

04/2014

Nueva herramienta interactiva para el aprendizaje de la cristalografía



Aunque la cristalografía está muy presente en nuestro entorno, y los métodos cristalográficos se utilizan en muchos ámbitos, es una ciencia complicada para muchos científicos y tecnólogos. Un equipo multidisciplinar ha desarrollado una herramienta informática de uso libre para facilitar el aprendizaje y la comprensión de la simetría, un aspecto básico de la cristalografía, basada en varias fichas interactivas en 3D. Esta herramienta ya se ha empezado a utilizar con éxito en ciertos grados universitarios.

La cristalografía está presente en nuestro entorno, desde los minerales y rocas de la corteza terrestre, pasando por todo tipo de fármacos, hasta multitud de materiales tecnológicos como los metales, los semiconductores, las cerámicas, etc.; todos ellos son sólidos con estructura interna (a nivel atómico) de tipo cristalino. A pesar de la ubicuidad del material cristalino y la utilidad de los métodos cristalográficos en multitud de ámbitos, como en la determinación de la estructura de las moléculas biológicas (como las proteínas o el ADN), por citar uno muy actual, la cristalografía constituye todavía una ciencia relativamente complicada y extraña para muchos científicos y tecnólogos.

Nuestro trabajo pretende facilitar el aprendizaje y comprensión de un aspecto básico de la cristalografía que es la simetría. Y lo hacemos mediante una herramienta informática moderna, trilingüe (catalán, español e inglés) y al alcance de todos, ya que no necesita ningún software especializado (se abre con Adobe Reader) y es de uso libre (<http://departaments.uab.cat/geologia/PSG>). En concreto se trata de 32 fichas interactivas en formato PDF, una para cada uno de los 32 posibles conjuntos de elementos de simetría puntual, que se denominan *grupos puntuales*. La *simetría puntual* constituye la primera categoría de la simetría cristalina (sólo hay otra categoría, la de la simetría espacial) y se asocia a la simetría de las figuras finitas (los cristales), aunque también existe a nivel de estructura interna. De hecho, tradicionalmente el aprendizaje de este tipo de simetría se ha basado en el uso de modelos poliédricos de madera que simulan cristales de forma ideal, y nosotros los hemos incorporado a ficheros PDF como diseños 3D que hemos desarrollado expresamente. También se han incorporado a los PDF los elementos de simetría (ejes de rotación, planos de reflexión y ejes de rotación-inversión) como diseños 3D. Todos estos componentes 3D son dinámicos, por lo que se pueden activar y desactivar individualmente y pueden ser observados desde todos los puntos de vista.

Consideramos que el trato que hacemos de la simbología de los grupos puntuales, que es un aspecto particularmente abstracto de la cristalografía, da mucho valor a nuestro recurso informático. Así, hemos asociado a los propios dígitos de la notación de los grupos cristalográficos (llamada notación internacional de *Hermann-Mauguin*) botones interactivos que activan la visualización de los correspondientes elementos de simetría que simbolizan (ver figura). Además, hemos incorporado un código de colores para facilitar aún más la correlación entre simetría real y notación cristalográfica. Otra originalidad, en el campo del software didáctico de la cristalografía, ha sido la incorporación de la proyección estereográfica de los grupos puntuales.

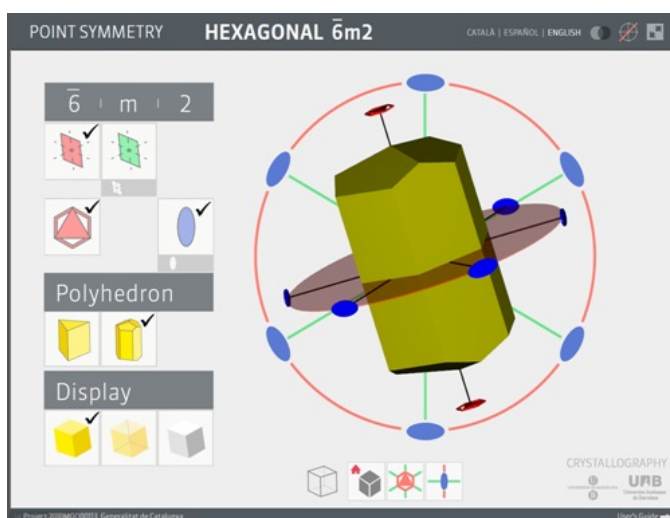


Figura: Ejemplo de ficha interactiva para el grupo puntual $-6m2$ en el que se han visualizado elementos 3D dinámicos (poliedro y simetría) y la proyección estereográfica. A la izquierda está el principal conjunto de botones para las opciones de visualización (las empleadas en la figura están marcadas con el símbolo V): 1) el primer grupo está encabezado por la banda gris con la notación de Hermann-Mauguin y debajo están los símbolos gráficos de los elementos de

simetría correlacionados verticalmente con la primera; 2) el segundo grupo permite elegir entre varios poliedros (dos en este caso); 3) el tercer grupo encabezado por el término display permite visualizar el poliedro como objeto macizo, translúcido, etc. Es remarcable que es fácil relacionar los botones del primer grupo activados (V) y los correspondientes elementos de simetría visualizados a la derecha, gracias al código de colores establecido que se aplica también a la proyección estereográfica.

El resultado es una herramienta interactiva simple, de diseño atractivo y moderno, fácil de usar, y que incorpora los principales aspectos que intervienen en la simetría puntual cristalina siguiendo los criterios de la Unión Internacional de Cristalografía. Este material ya se ha empezado a utilizar con éxito en los grados de Geología, Nanociencia y Nanotecnología, y Química de la UAB, y el grado de Geología de la UB.

Este trabajo ha sido posible por la colaboración entre un experto diseñador 3D y algunos profesores de cristalografía. Estamos muy satisfechos de la coincidencia de su publicación con la declaración por parte de la UNESCO de 2014 como Año Internacional de la Cristalografía. Aprovechando esta coincidencia realizaremos una serie de actividades derivadas del material informático presentado, como un concurso abierto a todos, mediante una aplicación para móviles en curso de desarrollo.

Lluís Casas

Eugènia Estop

Lluís.Casas@uab.cat, Eugenia.Estop@uab.cat

Referencias

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.

[View low-bandwidth version](#)