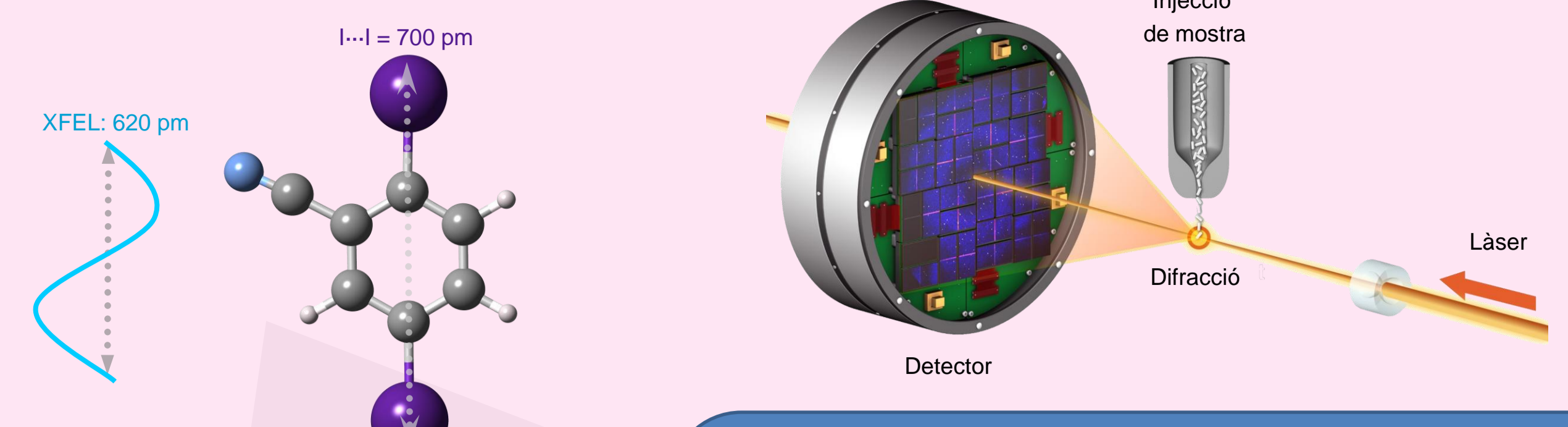


El futur és brillant, amb cristalls i sense

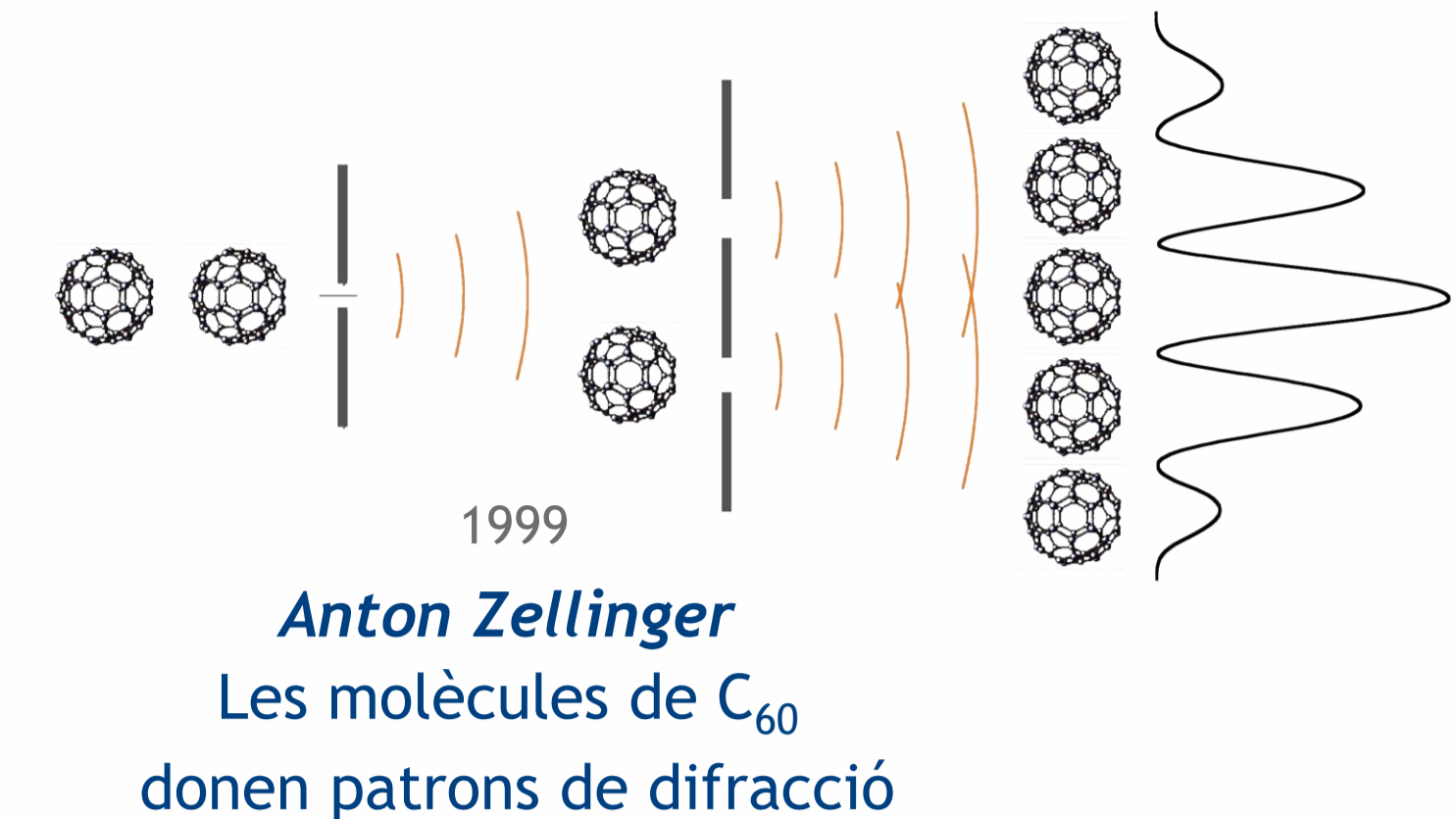


2014
Jochen Küper i 54 col·laboradors
Difracció de raigs X per molècules en fase gas

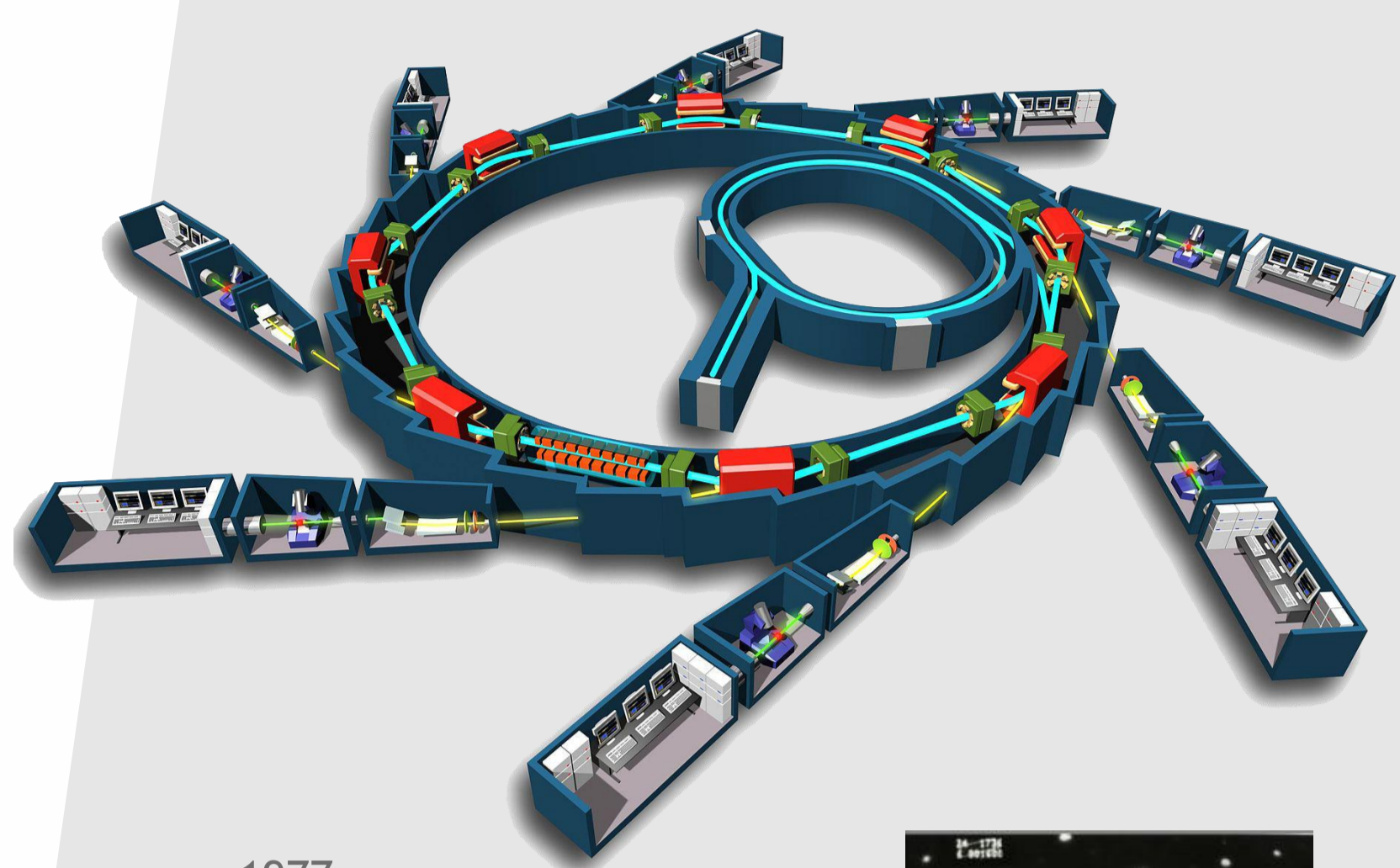
Els làsers de raigs X (XFEL) són tan intensos que destrueixen cristalls i molècules, però amb polsos molt curts es pot detectar la difracció abans que es destrueixi la mostra. Permetran determinar estructures en cristalls nanomètrics, obtenir imatges de macromolècules, i observar difracció de molècules en fase gas.



2013
Makoto Fujita
Cristal·lografia sense cristalls
L'estratègia proposada per Fujita consisteix a incloure molècules d'un compost que no es pot cristal·litzar dins les cavitats d'una xarxa metall-orgànica (MOF).

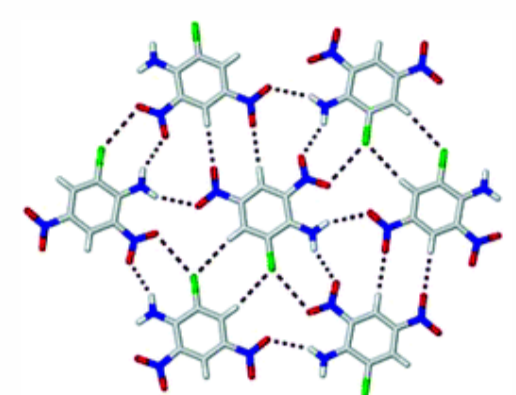


1999
Anton Zellinger
Les molècules de C₆₀ donen patrons de difracció

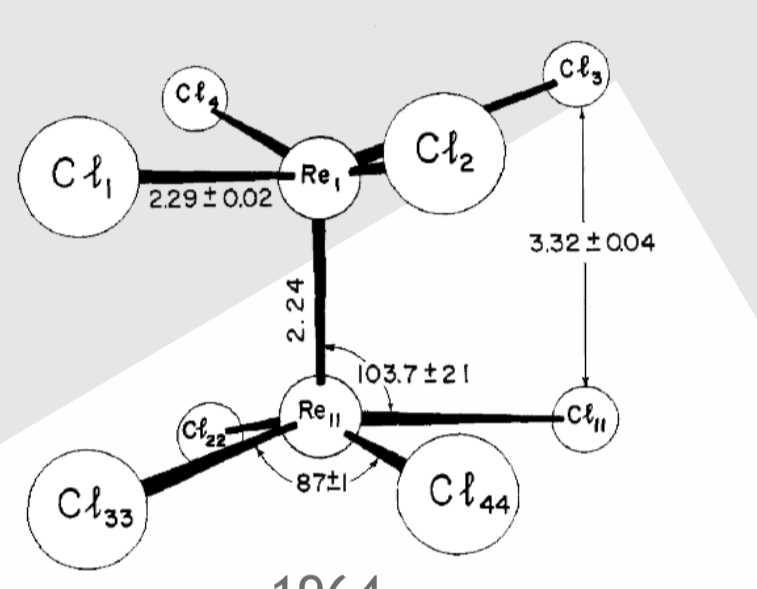


- Desenvolupaments recents**
- 2009 - Làsers de raigs X durs (SLAC)
 - 2005 - Làsers de raigs X tous (FLASH)
 - 1997 - Fotocristal·lografia
 - 1994 - Sincrotrons de 3ª generació
 - 1985 - Microscopi de força atòmica
 - 1981 - Microscopi d'efecte túnel
 - 1981 - Generació de raigs X per sincrotrons de 2ª generació

1987
Gautam R. Desiraju
Enginyeria del cristall



1977
Sandstrom, Dodgen, Lytle
Estructura d'un complex en dissolució per EXAFS: [Ni(H₂O)₆]²⁺



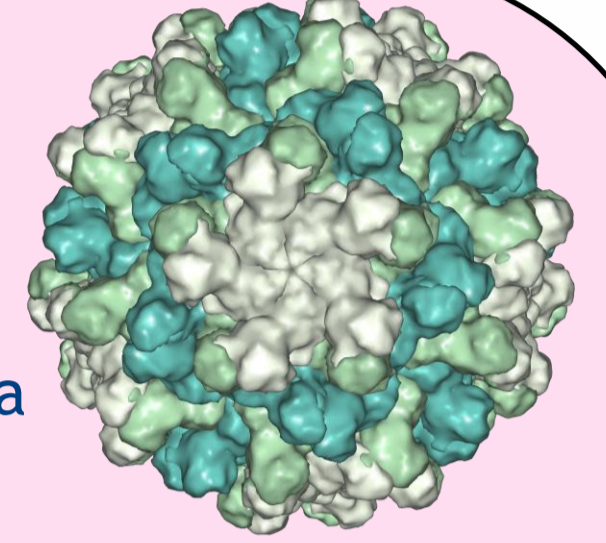
1982
Dan Schechtman
Quasicristalls: imatge de difracció de MnAl₆
Premi Nobel de Química 2011

Naixement de la biologia estructural



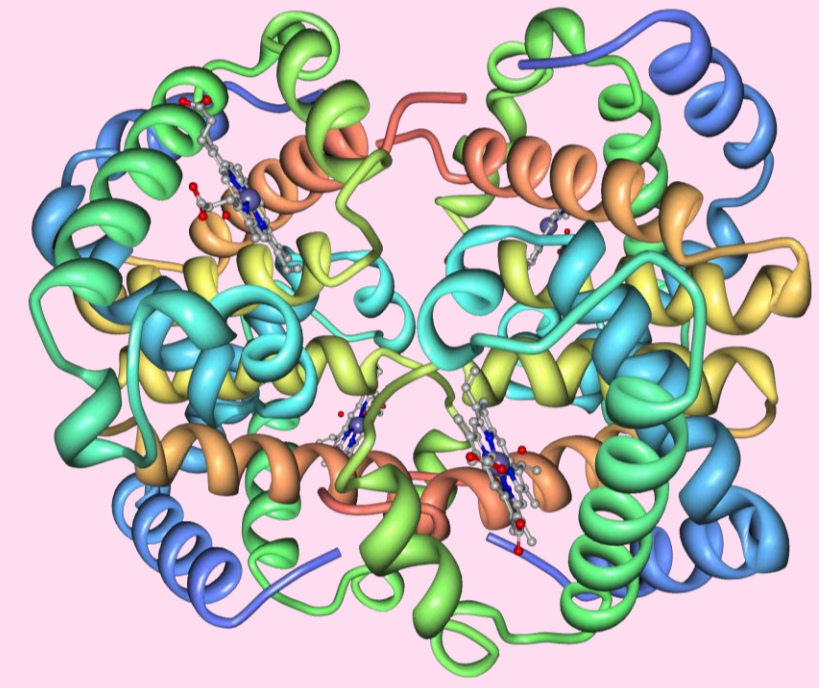
1965
David Chilton Philips (1924-1999)
Primera estructura d'un enzim: lisozima

1978
Stephen C. Harrison
Primera estructura d'un virus amb resolució atòmica

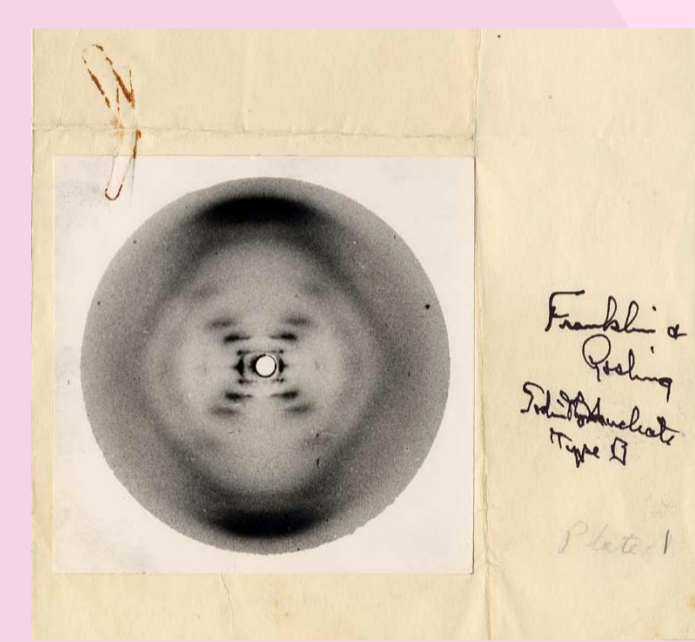


Max F. Perutz (1914-2002) | **John C. Kendrew** (1917-1997)

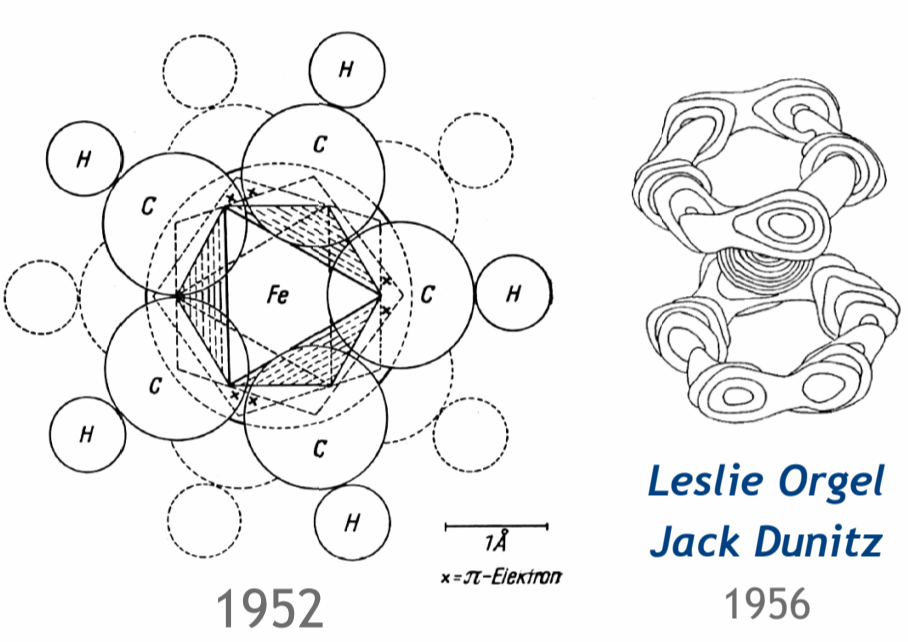
Premi Nobel de Química 1962
Primeres estructures de proteïnes
Hemoglobina



Premi Nobel de Fisiologia i Medicina 1962
Francis Crick (1916-2004), **James D. Watson** (1928-)
Maurice H. F. Wilkins (1916-2004), **Rosalind E. Franklin** (1920-1958)
Model de doble hèlix de l'ADN



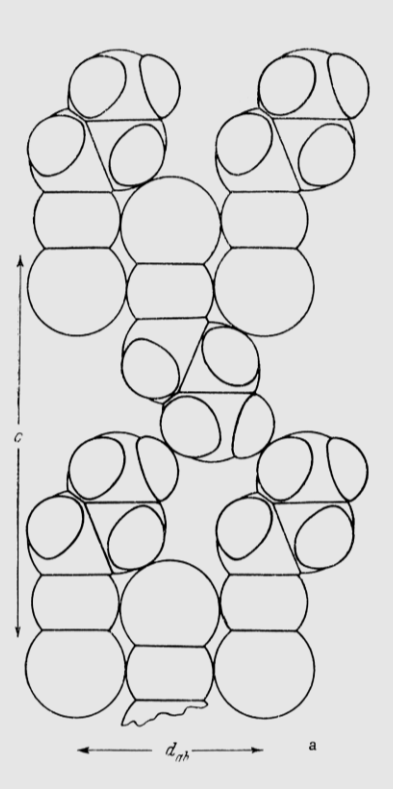
1964
F. Albert Cotton (1930-2007)
Estructura i descripció d'un enllaç quadruple Re-Re



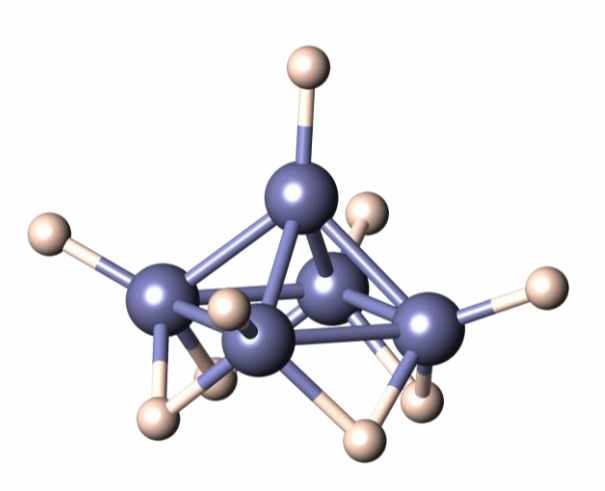
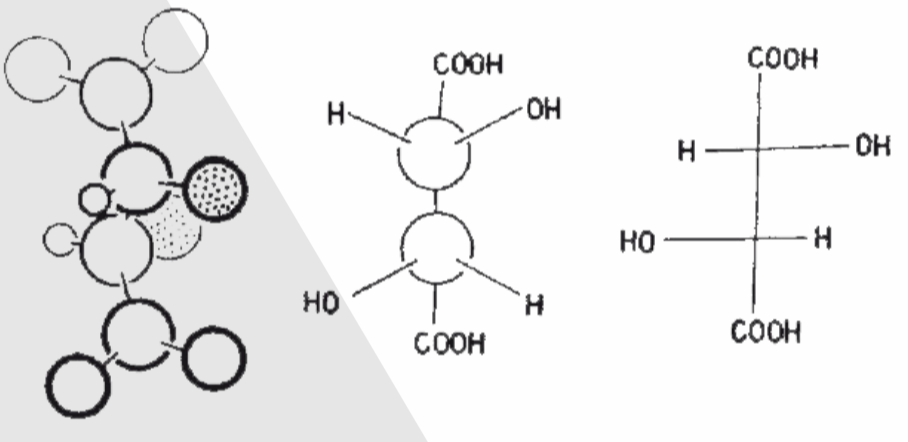
Leslie Orgel
Jack Dunitz



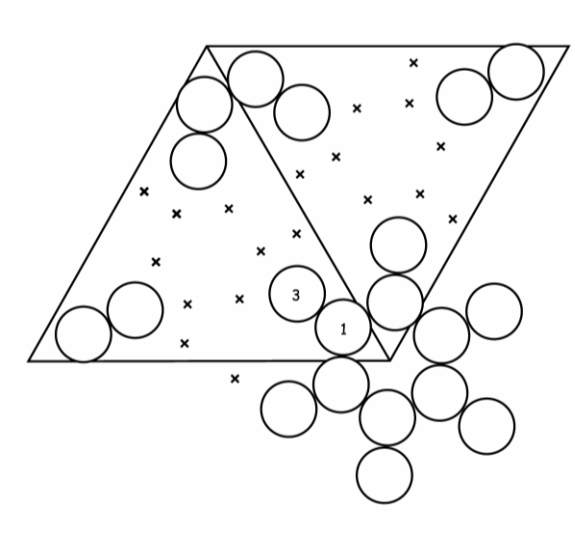
1955
Aleksandr I. Kitaigorodskii (1914-1985)
Empaquetament de molècules orgàniques



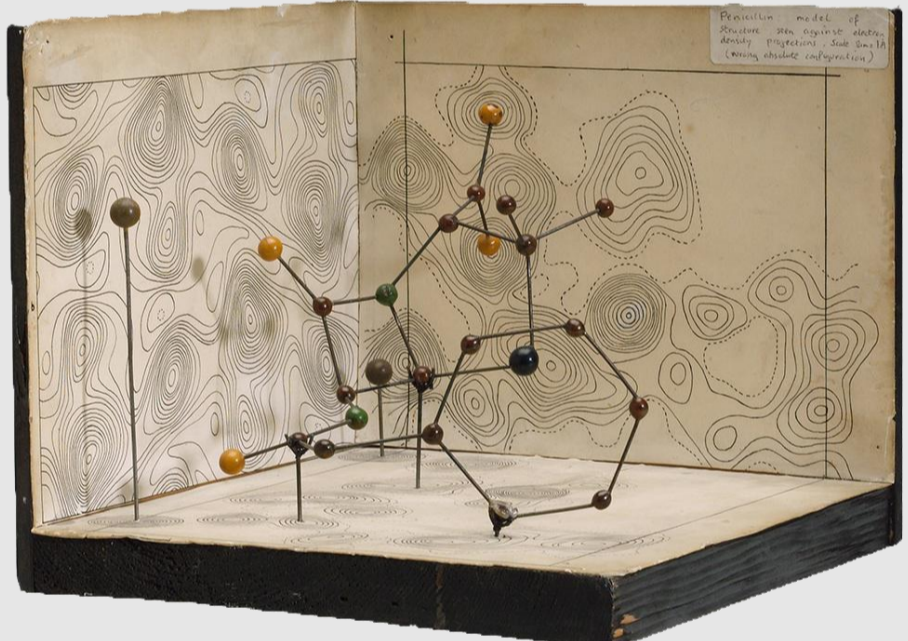
1951
Johannes M. Bijvoet (1892-1980)
Configuració absoluta del D-tartrat de sodi i rubidi



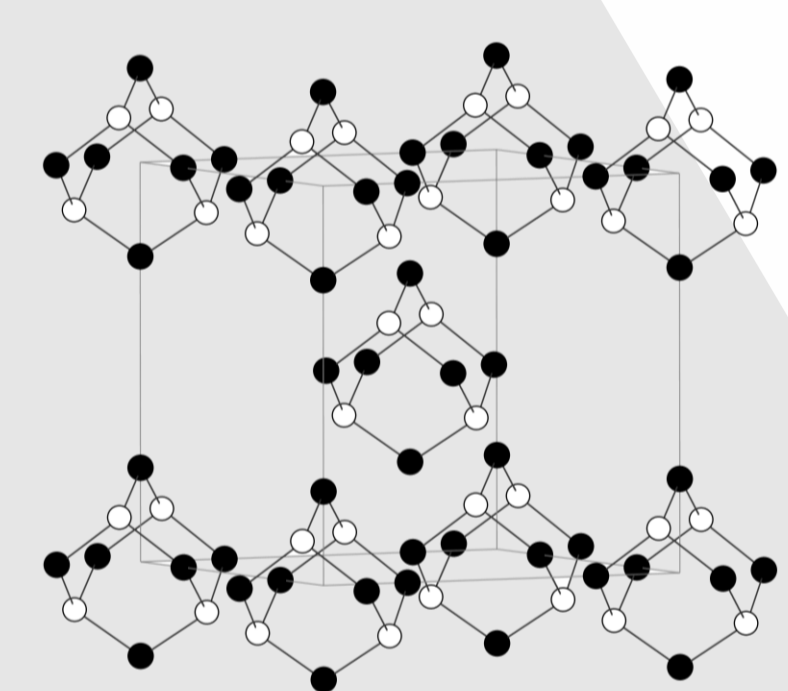
1952
William Lipscomb (1919-2011)
Estructura dels borans
Premi Nobel de Química 1976



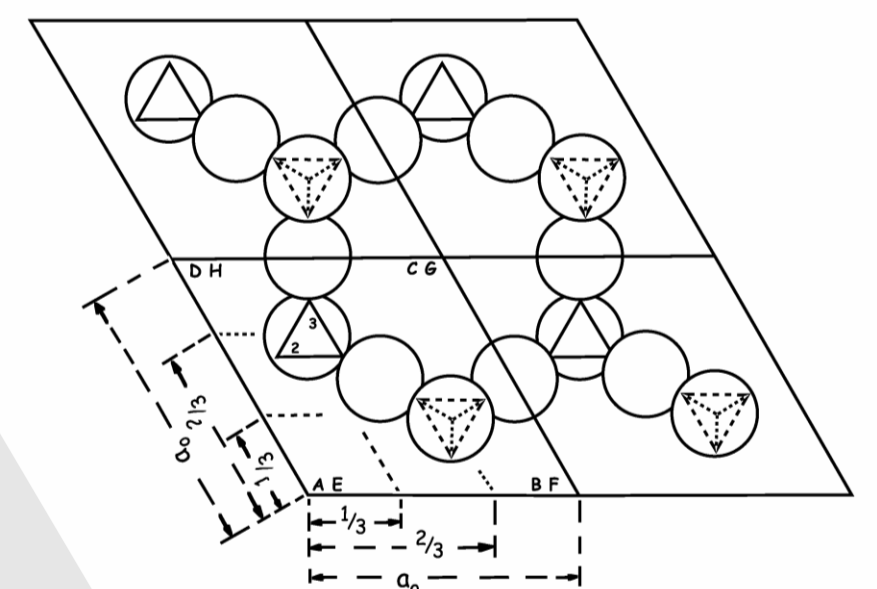
1929
Kathleen Lonsdale (1903-1971)
El benzè, com el somià Kekulé: estructura de l'hexametilbenzè



1949
Dorothy Crowfoot Hodgkin (1910-1994)
Estructures de penicil·lina i vitamina B₁₂
Premi Nobel de Química 1964



1922
Roscoe Dickinson (1894-1945)
Albert L. Raymond (1901-1988)
Primera estructura d'una molècula orgànica: hexametilentetraamina



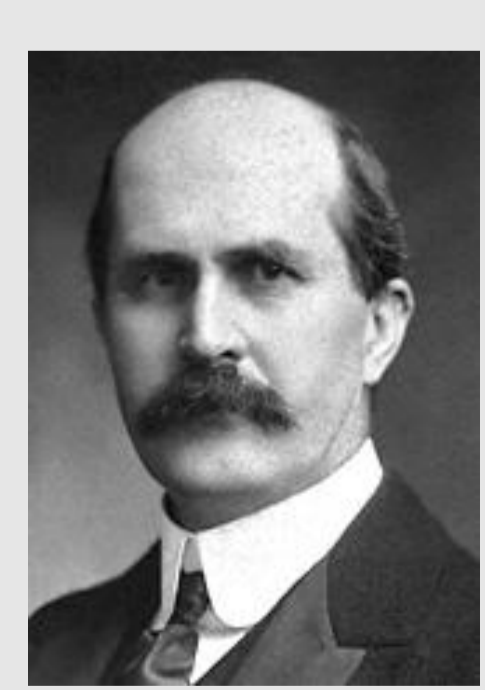
William H. Barnes (1903-1980)
L'estructura del gel explica la forma hexagonal dels flocs de neu

- 1968 - Aaron Klug (1926-): Desenvolupament de la microscòpia electrònica cristal·logràfica | Nobel de Química 1982
1966 - Jerome Karle (1918 - 2013), Isabella H. Karle (1921-): Addició simbòlica en mètodes directes | Nobel de Química 1985
1956 - David Harker (1906-1991): Determinació de la fase en cristalls no centrosimètrics
1953 - Herbert A. Hauptman (1917-2011): Desenvolupament dels mètodes directes | Nobel de Química 1985
1952 - David Sayre (1924-2012): Mètodes directes de resolució d'estructures
1952 - Frederik W. H. Zachariasen (1906-1979): Mètode de l'àtom pesant
1946 - Clifford G. Shull (1915-2001): Difracció de neutrons i estructura magnètica del MnO | Nobel de Física 1994
1934 - Arthur L. Patterson (1902-1966): Funció de Patterson
$$P(u, v, w) = \sum_{hkl} |F_{hkl}|^2 e^{-2\pi i(hu + kv + lw)}$$

1927 - Clinton Davison (1881-1958), George P. Thomson (1892-1975): Difracció d'electrons | Nobel de Física 1937
1919 - Paul Niggli (1888-1953): Grups espacials i extincions sistemàtiques

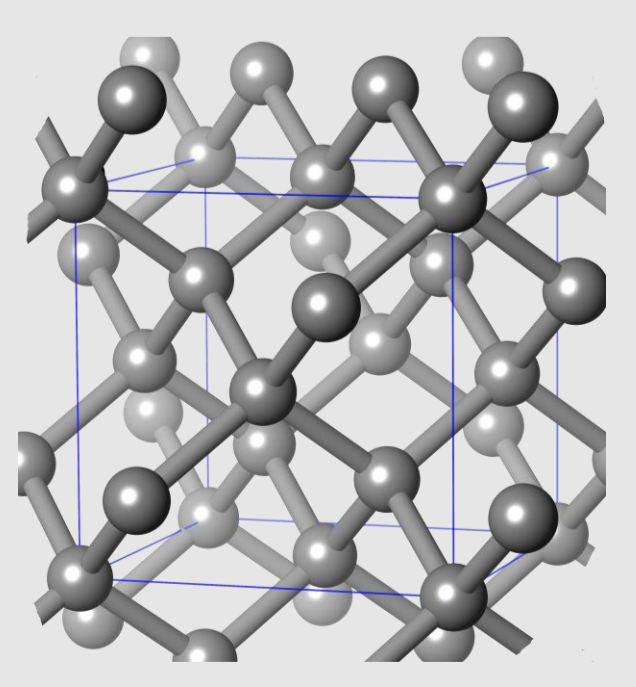
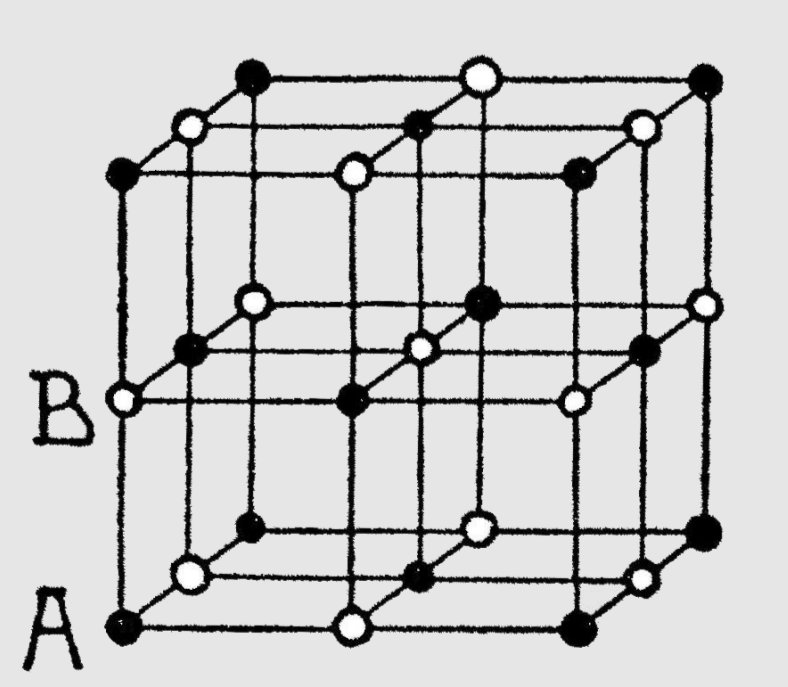
Desenvolupaments metodològics

Creixement cristal·lí



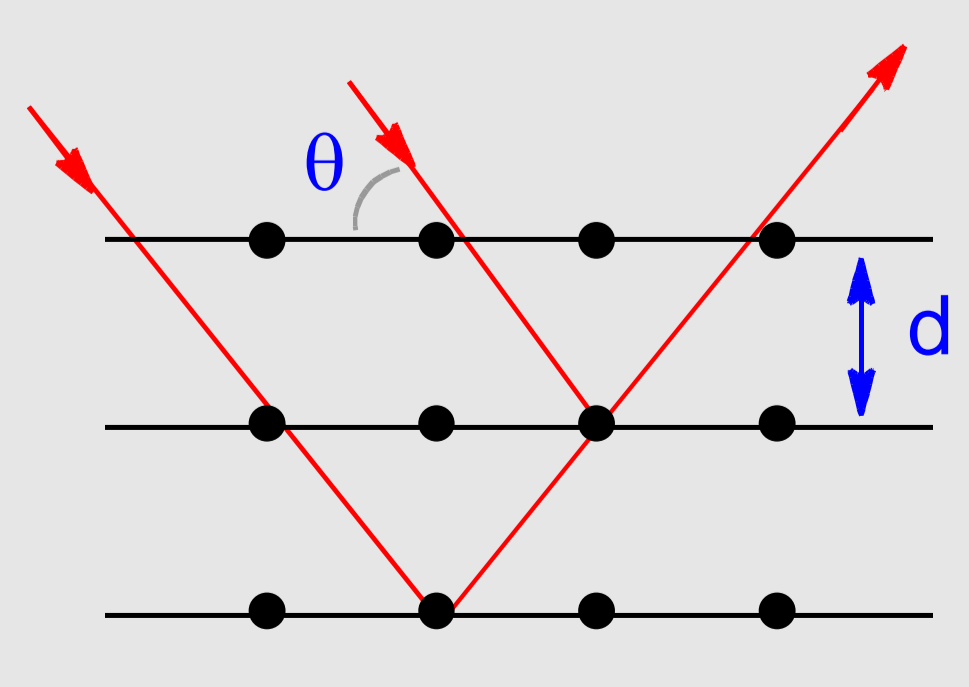
William H. Bragg (1842-1962) | **William L. Bragg** (1890-1971)
Premi Nobel de Física 1915

Primeres estructures cristal·lines:
NaCl i diamant



For NaCl
 $AB = 2.8 \cdot 10^{-8} \text{ cm.}$

Diamant

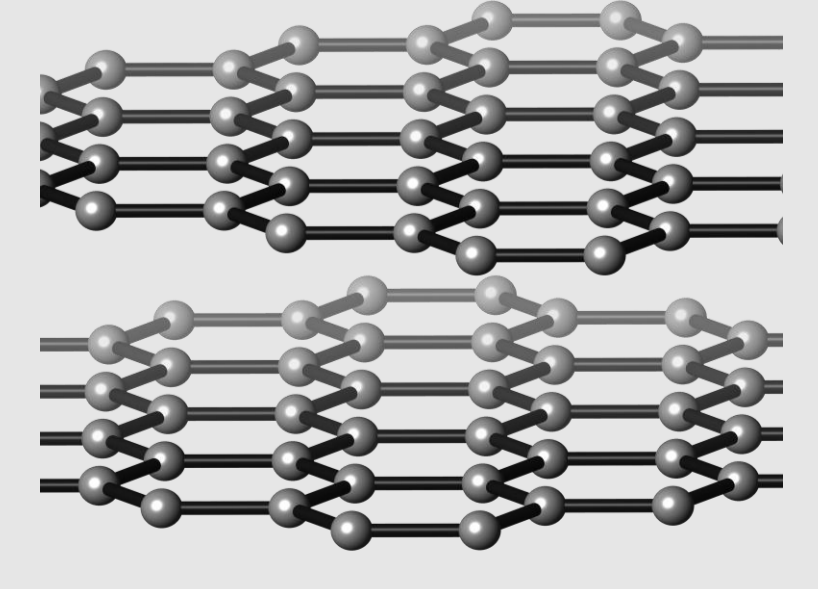
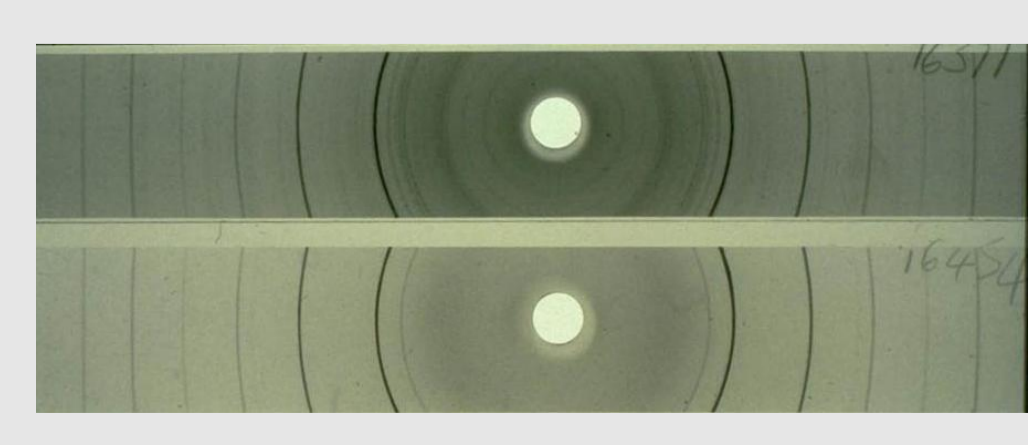


Llei de Bragg:

$$n \lambda = 2 d \sin \theta$$

1967
Hugo Rietveld (1932-)
Mètode de refinament d'estructures a diagrames de pols

1937
André Guinier (1911-2000)
Dissena un nou difractòmetre que permet obtenir diagrames de pols amb més resolució



Premi Nobel de Química 1936
Peter Debye (1884-1966), **Paul Scherrer** (1890-1969),
Albert W. Hull (1880-1966)
Obtenen diagrames de difracció de pols policristal·lina i determinen l'estructura del grafit.