

¿Cómo aprendimos a «ver» los átomos?



Martín Martínez-Ripoll *

*Departamento de Cristalografía y Biología Estructural
Instituto de Química-Física «Rocasolano», CSIC. Madrid*

Palabras clave

Átomos, cristales, rayos X, química.

Resumen

El átomo es la unidad de materia más pequeña de un elemento químico, que mantiene la identidad y propiedades de dicho elemento, imposible de dividir mediante procedimientos químicos convencionales. Los átomos, aisladamente o en forma de agrupaciones que denominamos moléculas, están en todas partes, en el aire, en la tierra, en el agua y en los seres vivos, formando todo tipo de materia existente en la Naturaleza. En 2012 celebramos el centenario de uno de los hallazgos más llamativos de la ciencia, la constatación de que los rayos X interaccionaban con la materia ordenada, los cristales, a través del fenómeno denominado difracción, demostrando la constitución repetitiva de éstos últimos. Estos descubrimientos, debidos al físico alemán Max von Laue (laureado Nobel de Física en 1914), fueron seguidos por una buena dosis de hallazgos que cambiaron la historia de la Química, Física, Biología, Bioquímica y de la Biomedicina, ya que nos permitieron «iluminar» la materia para poder «ver» los átomos en los cristales y poder averiguar cómo están constituidos los materiales, las moléculas, las hormonas, los ácidos nucleicos, los enzimas, las proteínas, los virus...; a qué se deben sus propiedades y cómo podemos entender y, por lo tanto, modificar su funcionamiento en una reacción química, en un tubo de ensayo o en el interior de un ser vivo.

La naturaleza e importancia de los átomos y de sus agrupaciones

La teoría atómica, que nació hace miles de años como un concepto filosófico, establecía que la Naturaleza estaba formada por unidades básicas, unitarias, que llamaron átomos (de la palabra griega «atomos», que significa «indivisible»). Sin embargo, esa creencia terminó a finales del siglo XIX, gracias a diversos experimentos sobre el electromagnetismo y la radiactividad, que demostraron que el supuesto

.....
* E-mail del autor: xmartin@iqfr.csic.es.

«átomo indivisible» era realmente un conglomerado de algunas partículas subatómicas que pueden tener existencia propia. La zona más interior de los átomos, también denominada núcleo, está formada por protones (con 1 unidad de carga eléctrica positiva y con 1 unidad de masa relativa) y neutrones (partículas sin carga y aproximadamente con la misma masa que los protones), mientras que la zona más externa del átomo está ocupada por los electrones (partículas sin apenas masa, unas 2000 veces menor que la de los protones o neutrones, y con 1 unidad de carga negativa), tal como se muestra en la **Tabla 1**.

	Masa relativa	Carga eléctrica relativa
Protón	1	+1
Neutrón	1	0
Electrón	0.000544	-1

Tabla 1. Masa y carga de las partículas fundamentales de los átomos

La existencia del electrón, postulada por el físico irlandés G. Johnstone Stoney (1826-1911) como una unidad de carga eléctrica en el campo de la electroquímica, fue descubierta como partícula en 1897 por el físico británico Joseph John Thomson (1856-1940), en el Laboratorio Cavendish de la Universidad de Cambridge, gracias a varios experimentos con rayos catódicos^[1]. Aunque el primer modelo moderno de la estructura interna de los átomos fue introducido en 1913 por el físico danés Niels Bohr (1885-1962) para explicar, entre otros aspectos, cómo los electrones pueden tener «órbitas» estables alrededor del núcleo^[2] (**Fig. 1**), hoy sabemos que los electrones (representados en la **Fig. 1** como partículas) muestran también un comportamiento de tipo ondulatorio (como el de las ondas de radio) y que desde el punto de vista formal es más real representarlos como una nube de «densidad electrónica», más o menos esférica que rodea el núcleo (**Fig. 2**).

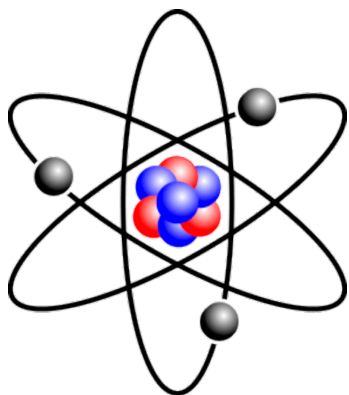


Fig. 1. Modelo atómico de Bohr para un átomo de litio.

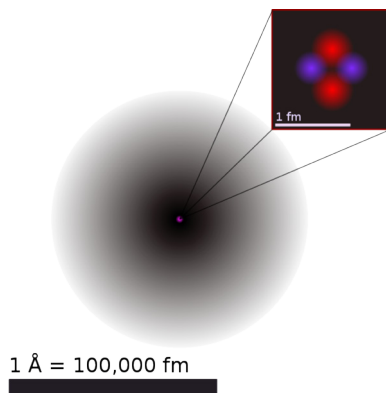


Fig. 2. Representación de la nube de densidad electrónica alrededor del núcleo atómico

Pero independientemente del modelo físico mediante el cual representemos los átomos, lo cierto es que éstos son las partículas que llenan el Universo. Y normalmente lo hacen en forma de agrupaciones que se mantienen gracias a un equilibrio de interacciones de corto alcance y que implican atracción y repulsión entre los átomos. Dichas interacciones de corto alcance se denominan «enlaces» y pueden ser de varios tipos, distinguiéndose entre los llamados:

- Enlaces metálicos, típicos en los materiales de este tipo (sodio, hierro, plata, oro...). Estos enlaces implican que los átomos del material se mantienen unidos gracias a una nube global de electrones, deslocalizada, que comparten entre sí todos los átomos.
- Enlaces iónicos. Son típicos en compuestos como las sales (por ejemplo la sal común o Cloruro Sódico, NaCl), en donde la atracción entre los átomos es debida a fuerzas electrostáticas, ya que previamente ha habido una transferencia de electrones entre los átomos que componen el material, formándose lo que se denominan «iones», es decir átomos que al perder o ganar electrones dejan de ser neutros en carga. En el caso mencionado de la sal común, la unión entre los centros atómicos de los elementos Sodio y Cloro se realiza por que éstos han perdido y ganado un electrón, respectivamente, convirtiéndose en Na^+ y Cl^- , y al ser cargas de distinto signo, se atraen (**Fig. 3**).
- Enlaces covalentes. Son los enlaces entre átomos más comunes en la Naturaleza y responsables de la formación de las agrupaciones de estas partículas que conocemos con el nombre de moléculas, las cuales se dan fundamentalmente (aunque no sólo) en la denominada materia orgánica, incluyendo la materia viva. Al contrario de como ocurre en el enlace iónico, en donde existe transferencia de electrones entre los átomos, el enlace covalente se caracteriza porque genera un equilibrio estable de fuerzas de atracción y repulsión entre los átomos al compartir electrones en dichas uniones (**Fig. 4**).

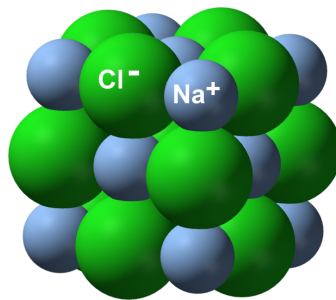


Fig. 3. Representación de la estructura de un micro-grano de sal común (Cloruro Sódico). Los átomos se mantienen unidos gracias a la atracción entre los mismos al soportar cargas eléctricas de diferente signo (verde: Cloro; azul: Sodio), es decir, en estado ionizado.

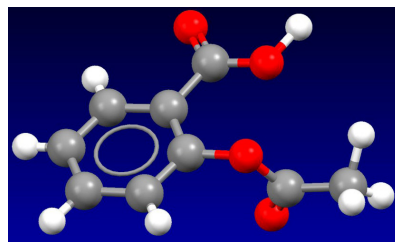


Fig. 4. Representación de una molécula de aspirina, mostrando los enlaces covalentes en forma de barras entre sus átomos, los cuales aparecen como bolas de distintos tamaños y colores (gris: carbono, rojo: oxígeno, blanco: hidrógeno).

Pero al margen de los diferentes modos con los que los átomos se pueden unir entre sí (enlaces), es muy importante resaltar que las propiedades de la materia (inanimada o no) son consecuencia de la forma mediante la cual los átomos y las moléculas se compactan para formar la estructura de la materia (molecular o no), y de ahí la relevancia que conlleva el conocimiento íntimo de dicha estructura, es decir, de la posición relativa de los átomos en el espacio y de las distancias que los separan. Resulta, pues, obvio el interés que supone conocer el desarrollo científico que subyace a la posibilidad de poder «ver» los átomos (y las moléculas), ya que sólo mediante ese conocimiento podemos entender y modificar sus propiedades y funcionamiento en una reacción química, en un tubo de ensayo o en el interior de un ser vivo.

Uno de los ejemplos más simples que podemos tomar para ilustrar la importancia de la estructura interna de los materiales (animados o inanimados) es el caso de un elemento químico simple, conocido por todos, el Carbono, que se muestra en la naturaleza en dos formas estructurales internas diferentes y que le confieren propiedades radicalmente distintas: el diamante y el grafito (**Fig. 5**). Así, el diamante es una piedra preciosa transparente; es el material más duro existente, un conductor térmico excepcional y apenas conduce la electricidad. Sin embargo, el grafito, que también es carbono puro (y que está en nuestros lápices), es un material muy blando, un lubricante excelente que apenas conduce el calor y un estupendo conductor eléctrico.

Pues bien, este tipo de diferencias estructurales pueden también extrapolarse para comprender la funcionalidad de cualquier otro tipo de materia y proponer así cambios racionales que mejoren la funcionalidad de nuevos materiales, de drogas, antibióticos, proteínas, enzimas (**Fig. 6**), virus, ácidos nucleicos y de todos sus complejos...

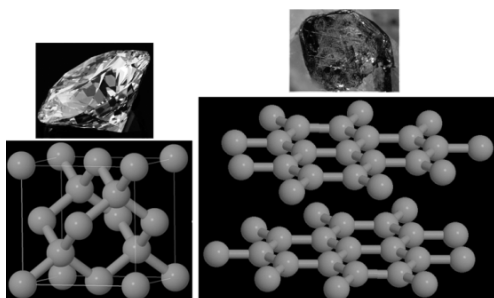


Fig. 5. Izquierda: Representación de la estructura del diamante. Obsérvese que la dureza es consecuencia de la rigidez de la estructura, ya que cada átomo está unido a otros cuatro vecinos. Derecha: representación de la estructura del grafito. Obsérvese que su propiedad como lubricante puede entenderse por el desplazamiento de unas capas respecto de otras.

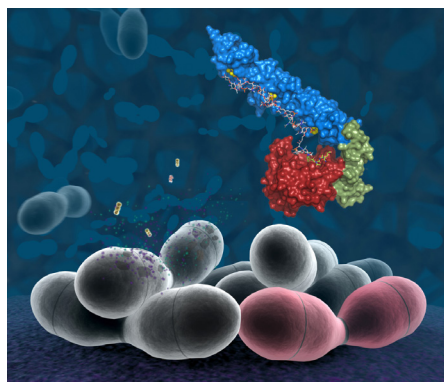


Fig. 6. Arriba, estructura de LytC^[3], un enzima que genera el Streptococcus pneumoniae (abajo) para llegar a ser más virulento, aniquilando a sus congéneres menos capaces.

Las dimensiones de la Naturaleza

Aunque ya intuimos que los átomos son partículas muy pequeñas de materia, antes de comenzar a introducir las bases científicas que nos permitieron «ver» a los átomos por primera vez, resulta muy ilustrativo situar estas partículas en las dimensiones relativas de la Naturaleza, haciéndonos la pregunta de ¿cómo son de pequeños?. Y para responder a esta pregunta nada mejor que hacer una comparación entre las cosas que nos rodean a diario con lo que vemos al mirar hacia el cielo...

Por ejemplo, según los astrónomos, para recorrer el tamaño de lo que llamamos Universo conocido (**Fig. 7**) necesitaríamos viajar cien mil millones de años a la velocidad de la luz (a unos 300.000 km/s), con lo cual recorreríamos una distancia aproximada de mil cuatrillones de metros:

1.000₄000.000₃000.000₂000.000₁00 0.000 m, es decir, 10^{27} m, o lo que es lo mismo, 10^{24} km (que equivale a un cuatrillón de km).

En el interior de este Universo existen, al menos mil millones de lo que conocemos con el nombre de galaxias (**Fig. 8**), como nuestra Vía Láctea (**Fig. 9**), que tardaríamos en recorrerla unos cien mil años a la velocidad de la luz, que equivale a una dimensión de unos mil trillones de metros: 1.000₃000.000₂000.000₁000.000 m,

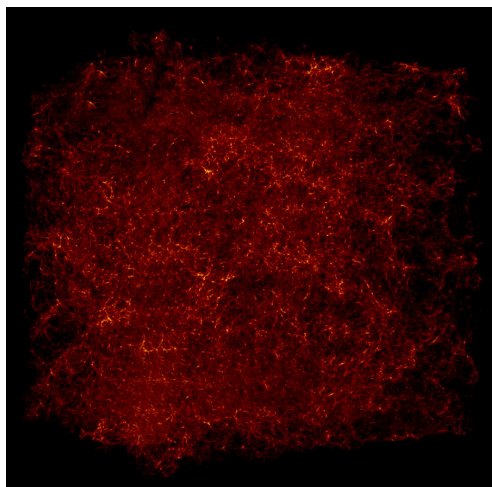


Fig. 7. Representación de lo que denominamos Universo conocido.

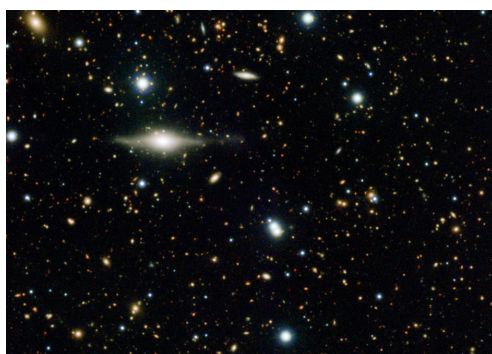


Fig. 8. Visión de lo que denominamos galaxias, una parte del Universo conocido.



Fig. 9. Visión de la galaxia Vía Láctea, una concentración de estrellas y planetas.

es decir, 10^{21} m, o lo que es lo mismo, 10^{18} Km (1 trillón de km), aunque hay galaxias de muchas formas y tamaños (**Fig. 8**).

Así que, para hacernos una idea de las dimensiones relativas de los objetos que queremos «ver» (los átomos), debemos descender en la escala de tamaños hasta lo que denominamos 1 Å (Ångström) que equivale a 0.000000000001 km = 10^{-10} m, o lo que es lo mismo, que desde el tamaño del Universo conocido hasta los átomos, hemos de dividir por 10^{37} , es decir por 10 sextillones (¡un 1 seguido de 37 ceros!): $10_6.000.000_5.000.000_4.000.000_3.000.000_2.000.000_1.000.000$.

O desde lo cotidiano, como es la dimensión de un garbanzo (**Fig. 10**), para llegar a la dimensión de un átomo, hemos de dividir por cien millones ($10^8 = 100.000.000$).



Fig. 10. Garbanzos de tamaño próximo a 1 cm.

¡Para ver, necesitamos iluminar!

Tal como el lector se imagina, para «ver» un objeto (su forma y sus dimensiones, es decir, su estructura) necesitamos de algún tipo de «luz apropiada». En el caso de las estrellas del Universo, es obvio que necesitamos de grandes telescopios que producen imágenes con luz visible, o bien los llamados radiotelescopios, que captan ondas de radio, generalmente a través de una gran antena parabólica, o un conjunto de ellas. Con objetos más cotidianos, por ejemplo, unos garbanzos, es obvio que nos bastaría con una linterna convencional de luz visible y, en todo caso, con un pequeño microscopio óptico, ya que con todo ello podríamos escudriñar todos los aspectos y formas que nos ofrecen estos granos de legumbres, tal como haríamos para estudiar los aspectos morfológicos del ala de una mosca (**Fig. 11**).

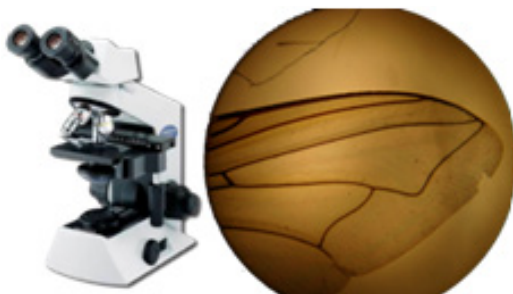


Fig. 11. Microscopio óptico e imagen de los detalles (del orden de 0.1 cm) del ala de una mosca.

Pero, si seguimos bajando en dimensiones, como por ejemplo, para intentar ver con cierto detalle la superficie de una bacteria, necesitaremos hacer uso de los denominados microscopios electrónicos, que utilizan electrones en lugar de fotones de

luz visible para formar imágenes de objetos muy diminutos, pudiendo alcanzar ampliaciones de hasta 5.000 veces las imágenes de los mejores microscopios ópticos. Tal es el caso de la **Fig. 12**, en donde se muestra un racimo de bacterias de una determinada especie y en donde cada bacteria tiene una dimensión del orden de $1.5\ \mu\text{m}$ (micrómetros), es decir $0.0000015\ \text{cm}$, o lo que es lo mismo, 1.5 veces la millonésima parte de un metro.

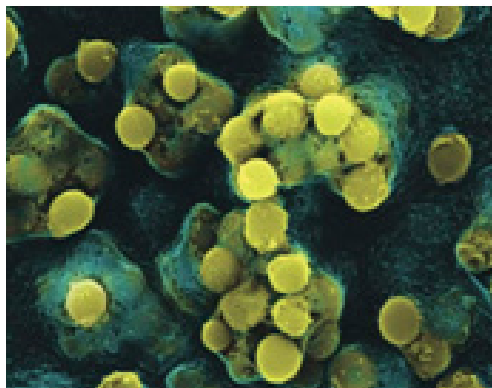


Fig. 12. Aspecto de un racimo de bacterias del tipo *Streptococcus pneumoniae*, vistas mediante un microscopio electrónico.

¡Pero, ni la luz visible, ni los electrones, nos sirven para llegar «ver» totalmente los átomos y las moléculas y meterlos en sus entresijos! Para ello necesitamos una «luz» cuyos fotones tengan una energía (o una longitud de onda) del mismo tamaño (o menor) que estas partículas, y que, por lo tanto, sea capaz de «iluminar», de interaccionar con los detalles más recónditos de la materia a ese nivel de detalle. ¡Pues esa luz es la de los rayos X, porque tiene una longitud de onda muy próxima al tamaño de los átomos ($10^{-10}\ \text{m} = 10^{-8}\ \text{cm}$), es decir, lo que llamamos $1\ \text{\AA}$. Sin embargo, como veremos, esta técnica de «visión» se complica con el caso de los átomos y los rayos X.

Al «iluminar» con luz visible un objeto de las dimensiones de nuestro entorno cotidiano (un edificio, una persona, un lápiz), las «lentes» de nuestros ojos son capaces recomponer de forma automática los haces de fotones de luz visible dispersados por di-

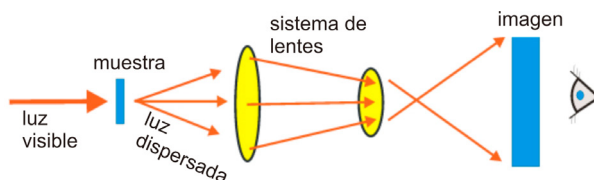


Fig. 13. Reconstrucción automática de una imagen mediante un microscopio óptico.

chos objetos y, por lo tanto, somos capaces de percibir las formas y detalles de los mismos. Y para ver objetos más pequeños (microscópicos) necesitamos de un sistema de lentes de vidrio capaces de reconvertir directamente dicha interacción, dando lugar a una imagen ampliada del objeto observado (**Fig. 13**). Y de forma similar ocurre (aunque sin lentes de vidrio) con los haces de electrones que se dispersan a través de un objeto de tamaño ínfimo en un microscopio electrónico, ya que la carga eléctrica de los haces de electrones dispersados se hacen re-converger mediante

campos magnéticos; sin embargo, en estos casos, el nivel de detalle alcanzado (resolución) no es el suficiente para llegar a penetrar a nivel de los átomos con el grado de detalle deseado.

Entonces, ¿qué ocurre al iluminar los átomos con rayos X?

Cuando pretendemos «ver» los átomos y las moléculas con los rayos X, nos encontramos con dos problemas bien diferenciados:

1) El primero de ellos, y en contraposición de la interacción de la luz visible con los objetos macro o microscópicos, es que la interacción de los rayos X con los átomos (materia submicroscópica), o con las moléculas, es extremadamente débil y produce un efecto devastador, tal como se muestra en la **Fig. 14**, tras el efecto de la interacción de un haz de rayos X con una macromolécula (una proteína), y

2) Aunque la mencionada interacción fuera sensiblemente más intensa de lo que es, desgraciadamente no existe una lente física capaz de reconvertir los haces de rayos X dispersados, para generar directamente la imagen ampliada de la molécula, objeto del experimento.

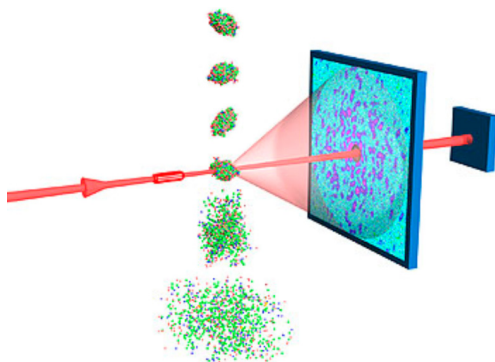


Fig. 14. La interacción de los rayos X (línea roja) con moléculas aisladas es extremadamente débil y devastador.

Así que, con todo ello, nos preguntamos de nuevo: ¿cómo podemos realmente ver los átomos y las moléculas?

Pues bien, teniendo en cuenta los dos puntos mencionados anteriormente, la respuesta es: con rayos X, pero con muchas moléculas juntas y ordenadas, para que el efecto conjunto amplifique la señal de la interacción, es decir, usando lo que se conoce con el nombre de cristales (materia homogénea y ordenada). Pero, además, y dado lo expuesto en el apartado 2), resulta que no tenemos más remedio que suplir la ausencia de lentes físicas por «lentes virtuales», que sean capaces de combinar entre sí los haces de rayos X dispersados y proporcionar, de algún modo, la imagen ampliada de la molécula (**Fig. 15**). Todo este conjunto de conocimientos y técnicas se conoce con el nombre de Cristalografía.