

Cristalografía en España

Martín Martínez-Ripoll

Resumen: Durante el año 2011, el mundo entero celebrará el *Año Internacional de la Química* y en tal conmemoración no puede quedar olvidada la Cristalografía. En dicho contexto los cristalógrafos españoles han hecho un esfuerzo digno de mención, trayendo por primera vez a España el *XXII Congreso Internacional y Asamblea General* de la *Unión Internacional de Cristalografía*, evento que desde 1946 se celebra cada tres años en un país distinto y que en esta ocasión acogerá Madrid en agosto de 2011. Con estas palabras pretendemos honrar a todos aquellos investigadores, que desde el primer tercio del siglo pasado y hasta nuestros días, han hecho posible que España merezca el honor de ser el país anfitrión de tal evento.

Palabras clave: Cristalografía, España, difracción, cristales, Unión Internacional de Cristalografía.

Abstract: The *International Year of Chemistry 2011* is a worldwide celebration of the achievements of Chemistry and its contributions to the well-being of humankind and therefore Crystallography cannot be out of this commemoration. In this context the Spanish crystallographers have made a noteworthy effort, bringing to Spain for the first time, the *XXII International Congress and General Assembly* of the *International Union of Crystallography*, an event that since 1946 is held every three years in a different country and that in this occasion will be held in Madrid in August 2011. With these words we try to honour all crystallographers who, from the first third of the 20th century until today, made possible that Spain deserves the prestige to host such an event.

Keywords: Crystallography, Spain, diffraction, crystals, International Union of Crystallography.

De la mano de los minerales

La Cristalografía es una de las disciplinas científicas más importantes para el desarrollo de la Química, Biología, Bioquímica y Biomedicina. Su influencia, que fue espectacular en España durante el último tercio del siglo XX, ha conducido felizmente, aunque tras muchos esfuerzos, al establecimiento de grupos de especialistas en esta disciplina, cuya relevancia científica está fuera de toda duda. Sin embargo, al contrario de lo que ha ocurrido (y ocurre) en otros países desarrollados, la Cristalografía en España y especialmente en el mundo académico, parece seguir siendo (en general) una asignatura pendiente, quizá porque, erróneamente, es considerada como una técnica menor, de aplicación trivial e interpretación baladí.

La relación entre España y los cristales se remonta a tiempos remotos, y es consecuencia de que en nuestro territorio existían importantes yacimientos para la extracción de minerales. Probablemente, la primera contribución española a la historia de los cristales aparezca ya citada por Plinio el Viejo (siglo I) en su conocida *Historia Natural*, en donde describe

cómo las ventanas e invernaderos de los habitantes más ricos del Imperio Romano estaban cubiertos por cristales de *Lapis specularis*, el nombre latino de grandes cristales transparentes de yeso. Esta forma cristalina del sulfato cálcico dihidratado la extraían los romanos de los alrededores de Segóbriga (La Mancha) y era muy apreciada por su transparencia, tamaño (de hasta un metro de longitud) y capacidad de exfoliación^[1].

La vasta información que sobre minerales figura en la *Historia Natural* de Plinio fue preservada y mejorada en las obras conocidas como *Etimologías*, que escribió San Isidoro de Sevilla (560–636), en concreto en el denominado *Libro XVI. Las piedras y los metales*. Y este tipo de información se recoge igualmente en *El Lapidario*, encargado por Alfonso X el Sabio (1221–1284), obra fascinante escrita por un grupo de musulmanes, hebreos y cristianos, sabios de una época en la que se demostró que la colaboración multicultural pacífica era posible. Sin embargo, fue el talento sin par de los geómetras árabes en la investigación del problema del teselado en los espacios bidimensionales, lo que generó la contribución española más importante a la cristalografía y al arte geométrico pre-renacentista. La simetría decorativa de los pavimentos y alicatados (Figura 1), todavía conservados en La Alhambra de Granada, es utilizada hoy en todo el mundo para la enseñanza de conceptos sobre simetría.



M. Martínez-Ripoll

Departamento de Cristalografía y Biología Estructural
Instituto de Química-Física “Rocasolano”, CSIC
Serrano 119, 28006 Madrid
C-e: xmartin@iqfr.csic.es

Recibido: 06/10/2010. Aceptado: 10/11/2010.



Figura 1. Mosaicos de La Alhambra (siglo XIII).

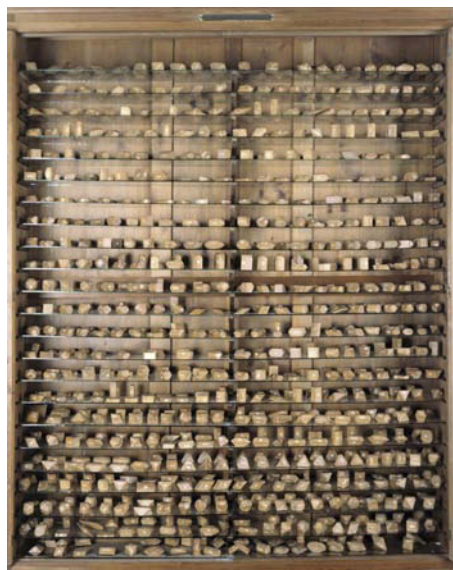


Figura 2. Algunos modelos del abate Häuy.

Algunos cientos de años más tarde, en el siglo XV, seguimos encontrando muchos ejemplos del interés por las estructuras bidimensionales y la simetría, como en el techo de las habitaciones principales de castillos, palacios y edificios especiales, tales como la Universidad de Alcalá o el Castillo de Segovia.

La variedad de la minería española y la enorme riqueza de los minerales extraídos de tierras americanas motivó el trabajo de excelentes metalúrgicos y mineralogistas, como Juan de Arfe Villafañe (1535–1603), Diego de Santiago Olivares (s. XVI), y Álvaro Alonso Barba (1569–1662), autor de *El arte de los metales* y del desarrollo de un método para la recuperación de oro y plata mediante el mercurio extraído en Almadén (La Mancha), la mayor mina de mercurio del mundo. Por otra parte, tanto de América como del Lejano Oriente se obtuvieron sorprendentes muestras de minerales fascinantes para los coleccionistas y científicos del Nuevo Mundo. El *Real Gabinete de Historia Natural* se creó en 1771 con la colección de minerales de Pedro Franco Dávila (1711–1786), probablemente el mejor muestrario mineral de su tiempo y que fue utilizado por Jean Baptiste Louis Romé de Lisle (ó Romé de L'Isle, 1736–1790) para sus estudios sobre la morfología cristalina.

En 1799 vio la luz *Anales de Historia Natural*, la primera revista periódica de carácter científico, y en ella fue en donde Proust, Herrgen, Del Río, Humboldt y otros mineralogistas, educados en la Escuela Werneriana de Friburgo, publicaron sus primeros artículos sobre la naturaleza de los cristales. La controversia entre las ideas de Werner en la clasificación de los minerales basados en las propiedades externas y el nuevo concepto introducido por Romé de L'Isle y el abate René Just Haüy (1743–1822) sobre la morfología cristalina se observa claramente en los *Anales de Historia Natural*. Todos estos trabajos muestran cómo la ciencia española era consciente de los cambios fundamentales que ocurrieron en la mineralogía durante los siglos XVIII y XIX.

La colección de sólidos cristalográficos (Figura 2) donada por Haüy al matemático gallego José Rodríguez González (1770–1824) fue fehacientemente utilizada por los cris-

talógrafos González de Linares (1845–1904) y Laureano Calderón (1847–1894), ambos relacionados con el establecimiento de lo que probablemente fue la primera Cátedra de Cristalografía en las universidades europeas (Universidad Central de Madrid, 1888) y que ocupó Francisco Quiroga y Rodríguez (1853–1894).

Los pioneros y sus alumnos “ven” con rayos X



Figura 3. Francisco Pardillo (1884–1955).¹



Figura 4. Blas Cabrera (1878–1945).

A principios del siglo XX, los cristalógrafos españoles ya estaban al corriente de los avances internacionales en este campo, y así, muy tempranamente Francisco Pardillo (Figura 3) fue consciente de la importancia de las investigaciones llevadas a cabo por Laue y Bragg, y ya en 1923 informó de estos estudios el *Boletín de la Real Sociedad Española de Historia Natural*.

Dos años más tarde, Blas Cabrera (Figura 4), quien posteriormente se convertiría en director del *Instituto Nacional de Física y Química*, escribió varios informes^[2] para *Anales de la Sociedad Española de Física y Química* sobre la nueva aplicación de los rayos X para poder determinar la estructura de los materiales cristalinos. Y en el mismo año, 1925, Julio Palacios (Figura 5) publicó en la misma revista dos nuevos informes^[3] sobre los descubrimientos de la época.

Julio Palacios (Figura 5), discípulo de Blas Cabrera en el *Instituto Nacional de Física y Química* (Figura 7), Gabriel Martín Cardoso (Figura 6) en el *Museo Nacional de Ciencias Naturales* de Madrid y Francisco Pardillo en el Departamento de Mineralogía de la *Universidad de Barcelona*, formaron los primeros grupos españoles de la cristalografía moderna. Luis Rivoir y otros trabajaron con Palacios en la determinación de estructuras de cristales orgánicos e inorgánicos y en la mejora de los métodos de análisis de Fourier. Pardillo creó de forma independiente una escuela de cristalografía en su departamento en la Universidad de Barcelona. Gabriel Martín Cardoso entrenó a Julio Garrido, quién más tarde se incorporaría al grupo de Palacios.



Figura 5. Julio Palacios (1891–1970).



Figura 6. Gabriel M. Cardoso (1896–1954).

¹ Foto amablemente cedida por la Real Academia de Ciencia y Artes de Barcelona.



Figura 7. El Instituto Nacional de Física y Química (Madrid, 1932). El Rockefeller fue su apelativo cariñoso debido al hecho de que los fondos usados para su construcción (200.000 \$ USA) los donó la Fundación Rockefeller Junior. Véase también Figura 8.



Figura 8. El Rockefeller, hoy Instituto de Química-Física "Rocasolano", uno de los centros de investigación del CSIC.



Figura 9. Luis Brú (1909–1997).



Figura 10. José L. Amorós (1920–2001).



Figura 11. Julio Garrido Marea (1911–1982).

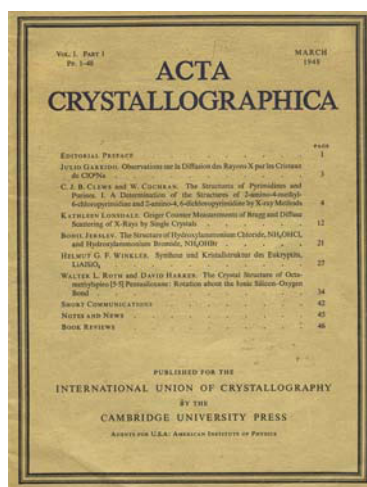


Figura 12. Portada del primer volumen y primer número de Acta Crystallographica.

El ímpetu de aquellos jóvenes cristalógrafos tras la infortunada Guerra Civil fue la raíz de la cristalografía española actual. Entre ellos, Luis Bru (Figura 9) promovió por primera vez el uso de los rayos X y de la microscopía electrónica en las Islas Canarias, posteriormente (después de 1949) en Sevilla y, finalmente (desde 1956) en la *Universidad Complutense de Madrid*. Luis Rivoir dirigió el Departamento de Rayos X en el Instituto de Física "Alonso de Santa Cruz" del CSIC (anteriormente *Instituto Nacional de Física y Química*). José Luis Amorós (Figura 10), un ex alumno de Pardillo, estuvo en el Instituto Lucas Mallada (CSIC) desde 1942 y, posteriormente, en la *Universidad de Barcelona*, en la *Universidad de Saint Louis* (EE UU), en la *Universidad Complutense de Madrid* desde 1956, y de nuevo a EE UU, hasta su regreso en 1974 a la mencionada universidad madrileña, en donde formó un grupo de jóvenes cristalógrafos y expertos en crecimiento de cristales.

Cuando en 1948 apareció la revista *Acta Crystallographica*, el primer artículo publicado en su primer volumen (Figura 12), titulado *Observations sur la diffusion des rayons X par les cristaux de ClO_3Na* ^[4], iba firmado por Julio Garrido (Figura 11), joven investigador del grupo de Julio Palacios. Y en este primer número también se publicaba una nota del mismo autor sobre la estructura de la carnitina, así como una reseña del libro de J. Garrido y J. Orland titulado *Los Rayos X y la Estructura fina de los Cristales: Fundamentos Teóricos Prácticos y Métodos* (1946). Un año más tarde, en 1949, el CSIC fundó el *Comité Nacional Español de Cristalografía* que se adhirió a la *Unión Internacional de Cristalografía* (IUCr, <http://www.iucr.org/>) creada dos años antes, en 1947.

En 1950, se fundó la *Asociación Cristalográfica Española* (ACE) con 35 miembros, entre ellos Francisco Pardillo, Luis Rivoir, Gabriel Martín Cardoso, Manuel Abad y José Luis Amorós como primera Junta de Gobernadores, cuya primera reunión se celebró en Barcelona. Durante esos años fueron invitados a España muchos cristalógrafos importantes, como Taylor, Laval, Lipson, Jeffrey, Wyckoff, Hägg, Buerger, Zädonov, Fornaseri, MacGillavry, Strunz, Henry... Y diez años después, en 1960, se fundó la *Asociación Iberoamericana de Cristalografía*.

Durante las décadas que siguieron a los 1950, los estudiantes eran conscientes de que la cristalografía en España estaba centrada en dos escuelas principales, una en Barcelona en torno a Manuel Font-Altaba (Figura 13, Universidad de Barcelona) y otra en Madrid alrededor de Sagrario Martínez Carrera y Severino García-Blanco (Figuras 14 y 15, Instituto de Química-Física "Rocasolano", CSIC). En aquel Instituto es donde Sagrario Martínez-Carrera incorporó sus experiencias



Figura 13. M. Font-Altaba (1922–2005).



Figura 14. S. Martínez-Carrera (1925–).



Figura 15. S. García-Blanco (1922–2003).

traídas de Pittsburgh sobre los incipientes programas de computación que sustituyeron a las famosas tiras de Beevers-Lipson y a las máquinas de cálculo casi manuales. Entre aquellos grupos de investigadores se llegaron a concentrar un par de equipos de difracción de rayos X de tipo Jong-Bowman y algunas cámaras de tipo Weissenberg, y comenzaron a usarse (con muchas dificultades) las primeras computadoras IBM. Los años 70 trajeron a Madrid el primer difractor automático de cuatro círculos para monocristal que poco a poco fue sustituyendo a las antiguas cámaras de Weissenberg y de precesión (Figura 16).

Durante largos años, el grupo madrileño localizado en el “Rocasolano” (CSIC) hizo un esfuerzo adicional para dar soporte a todos sus colegas cristalógrafos españoles, ofreciendo todas las facilidades locales para la medida experimental de datos de difracción (Figura 17), la creación y mantenimiento de las primeras librerías de cálculo cristalográfico en España (instalado en una computadora central UNIVAC del Ministerio de Educación y Ciencia), y haciendo un esfuerzo económico para llegar a un acuerdo con el *Cambridge Crystallographic Data Centre* (CCDC) y el CSIC para ofrecer gratuitamente a todas las instituciones académicas españolas copias regulares de la base de datos cristalográficos *Cambridge Structural Database* (CSD). Gracias a la generosidad del CCDC, este acuerdo se extendió más tarde a todos los países de América Latina, situación que aún sigue en vigor.

La influencia de la cristalografía, tan importante para el desarrollo de la química en España durante el último tercio del

siglo XX, condujo a la creación de varios grupos de cristalógrafos cuya relevancia científica está fuera de toda duda. Y en esta empresa, parte de la generación de cristalógrafos españoles nacidos alrededor de la década de 1940 también jugó un papel importante. Con grandes y generosos esfuerzos, estas personas lograron elevar el nivel de la cristalografía que se desarrollaba en España a un lugar legítimo en la escena internacional. Muchos de ellos han muerto, incluyendo F. H. Cano (CSIC) y X. Solans (Univ. de Barcelona), otros se han retirado como J. Fayos y F. Sanz (CSIC), y J. A. Subirana (Univ. Politécnica de Cataluña), mientras que otros siguen en activo como J. M. Amigó (Univ. de Valencia), C. Miravittles, C. Foces-Foces, E. Iglesias y M. Martínez-Ripoll (CSIC). Sin embargo, al contrario de lo que ha ocurrido (y ocurre) en otros países desarrollados, la cristalografía en España y especialmente en el mundo académico, parece seguir siendo una asignatura pendiente, quizá porque, erróneamente, es considerada como una técnica menor, de aplicación trivial e interpretación baladí. De modo similar, la cristalografía aplicada a las macromoléculas, es igualmente la disciplina que más profundamente ha repercutido en la Biología, Bioquímica y Biomedicina, dando nombre a la Genómica Estructural, sin límites en la complejidad molecular y, por lo tanto, capaz de abordar el estudio de enzimas, proteínas, virus, ácidos nucleicos y todos sus complejos. El conocimiento detallado de la estructura de las macromoléculas biológicas permite no sólo la comprensión de la relación entre estructura y función, sino realizar propuestas racionales de mejora funcional, lo que constituye un objetivo prioritario de la Biomedicina actual. Frente a la importancia de estos aspectos, del apreciable número de grupos de investigación en España, muy competitivos en Biología Celular y Molecular, se hace aún más patente cierta falta de recursos, o desequilibrio, entre los escasos laboratorios españoles dedicados a la cristalografía de macromoléculas biológicas.

A finales de los años ochenta, España se convirtió en el primer miembro colaborador científico del Instituto Laue-Langevin (ILL), el reactor de alto flujo de neutrones sito en Grenoble, y con ello se abrieron nuevas posibilidades para la comunidad cristalográfica española, incluyendo a los físicos, biólogos e ingenieros. Ello trajo consigo un aumento de la actividad desarrollada en torno a la cristalografía magnética, materia condensada blanda, líquidos y vidrios, así como a la biología. Finalmente, la entrada de España en el *European Synchrotron Radiation Facility* (ESRF) también contribuyó decisivamente al comienzo de una nueva etapa de la actividad cristalográfica española.

En la actualidad, el *Grupo Español de Cristalografía y Crecimiento Cristalino* (GE3C), grupo especializado vinculado a las RR SS EE de Física y Química, cuenta con más de 200 miembros. Y si tenemos en cuenta a los cristalógrafos asociados a otros grupos, como los usuarios de neutrones, los de estado sólido, proteómica, superficies, etc., se llega a los 400 investigadores españoles que participan de los avances cristalográficos. La mayoría de ellos se agrupan en equipos bien reconocidos, distribuidos por toda España: Islas Canarias, Andalucía, Comunidad Valenciana, Asturias, Cataluña, Galicia, País Vasco y, por supuesto Madrid, así como en las restantes regiones de nuestra geografía. Todos ellos comparten más de 200 equipos de difracción de rayos X para monocristal, polvo y técnicas estructurales afines, y mantienen una participación activa en técnicas de neutrones y de sincrotrón en diferentes instalaciones europeas (dos

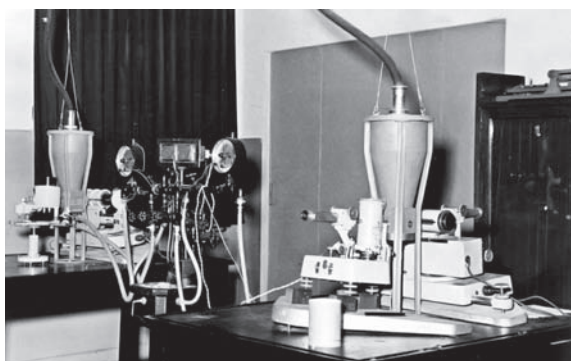


Figura 16. Cámaras Weissenberg y tubos de rayos X usados en Madrid durante la década de 1960.



Figura 17. El primer difractor automático de cuatro círculos (PW1100) instalado en España, Madrid, 1973.

instrumentos españoles en el ILL, D1B y D15, y dos líneas de luz en el ESRF, BM16 y BM25). Además, el sincrotrón español ALBA (Figura 18) fue inaugurado en marzo de 2010, con varias líneas de luz X para cristalografía, y en donde la microscopía de rayos X también estará bien representada.

Los cristalógrafos españoles organizan anualmente un Congreso Nacional, así como seminarios, talleres, conferencias y reuniones internacionales. En este sentido, en la reunión del Comité Ejecutivo de la Unión Internacional de Cristalografía que se organizó durante el tercer Congreso Internacional y Asamblea General de la IUCr, en julio de 1954 en París, se propuso que la Unión debería organizar simposios especializados entre cada Asamblea General. La primera de estas reuniones se celebró en Madrid en 1956 (Figura 19) y desde entonces, estas reuniones especializadas entre Congresos Internacionales se han convertido en una característica regular de las actividades de la Unión.

En abril de 1974 una nueva Conferencia inter-congreso se celebró igualmente en Madrid sobre el tema de dispersión anómala (Figuras 20 y 21), cuyos resultados se integraron en un valioso libro que se ocupó de todos los aspectos de la dispersión anómala conocidos hasta ese momento.

Años más tarde y gracias a los votos explícitos de Mario Nardelli (Italia) y Olga Kennard (Reino Unido), del apoyo de M. Font-Altaba (alcalde de Barcelona durante la década de 1980) y de la ayuda financiera concedida por el Ayuntamiento de dicha ciudad, el *6th European Crystallographic Meeting* (ECM-6) tuvo lugar en Barcelona durante el verano de 1980, siendo Carlos Miravittles el Presidente del Comité Organizador.

En la actualidad, y con la inestimable ayuda del *Comité Internacional para el Programa Científico* (International

Program Committee, IPC), estamos igualmente dispuestos a hacer todo lo posible para ofrecer un excelente contenido científico y una atractiva organización para el *XXII Congreso y Asamblea General* de la IUCr^[5] que se celebrará por primera vez en España, y para hacer de Madrid-2011 (casi tras un siglo desde los famosos experimentos de Laue y Bragg) un acontecimiento memorable desde el punto de vista científico y social. Los cristalógrafos estamos convencidos de la importancia de este evento y esperamos que nuestras Instituciones, también. El congreso contará con cuatro conferencias plenarios (tres de ellas ofrecidas por los tres Premios Nobel de Química de 2009), 36 conferencias temáticas y 98 microsimplios, además de un número relevante de reuniones satélite y talleres que se llevarán a cabo en toda España. El programa abarcará las áreas más relevantes de interés, desde el crecimiento de cristales hasta la incidencia de la cristalografía en el arte, e incluirá la biología y biomedicina, ciencia de materiales, química inorgánica, orgánica y de la coordinación, topología, física de la difracción, superficies, y un largo etcétera. Su logotipo se muestra en la Figura 22.



Figura 18. Vista del sincrotrón español ALBA, en 2009.



Figura 19. La primera reunión de la IUCr que tuvo lugar en Madrid en 1956.



Figura 20. Reunión sobre Dispersión Anómala, celebrada en Madrid en 1974.



Figura 21. De izquierda a derecha, Dorothy Hodgkin, S.C. Abraham y S. Martínez-Carrera (Madrid, 1974).



Figura 22. Logotipo oficial del XXII Congreso y Asamblea General de la IUCr.

Los cristalógrafos, hoy en España

La mayor parte de los cristalógrafos que trabajan en España están inscritos en el *Grupo Especializado de Cristalografía y Crecimiento Cristalino (GE3C)*, (<http://bit.ly/dzHLTv>), grupo que está asociado a ambas *Reales Sociedades Españolas*, la de Química (*RSEQ*, <http://www.rseq.org/>) y la de Física (*RSEF*, <http://bit.ly/aEXW4k>). La mayor parte de ellos están igualmente asociados a la *European Crystallographic Association (ECA)*, (<http://www.ecanews.org/>). Paralelamente, el *Comité Español de Cristalografía* (<http://bit.ly/9wTtpn>) es el órgano responsable de coordinar la representación oficial española en la *IUCr*. Además, existen otras asociaciones españolas relacionadas con la cristalografía, organizadas de acuerdo con el tipo de radiación electromagnética de interés para el campo de estudio:

- *Asociación de Usuarios de Sincrotrón de España (AUSE)*, <http://bit.ly/bJHWmY>
- *Sociedad Española de Técnicas Neutrónicas (SETN)*, <http://bit.ly/atYvKF>

Los grupos de cristalógrafos en España se concentran fundamentalmente en las Comunidades Autónomas que se muestran en el gráfico (Figura 23):



Figura 23. Distribución de grupos de cristalógrafos en España. Los círculos naranja muestran su situación aproximada. Los números sólo significan una referencia regional que se utiliza en los textos siguientes.

1. Galicia

La cristalografía en Galicia se cultiva en:

- El *Grupo de Investigación de Química Molecular y Estructural (GIQIMO)*, Universidad de Santiago de Compostela, un grupo bien definido y creado en 1980 por Alfonso Castiñeiras (qiac01@usc.es) tras su estancia en el Departamento de Cristalografía y Biología Estructural del CSIC en Madrid. Su investigación se distribuye entre los campos de materiales magnéticos, química bio-inorgánica, química estructural, ingeniería cristalina y estructuras supramoleculares. Véase también: <http://bit.ly/aeHKbf>.

- La *Unidad de Rayos X de la Universidad de Santiago de Compostela*, que forma parte de la red de infraestructura para investigación y desarrollo tecnológico de dicha Universidad (*RAIDT*). Entre otros, se dedica a la determinación de las estructuras de compuestos cristalinos (monocristal y polvo microcristalino). El grupo, liderado por Antonio Llamas (antonio.llamas@usc.es), está implicado en varios proyectos nacionales e internacionales en colaboración con otros grupos de la Universidad, fundamentalmente de los Departamentos de Orgánica, Inorgánica y Bioquímica. Durante los últimos seis años, han realizado un esfuerzo especial para establecer una línea de investigación en cristalografía macromolecular en esta Universidad, estableciendo colaboraciones internas y externas muy fructíferas. Líneas actuales de interés incluyen estructuras de reovirus y proteínas de adenovirus aviáres, así como de otras fibras virales, la estructura de complejos de dehidroquinasa con drogas inhibitoras y péptidos cíclicos (análogos GramS), entre otros. Véase también: <http://bit.ly/cGJa6X>.
- Las *Universidades de Vigo y Coruña* mantienen equipos de difracción en forma de unidades de servicio para sus departamentos de investigación. Véase <http://bit.ly/ahx8BO> y <http://bit.ly/9zwlIV>, respectivamente.

2. Asturias

Los grupos más relevantes de cristalógrafos en Asturias pertenecen a la Universidad de Oviedo.

- El *Grupo de Cristalografía de Rayos X* (<http://bit.ly/9viBu4>), que forma parte del Departamento de Química-Física y Analítica, es uno de los grupos españoles más activos en cristalografía. Su fundación allá por los años 1980 fue consecuencia del empeño de Fermín Gómez Beltrán y Santiago García Granda (sgg@uniovi.es), actual líder del grupo y presidente de la ECA (*European Crystallographic Association*). Sus líneas de investigación más relevantes se concentran en el desarrollo de herramientas para la resolución automática de estructuras cristalinas de pequeñas moléculas, modelos QSAR y QSPR y, en general, cristalografía de pequeñas moléculas.
- El *Grupo de Crecimiento Cristalino y Geoquímica Acuática Experimental* (<http://bit.ly/anZmfz>) es un grupo multidisciplinar implicado en una red europea que focaliza sus investigaciones en el comportamiento de la disolución y precipitación de soluciones sólidas. El líder del grupo es Manuel Prieto Rubio (mprieto@geol.uniovi.es).
- El *Departamento de Física* de esta Universidad también muestra actividad cristalográfica, aunque fundamentalmente relacionada con materiales magnéticos y utilizando difracción de neutrones (<http://bit.ly/a8qqd7>). Esta línea de investigación está dirigida por Jesús A. Blanco Rodríguez (jabr@uniovi.es) y Pedro Gorria Korres (pgorria@uniovi.es).

3. Cantabria

El *Grupo de Magnetismo de la Materia* de la *Universidad de Cantabria* (<http://bit.ly/ceXijZ>) es pionero en España en el uso de las técnicas de difracción de neutrones, y la primera estructura magnética publicada por un español iba firmada por José Carlos Gómez Sal (jose.gomezsal@unican.es), el cual, desde varios comités del ILL promovió una estrecha colaboración entre las comunidades de usuarios de neutrones y de rayos X. Las actividades del grupo, incluyendo a Jesús Rodríguez Fernández (jesus.rodriguez@unican.es) y a Luis Fernández Barquín (barquinl@unican.es) están relacionadas con las estructuras cristalinas y magnéticas de metales, nanocristales, cristalización y difracción a bajo ángulo.

En el *Grupo de Alta Presión y Espectroscopía* (<http://bit.ly/b0j7BK>) de la misma Universidad, Fernando Rodríguez (fernando.rodriguez@unican.es) investiga en las estructuras de aislantes en condiciones extremas.

4. País Vasco

La cristalografía en el País Vasco, concretamente en Bilbao y alrededores, está bien representada por varios grupos de investigación dedicados a aspectos químicos y físicos de la cristalografía, así como por la aplicación de la misma a sistemas biológicos.

- El *Departamento de Mineralogía y Petrología* (<http://bit.ly/92zVzg>) de la *Universidad del País Vasco* (UPV/EHU) está actualmente liderado por Karmele Urtiaga (karmele.urtiaga@ehu.es), quien reemplazó a María Isabel Arriortua (maribel.arriortua@ehu.es) cuando esta última se hizo cargo de la Dirección de los *Servicios Generales de Investigación* de la UPV/EHU, que a su vez incluyen un buen equipamiento para técnicas de difracción de rayos X dedicado a toda la Universidad (<http://bit.ly/cFitTW>). Las líneas de investigación del Departamento se concentran en el estudio de sistemas multifuncionales para aplicaciones medioambientales (materiales zeotípicos y zeolitas), y energéticas, como los nuevos materiales catódicos para optimizar las células de combustible.
- El *Departamento de Química Inorgánica* de la UPV/EHU (<http://www.ehu.es/qi/>) distribuido en dos campus, está dirigido por Pascual Román Polo (pascual.roman@ehu.es). Este Departamento mantiene activas las siguientes líneas de investigación: b1) Estructura de materiales laminares y tubulares de interés tecnológico, liderado por Teófilo Rojo (teo.rojo@ehu.es); b2) Química de polioxometalatos, sistemas híbridos orgánico-inorgánico, dirigido por Juan Manuel Gutiérrez-Zorrilla (juanma.zorrilla@ehu.es); b3) Caracterización estructural y comportamiento magnético de complejos polinucleares con ligandos orgánicos polifuncionales, codirigido entre Pascual Román y Antonio Luque (antonio.luque@ehu.es).
- El *Grupo de Propiedades Estructurales y Dinámicas de Sólidos* (<http://bit.ly/b4AA3b>), igualmente localizado en la UPV/EHU, está dirigido por Juan Manuel Pérez-Mato (wmpemam@lg.ehu.es) y adscrito al *Departamento de*

Física de la Materia Condensada. Centra sus actividades de investigación sobre problemas dinámicos en estructuras y redes de materiales funcionales y transiciones de fase en cristales inorgánicos y moleculares, sin olvidar sus temas de investigación fundamental, tales como cristalografía matemática, métodos cristalográficos no convencionales, propiedades térmicas, cristales aperiódicos, cristalografía de alta presión y estudios *ab-initio* de materiales ferroicos. El grupo es también responsable del denominado Servidor Cristalográfico de Bilbao (*Bilbao Crystallographic Server*, <http://www.cryst.ehu.es/>), un esfuerzo de más de diez años bajo la dirección de Moisés Aroyo (mois.aroyo@ehu.es). Del mismo modo, el grupo generó una base de datos de estructuras incommensurables, actualmente en proceso de reorganización bajo la dirección de Gotzon Madariaga (gotzon.madariaga@ehu.es).

- El *Grupo de Magnetismo y Materiales Magnéticos* (<http://bit.ly/cetJqA>) de la UPV/EHU, dirigido por José M. Barandiarán García (manub@we.lc.ehu.es), investiga sobre estructuras nanocristalinas y procesos de cristalización relacionados con propiedades eléctricas y magnéticas de los materiales.
- La *Unidad de Biofísica*, (<http://bit.ly/daFkUd>) dependiente de la UPV/EHU y del CSIC, y dirigida por Félix M. Goñi (felix.goni@ehu.es), dedica una parte fundamental de su investigación al estudio de las membranas biológicas, y el grupo de cristalografía está liderado por Diego Guérin (gbxguxxd@lg.ehu.es).
- La *Unidad de Biología Estructural* está localizada en el denominado *CIC bioGUNE* (Center for Cooperative Research in Biosciences, <http://www.cicbiogune.com/>), dirigido por José M. Mato. En dicho centro tienen cabida cuatro diferentes grupos de investigación cuya herramienta fundamental es la cristalografía biológica. f1) El primero de ellos está dirigido por Alfonso Martínez de la Cruz (amartinez@cicbiogune.es) dedicado al estudio de la regulación de los dominios CBS en sus proteínas diana, y a un segundo gran proyecto dirigido al conocimiento funcional y estructural de canales iónicos; f2) Lucy Malinina (lucy@cicbiogune.es) dirige sus esfuerzos a los complejos RNA-proteína-lípido con la intención de comprender determinadas enfermedades neurodegenerativas; f3) Aitor Hierro (ahierro@cicbiogune.es), cuya investigación se centra en los procesos de tráfico intracelular; y f4) Nicola G. A. Abrescia (nabrescia@cicbiogune.es) interesado en los mecanismos de ensamblaje de virus.

5. Navarra

La investigación cristalográfica en Navarra está únicamente localizada en la Universidad Pública de Navarra, y concretamente en el *Departamento de Física* (<http://bit.ly/bfT7fT>) en donde Vicente Recarte (recarte@unavarra.es) e Iñaki Pérez de Landazabal (ipzlanda@unavarra.es), como parte del *Grupo de Propiedades Físicas y Aplicaciones de los Materiales*, dedican su investigación a las transformaciones estructurales y propiedades magnéticas de aleaciones ferromagnéticas con memoria de formas.

6. Castilla y León

La cristalografía en la vasta Comunidad Autónoma de Castilla y León está representada por un grupo de investigación y por varias unidades de servicio adscritas a universidades de esta región.

- a. El *Grupo de Biología Estructural* del Centro de Investigación del Cáncer (<http://xtal.cicancer.org>), Universidad de Salamanca y CSIC), dirigido por J. M. de Pereda (pereda@usal.es), aplica cristalografía de proteínas para el estudio de los procesos de adhesión celular.
- b. Tres de las Universidades de esta Comunidad Autónoma mantienen unidades de servicio de difracción: b1) Universidad de Salamanca (<http://bit.ly/b1W7Ov>), dirigido por Francisca Sanz González (sdrayosxr@usal.es); b2) la unidad de servicio de la Universidad de Burgos (<http://bit.ly/bmx8aB>), dirigida por Jacinto José Delgado (jdelgado@ubu.es); y b3) la unidad adscrita a la Universidad de Valladolid, dirigida por Fernando Rull Pérez (rull@fmc.uva.es).

7. La Rioja

La *Universidad de La Rioja* dispone de una Unidad Central de Servicio para los grupos de investigación de dicha universidad, pero especialmente para aquellos adscritos al *Departamento de Química* (<http://bit.ly/9dRIUu>). La investigación cristalográfica en dicha unidad está dirigida por Jesús Berenguer (jesus.berenguer@unirioja.es).

8. Aragón

La investigación cristalográfica en esta Comunidad Autónoma está fundamentalmente representada por tres grupos adscritos al Instituto de Ciencia de Materiales de Aragón (centro mixto entre la Universidad de Zaragoza y el CSIC):

- a. El *Grupo de Preparación, Propiedades y Transformaciones de Sólidos Moleculares* (<http://bit.ly/aDVwlv>), liderado por Larry Falvello (falvello@unizar.es), dirige su investigación a la preparación y caracterización estructural de sólidos moleculares, sus propiedades, comportamiento dinámico y transformaciones.
- b. El *Departamento de Química de la Coordinación y Catálisis Homogénea* (<http://bit.ly/ayrYhD>) se interesa por los aspectos más relevantes de la química de la coordinación en los complejos metálicos del grupo del Pt, incluyendo su reactividad especialmente en procesos catalíticos. La investigación cristalográfica está dirigida por Fernando J. Lahoz (lahoz@unizar.es).
- c. En el *Departamento de Física de la Materia Condensada* del mismo instituto, Javier Campo (javier.campo@unizar.es) es el coordinador científico del Grupo Español de Investigación Colaborativa en el ILL y el presidente de la Sociedad Española de Técnicas Neutrónicas (SETN). Es especialista en cristalografía magnética en imanes de base molecular, dispersión de neutrones y en quiralidad magnética. Véase también: <http://bit.ly/bXfx5u>.

Recientemente, el Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos (BIFI, <http://bifi.es/>) se ha incorporado también a la investigación cristalográfica a través de un grupo codirigido por Ramón Hurtado Guerrero (rhurtado@bifi.es) y Marta Martínez Júlvez (mmartinez@unizar.es).

9. Cataluña

Esta Comunidad Autónoma, y especialmente su capital Barcelona, son, junto con Madrid, las regiones en donde se ubican el mayor número de grupos de investigación cristalográfica.

- a. En el *Departamento de Biología Estructural*, dependiente del Instituto de Biología Molecular de Barcelona (CSIC), se incluyen varios laboratorios de cristalografía: a1) en el *Laboratorio de Biología Estructural de Proteínas, Ácidos Nucléicos y sus Complejos* (<http://bit.ly/bPCp5E>), liderado por Miquel Coll (mcoll@ibmb.csic.es) se aplican métodos cristalográficos para el estudio de sistemas relacionados con la transferencia genética que implica el paso del ADN a través de la membrana celular; a2) Ignacio Fita (ifrcr@ibmb.csic.es) es el líder del *Laboratorio de Biología Estructural en Sistemas de Estrés Oxidativo. Proteínas de Membrana* (<http://bit.ly/ak4m0F>) que dirige sus investigaciones al estudio estructural y funcional de proteínas relacionadas con el estrés oxidativo; a3) el objetivo fundamental de la investigación en el *Laboratorio de Proteólisis* (<http://bit.ly/a0K3uU>), dirigido por F. Xavier Gomis-Rüth (xgrcri@ibmb.csic.es), es la comprensión de las relaciones estructura-función y los mecanismos de actividad de enzimas de interés biomédico y biotecnológico; a4) María Solá (msvcri@ibmb.csic.es) dirige el *Laboratorio de Macromoléculas de Organelos* (<http://bit.ly/9UIJkE>), con el propósito de estudiar los procesos bioquímicos de las proteínas existentes en dichas partículas, que muestran ciertas peculiaridades respecto de las existentes en otros compartimentos celulares; a5) el *Laboratorio de Métodos Cristalográficos* (<http://bit.ly/aMWbJA>), dirigido por Isabel Usón (iufcri@ibmb.csic.es), tiene como meta fundamental el desarrollo de métodos computacionales para un óptimo uso de los datos de difracción en macromoléculas biológicas; a6) finalmente, el *Laboratorio de Virología Estructural y de Grandes Complejos Biológicos* (<http://bit.ly/bp7ihg>), liderado por Nuria Verdager (nvmcri@ibmb.csic.es), se focaliza en el estudio estructural y funcional de diferentes procesos del ciclo biológico de los virus de ARN.
- b. El *Instituto de Ciencia de Materiales de Barcelona* (CSIC) incluye un amplio conjunto de investigadores que basan su trabajo en técnicas cristalográficas. Los investigadores del *Departamento de Cristalografía* (<http://bit.ly/aJrQHZ>), actualmente dirigido por Elies Molins (elies@icmab.es), centran su trabajo en varias líneas: b1) el desarrollo de metodología cristalográfica, aplicada tanto a muestras monocristalinas como policristalinas, está codirigido por Jordi Rius (jordi.rius@icmab.es) y Carles Miravittles (carles.miravittles@icmab.es); b2) los estudios de densidades electrónicas, fundamentalmente en los enlaces de hidrógeno está dirigido por Elies Molins e Ignasi Mata (imata@icmab.es); b3) en dicho departamento existen, además, otras líneas de

investigación cristalográficas, como las lideradas por Anna Roig (roig@icmab.es) y dedicadas a la ingeniería cristalina de materiales farmacéuticos, entre otras. Otros investigadores de este instituto, esta vez adscritos al *Departamento de Materiales Magnéticos y Óxidos Funcionales* (<http://bit.ly/be8Ys0>), dirigidos por José Luis García-Muñoz (garcia.munoz@icmab.es), hacen uso de técnicas de difracción muy precisas para la cristalografía estructural y magnética de óxidos. Finalmente, en otros departamentos de este mismo instituto, como en el de *Química del Estado Sólido* (<http://bit.ly/dq4vtd>), liderado por Nieves Casañ (nieves@icmab.es), se aplican también técnicas cristalográficas para el estudio de nuevos materiales.

- c. La Universidad de Barcelona tradicionalmente ha dispuesto también de importantes grupos de cristalógrafos, como por ejemplo los adscritos al *Departamento de Cristalografía, Mineralogía y Depósitos Minerales* (<http://bit.ly/aeRa6N>), dirigido por Salvador Galí (gali@ub.edu), aunque el trabajo cristalográfico está directamente liderado por Miguel Ángel Cuevas (mcuevasdiartel@ub.edu).
- d. El *Grupo de Cristalografía, Estructura y Función de Macromoléculas Biológicas* (<http://bit.ly/c53Ep0>), adscrito al Departamento de Ingeniería Química de la Universidad Politécnica de Cataluña y dirigido por Lourdes Urpi (lourdes.urpi@upc.edu), está dirigido al estudio estructural de ADN y sus interacciones con drogas, iones y proteínas.
- e. El *Grupo de Física y Cristalografía de Materiales* (<http://bit.ly/a4e1jA>), codirigido por Francesc Díaz y Magdalena Aguiló (aguilo@quimica.urv.es), está adscrito a la Universidad Rovira i Virgili (Tarragona) y dirige sus investigaciones a la caracterización estructural de nuevos materiales con potencial uso en tecnologías láser y fotónicas.
- f. El *Instituto Catalán de Investigaciones Químicas* (ICIQ) (<http://bit.ly/avdERB>) dispone de un grupo de cristalógrafos dirigidos por Jordi Benet Buchholz (jbenet@iciq.es) para a la caracterización estructural de nuevos compuestos.
- g. Finalmente, la *Unidad de Cristalografía y Mineralogía* (<http://bit.ly/9buGXE>), adscrita al Departamento de Geología de la Universidad Autónoma de Barcelona, realiza investigación en el ámbito cristalográfico, dirigido por Juan F. Piniella (juan.piniella@uab.es).

10. Madrid

La Comunidad Autónoma de Madrid ofrece, junto a Cataluña, el mayor número de grupos de cristalógrafos de España. Directamente localizados en la ciudad de Madrid encontramos:

- a. El *Departamento de Cristalografía y Biología Estructural* (<http://bit.ly/c8cHaM>) adscrito al Instituto de Química-Física Rocasolano (CSIC) ofrece uno de los laboratorios españoles mejor equipados para estudios cristalográficos en macromoléculas biológicas, incluyendo desde su pro-

ducción, caracterización y cristalización, hasta las técnicas más modernas para difracción de rayos X, incluyendo su procesado y análisis estructural y funcional ulterior. Armando Albert (xalbert@iqfr.csic.es), actual Jefe de Departamento, dirige un grupo dedicado al estudio de la respuesta celular al estrés. Julia Sanz (xjulia@iqfr.csic.es) lidera un grupo dedicado al estudio de enzimas activos en carbohidratos; José M. Mancheño (xjosemi@iqfr.csic.es) dirige proyectos sobre enzimas de bacterias del ácido láctico, y Lourdes Infantes (xlourdes@iqfr.csic.es) es especialista en estudios de acoplamiento e interacciones moleculares. Al margen de otros jóvenes investigadores del departamento, adicionalmente, Concepción Foces-Foces (cfofes@iqfr.csic.es) y Martín Martínez-Ripoll (xmartin@iqfr.csic.es) constituyen un puente muy activo entre las anteriores generaciones de cristalógrafos del departamento y las actuales. El departamento, que actúa como Centro Nacional Asociado al *Cambridge Crystallographic Data Centre* (CCDC), y gracias a la financiación concedida por el CSIC y la ayuda del CCDC, distribuye licencias gratuitas de la base de datos CSD a más de 130 instituciones académicas españolas y latinoamericanas. Merece la pena añadir que el departamento ha desarrollado y mantiene una atractiva página web (<http://bit.ly/c8cHaM>) de amplia difusión y ofrecida en español e inglés, para la enseñanza de la cristalografía, sin olvidar los aspectos históricos.

- b. El *Grupo de Biología Estructural de Proteínas* (<http://bit.ly/8Zsp5p>), adscrito al Departamento de Biología Química y Física del Centro de Investigaciones Biológicas (CSIC), dispone de tres laboratorios de cristalografía dirigidos respectivamente por Antonio Romero (romero@cib.csic.es), Cristina Vega (cvega@cib.csic.es) y Fernando Tornero (cftornero@cib.csic.es).
- c. El Centro de Investigaciones Oncológicas (CNIO) dispone de tres grupos de cristalógrafos: c1) Guillermo Montoya (gmontoya@cnio.es) lidera el *Grupo de Cristalografía Macromolecular* (<http://bit.ly/dDdLHF>), que focaliza sus investigaciones en el estudio del papel de macromoléculas implicadas en procesos oncogénicos; c2) la investigación desarrollada en el *Grupo de Adhesión y Señalización Celular* (<http://bit.ly/cZn2d8>), dirigida por Daniel Lietha (dlietha@cnio.es), está enfocada al estudio de los mecanismos de determinadas quinasas implicadas en adhesión celular; y c3) Santiago Ramón (sramon@cnio.es) dirige el *Grupo de Bases Estructurales de la Integridad Genómica* (<http://bit.ly/dwOC7r>) implicado en la resolución de las estructuras del conjunto proteico denominado RAG1/2 implicado en procesos de cáncer linfático.
- d. La Universidad Complutense de Madrid dispone de los siguientes departamentos en donde existe investigación cristalográfica: d1) en el *Departamento de Geología y Mineralogía* de la Facultad de Geología (<http://bit.ly/avBUbn>), dirigido por José Fernández Barrenechea (barrene@geo.ucm.es), y acompañado por Lourdes Fernández (ishtar@geo.ucm.es), Victoria López (vcornejo@geo.ucm.es) y Sol López Andrés (antares@geo.ucm.es), entre otros, son expertos en crecimiento cristalino de fases minerales

y otros compuestos inorgánicos, gemología, crecimiento epitaxial y mecanismos de ruptura quiral durante el crecimiento; d2) en el *Departamento de Química Inorgánica I* (<http://bit.ly/aALUdM>), Carlos Otero Díaz (carlos1@quim.ucm.es) líder de un grupo de investigación sobre caracterización de cristales no moleculares con estructuras conmensurables y/o inconmensurables; por último, esta Universidad dispone de un *Servicio Centralizado de Difracción de Rayos X* (<http://bit.ly/9dXuUc>).

- e. Aunque sólo sea con la pretensión de contribuir a la enseñanza de la cristalografía, merece la pena destacar que la *Universidad Nacional de Educación a Distancia*, conjuntamente con el Departamento de Ingeniería Geológica de la *Universidad Politécnica de Madrid*, mantienen un servidor web conocido como *Cristamine* (<http://bit.ly/djXrDb>).

A unos 15 km al norte de la ciudad de Madrid, en el campus de la Universidad Autónoma de Madrid, podemos encontrar algunos departamentos universitarios e institutos de investigación del CSIC con actividad cristalográfica.

- a. El Departamento de Estructura de Macromoléculas del Centro Nacional de Biotecnología (centro asociado entre la Universidad Autónoma de Madrid y el CSIC) incluye dos grupos de cristalógrafos: a1) el *Grupo sobre Interacciones Célula-Célula y Virus-Célula* (<http://bit.ly/9tex0T>) que lidera José María Casanovas (jcasanovas@cnb.csic.es), y a2) el recientemente incorporado grupo dirigido por Mark J. van Raaij (markvanraaij@gmail.com) dedicado a la biología estructural de fibras virales.
- b. El *Grupo de Crecimiento Cristalino* (<http://bit.ly/bqaKu9>), liderado por Ernesto Diéguez (ernesto.dieguez@uam.es) e incluido en el Departamento de Física de Materiales de la Universidad Autónoma de Madrid, dedica sus investigaciones a la cristalización de compuestos del tipo CdTe o similares, que se han demostrado como los mejores candidatos para la tecnología relacionada con el diagnóstico por imagen de patologías cardiovasculares y tiroideas.
- c. El *Departamento de Nuevas Arquitecturas en Química de Materiales* (<http://bit.ly/bGyavs>) del Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid (CSIC) dispone de un grupo de químicos y cristalógrafos liderado por Ángeles Monge Bravo (amonge@icmm.csic.es) y Enrique Gutiérrez-Puebla, jefe del Departamento, cuyas investigaciones se centran en el diseño, síntesis y caracterización estructural de nuevos materiales micro- y nano-porosos con propiedades multifuncionales, así como en la síntesis de sistemas aromáticos con propiedades electro-ópticas aplicables en el campo de la electrónica molecular.
- d. También en el mismo Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid (CSIC), aunque dependientes del *Departamento de Energía, Medioambiente y Tecnologías Sostenibles*, Jorge Hernández Velasco (hernandez-velasco@hmi.de) y José A. Alonso Alonso (ja.alonso@icmm.csic.es) mantienen una activa investigación cristalográfica dedicada a la caracterización de nuevos materiales por medio de la

difractometría de polvo, usando rayos X y neutrones. En el mismo departamento, Ángel Landa (landa@icmm.csic.es) y Pilar Herrero (pherrero@icmm.csic.es) son activos en difracción de electrones.

Finalmente, en la Universidad de Alcalá (30 km al este de la ciudad de Madrid) y dependiente del Departamento de Química Inorgánica, Pilar Gómez-Sal (pilar.gomez@uah.es) fundó en 1990 el *Grupo de Química Estructural*, centrado en la síntesis e identificación estructural de nuevos compuestos organometálicos, dendrímeros, polímeros órgano-metálicos y nuevas redes cristalinas formadas por uniones entre metales y unidades orgánicas.

11. Castilla-La Mancha

Investigación con actividad cristalográfica en la región de Castilla-La Mancha está presente en varios grupos incluidos en el *Departamento de Química Inorgánica de la Universidad de Castilla-La Mancha*, pero sobre todo en el *Grupo de Química Organometálica y Catálisis* (<http://bit.ly/csPCpp>). El trabajo cristalográfico concreto está encabezado por María Isabel López (mabel.lopez@uclm.es).

12. Valencia

La investigación sobre cristalografía química en la Universidad de Valencia está representada por varios grupos:

- a. El Instituto de Ciencia Molecular (ICMol) de dicha universidad dispone de dos grupos, el *Grupo de Química de la Coordinación* (<http://bit.ly/b9NRfN>) y el *Grupo de Investigación sobre Materiales Moleculares* (<http://bit.ly/cgTST8>). Sin embargo, las investigaciones estructurales en las que basan sus trabajos se lleva a cabo en otros centros.
- b. El *Departamento de Geología* (<http://bit.ly/9rL2wp>) contiene un pequeño grupo de cristalógrafos dirigidos por José M. Amigó (jose.m.amigo@uv.es).
- c. El trabajo de tipo cristalográfico que se lleva a cabo en el *Departamento de Química Inorgánica* de esta Universidad, fundamentalmente sobre estudios estructurales de compuestos organometálicos, es responsabilidad de Mercedes Sanau (mercedes.sanau@uv.es).
- d. En el *Departamento de Química Orgánica*, el grupo dedicado a la ingeniería cristalina de compuestos orgánicos, dirigido por Carmen Ramírez de Arellano (Carmen.Ramirezdearellano@uv.es), lleva a cabo estudios estructurales de compuestos organometálicos, organofluorados y algunos péptidos.

La Universidad Jaume I, localizada a 75 km al norte de la ciudad de Valencia, es también activa en investigación cristalográfica. Así, Vicente Esteve (estevev@qio.uji.es) es el responsable de los trabajos basados en difracción de polvo que se llevan a cabo en el *Departamento de Química Inorgánica y Orgánica*. Del mismo modo, Rosa Llusar (Rosa.Llusar@qfa.uji.es), líder del *Grupo de Investigación sobre Materiales Moleculares* (<http://bit.ly/bXZQNT>), adscrito al *Departamento de Química, Física y Analítica*, es también la

responsable del servicio general de difracción de monocristal de esta Universidad.

La cristalografía de macromoléculas está bien representada en esta Comunidad Autónoma, aunque no en el ámbito universitario, sino en el *Instituto de Biomedicina de Valencia*, adscrito al CSIC y situado en la capital de dicha Comunidad. En dicho centro existen tres unidades que utilizan la cristalografía como herramienta en sus investigaciones y que están integradas en el *Departamento de Genómica y Proteómica*. Vicente Rubio (rubio@ibv.csic.es) fue el promotor de la incorporación de la cristalografía a este centro de investigación y actualmente es el líder de la *Unidad de Enzimopatología Estructural* (<http://bit.ly/a5cxzT>). Alberto Marina Moreno (amarina@ibv.csic.es) es el responsable de la *Unidad de Cristalografía de Macromoléculas* (<http://bit.ly/97MFpx>), y Jerónimo Bravo (jbravo@ibv.csic.es) dirige la *Unidad de Transducción de Señales* (<http://bit.ly/c0vSvK>).

13. Andalucía

Distintas ciudades andaluzas mantienen grupos de investigación cristalográfica. En la ciudad de Sevilla podemos encontrar:

- a. En el *Instituto de Ciencia de Materiales de Sevilla* (<http://bit.ly/bB9uHg>, centro mixto entre la Universidad de Sevilla y el CSIC), María Jesús Dianeze (dianeze@us.es), Ángel Justo (jjusto@icmse.csic.es), Alberto Criado (criado@us.es) y María Dolores Estrada (estrada@us.es) son responsables de cierta actividad en cristalografía.
- b. El *Grupo de Química Organometálica y Catálisis Homogénea* del Instituto de Investigaciones Químicas (<http://bit.ly/bhaEYM>, centro mixto entre la Universidad de Sevilla y el CSIC), es un buen representante de la química organometálica española, y el trabajo cristalográfico asociado es responsabilidad de Celia Maya (maya@us.es).

En la Universidad de Málaga, Miguel A. García Aranda (g_aranda@uma.es) lidera un grupo de investigadores adscrito al *Departamento de Química Inorgánica, Cristalografía y Mineralogía*, que trabajan en aspectos estructurales de materiales con nuevas propiedades conductoras y magnéticas, haciendo uso fundamentalmente de la difracción de polvo.

La ciudad de Granada nos ofrece los siguientes grupos de investigación:

El recientemente creado *Grupo de Química de la Coordinación y Análisis Estructural* (<http://fqm195.ugr.es>) de la Universidad de Granada, cuya investigación cristalográfica está fundamentalmente dirigida por Daniel Martín (jdmartin@ugr.es).

El *Laboratorio de Estudios Cristalográficos* (LEC, <http://lec.ugr.es>), unidad mixta entre la Universidad de Granada y el CSIC y dirigido por Juan Manuel García Ruiz (juanma.garciaruiz@gmail.com) es un grupo bien conocido por su experiencia en nucleación y crecimiento cristalino en condiciones de difusión controladas, cristalización industrial, así como en procesos de biomineralización, habiendo incorporado desarrollos tecnológicos tales como la denominada “Granada crystallization box” o el APCF (Advanced Protein

Crystallization Facility), ya utilizado en vuelos de la ESA y NASA. Merece la pena añadir que García Ruiz es el director de un proyecto integrado por varios laboratorios españoles de cristalografía (La factoría de cristalización, <http://lafactoria.lec.csic.es/lafactoria/>), así como del “Máster y Doctorado en Cristalografía y Cristalización” (<http://lafactoria.lec.csic.es/mcc>), como acción conjunta entre la Universidad Internacional Menéndez Pelayo y el CSIC, con la participación de otras Universidades españolas y extranjeras.

La Universidad de Cádiz ofrece un *Servicio Central de Ciencia y Tecnología* (<http://bit.ly/coZJL2>) que incluye un servicio de técnicas cristalográficas que dirige Pedro Valerga (pedro.valerga@uca.es).

Finalmente, en la Universidad de Almería, Ana Cámara Artigas (acamara@ual.es) dirige un pequeño grupo de cristalografía de macromoléculas (<http://bit.ly/aMZDUJ>), adscrito al *Departamento de Química-Física, Bioquímica y Química Inorgánica*, cuyo interés se centra en el estudio de reconocimiento de dominios de poli-prolina.

14. Islas Canarias

La investigación en cristalografía en las Islas Canarias sólo existe en la Universidad de La Laguna:

- a. El *Servicio Integrado de Difracción de Rayos X* (<http://bit.ly/dC1OEH>) dirigido por Javier Platas (jplatas@ull.es), y quien comparte con Cristina González Silgo (csilgo@ull.es) un pequeño grupo de investigación adscrito al Departamento de Física Fundamental II.
- b. El *Laboratorio de Rayos X y Materiales Moleculares* (<http://bit.ly/97zxMa>), que dirige Catalina Ruíz-Pérez (caruiz@ull.es), está implicado en estudios cristalográficos de materiales magnéticos moleculares.

Agradecimientos

El autor agradece a los componentes del Comité Local, organizador del *XXII Congreso y Asamblea General* de la IUCr, y a los correctores de la revista, la ayuda prestada en la elaboración de este artículo, al mismo tiempo que pide disculpas si su contenido no refleja con propiedad la situación actual de algunos de los grupos de cristalógrafos que desarrollan su investigación en España, o si, por el contrario, otros han sido involuntariamente omitidos.

Bibliografía

1. Plinio el Viejo: *Lapidario (Libros XXXVI y XXXVII de la Historia Natural)*. Traducción Avelino Domínguez García e Hipólito Benjamín Riesco, Alianza Editorial, Madrid, 1993.
2. B. Cabrera, *An. Soc. Esp. Fís. Quím.* **1925**, 23(2), 101–122, 211–222 y 239–249.
3. J. Palacios, *An. Soc. Esp. Fís. Quím.* **1925**, 23(2), 1–21 y 31–42.
4. J. Garrido, *Acta Cryst.* **1948**, 1, 3–4.
5. XXII Congreso y Asamblea General de la Unión Internacional de Cristalografía, <http://www.iucr2011madrid.es/>, visitada el 10/09/2010.