

Nova eina interactiva per a l'aprenentatge de la cristal·lografia

04/2014 - **Geologia**. Malgrat que la cristal·lografia és molt present en el nostre entorn, i els mètodes cristal·logràfics s'utilitzen en molts àmbits, és una ciència complicada per molts científics i tecnòlegs. Un equip multidisciplinari ha desenvolupat una eina informàtica d'ús lliure per tal de facilitar l'aprenentatge i la comprensió de la simetria, un aspecte bàsic de la cristal·lografia, basada en diverses fitxes interactives en 3D. Aquesta eina ja s'ha començat a utilitzar amb èxit en certs graus universitaris.



Cristalls naturals de calcita (CaCO_3).

La cristal·lografia és present al nostre entorn, des dels minerals i roques de l'escorça terrestre, passant per tot tipus de fàrmacs, fins a multitud de materials tecnològics com els metalls, els semiconductors, les ceràmiques, etc.; tots ells són sòlids amb estructura interna (a nivell atòmic) de tipus cristal·lina. Malgrat la ubiqüitat del material cristal·lí i la utilitat dels mètodes cristal·logràfics en multitud d'àmbits, com ara en la determinació de l'estructura de les molècules biològiques (com les proteïnes o l'ADN), per citar-ne un de molt actual, la cristal·lografia constitueix encara una ciència relativament complicada i estranya per molts científics i tecnòlegs.

El nostre treball pretén facilitar l'aprenentatge i comprensió d'un aspecte bàsic de la cristal·lografia que és la simetria. I ho fem mitjançant una eina informàtica moderna, trilingüe (català, espanyol i anglès) i a l'abast de tothom, ja que no necessita cap software especialitzat (s'obre amb l'Adobe Reader) i és d'ús lliure (<http://departaments.uab.cat/geologia/PSG>). En concret es tracta de 32 fitxes interactives en format PDF, una per a cadascun dels 32 possibles conjunts d'elements de simetria puntual, que s'anomenen *grups puntuals*. La *simetria puntual* constitueix la primera categoria de la simetria cristal·lina (només hi ha una altra categoria, la de la simetria espacial) i s'associa a la simetria de les figures finites (els cristalls), tot i que també existeix a nivell d'estructura interna. De fet, tradicionalment l'aprenentatge d'aquest tipus de simetria s'ha basat en l'ús de models polièdrics de fusta que simulen cristalls de forma ideal, i nosaltres els hem incorporat a fitxers PDF com a dissenys 3D que hem desenvolupat expressament. També s'han incorporat als PDF els elements de simetria (eixos de rotació, plans de reflexió i eixos de rotació-inversió) com a dissenys 3D. Tots aquests components 3D són dinàmics, de manera que es poden activar i desactivar individualment i poden ser observats des de tots els punts de vista.

Considerem que el tracte que fem de la simbologia dels grups puntuals, que és un aspecte particularment abstracte de la cristal·lografia, dona molt valor al nostre recurs informàtic. Així, hem associat als propis dígets de la notació dels grups cristal·logràfics (anomenada notació internacional de *Hermann-Mauguin*) botons interactius que activen la visualització dels corresponents elements de simetria que simbolitzen (vegeu la figura). A més, hem incorporat un codi de colors per facilitar encara més la correlació entre simetria real i notació cristal·logràfica. Una altra originalitat, dins el camp del software didàctic de la cristal·lografia, ha estat la incorporació de la projecció estereogràfica dels grups puntuals.

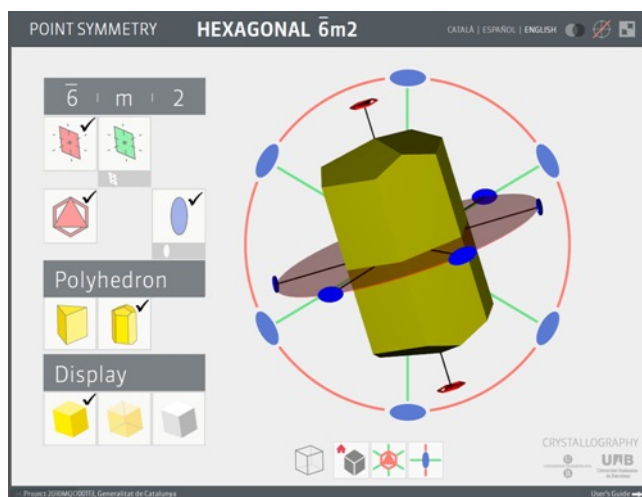


Figura: Exemple de fitxa interactiva per al grup puntual $-6m2$ en què s'han visualitzat elements 3D dinàmics (poliedre i simetria) i la projecció estereogràfica. A la banda esquerra hi ha el principal conjunt de botons per a les opcions de visualització (les emprades a la figura estan marcades amb el símbol V): 1) el primer grup està encapçalat per la banda grisa amb la notació de Hermann-Mauguin i a sota hi ha els símbols gràfics dels elements de simetria correlacionats verticalment amb la primera; 2)

el segon grup permet escollir entre varis poliedres (dos en aquest cas); 3) el tercer grup encapçalat pel terme display permet visualitzar el poliedre com a objecte massís, translúcid, etc. És remarcable que és fàcil relacionar els botons del primer grup activats (V) i els corresponents elements de simetria visualitzats a la dreta, gràcies al codi de colors establert que s'aplica també a la projecció estereogràfica.

El resultat és una eina interactiva simple, de disseny atractiu i modern, fàcil d'usar, i que incorpora els principals aspectes que intervenen en la simetria puntual cristal·lina tot seguint els criteris de la Unió Internacional de Cristal·lografia. Aquest material ja s'ha començat a utilitzar amb èxit als graus de Geologia, Nanociència i Nanotecnologia, i Química de la UAB, i al grau de Geologia de la UB.

Aquest treball ha estat possible per la col·laboració entre un expert dissenyador 3D i alguns professors de cristal·lografia. Estem molt satisfets de la coincidència de la seva publicació amb la declaració per l'UNESCO de l'any 2014 com a Any Internacional de la Cristal·lografia. Aprofitant aquesta coincidència realitzarem una sèrie d'activitats derivades del material informàtic presentat, com ara un concurs obert a tothom, mitjançant una aplicació per a mòbils en curs de desenvolupament.

Lluís Casas
Eugènia Estop

Departament de Geologia

Arribas, Victor; Casas, Lluís; Estop, Eugènia; Labrador, Manel. [Interactive PDF files with embedded 3D designs as support material to study the 32 crystallographic point groups](#). Computers & Geosciences 62:53-61. 2014.