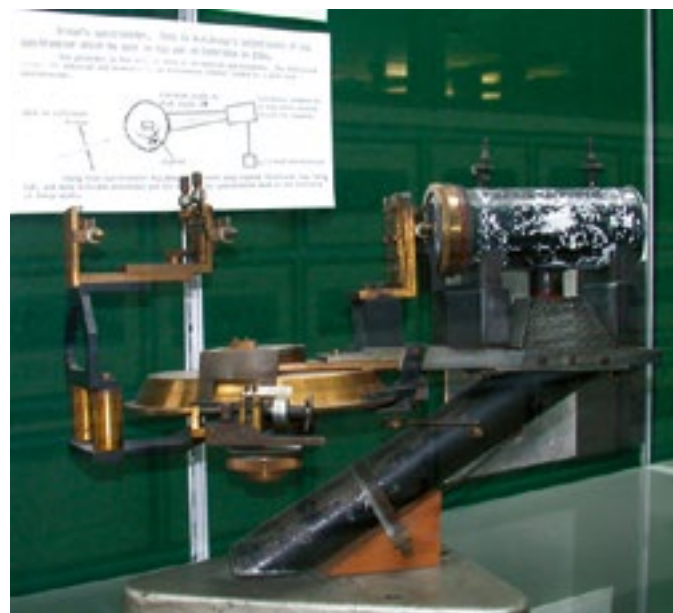


Figura 1

b) Victor Moritz Goldschmidt (1888-1947)

Se adjudica a V. M. Goldschmidt el haber establecido por primera vez "Las leyes de la cristalquímica" en 1926. En uno de

sus primeros trabajos [13] introduce la idea del cociente de radios iónicos como una explicación de los diferentes números de coordinación en los compuestos iónicos y como una extensión de las ideas de Alfred Werner en los complejos de coordinación [5]. Los trabajos iniciales de Goldschmidt se desarrollan a partir de 1917, cuando él dirige el Norwegian Raw Materials Laboratory y entre sus logros está el haber colectado con su grupo de trabajo alrededor de 1,300 patrones de difracción de rayos X que, entre otras cosas, le permitieron describir 192 estructuras cristalinas [5, 14]. Goldschmidt también reconoce la existencia de la contracción lantánida (1925); la primera clasificación de radios atómicos y iónicos y su dependencia con el número de coordinación (1926) [15]; los factores de tolerancia y estabilidad de iones en estructuras complejas (1926). Es autor también de las primeras reglas para la formación de soluciones sólidas [16] y de la primera clasificación geoquímica de los elementos (ver la figura 2): litófilos, siderófilos, calcófilos, atmófilos [17]. V. M. Goldschmidt es considerado el fundador de la geoquímica moderna.

Entre los trabajos de Goldschmidt que Google Scholar tiene registrados están: "Geochemistry" [18] con 1,729 citas, "The Principles of Distribution of Chemical Elements in Minerals and Rocks" [16] con 645, y "Die geseetze der krystallochemie" [19] con 419, entre otros. Una excelente nota biográfica de la vida de este excepcional geoquímico, cuya carrera científica fue muy trastocada por la persecución nazi se puede encontrar en la referencia 14.

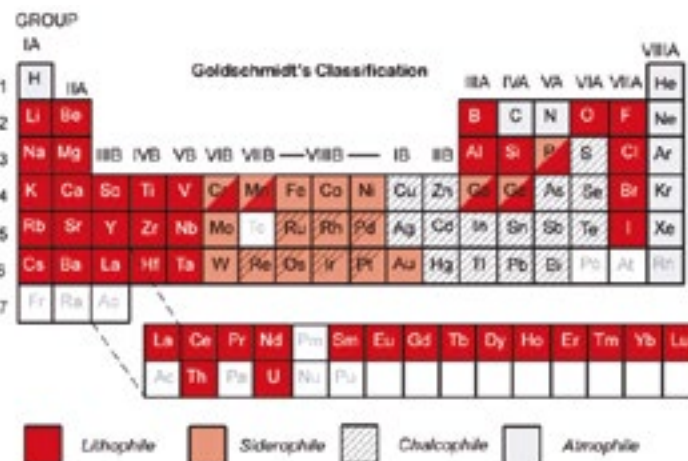


Figura 2

c) Linus C. Pauling (1901-1994)

Una de las carreras científicas más impresionantes, por la magnitud de sus aportaciones a la química es, sin duda, la de Linus Carl Pauling. En lo que se refiere al presente trabajo, el equipo de difracción que el mismo Pauling construyó para sus investigaciones (bajo la dirección del profesor Roscoe Gilkey Dickinson, del Gates and Crellin Laboratories of Chemistry, del California

Institute of Technology, que recientemente había fundado el profesor Arthur Amos Noyes), data de 1923 (Pauling obtuvo su doctorado en 1925 con destacadas investigaciones en cristalografía). En el año de 1925 este equipo estaba en pleno funcionamiento y proporcionaba a Pauling los datos necesarios para hacer importantes contribuciones (ver la figura 3). La formación de Pauling en cristalografía tenía la influencia directa de Ralph G. W. Wyckoff, quien poco tiempo antes había enseñado a Dickinson las formalidades del análisis cristalográfico, y éste, a su vez, condujo a Pauling por un camino muy exitoso en el análisis de estructuras cristalinas determinadas por difracción de rayos X [20].

En 1927 L. Pauling, durante una estancia en Europa, en la que tuvo encuentros muy importantes con los grupos de investigación de E. Schrödinger, A. Sommerferld, N. Bohr, W. H. Bragg y W. L. Bragg, envía para su publicación el trabajo "The sizes of ions and the structure of ionic crystals" [21]. En este trabajo Pauling ponía de manifiesto dos de las disciplinas que le eran muy familiares: la cristalografía y la química cuántica. A partir de pocos datos experimentales —muy confiables— sobre los radios iónicos de cationes alcalinos y alcalinotérreos, los radios iónicos empíricos obtenidos por J. A. Wastjerna, el tratamiento de Born y Landé para la repulsión interatómica y con la plena convicción del buen funcionamiento de las ideas contenidas en el modelo de la carga nuclear efectiva y las constantes de apantallamiento, Pauling consigue construir una robusta tabla de radios atómicos y iónicos, que además sería de una gran ayuda en los trabajos que él mismo desarrollaba.

Al poco tiempo, en 1928, Pauling publica "The principles determining the structure of complex ionic crystals" [22], en el que propone un conjunto de cinco reglas empíricas con las que él consigue dar una explicación congruente sobre la coordinación y las geometrías locales de la mayoría de los sistemas cristalinos conocidos entonces. Estas cinco reglas son, a la fecha, el punto de partida para el análisis más inmediato de los sólidos iónicos y se conocen como "las reglas de Pauling": 1) *Regla del cociente de radios*. El número de coordinación (de aniones rodeando a un catión) está determinado por el cociente de sus radios, r_+/r_- ; 2) *Regla de la valencia electrostática*. La valencia de un anión (catión), en una estructura iónica estable, tiende a compensar las fuerzas de los enlaces electrostáticos, tomando en cuenta a los cationes (aniones) en el centro de los poliedros de los que el anión (catión) es un vértice; 3) *Regla de enlaces entre poliedros*. Los poliedros que se forman con aniones rodeando a cationes, pueden compartir vértices, aristas o caras; el mayor costo energético se presenta en la compartición de caras, luego de aristas y finalmente de vértices; el costo energético será mayor, mientras mayor sea la carga del catión al centro del poliedro; 4) *Regla de la valencia y el número de coordinación*. En una estructura cristalina que contiene varios cationes, aquellos con mayor valencia y menor número de coordinación tienden a no compartir

elementos de sus poliedros de coordinación; 5) *Regla de la parsimonia*. Hay un número pequeño de sitios en un cristal para cationes y aniones. Cuando en un cristal existan sitios tetraédricos, octaédricos, etc., el número de sitios distintos será mínimo, aunque un mismo sitio pueda ser ocupado por diferentes elementos.



Figura 3

Pauling es uno de los químicos que más ha influido en esta ciencia en los últimos tiempos. Su obra más citada es "The Nature of the Chemical Bond" [23] para la que Google Scholar registra 26,054 citas concedidas a un número muy grande de ediciones de esta obra; luego aparece "The structure of proteins: two hydrogen-bonded helical configurations of the polypeptide chain", con 2,199 citas; en tercer lugar, otro libro, "Introduction to Quantum Mechanics with Applications to Chemistry", con 1,964 citas. Pauling es uno de los químicos más citados en la literatura científica y acumula alrededor de 80,000 citas. El trabajo que atrae nuestra atención refiere a la geometría local de los sistemas iónicos [22] y la determinación de los radios iónicos [21], que acumulan 1,129 y 384 citas respectivamente.

d) Hugo M. Rietveld (1932)

Los experimentos seminales de difracción de M. von Laue y W. H. Bragg y W. L. Bragg, que dieron origen a la cristalografía moderna, fueron todos realizados en muestras de cristal único (monocristal); no fue sino hasta los años de 1916-1917, cuando Paul Scherrer (estudiante) y Peter Debye (profesor), e independientemente Albert W. Hull, consiguieron realizar los primeros experimentos de difracción de un haz monocromático de rayos X sobre muestras policristalinas (Scherrer y Debye en LiF, y Hull en polvo de Fe) [24]. Tres décadas después se consiguió observar por primera vez la difracción de neutrones también en muestras policristalinas. La metodología de difracción de rayos X de muestras policristalinas tenía como primera ventaja el no necesitar que la muestra fuera un cristal único; la primera y más importante desventaja tenía que ver con lo complicado que se hacía resolver la estructura de un compuesto apenas complejo. La presencia de otras fases cristalinas, cuyas reflexiones pudieran traslaparse, diferente tamaño de grano y de cristalita, orientaciones preferentes de los cristales, diferente cristalinidad de muestras, además de dificultades asociadas a la geometría del

experimento y particularidades del detector, hacían que la resolución de estructuras cristalinas mediante la difracción de polvos estuviera limitada a los cristales poco complejos y de alta simetría. La Netherlands Energy Research Foundation encargó a Hugo M. Rietveld que se dedicara a develar la estructura de posibles combustibles para reactores nucleares (cuyos compuestos suelen ser complejos y sólo existen en forma de polvos). Rietveld, que tenía experiencia en la simulación por computadora de los patrones de difracción de muestras monocristalinas, era el más indicado para ese encargo. Los parámetros que tenía por suministrar eran pocos inicialmente: posición, ancho e intensidad de las reflexiones y una expresión matemática para la base del patrón de difracción (fondo); después de esto, un tratamiento por mínimos cuadrados le permitía la obtención de un conjunto de parámetros para conseguir un buen ajuste entre el patrón observado y el calculado. El método de Rietveld de refinamiento estructural, fue originalmente concebido en 1967 para difracción con neutrones, y su versión para rayos X apareció una década después. Debe señalarse que su evolución y alcances han estado muy ligados al desarrollo y acceso a los equipos de cómputo. El método de Rietveld es ahora ampliamente usado en metalurgia, mineralogía, ciencias forenses, arqueología, física del estado sólido, biología, farmacia y puede proporcionar información cuantitativa en el análisis de fases y la distribución de defectos y tensiones en un sólido cristalino. Los recientes análisis geoquímicos realizados por “Curiosity” en la superficie de Marte, contaron con los criterios de la metodología de Rietveld [1].

El número de veces que en las publicaciones científicas aparece “método de Rietveld” puede verse en la Figura 4. Con mucho, los trabajos más citados de Rietveld son aquellos en los que se define su metodología: “Line profiles of neutron powder-diffraction peaks for structure refinement” de 1967, con 2,196 citas, y “A profile refinement method for nuclear and magnetic structures” de 1969, con 10,290 citas [25, 26].

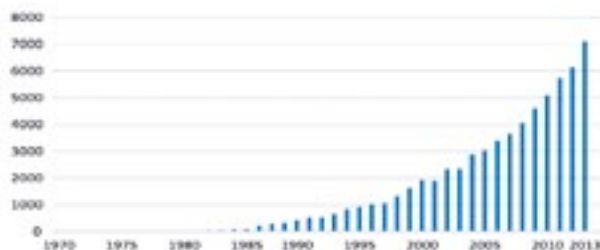


Figura 4

e) Robert D. Shannon y Charles T. Prewitt

El radio iónico de un elemento no puede considerarse como una propiedad fija, ésta más bien depende de la carga del ion, de su número de coordinación y del estado de espín del ion. En 1969, R. D. Shannon y C. T. Prewitt [7], sobre la base de alrededor de 1,000 compuestos típicamente iónicos (óxidos y fluoruros), presentaron un conjunto de radios iónicos efectivos y radios cristalinos para la mayoría de los elementos de la

tabla periódica. En el conjunto de radios iónicos efectivos, y como una extensión de la metodología de Goldschmidt, Shannon y Prewitt toman como base el radio del ion oxígeno en coordinación (VI), $r(\text{VI}\text{O}^{2-})=1.40\text{Å}$, y para los radios cristalinos, el radio del ion fluoruro, $r(\text{VI}\text{F})=1.39\text{Å}$. En el conjunto de radios iónicos efectivos, que tiene un origen predominantemente empírico, se incluyen efectos de covalencia en los enlaces metal-oxígeno y metal-flúor. En 1976, R. D. Shannon hace una revisión de este trabajo en la que incluye nueva información estructural, nuevos compuestos, y considera la presencia de distorsiones estructurales [4]. La información contenida en este conjunto de radios ha sido, desde su publicación, un criterio estructural muy importante en los reportes de investigación en sólidos inorgánicos. El número de veces que los trabajos de R. D. Shannon han sido citados en la literatura científica, según Google Scholar son: 32,285 para “Revised values of effective ionic radii” de 1976, y 6,615 para “Effective ionic radii in oxides and fluorides” de 1969. La revista *Nature* (con la base de datos de Thomson Reuter’s Web of Science) en “The Top 100 Papers” ubica a la publicación de Shannon en el lugar 22, dentro de las publicaciones más citadas desde 1900 a la fecha; Google Scholar la ubica en el lugar 100, y considerando que ésta es una versión revisada del trabajo con C. T. Prewitt, si se suman las citas estaría en el lugar 63.

La idea de medir la trascendencia de una contribución científica a partir del número de citas no toma en cuenta una consideración, que parece estar clara en el caso de H. Rietveld: hay autores que son considerados “patrimonio” de la disciplina en cuestión, y la cita es omitida. Cuando un autor refiere que ha realizado un refinamiento estructural de Rietveld, no concede la cita al trabajo de Hugo Rietveld, como tampoco al mencionar electronegatividades en escala de Pauling se cita el trabajo de Linus Pauling. Lo anterior, con el mejor respeto a las 310,345 citas a la publicación de Oliver H. Lowry y colaboradores [2, 27].

Agradezco al doctor Sylvain Bernès, del Instituto de Física Luis Rivera Terrazas, BUAP, por sus importantes comentarios a este trabajo.

Referencias bibliográficas

1. Montoya, M., Moscatelli, A. & Taroni, A. 2014. Nature Milestones in Crystallography. *Nature*, 17 de julio de 2014.
2. Van Noorden, R., Maher, B. & Nuzzo, R. 2014. The top 100 papers. *Nature* 514, 7524, 550-553.
3. Sheldrick, G. M. 2007. A short history of SHELX. *Acta Crystallogr. Sect. A Found. Crystallogr.* 64, 112-122.
4. Shannon, R. D. 1976. Revised effective ionic radii and systematic studies of interatomic distances in halides and chalcogenides. *Acta Crystallogr. Sect. A* 32, 751-767.
5. Baur, W. H. 2014. One hundred years of inorganic crystal chemistry —A personal view. *Crystallogr. Rev.* 20, 64-116.
6. Bragg, W. L. 1920. XVIII. The arrangement of atoms in crystals. *Philos. Mag. Ser. 6* 40, 169-189.
7. Shannon, R. D. & Prewitt, C. T. 1969. Effective ionic radii in oxides and fluorides. *Acta Crystallogr. Sect. B Struct. Crystallogr. Cryst. Chem.* 25, 925-946.

8. Bragg, W. H. 1913. The Reflection of X-rays by Crystals. (II). Proc. R. Soc. A Math. Phys. Eng. Sci. 89, 246-248.
9. Bragg, W. L. 1913. The Structure of Some Crystals as Indicated by their Diffraction of X-rays. Proc. R. Soc. A Math. Phys. Eng. Sci. 89, 248-277.
10. Bragg, W. L. 1914. The Analysis of Crystals by the X-ray Spectrometer. Proc. R. Soc. A Math. Phys. Eng. Sci. 89, 468-489.
11. Bragg, W. H. & Bragg, W. L. 1913. The Structure of the Diamond. Nature 91, 557-557.
12. Bragg, W. L. 1912. The Specular Reflection of X-rays. Nature 90, 410.
13. Beskow, G. 1924. V. M. Goldschmidt: Geochemische Verteilungsgesetze der Elemente. Geol. Foereningen i Stock. Foerhandlingar. 46, 738-743.
14. Grossman, L. 1993. A giant in geochemistry. Science 261, 114-115.
15. Brown, Jr., G. E. & Calas, G. 2012. Mineral-Aqueous Solution Interfaces and their Impact on the Environment. Geochemical Perspect. 1, 483-742.
16. Goldschmidt, V. 1937. The principles of distribution of chemical elements in minerals and rocks. The seventh Hugo Müller Lecture, delivered before the Chemical Society on March 17th, 1937. J. Chem. Soc., 655-673.
17. White, W. M. 2012. Geochemistry: Portrait of Earth's coming of age. Nature 485, 452-453
18. Goldschmidt, V. M. 1954. Geochemistry, Oxford Univ. Press. London, 730 pp.
19. Goldschmidt, V. M. 1926. Die Gesetze der Krystallochemie. Naturwissenschaften 14, 477-485
20. Dunitz, J. D. 1997. Linus Carl Pauling 1901-1994. Ist. Washington, D. C. National Academies Press.
21. Pauling, L. 1927. The Sizes of ions and the structure of ionic crystals. J. Am. Chem. Soc 49, 765-790.
22. Pauling, L. 1929. The Principles Determining the Structure of Complex Ionic Crystals. J. Am. Chem. Soc. 51, 1010-1026.
23. Pauling, L. 1960. The Nature of the Chemical Bond. 3a. ed. Cornell University Press.
24. Paszkowicz, W. 2006. Ninety Years of Powder Diffraction: from Birth to Maturity. Synchrotron Radiat. Nat. Sci. 5, 115-126.
25. Rietveld, H. 1967. Line profiles of neutron powder-diffraction peaks for structure refinement. Acta Crystallogr. 22, 151-152.
26. Rietveld, H. M. 1969 A profile refinement method for nuclear and magnetic structures. J. Appl. Crystallogr. 2, 65-71
27. Lowry, O. H., Rosebrough, N. J., Farr, A. L. & Randall, R. J. 1951. Protein measurement with the Folin phenol reagent. J. Biol. Chem. 193, 265-275. Consultado en Web of Science el 28 de julio de 2015.

Influencia del ambiente sobre la superficie de los cristales gigantes de selenita de Naica

María Elena Montero-Cabrera¹, Isaí Castillo-Sandoval¹, Luis E. Fuentes-Cobas¹, Hilda E. Esparza-Ponce¹, María Elena Fuentes-Montero², Manuel Reyes-Cortés²

Resumen

La mina de Naica se encuentra a 112 km al sureste de la ciudad de Chihuahua, México. Dentro de este complejo minero se descubrió en 1910 la llamada Cueva de las Espadas, que contenía monocristales de selenita (yeso) de alrededor de un metro de largo. En el año 2000 se descubrió la Cueva de los Cristales Gigantes, donde los cristales alcanzan hasta 11 m de largo y más de uno de diámetro. Estas formaciones han sido estudiadas por diferentes investigadores, quienes han propuesto explicaciones diversas sobre la geología del complejo y el crecimiento de los cristales. El modelo más aceptado actualmente es el de García-Ruiz y colaboradores.

En el presente trabajo se describe el sistema de cuevas de Naica y su formación. Se muestran resultados originales de investigaciones propias relacionadas con los procesos físico-químicos que tienen lugar en la superficie de los cristales de las diferentes cuevas. Se analizaron 13 muestras de la Cueva de las Espadas por diferentes técnicas de microscopía (óptica y electrónica) y técnicas con radiación sincrotrónica. En la superficie de los cristales de yeso se encontraron las fases selenita, hematita, calcopirita, esfalerita, cuprita, galena, alabandita, halita, fluorita y los amorfos constituidos por oxi-hidróxidos de plomo y manganeso. El espesor de las impurezas superficiales varía entre los órdenes de 100 nanómetros y 100 micrómetros, dependiendo de la muestra.

Para explicar las impurezas superficiales se propone un modelo conceptual, donde se concluye que las impurezas superficiales de los cristales de la Cueva de las Espadas no fueron provocadas por la acción del hombre. Éstas fueron depositadas por precipitación desde la solución, posteriormente al crecimiento de los monocristales. El mayor daño que ha provocado el hombre en esta cueva es la depredación por coleccionistas.

Introducción

¿Qué objeto es más común hallar en un museo de historia natural, o de mineralogía, en todo el mundo, que tenga su origen en el estado de Chihuahua? La respuesta es: una muestra de cristales de selenita (yeso) extraídos de la “Cueva de las Espadas” de la mina de Naica (Figura 1).

¹ Centro de Investigación en Materiales Avanzados S.C., Miguel de Cervantes 120, Complejo Industrial Chihuahua, Chihuahua 31136, Chih., México.

² Universidad Autónoma de Chihuahua, Av. Escorza 900, Zona Centro, Chihuahua 31000, Chih., México.



Figura 1. Muestras de cristales de selenita expuestas en el Museo de Historia Natural de la Universidad de Harvard. Obsérvese el tamaño de los cristales, relativo al de las ventanas al fondo.

El yeso, $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, es la variante hidratada del sulfato de calcio. La variante no hidratada se llama anhidrita, y en general coexiste en alguna medida en los lugares donde hay cristales de yeso. La anhidrita se cristaliza en el sistema ortorrómbico. El yeso se cristaliza en el sistema monoclinico. El yeso forma prismas, frecuentemente tiene hábito tabular y es exfoliable. Cuando el yeso forma cristales de dimensiones centimétricas o mayores se le llama selenita, aludiendo a la luz que proyecta la Luna. La selenita tiene baja dureza, de valores entre 1.5 y 2. Se puede rayar en blanco, con una uña. La densidad de la selenita es 2.3 g/cm^3 . La primera descripción científica de la Cueva de las Espadas (mina de Naica, nivel -120 metros) y sus cristales se debe a Foshag [1]. Este autor describe los cristales como maravillosos y transparentes, algunos de 4 o 5 pies de largo, con apariencia de espadas. Los cristales como espadas le dieron nombre a la cueva desde 1910. Sin embargo, quien visita en la actualidad la Cueva de las Espadas se lleva una impresión distinta. Aparte del asombro de ver una multitud tan grande de cristales, el aspecto actual de los cristales es opaco y está maltratado (Figura 2).



Figura 2. Aspecto actual de la Cueva de las Espadas.

Actualmente, la Cueva de las Espadas pasa casi inadvertida, debido al descubrimiento en 2000, en la misma localidad, de tres cuevas con cristales de selenita, la más notable de ellas llamada “Cueva de los Cristales Gigantes” (mina de Naica, nivel -290 metros, Figura 3). Las cuevas siempre se localizan cerca de fracturas y sus paredes están cubiertas por una costra de calcita y celestina con cantidades menores de óxidos de hierro, montmorillonita, clorita e illita. En esta cueva los cristales de selenita son de hasta 11 metros de longitud, sus diámetros alcanzan cerca de un metro y su masa es de varias toneladas. La primera publicación que trató de formular el modo y el tiempo que llevó la formación de estos gigantes cristales es de Marín Herrera *et al.* [2]. Una teoría y demostración más acabada se brinda por el grupo de García Ruiz [3-7].

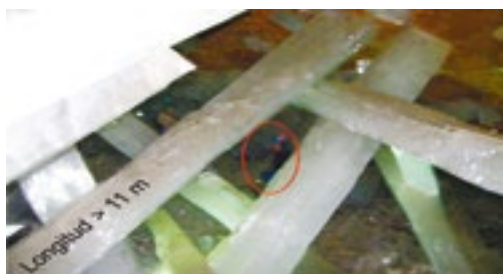


Figura 3. Vista de los megacrystales en la Cueva de los Cristales Gigantes. El óvalo señala una persona en el fondo de la fotografía.

La mina de Naica se encuentra en la sierra del mismo nombre. Esta sierra forma parte de la provincia fisiográfica de Sierras y Cuencas que forma parte de las estribaciones de la Sierra Madre Occidental, en el estado de Chihuahua. Puesta en el contexto socioeconómico, la mina de Naica produce 760,000 toneladas anuales de plomo (la mayor del país y una de las mayores del mundo), y además produce zinc y plata. La separación del mineral se realiza por molienda y flotación en un proceso químico automatizado. El pueblo de Naica tiene una población aproximada de 5,000 habitantes. La estructura de la mina y la localización esquemática de las cuevas de las Espadas y de los Cristales Gigantes se presenta en la figura 4.

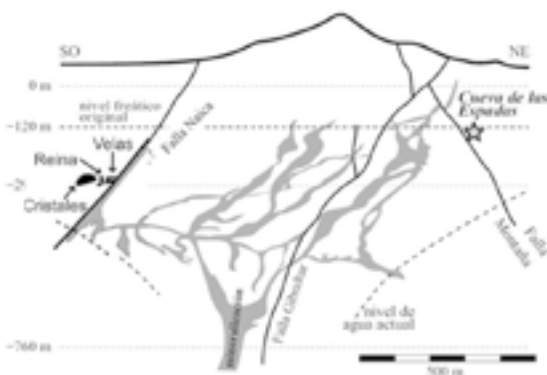


Figura 4. Sección transversal de la mina de Naica. (Tomada de [4].)

Teoría de la formación de los cristales

Un intrusivo a más de 2 km de profundidad ha calentado la zona y ha generado la mineralización de Pb, Ag y Zn. También generó ácido sulfúrico, que disolvió la roca caliza y produjo abundante anhidrita. El agua meteórica comenzó a infiltrarse y a enfriar el ambiente. Una mezcla del agua meteórica, agua de disolución de la anhidrita y de la zona de mineralización, produce una ligerísima sobresaturación. De acuerdo con la teoría de García-Ruiz *et al.*, a partir de la figura 5 se puede observar que a temperaturas de la solución acuosa superiores a 48°C la fase sólida más estable es la anhidrita, y por debajo de esa temperatura precipita el yeso. El enfriamiento muy lento, a lo largo de miles de años, produjo la nucleación del yeso y el posterior crecimiento de los cristales. En la Cueva de las Espadas, más superficial (-120 m), el proceso fue más rápido, lo que explica la gran cantidad de cristales presentes. Pero en la Cueva de los Cristales, a -290 m, el enfriamiento más fue más lento y cerca del equilibrio. El número limitado de megacrystales en la cueva y el gran tamaño alcanzado por los cristales gigantes son indicadores de una muy baja tasa de nucleación durante todo el periodo de crecimiento de los cristales.

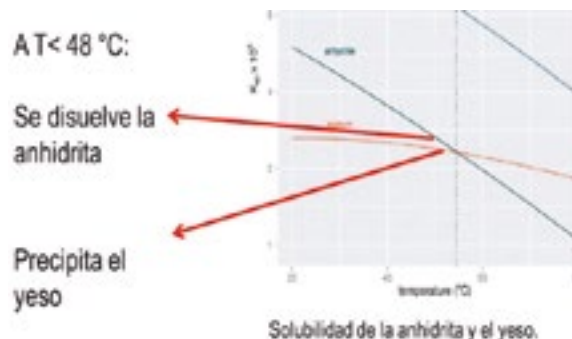


Figura 5. K_{ps} del yeso y la anhidrita en función de la temperatura de la solución acuosa de $CaSO_4$. (Adaptado de [7].)

Pudiera pensarse que los cristales que han tardado un millón de años en formarse no se pueden destruir fácilmente. Pero vale la pena investigar si las condiciones actuales de carencia del agua que sustentó la nucleación y el crecimiento de los cristales provocan cierta inestabilidad mecánica. Igualmente interesa conocer si los gases del ambiente actual pueden provocar deposiciones que hagan opacas las superficies, como sucedió con la Cueva de las Espadas. Los cristales en su estado natural, a temperaturas cercanas a los 50°C y cerca de 100% de humedad, conservan su transparencia. Cuando baja la temperatura por cualquier proceso natural o antropogénico se deposita rocío sobre las paredes de las y aparece la posibilidad de diversos fenómenos negativos. Algunos autores han señalado que puede ocurrir la disolución o la deposición de otros compuestos de calcio sobre la superficie de los cristales [8]. Con esa motivación se ha emprendido el estudio de la influencia del ambiente sobre los cristales gigantes de selenita. En este trabajo se presentan resultados parciales de la investigación.

Estudio de las impurezas superficiales en la Cueva de las Espadas de las Espadas

Materiales y métodos

Se analizaron 13 muestras de la Cueva de las Espadas obtenidas de coleccionistas privados y del Museo de Historia Natural de la Universidad de Harvard, Mass. En la figura 6 se presentan las dos muestras más importantes.

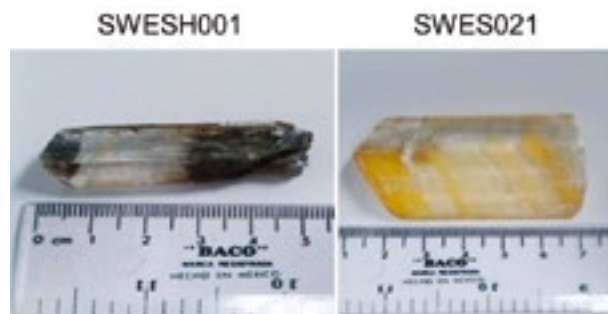


Figura 6. A la izquierda aparece la muestra obtenida del Museo de Historia Natural de la Universidad de Harvard, con impurezas superficiales de color oscuro, y a la derecha una muestra de un coleccionista, donde se aprecian impurezas amarillas, difíciles de identificar por métodos de laboratorio convencional.

En los laboratorios del Centro de Investigación en Materiales Avanzados se aplicaron las técnicas de microscopía óptica, difracción de rayos X de polvo (XRD), microscopía electrónica de barrido combinada con espectroscopía de rayos X en dispersión de energía (SEM-EDS), microscopía confocal láser combinada con microscopio de contraste de interferencia diferencial (LCM-DIM), microscopía electrónica de transmisión modo barrido (STEM), microdifracción en el Microscopio Electrónico de Transmisión (TEM). En el Sincrotrón de la Universidad de Stanford se aplicaron las técnicas de difracción de rayos X con incidencia rasante (GI-XRD), microfluorescencia de rayos X (μ -XRF) y espectroscopía de estructura fina de la absorción de rayos X en la zona cercana del borde de absorción (μ -XANES).

Resultados

En la muestra SWESH01 se encontraron las fases selenita, hematita, calcopirita, esfalerita y cuprita, galena, sulfuro de manganeso, halita y fluorita, y los amorfos constituidos por oxi-hidróxidos de plomo y manganeso. En la muestra SWES021 se determinaron selenita, hematita, calcopirita, esfalerita y cuprita. Las mismas fueron obtenidas con la ayuda de GI-XRD y con los métodos de análisis elemental.

En la Figura 7 se muestra el patrón bidimensional de GI-XRD para el ángulo de incidencia de 2° , interpretado por el programa ANAELU [9]. En la Figura 8 se muestra un mapeo de μ -XRF de una zona en una de las muestras de estudio.



Figura 7. Patrón bidimensional de difracción de rayos X con incidencia rasante de 2° de la muestra SWESH01, obtenido en el Stanford Synchrotron Radiation Lightsource (SSRL), Beamline 11-3. Se muestra la identificación de las reflexiones de yeso y de las impurezas esfalerita (12) y hematita (11 y 15).

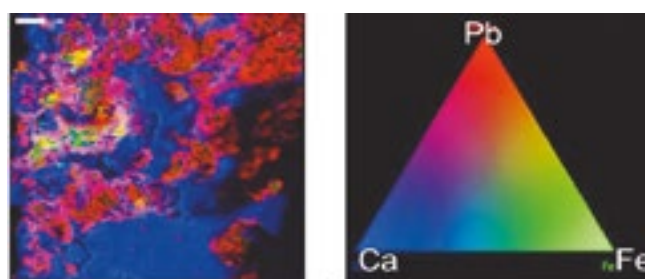


Figura 8. Mapeo e identificación elemental por μ -XRF de una sección de la muestra SWESH01; la barra de escala es de 100 micras. Los análisis se realizaron en el Stanford Synchrotron Radiation Lightsource (SSRL), Beamline 2-3.

Por los métodos de microscopía óptica y electrónica se determinó que el espesor de las impurezas de la muestra SWESH01 es de 50 a 150 micras, mientras que las de la muestra SWES021 es de 125 a 250 nanómetros.

La Tabla I nos permite interpretar el origen de las impurezas determinadas en el presente estudio. Debido a que las fases diferentes al yeso son producto de ambientes reductores de alta temperatura o de la hematita, propia de ambiente oxidante y cualquier temperatura, se sugiere que todas esas fases estaban presentes en la solución-suspensión que dio origen a los cristales, simultáneamente con el calcio y el sulfato.

Sobre la base de los resultados experimentales y los modelos físico-químicos aceptados de precipitación y crecimiento de cristales, se propone el siguiente modelo conceptual: la selenita detiene su crecimiento cuando la concentración de sulfato de calcio en la solución disminuye. A continuación la fase principal que se deposita es la hematita, que está suspendida en la solución. La hematita sirve de matriz para la adsorción de otras fases cristalinas y amorfas.

Tabla I. Características de los ambientes que provocan la presencia de las fases identificadas

Fase	Yeso en mosaico	Hematita	Esfalerita	Galeza	Calcopirita	Alabandita
Fórmula	CaSO ₄ ·2H ₂ O	Fe ₂ O ₃	ZnS	PbS	CuFeS ₂	MnS
Ambiente	oxidante	oxidante	reductor	reductor	reductor	reductor
pH	> 7.8	neutro	neutro- alcalino	neutro- alcalino	neutro- alcalino	neutro- alcalino
Presencia	Fase principal	Principal impureza	frecuente	frecuente	menos frecuente	menos frecuente
Génesis	Nucleación de baja sobre- saturación	Suspendido	Adsorción o suspensión	Adsorción o suspensión	Adsorción o suspensión	Adsorción o suspensión

Los sulfuros de Zn, Cu-Fe, Pb y Mn, presentes en forma suspendida en la solución en menores concentraciones que el CaSO₄ y el Fe₂O₃, se adsorben o precipitan en forma cristalina sobre este último.

La fase amorfa, que contiene PbS, MnS y oxi-hidróxidos de estos metales, se deposita por adsorción sobre la hematita y otras fases policristalinas minoritarias.

Conclusiones

Los resultados encontrados y la interpretación brindada permiten concluir que las impurezas superficiales de los cristales de la Cueva de las Espadas no fueron provocadas por la acción del hombre. Las impurezas fueron depositadas por precipitación o adsorción desde la solución o suspensión donde crecieron los cristales, después de concluir el crecimiento de los monocristales.

Agradecimientos

Los autores desean agradecer al Mineralogical and Geological Museum de la Universidad de Harvard y al Stanford Synchrotron Radiation Lightsource (SSRL) por el apoyo en la obtención y análisis de las muestras. Este estudio ha sido financiado por el proyecto CONACYT 183706. Se agradece a la Empresa Peñoles por apoyo general al proyecto.

Referencias

1. Foshag, W. 1927. *American Mineralogist* 12, 252-256.
2. Marín Herrera, B. R., Vogel Gonzalez, F., Echegoyén Guzman, R. 2006. *Boletín de Mineralogía* 17, 139-148.
3. García-Ruiz, J. M., Villasuso, R., Ayora, C., Canals, A., Otálora, F. 2007. *Geology* 35, 327-330.
4. García Ruiz, J. M., Villasuso, R., Ayora Ibáñez, C., Canals, A., Otalora, F. 2007. *Boletín de la Sociedad Geológica Mexicana*, 59, 63-70.
5. Van Driessche, A. E. S., García-Ruiz, J. M., Delgado-Lopez, J. M., Sasaki, G. 2010. *Crystal Growth & Design*, 10, 3909-3916.
6. Van Driessche, A. E. S., García-Ruiz, J. M., Tsukamoto, K., Patiño-López, L. D., Satoh, H. 2011. *Proceedings of the National Academy of Sciences* 108, 15721-15726.
7. Otalora, F., García-Ruiz, J. 2014. *Chemical Society Reviews* 43, 2013-2026.
8. Forti, P. 2010. *Zeitschrift fur Geomorphologie, Supplementary Issues*, 54, 115-135.
9. Fuentes-Montero, L., Montero-Cabrera, M. E., Fuentes-Cobas, L. 2011. *Journal of Applied Crystallography*, 44, 241-246.

Determinantes estructurales de la oligomerización en proteínas

Alejandra Hernández Santoyo*

Resumen

Una gran cantidad de las proteínas presentes en la naturaleza se encuentran en forma oligomérica o requieren cambiar su estado de oligomerización para cumplir con una función determinada. Este proceso de asociación puede provocar un efecto positivo o negativo en las propiedades de las proteínas. Por un lado, puede regular su función, favorecer su estabilidad y actividad y, por el otro, puede generar proteínas no funcionales y la formación de depósitos en fibras, dando lugar a un gran número de enfermedades degenerativas como Alzheimer, Creutzfeld-Jacob, Parkinson, Huntington, amiloidosis sistémica, diabetes de tipo II, esclerosis lateral amiotrófica y angiopatía cerebral, entre otras. El conocimiento de cómo ocurre este tipo de interacción proteína-proteína nos puede ayudar a encontrar procedimientos que permitan inhibir dicha oligomerización, ya sea mediante modificaciones químicas, mutaciones o por medio de la búsqueda de fármacos o anticuerpos monoclonales específicos que inhiban dicho efecto. Además, inducir este tipo de asociaciones puede generar proteínas muy activas, estables bajo condiciones extremas, o con una mayor especificidad, aspectos importantes para su aplicación biotecnológica. Es muy poco lo que se conoce sobre los mecanismos de oligomerización de proteínas debido a que cada proteína se comporta diferente. Una técnica muy valiosa en el estudio de estos mecanismos a un nivel molecular lo constituye la cristalografía de macromoléculas, en donde a partir de datos de difracción de rayos X es posible obtener la estructura 3D de una proteína. La técnica tiene la ventaja de que podemos analizar oligómeros de gran tamaño.

Introducción

Las proteínas en los sistemas biológicos raramente actúan en forma aislada, por lo que se unen a otras biomoléculas para dar las respuestas celulares específicas. Estas biomoléculas son a menudo otras proteínas, y un número sorprendente de estas asociaciones proteína-proteína intervienen en diversas reacciones en cascada que afectan todos los procesos en una célula. Las proteínas oligoméricas abundan en la naturaleza. Están compuestas por múltiples cadenas polipeptídicas, las cuales pueden ser iguales (proteínas homo oligoméricas) o diferentes (proteínas hetero

oligoméricas). Estudios recientes, estiman que aproximadamente 35% de las proteínas en una célula son oligoméricas, siendo el estado oligomérico promedio el tetramérico [1, 2].

La asociación de proteínas consigo mismas para formar dímeros y oligómeros de orden superior es un fenómeno muy común y puede conferir ventajas estructurales y funcionales a las mismas, incluyendo el aumento en la actividad y estabilidad, el control de la accesibilidad y especificidad de sitios activos. Sin embargo, el aspecto negativo de este proceso ocurre cuando se pierde la actividad y se forman fibras amiloides dando lugar a un gran número de enfermedades degenerativas [3-6]. Se sabe que este tipo de fenómenos puede ocurrir mediante cambios conformacionales muy sutiles que pueden dar lugar a efectos a larga distancia favoreciendo las interacciones β - β originando la formación de fibras amiloides, tal es el caso de la inmunoglobulina 6aJL2 (Figura 1) [7], que es la proteína responsable de la amiloidosis sistémica de cadena ligera. Sin embargo, el cambio conformacional puede ser más drástico creando un fenómeno que se conoce como intercambio de dominios (3D domain Swapping), en donde justamente se intercambia un dominio estructural de un monómero de una proteína con un dominio idéntico de otro monómero, resultando en un oligómero donde cada subunidad contiene los mismos motivos estructurales que el monómero antes del intercambio de los dominios. Se ha sugerido que este mecanismo puede dar lugar a la formación de fibras amiloides [8-10]. Una de las diversas proteínas que presentan este comportamiento es la cistatina C humana. Las propiedades amiloidogénicas de esta proteína se incrementan fuertemente en presencia de la mutante natural L68Q resultando en la enfermedad conocida como angiopatía cerebral amiloide, fatal, que se presenta en adultos jóvenes (Figura 2). Otro mecanismo de oligomerización se observa en la superóxido dismutasa de *Taenia solium* (Figura 3), donde la asociación de los monómeros de la proteína está mediado por la coordinación de iones zinc [11]. En el presente estudio se presentan avances en la investigación de los mecanismos de oligomerización de proteínas.

* Instituto de Química, Universidad Nacional Autónoma de México. Circuito exterior, Ciudad Universitaria. Coyoacán 04510 México, D.F. hersan@unam.mx

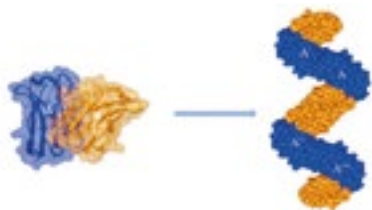


Figura 1. Análisis estructural de la oligomerización de 6aJL2. Se presentan las moléculas relacionadas por simetría que permiten inferir cómo se formaría una fibra amiloide (código PDB 3BDX).



Figura 2. Oligomerización de la cistatina C humana mediante intercambio de dominios. La estructura contiene los elementos de estructura secundaria correctos, pero formados por más de una cadena (código PDB 1TIJ).

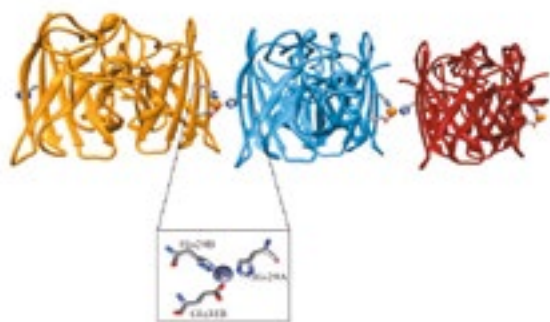


Figura 3. Oligomerización de la superóxido dismutasa de *Taenia solium* mediante la coordinación de iones zinc. Este mecanismo se pudo observar mediante el análisis de las moléculas relacionadas por simetría (código PDB 3MND).

Materiales y métodos

Se seleccionaron proteínas de diferentes fuentes que tienen en común la presencia de fuertes fenómenos de oligomerización. La purificación se realizó utilizando técnicas cromatográficas apropiadas para cada proteína que incluyen cromatografías de afinidad, intercambio iónico y exclusión molecular. El análisis del estado oligomérico se realizó utilizando dispersión dinámica de luz. Para el análisis filtraron las muestras con filtros de 0.22 μm y se utilizó una concentración de proteína de 1 mg/mL. Las proteínas se cristalizaron utilizando la técnica de difusión de vapor en gota colgante [12]. Los datos obtenidos por difracción de rayos X se procesaron con el programa XDS [13] y se escalaron con SCALA [14]. La estructura 3D se determinó por reemplazo molecular y se afinó utilizando el programa PHENIX [15].

Resultados

Se observó que cada proteína presenta un comportamiento diferente cuando se le modifica su estado oligomérico. En el caso de una celulasa purificada del molusco marino *Megathura crenulata* observamos que su actividad se incrementa notablemente cuando forma hexámeros (Figura 4). Por otro lado, la alginasa purificada del mismo organismo presentó un comportamiento similar, sólo que la forma más activa fue el octámero (Figura 5). Además, fue interesante notar que la misma oligomerización favorece la estabilidad térmica de la proteína manteniendo su actividad aun después de incubar por una hora a ebullición. Este comportamiento puede ser el resultado de la asociación de los monómeros de la proteína, que protegen zonas lábiles. A la fecha se está intentando la cristalización de estas proteínas para analizar con mayor detalle estos procesos y poder explicar su comportamiento.

Por otro lado, la lisozima del camarón *Litopenaeus vannamei* se purificó y cristalizó por difusión de vapor en gota colgante. Se observó que es una proteína con una fuerte tendencia a oligomerizar. Al analizar la estructura cristalina observamos que el extremo carboxilo terminal está formado por aminoácidos hidrofóbicos que favorecen la interacción con la misma zona de otros monómeros formando oligómeros que favorecen la formación de un poro que permite que esta lisozima sea capaz de hidrolizar la pared celular de bacterias tanto Gram (+) como (-) (Figura 6).

Finalmente se analizó el efecto de una mutación en la interfase del dímero de la triosafosfato isomerasa de *Trypanosoma brucei*. Esta proteína, vital para la vida, es funcional únicamente en la forma dimérica. Al desestabilizar la interfase, la proteína formó un hexámero de dímeros, perdiendo su actividad y estabilidad, lo que provocó que se agregara y precipitara en periodos de tiempo muy cortos (Figura 7). Es importante señalar que es algo interesante ya que se están tratando de diseñar fármacos contra este tipo de parásitos y este resultado resalta la importancia del aminoácido 104 en la estabilidad de la proteína de este organismo.

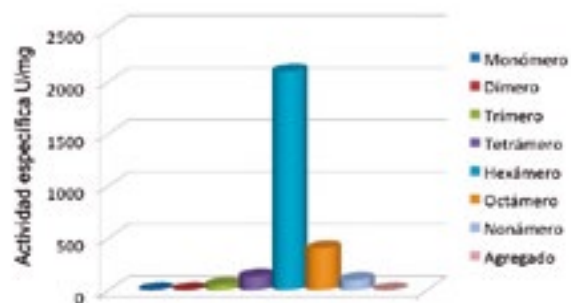


Figura 4. Actividad de una celulasa de *Megathura crenulata* en diferentes estados oligoméricos.

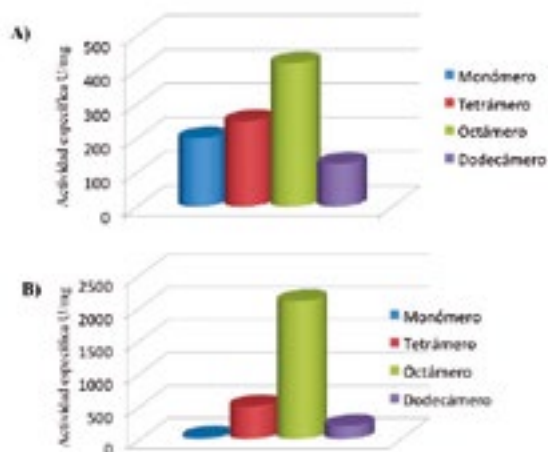


Figura 5. Actividad de una algina del molusco *Megathura crenulata*. (A) En diferentes estados oligoméricos. (B) Después de incubar cada oligómero por una hora a ebullición.

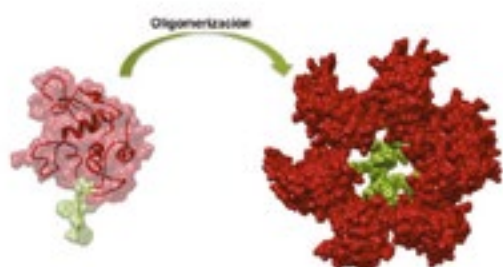


Figura 6. Lisozima de *Litopenaeus vannamei*. Se observa que la oligomerización ocurre por la interacción del extremo carboxilo terminal, que es de naturaleza hidrofóbica.

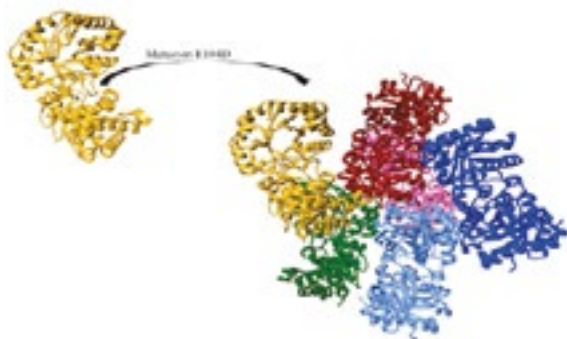


Figura 7. Oligomerización de una triosafosfato isomerasa de *Tripanosoma brucei* inducida por la mutación E104D (4JEQ).

Conclusiones

La difracción de rayos X es una técnica que nos permite analizar a un nivel atómico los procesos de asociación de las proteínas. Cada proteína utiliza mecanismos diferentes para formar oligómeros.

La oligomerización puede conferir efectos positivos en las propiedades de las proteínas, como el aumento en su actividad y estabilidad; sin embargo, también puede dar lugar a moléculas inactivas.

Agradecimientos

Agradezco a la DGAPA-UNAM el apoyo económico IN207013 y al CONACyT el apoyo con el proyecto I66472. Agradezco además al Laboratorio Nacional de Estructura de Macromoléculas del Instituto de Química de la UNAM por su apoyo en la colecta de datos de difracción de rayos X.

Referencias

1. Ali, M.H., and Imperiali, B. 2005. *Bioorg Med Chem.* 13, 5013-20.
2. Marianayagam NJI, Sunde M, Matthews JM. 2004. *Trends Biochem Sci.* 29, 618-25.
3. Yeates, T.O., Padilla, J.E. 2002. *Curr Opin Struct Biol.* 12, 464-70.
4. Goodsell DS, Olson AJ. 2000. *Annu Rev Biophys Biomol Struct.* 29, 105-53.
5. Ponstingl, H., Kabir, T., Gorse, D., Thornton, J.M. 2005. *Prog Biophys. Mol Biol* 89, 9-35.
6. Ross, C.A., Poirier, M.A. 2005. *Nat Rev Mol Cell Biol.* 6, 891-8.
7. Hernández-Santoyo A, del Pozo Yauner L, Fuentes-Silva D, Ortiz E, Rudiño-Piñera E, Sánchez-López R, Horjales E, Becerril B, Rodríguez-Romero A. 2010. *J Mol Biol.* 396, 280-92
8. Janowski R, Kozak M, Jankowska E, Grzonka Z, Grubb A, Abrahamson M, Jaskolski M. 2001. *Nature Struct Biol* 8, 316-320.
9. Jaskolski M. 2001. *Acta Biochim Polon* 48, 807-827.
10. Janowski R, Kozak M, Abrahamson M, Grubb A, Jaskolski M. 2005. *Proteins: Struc func bioinform* 61, 570-578.
11. Hernández-Santoyo A, Landa A, González-Mondragón E, Pedraza-Escalona M, Parra-Unda R, Rodríguez-Romero A. 2011. *FEBS J.* 278, 3308-18.
12. McPherson, A. 2004. *Methods.* 34, 254-265.
13. Kabsch W. 2010. *Acta Crystallogr D Biol Crystallogr.* 66, 125-132.
14. Collaborative Computational Project, Number 4. The CCP4 suite: programs for protein crystallography. (1994) *Acta Crystallogr D Biol Crystallogr.* 50, 760-763.
15. Adams P.D., Afonine P.V., Bunkoczi G, Chen V.B., Davis I.W., Echols N, Headd J.J., Hung L.W., Kapral GJ, Grosse-Kunstleve R.W., McCoy A.J., Moriarty N.W., Oeffner R, Read R.J., Richardson D.C., Richardson J.S., Terwilliger T.C., Zwart P.H. 2010. *Acta crystallogr D, Biol crystallogr.* 66, 213-221.

Calendario de la Sociedad Química de México en conmemoración del “Año Internacional de la Cristalografía”

Estimados miembros de la Sociedad Química de México

Con los mejores deseos para este año 2014, hacemos un reconocimiento a la ONU por decretar el **Año Internacional de la Cristalografía** que coincide con el centenario de uno de los hallazgos más relevantes de la ciencia, la constatación de que los rayos X, descubiertos en 1895 por Wilhelm Conrad Röntgen (1845-1923), se comportaban como ondas electromagnéticas y, lo que fue aún más importante, que éstos interactuaban con los cristales a través del fenómeno denominado difracción, lo que demostró la constitución repetitiva de estos últimos, y se pudo conocer la constitución de los compuestos que formaban el cristal.

Tales descubrimientos (1912), que se debieron al físico alemán y laureado Nobel de Física en 1914, Max von Laue (1879-1960), fueron seguidos por un conjunto de nuevos hallazgos que cambiaron nuestro conocimiento sobre la materia y, por ende, de la historia contemporánea.

Muchos de los científicos que han sido responsables del desarrollo de la cristalografía moderna obtuvieron el Premio Nobel, pero, injustamente, no todos lo fueron. Sin embargo, aun así, la cristalografía ha producido, directa o indirectamente, el mayor número de los laureados (veintiocho) en la historia de estos premios. Muchos de estos grandes personajes han dejado huella imborrable en la historia de la ciencia.

La SQM agradece la colaboración de los colegas que nos enviaron las imágenes que forman parte de este calendario, así como las palabras que a modo de presentación, preparo para nosotros el Dr. José Chávez, presidente de la Sociedad Mexicana de Cristalografía.

¡Muchas gracias!

DRA. LENA RUIZ AZUARA
Presidente en turno de la Sociedad Química de México, A.C.

Presentación

La cristalografía, al igual que el origen de los elementos químicos y su ordenamiento, tanto microscópico como macroscópico, está relacionada con la génesis del cosmos. Desde los primeros intentos por conocer nuestro 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 se ha logrado, en buena medida, gracias a la cristalografía.

Este calendario, que nos muestra importantes facetas de la cristalografía, es un artilugio de una propiedad universal pocas veces aprovechado por el hombre: el tiempo, un ardid de los sabios, poetas, reyes y cautivos, que han querido congelarlo, siempre rebelde, indomable e insolente como el agua en un manantial que fluye por nuestras manos resacas, nuestras mentes desérticas, nuestras bocas anhelantes y sedientas y que somos incapaces de aprender.

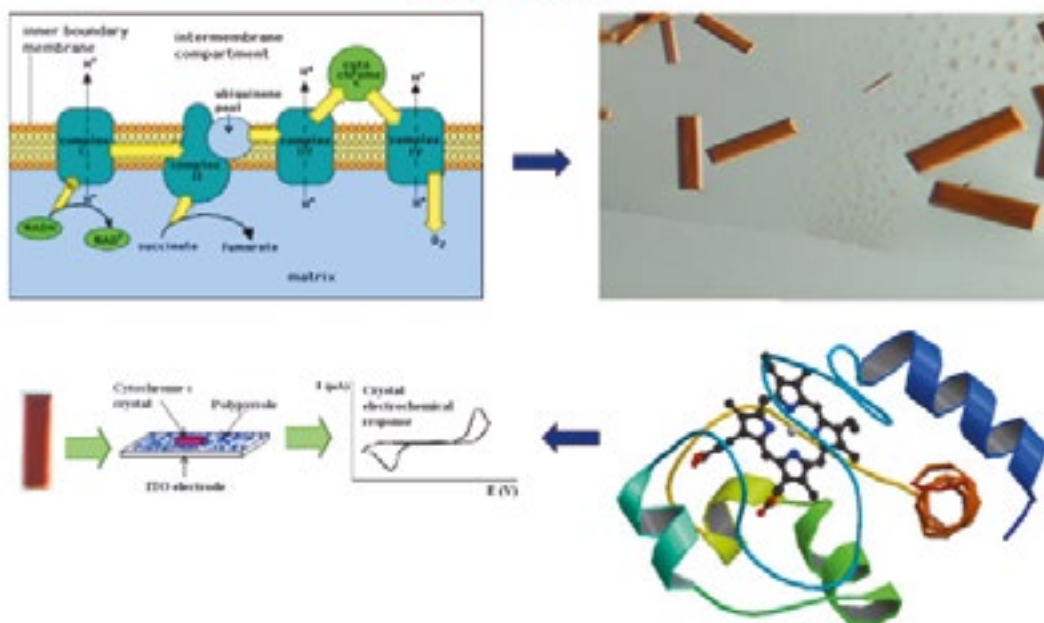
Ese tiempo atrapado en minerales, herramientas y utensilios, en arreglos atómicos y moleculares de seres vivos e inertes testigos de ordenamientos universales, en materiales con memoria que cuentan sus historias y que nos preocupamos y ocupamos por revelar sus secretos y descubrirlos en modelos y estructuras. Tareas cotidianas atemporales.

Además de la trascendencia científica ampliamente reconocida por nosotros hay que concederle a la cristalografía otra gran cualidad: sin jactancia ni soberbia, ha logrado reunir una gran cantidad de especialistas —sin importar género, raza o nacionalidad— de áreas tan diversas como la química, física, ingeniería, ciencia de materiales, biología, genética... Así, les invito a que durante todo el 2014 festejemos a esta importante área del conocimiento que será, además, su año: el “Año Internacional de la Cristalografía”.

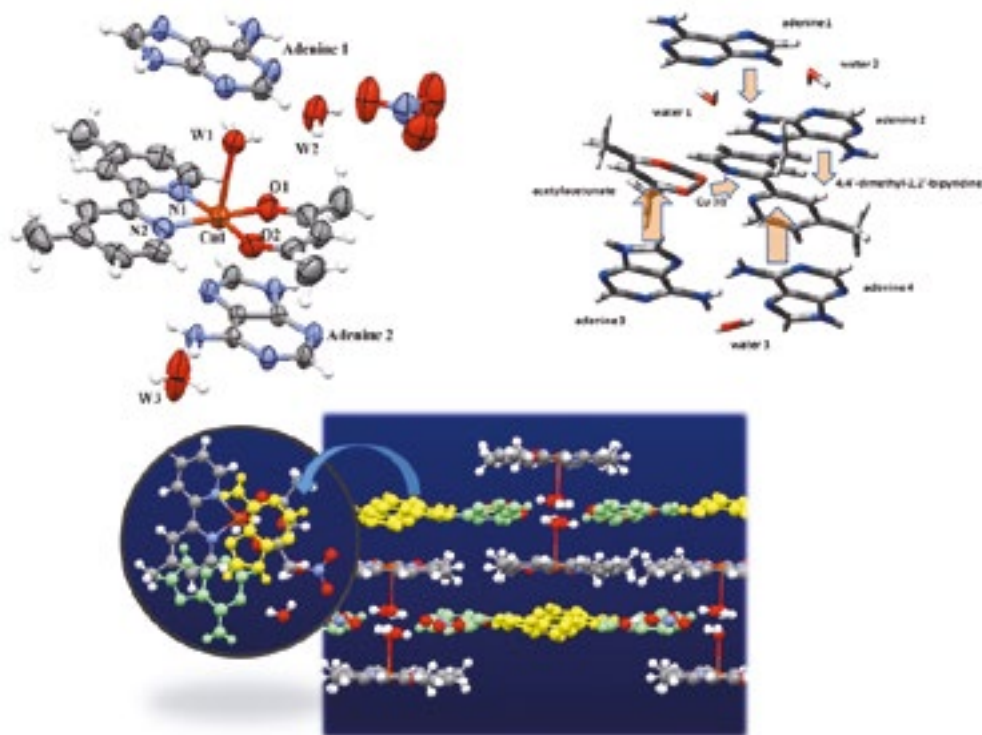
DR. JOSÉ CHÁVEZ
Presidente de la Sociedad Mexicana de Cristalografía

A continuación, se muestran algunas de las imágenes utilizadas en el calendario conmemorativo:

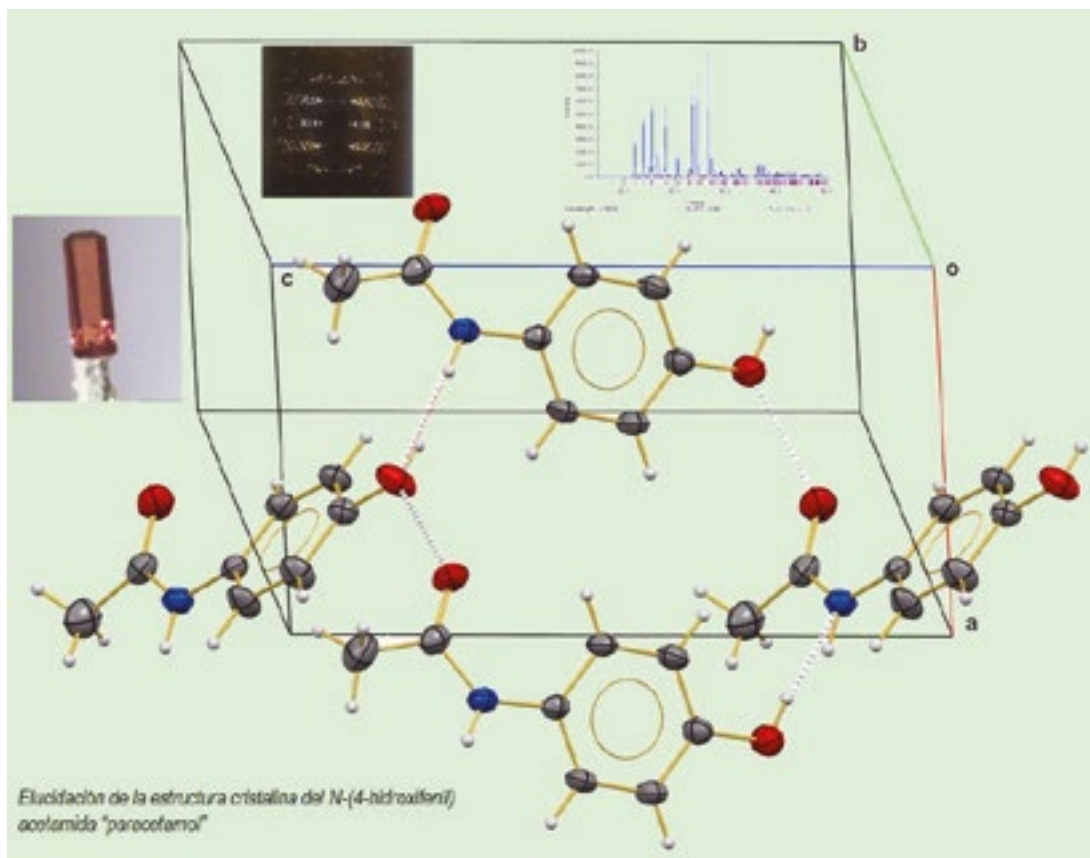
Cytochrome C: naturally-electron transfer biosensor



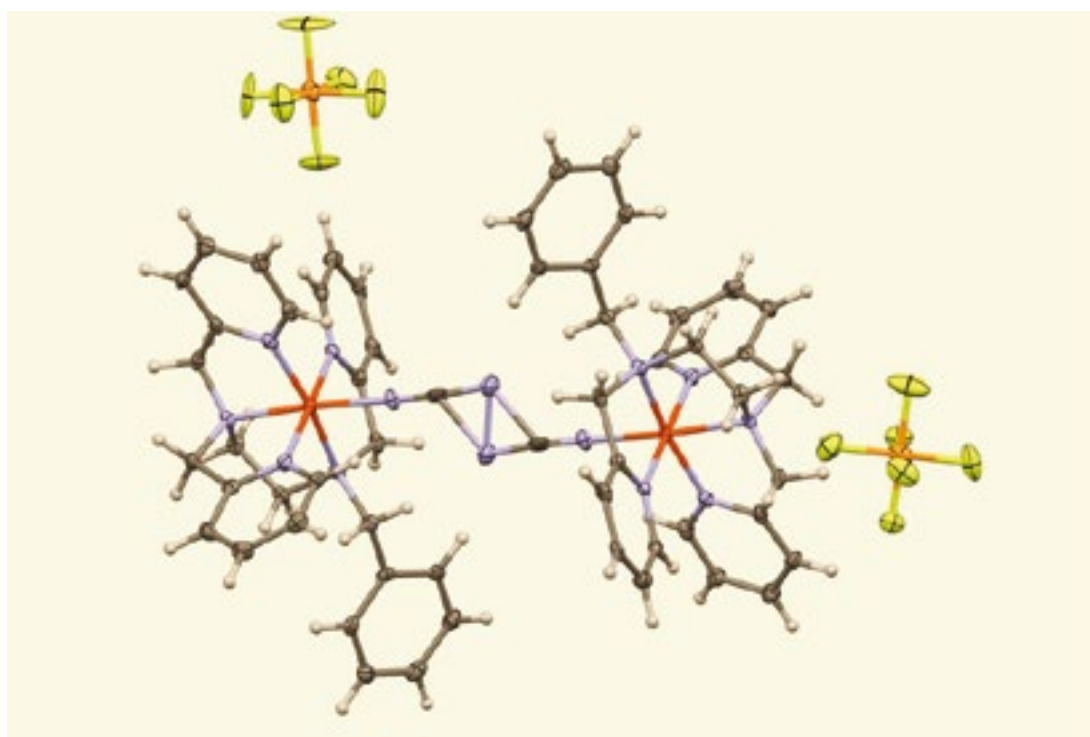
Francisco Acosta, Désir Eid, Liliana Marín-García, Bernardo A. Frontana Uribe, and Abel Moreno. 2007. "From Cytochrome C. Crystals to a Solid-State Electron-Transfer Device". *Crystal Growth and Design* 7, 2187-2191.



Juan Carlos García-Ramos, Araceli Tovar-Tovar, Joseelyne Hernández-Lima, Fernando Cortés-Guzmán, Rafael Moreno-Esparza, Lena Ruiz-Azuara. 2011. A new kind of intermolecular stacking interaction between copper (II) mixed chelate complex (Casiopeína III-ia) and adenine. *Polyhedron* 30, 2691-2703.



M. Flores Álamo, Laboratorio de Rayos X Monocristal, USAI, Facultad de Química-UNAM
Elucidación de la estructura cristalina del N-(4-hidroxifenil) acetamida "paracetamol".



N. Ortega-Villar, A.L. Thompson, M.C. Muñoz, V.M. Ugalde-Saldívar, A.E. Goeta, R. Moreno-Esparza, J.A. 2005.
Real Chemistry an European Journal, 11, 5721.



Se le hace una atenta invitación a participar en nuestros próximos congresos: 50º Congreso Mexicano de Química, 34º Congreso Nacional de Educación Química y en la Expoquímica 2015.

A celebrarse en Santiago de Querétaro, del 7-10 de octubre de 2015.

***Sede:** La Central. Centro Educativo y Cultural del Estado de Querétaro, "Manuel Gómez Morín".*

El Boletín de la Sociedad Química de México es una publicación cuatrimestral que lleva información de calidad a sus socios e instituciones especializadas del sector químico. Por considerarlo de interés de la comunidad química, invita a empresas, universidades y laboratorios a anunciarse en sus páginas.

Si les interesa comuníquese con nosotros a los siguientes teléfonos:

55 5662 6823 • 55 5662 6837

o bien escribámos al siguiente correo electrónico:

soquimex@sqm.org.mx

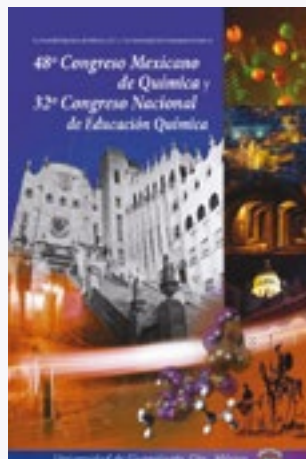


Sociedad Química de México
"La Química nos une"

50° Aniversario del Congreso Mexicano de Química

El Congreso Mexicano de Química propicia el intercambio de conocimientos, tendencias y opiniones de científicos mexicanos. A través de la exposición y discusión de trabajos de los profesionistas de las distintas ramas de la Química y de sus ciencias afines.

El Congreso se realiza cada año desde 1967; la sede se alterna en diferentes ciudades del país para dar mayor alcance a sus actividades.



Actividades del Congreso Mexicano de Química:

- Cursos Pre- Congreso
- Simposios
- Conferencias Plenarias
- Presentaciones orales
- Exposición de carteles profesionales
- Mesas Redondas
- Cursos
- Talleres
- Presentación de libros
- Concurso Nacional de
- Carteles Estudiantiles
- Expoquímica
- Actividades culturales y recreativas

