



UNIVERSIDAD
COMPLUTENSE
MADRID

Proyecto de Innovación

Convocatoria 2023/2024

Proyecto nº 59

Modelos estructurales 3D de los elementos del bloque p. Del no metal al metal

Responsable del Proyecto:

María Hernando González

Facultad de Ciencias Químicas

Departamento de Química Inorgánica

1. Objetivos propuestos en la presentación del proyecto

El objetivo general del proyecto MODELOS ESTRUCTURALES 3D DE LOS ELEMENTOS DEL BLOQUE p DEL METAL AL NO METAL era desarrollar modelos tridimensionales de las estructuras cristalinas de las formas alotrópicas estables en condiciones ordinarias de los elementos del bloque p del sistema periódico (SP) para su impresión en 3D.

A lo largo de nuestra experiencia docente impartiendo asignaturas que, de distintas formas y en diferentes contextos, incluyen estructuras cristalinas, hemos constatado la enorme dificultad del alumnado para la comprensión de las mismas. A nuestro entender, el principal problema radica en la visualización en 3D de las estructuras de los elementos y compuestos. Para solucionar este inconveniente se propuso la creación de modelos 3D de las estructuras que adoptan los elementos no metálicos. Estos modelos podrán ser utilizados en la asignatura de Química Inorgánica I que se imparte en segundo y tercer curso del grado de Química y del doble grado en Química y Bioquímica, respectivamente.

Utilizar modelos 3D para el aprendizaje de las características estructurales no es algo novedoso, pero la mayor parte de estos son representaciones de estructuras de sólidos metálicos o sus combinaciones (sales iónicas). Para los elementos no metálicos, o en general, del bloque p, no disponemos de modelos 3D accesibles, con la excepción del C diamante (estructura tipo blenda, ZnS cúbico), y es en este aspecto en el que incide este proyecto

Este objetivo general se desglosó en los siguientes objetivos específicos:

1. Selección de las estructuras cristalinas a estudiar.
2. Selección del modelo estructural más adecuado para visualizar las estrechas relaciones estructurales entre los elementos de un mismo grupo y un mismo periodo resaltando la conectividad, por distintas interacciones, entre átomos y/ o poliedros de coordinación.
3. Diseño e impresión de los modelos tridimensionales anteriormente citados.
4. Difusión de los modelos generados. Estaba planeado que todo el material (archivos y modelos 3D) se pusiera a disposición de los alumnos a través del Campus virtual de la asignatura. Asimismo, que la divulgación científica se realizara a través de distintas plataformas de la UCM y de la UAM.

2. Objetivos alcanzados

A pesar de no tener financiación para el gasto de impresión y uso de las impresoras 3D, se han podido realizar y completar algunos de los objetivos del proyecto. Los más relevantes son:

- 1- **Selección de las estructuras cristalinas a estudiar.** Se ha realizado un estudio pormenorizado de las posibles estructuras necesarias para explicar los diferentes temas de las asignaturas que ha concluido en la selección de un conjunto de estructuras de interés didáctico que permiten establecer relaciones estructurales entre las formas alotrópicas dentro de un grupo y un periodo del bloque p del SP.
- 2- **Selección del modelo estructural adecuado.** Se han encontrado las proyecciones de las estructuras más adecuadas para visualizar las relaciones estructurales entre los elementos de un mismo grupo y periodo.
- 3- **Diseño y prueba de impresión.** Se ha diseñado el modelo digital tridimensional de una estructura y se ha realizado su impresión 3D para evaluar el procedimiento a seguir con las demás estructuras.

3. Metodología empleada en el proyecto

La metodología empleada para la realización de este proyecto se divide en las siguientes etapas:

1-Reunión inicial para la selección de las estructuras: Todos los miembros del equipo nos reunimos para concretar los modelos estructurales que se imprimirán en 3D. En esta primera reunión se plantearon los problemas que el alumnado tiene en la visualización de las estructuras cristalinas. Con el fin de solventar los problemas detectados se decidió qué estructuras y proyecciones son más convenientes reforzar mediante la impresión 3D de las mismas para mostrar y manipular en el aula.

2-Recopilación de la información cristalográfica: Se recopiló la información cristalográfica (ficheros cif) de las estructuras acordadas, utilizando bases de datos de cristalografía (*COD, Crystallography Open Database*).

3- Elaboración de modelos digitales 3D: Se elaboró un modelo digital 3D, el más sencillo, de la estructura de carbono diamante, con el programa *OpenScad* (programa gratuito multiplataforma que permite la parametrización de los modelos de forma muy sencilla). El objetivo era evaluar sus posibilidades para la planificación del resto de estructuras.

4- Prueba de concepto: Se seleccionó e imprimió en 3D el modelo digital del carbono diamante utilizando el programa gratuito *OrcaSlicer*. Con este programa se ha buscado la orientación que crea menos soportes en las estructuras y, además, que fueran fácilmente removibles.

4. Recursos humanos

Este proyecto ha contado con los siguientes participantes:

María Hernando González, profesora titular del departamento de Química Inorgánica y responsable de este proyecto.

Marina Parras Vázquez, catedrática del departamento de Química Inorgánica. Directora del CAI de difracción de Rayos X.

Aurea Varela Losada, profesora titular del departamento de Química Inorgánica con una dilatada experiencia en la impartición de asignaturas de Química Inorgánica.

Emilio Matesanz Sáez, técnico de la unidad de difracción de rayos X. Es especialista en determinación estructural por difracción de RX de materiales policristalinos y de monocristal y tiene amplia experiencia en actividades de divulgación científica relacionadas con este tema.

Jorge Sánchez Marcos, (PDI externo a la UCM) profesor del departamento de Química Física Aplicada de la Facultad de Ciencias de la Universidad Autónoma de Madrid, con experiencia en generación de modelos tridimensionales digitales e impresión 3D.

Daniel Gutiérrez Martín, estudiante de doctorado y colaborador docente del Departamento de Química Inorgánica de la Facultad de Ciencias Químicas de la UCM.

5. Desarrollo de las actividades

A continuación, se desarrollan en detalle las diferentes actividades realizadas en el marco del proyecto:

1-Elección de las estructuras

Los profesores que participan en este proyecto han impartido durante muchos años la asignatura de Q. Inorgánica I y han detectado, de manera sistemática, una cierta dificultad a la hora de entender las estructuras cristalinas de los elementos del bloque p del Sistema Periódico y, aún más, las relaciones que existen entre ellas. Por ello, y con el objetivo de facilitar el aprendizaje de los alumnos en este aspecto, emprendimos este trabajo seleccionando estructuras representativas de elementos de distintos grupos del SP.

En particular, para ilustrar la relación estructural existente entre las distintas formas alotrópicas de los elementos no metálicos comenzamos seleccionando elementos de un mismo periodo (periodo 2 del Sistema periódico) desplazándonos desde el grupo 14 hasta el 16. Se seleccionaron las siguientes estructuras: i) del grupo 14, el carbono diamante, ii) del grupo 15, el fósforo negro romboédrico y iii) del grupo 16, el selenio. Estas estructuras son representativas de cada uno de los grupos considerados: en el grupo 14, la forma alotrópica de alta presión del carbono, las de silicio y germanio en condiciones ordinarias y la del estaño a baja temperatura presentan estructura tipo diamante. En el grupo 15, aunque con significativas diferencias, el arsénico, antimonio y bismuto presentan estructura tipo P negro y, por último, en el grupo 16, el telurio es isoestructural con el selenio; además, esta estructura guarda una estrecha relación con la del polonio.

2-Recopilación de la información cristalográfica:

El primer paso fue descargar los ficheros CIF (Crystallographic Information Framework) de las estructuras seleccionadas utilizando la base de datos ICSD (<https://icsd.fiz-karlsruhe.de/search/basic.xhtml>). Estos archivos contienen la información cristalográfica

detallada y necesaria para visualizar las estructuras y, por tanto, para la elaboración de los modelos 3D.

En la Figura 1 se muestra la red tridimensional del C diamante, la laminar del P negro y las cadenas del Se, ilustrando la tendencia a la disminución de la dimensionalidad al desplazarnos en un periodo de izquierda a derecha.

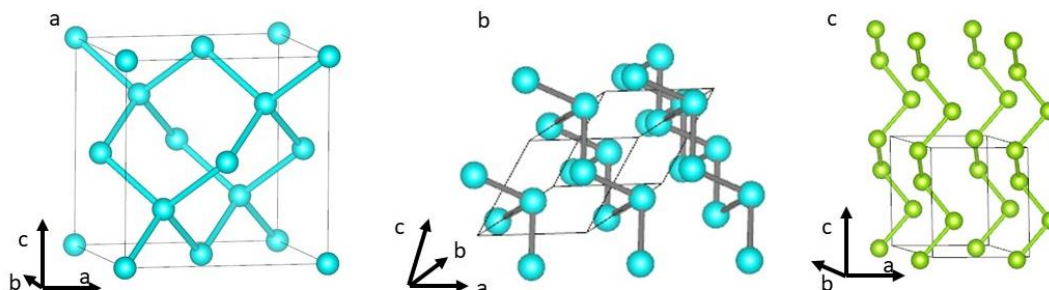


Figura 1. Estructuras correspondientes al (a) C _{diamante}, (b) P negro _{romboédrico} y (c) Se _{gris}.

Con esta representación es fácil describir la estructura de cada forma alotrópica, pero no resulta sencillo establecer las relaciones que existen entre ellas. Por ello, el siguiente paso es buscar la proyección más adecuada para resaltar las analogías y diferencias entre éstas. Esta recopilación sigue el camino descrito en la referencia: Ulrich Müller, *Inorganic Structural Chemistry*, Wiley, ISBN-13:978-0-470-01864-4.

3-Elección de la proyección de la estructura.

Para facilitar la visualización, como primer paso hacia la comprensión y el aprendizaje del alumno, de las estrechas relaciones estructurales que pueden establecerse entre las estructuras del C diamante, la del P negro y la del α -Se, empezamos por representar la estructura del diamante a lo largo de la diagonal del cubo, es decir, de la dirección [111] (Figura 2a). En esta proyección la estructura del diamante puede describirse a partir de una secuencia ABC de capas plegadas formadas por hexágonos de átomos de carbono. Cada C se une a 3 átomos de la misma capa y uno de la capa adyacente por enlace covalente resultando un índice de coordinación 4 para cada átomo, en un entorno tetraédrico, y un sólido de red tridimensional.

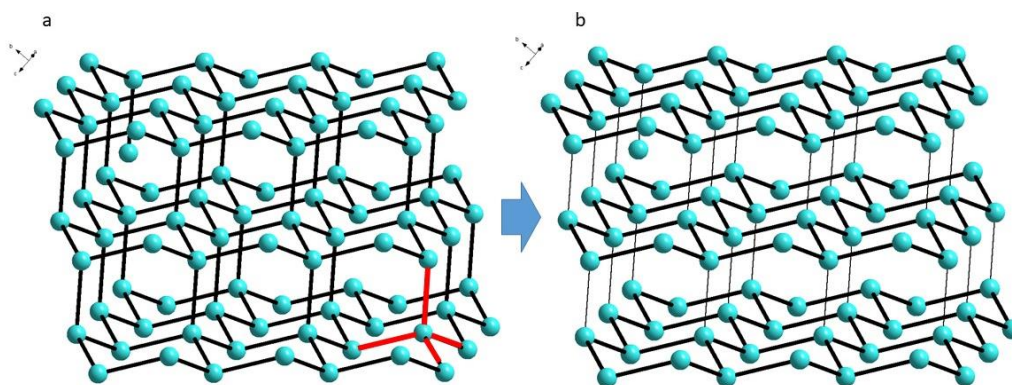


Figura 2. (a) Estructura tridimensional del C _{diamante} a lo largo de la dirección [111] de la celda unidad. Se señala en rojo el entorno tetraédrico del C. b) Estructura idealizada del P _{negro romboédrico} (2D) generada a partir de la estructura 3D del diamante.

A partir de este modelo, se puede derivar de manera sencilla la estructura del fósforo romboédrico (grupo 15). Al movernos en la tabla periódica desde el grupo 14 al grupo 15, la configuración electrónica más externa de los átomos pasa de ns^2np^2 a ns^2np^3 , de

forma que el índice de coordinación pasa de 4 en el diamante a 3 en el P, hay un enlace covalente/átomo menos, resultando un entorno piramidal (trigonal) para el fósforo y una estructura laminar (bidimensional). El ángulo de enlace disminuye de 109.5° a 95.8° , lo que se refleja en un mayor plegamiento de las capas (ver Figura 2b). Comparando los modelos estructurales de la figura 2(a) y (b), puede apreciarse la sencilla relación estructural existente entre ambas formas alotrópicas (se ha mantenido en el P la distancia y ángulo de enlace del C diamante). Las uniones entre átomos de distintas láminas están marcadas con línea más débil para indicar que no hay enlace covalente sino fuerzas de van der Waals. Se han seleccionado estas dos proyecciones de las estructuras para la creación de los modelos digitales y su posterior impresión 3D. La manipulación de estos modelos tridimensionales en el aula contribuirá a una mayor comprensión de las mismas.

Siguiendo esta idea, puede establecerse la relación estructural entre los alótropos del grupo 15 y 16. La configuración electrónica de los elementos de este grupo, ns^2p^4 , resulta en un índice de coordinación 2 para el Se y Te que adoptan una estructura en cadenas (1D). Como puede verse en la Figura 1c, la estructura de ambos elementos puede describirse como cadenas helicoidales de átomos de Se (Te) en las que cada átomo se une por enlace covalente a otros dos con un ángulo de enlace que se va aproximando a 90° (103° para el Se). Estas cadenas, se señalan en color verde en la proyección [111] de la estructura diamante (Figura 3). Nuevamente, se mantienen las distancias y ángulos de enlace de la celda diamante, aunque es fácilmente reconocible la estructura real del Se. El correspondiente modelo digital que se genere presentará las mismas características que se muestran en la figura de la proyección. Además, se imprimirá en 3D la cadena helicoidal de átomos.

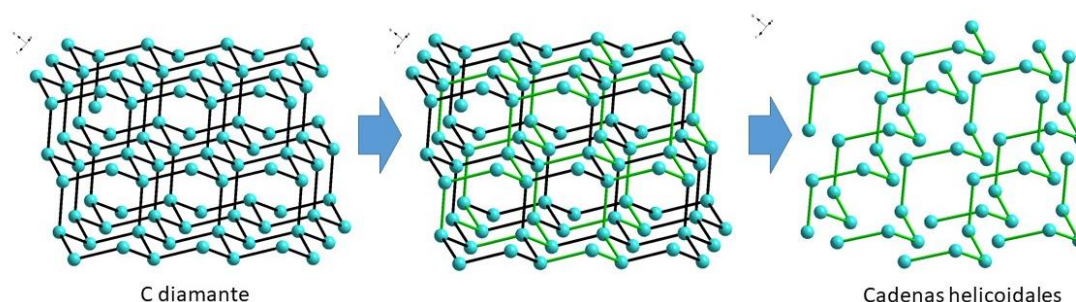


Figura 3. Generación de las cadenas helicoidales características de los elementos del grupo 16 a partir de la estructura tridimensional del C_{diamante} .

La manipulación física, en las proyecciones seleccionadas, de estos modelos tridimensionales en el aula permitirá a los estudiantes comprender las relaciones estructurales tanto dentro de un mismo grupo como entre diferentes grupos. Esta variación estructural puede relacionarse con la estructura atómica de los átomos de cada elemento y, por tanto, de su situación (grupo y periodo) en el sistema periódico.

4- Generación del Modelo Digital

Se generó un modelo digital del carbono en forma de diamante utilizando el programa *OpenScad* (figura 4a). Este software gratuito y multiplataforma permite la parametrización sencilla de los modelos, facilitando la creación de estructuras detalladas y precisas.

5- Prueba de Impresión 3D

Como prueba de concepto, se seleccionó el modelo del carbono en forma de diamante y se procedió a su impresión 3D (figura 4b). Para ello, se utilizó el programa gratuito y

multiplataforma OrcaSlicer, que permite optimizar la orientación de la impresión para minimizar los soportes y facilitar su remoción. La impresión se realizó con la impresora Bambu X1 Carbon. Todos los miembros del equipo cubrieron los gastos de material fungible con fondos propios, demostrando su compromiso con el proyecto y con la mejora de la enseñanza de las estructuras cristalinas.

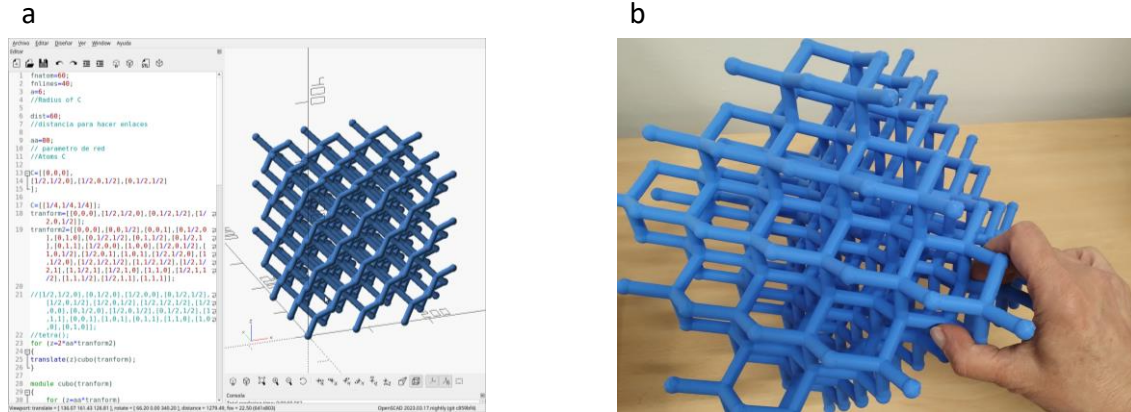


Figura 4. a) Modelo digital del carbono en forma de diamante. b) Modelo del C_{diamante} impreso en 3D.

6. Anexos