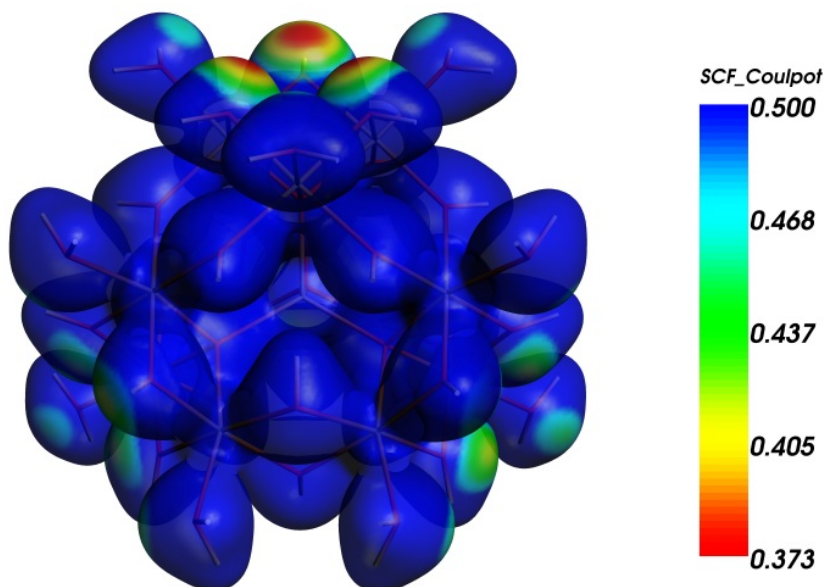


Descifran secretos de los clústeres metálicos

Investigadores del Instituto Catalán de Investigación Química, junto a colegas de EE UU, han conseguido cristalizar los esquivos clústeres de cromo, analizando el proceso con técnicas computacionales. Los clústeres de óxidos metálicos como este actúan en multitud de procesos naturales y pueden ayudar al desarrollo de nuevos materiales.

ICIQ

9/12/2016 08:00 CEST



Los cálculos computacionales permiten a los investigadores predecir las propiedades de los clústeres metálicos. / ICIQ

Los clústeres o agrupaciones de óxidos metálicos son estructuras clave en una enorme variedad de procesos naturales como la fotosíntesis, el crecimiento de minerales o el transporte de sustancias en la atmósfera. Comprender cómo se comportan estas estructuras podría inspirar el desarrollo de nuevos materiales funcionales.

Se han logrado cristalizar clústeres de cromo que, hasta la fecha, suponían un enorme reto para los

químicos

Ahora, en un estudio llevado a cabo en el [Instituto Catalán de Investigación Química \(ICIQ\)](#) en Tarragona y la Oregon State University en EE UU, varios investigadores han logrado cristalizar clústeres de cromo que, hasta la fecha, suponían un enorme reto para los químicos. Además, han utilizado las técnicas computacionales y espectroscópicas más avanzadas para analizar y comprender todos los detalles del proceso de cristalización de estas estructuras.

Carles Bo, investigador del ICIQ, lideró el equipo que llevó a cabo los estudios computacionales. Estos experimentos numéricos consideraron todas las combinaciones posibles, casi mil estructuras distintas, para explicar el desorden aparente de los cristales y descubrir qué condiciones favorecen la formación de los clústeres.

Estos descubrimientos contribuirán a ampliar el conocimiento sobre los procesos de cristalización de estructuras como los clústeres metálicos y los polycationes. Estas no sólo son clave en procesos naturales, sino también en procesos industriales. Los investigadores esperan que sus resultados inspiren avances en la creación de nuevos materiales para fotosíntesis artificial, una fuente de energía alternativa 'cero emisiones'.

Este trabajo supone la primera contribución del ICIQ a la revista [Chem](#), hermana de la prestigiosa Cell y creada a comienzos de 2016 para impulsar la investigación en química sostenible que proporcione soluciones a retos globales.

Referencia bibliográfica:

W. Wang, L.B. Fullmer, N.A.G. Bandeira, S. Goberna-Ferrón, L.N. Zakharov, C. Bo, D.A. Keszler, M. Nyman. "Crystallizing elusive chromium polycations". *Chem*, 2016, DOI: 10.1016/j.chempr.2016.11.006.

Derechos: **Creative Commons**

TAGS

MATERIALES

| CRISTALIZACIÓN

| CROMO

Creative Commons 4.0

Puedes copiar, difundir y transformar los contenidos de SINC. [Lee las condiciones de nuestra licencia](#)