



UNIVERSIDAD
COMPLUTENSE
MADRID

Proyecto de Innovación

Convocatoria 2024/2025

Proyecto nº 207

Impresión 3D de modelos estructurales de los elementos del bloque p de la tabla
periódica

Responsable del Proyecto:

María Hernando González

Facultad de Ciencias Químicas
Departamento de Química Inorgánica

1. Objetivos propuestos en la presentación del proyecto

El proyecto IMPRESIÓN 3D DE MODELOS ESTRUCTURALES DE LOS ELEMENTOS DEL BLOQUE P DE LA TABLA PERIÓDICA es un proyecto continuación del proyecto Innova-Docencia nº 59 de la convocatoria 23/24. Su finalidad es el diseño y la impresión en 3D de modelos tridimensionales de las estructuras de los elementos del bloque p del sistema periódico para su empleo y difusión con fines docentes.

A lo largo de nuestra dilatada actividad 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 estas. A nuestro entender, el principal problema es la visualización tridimensional de las diferentes estructuras de los elementos y sus compuestos.

En la actualidad, el departamento de Química Inorgánica no dispone de modelos 3D de las formas alotrópicas de los elementos no metálicos, o en general, del bloque p, con la excepción del C diamante (estructura tipo blenda, ZnS cúbico), el grafito y la molécula S₈. Por ello, se planteó este proyecto para crear estos modelos con el fin de realizar una enseñanza más activa en el aula. De esta manera, el alumnado podrá manipular algunas estructuras cuando el docente está realizando la explicación de las mismas. Este objetivo general se desglosó en dos objetivos específicos:

1- Diseño e impresión de los modelos tridimensionales más adecuados 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 poliedros de coordinación.

2-Difusión de los modelos generados. Los modelos digitales generados serán puestos a disposición del alumnado a través del Campus virtual de la asignatura.

2. Objetivos alcanzados

A lo largo del desarrollo del presente proyecto, se han logrado y completado algunos de los objetivos inicialmente planteados, centrados en el diseño e impresión de un modelo tridimensional adecuado para visualizar y analizar las estrechas relaciones estructurales de los elementos de un grupo del bloque p de la tabla periódica. Para ilustrar esta relación estructural, en el proyecto nº 59 de la convocatoria 23/24 se seleccionaron los elementos (y su estructura) representativos de los grupos 14, 15 y 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.

Como punto de partida del proyecto, se priorizó el diseño e impresión del modelo tridimensional correspondiente al carbono diamante, dada su importancia para estudiar la relación estructural de los elementos del **grupo 14** (estructura que presenta el Si y Ge a temperatura ambiente y a baja temperatura el Sn). En este sentido, se ha diseñado un modelo tridimensional de gran formato, con dimensiones de 30 x 40 x 50 cm, que permite una observación y manipulación adecuada en el aula (figura 1).

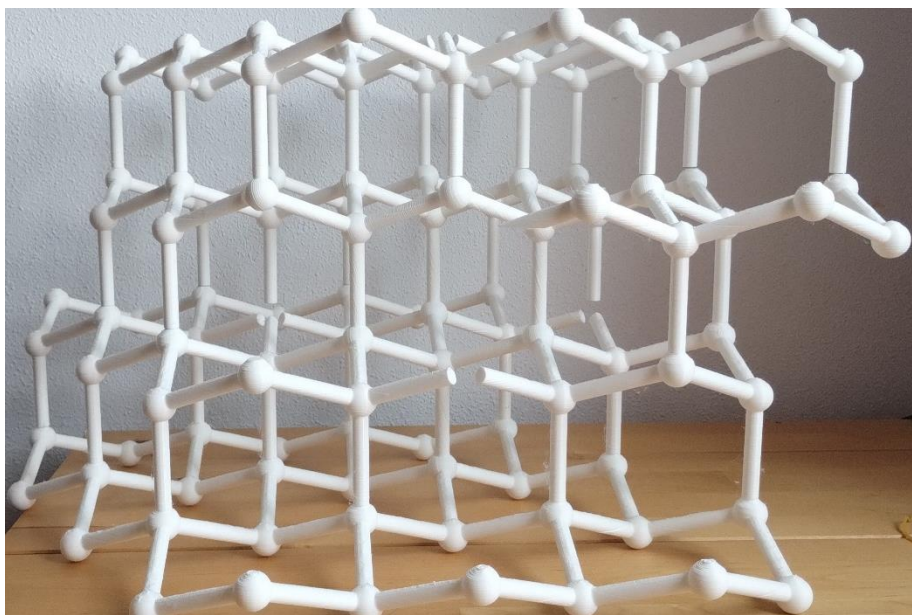


Figura 1. Modelo estructural tridimensional de dimensiones 30 x 40 x 50 cm de la forma alotrópica diamantina del C.

Lo que hace verdaderamente único a este modelo es que, por primera vez, se ha conseguido integrar en el mismo modelo tridimensional dos características fundamentales para entender la estructura de los elementos del grupo 14: por un lado, la representación de las capas plegadas del diamante y, por otro, la visualización clara y accesible de la celda unidad tipo blenda en el interior del propio modelo. Hasta la fecha, no se tiene constancia de la existencia de ningún modelo comercial que logre mostrar de forma simultánea estas dos características. Esto convierte al modelo desarrollado en este proyecto en una aportación inédita y de alto valor docente para abordar y comprender las relaciones estructurales entre elementos del mismo grupo 14.

El trabajo realizado sienta las bases para continuar con el diseño e impresión de los modelos correspondientes al fósforo negro y al selenio, con el objetivo de completar un conjunto de modelos tridimensionales que permita el estudio comparativo de las estructuras cristalinas que adoptan las formas alotrópicas de los elementos del grupo 14 al 16.

3. Metodología empleada en el proyecto

Para diseñar e imprimir el modelo tridimensional que permita estudiar las formas alotrópicas del **grupo 14** se ha comenzado generando un modelo del C diamante. La metodología empleada para la realización de este modelo se divide en las siguientes etapas:

1- Selección del modelo estructural adecuado

Se eligió representar la estructura del C diamante a lo largo de la dirección [111] del cubo. Esta proyección permite visualizar tanto las capas plegadas de átomos de C lo que facilita su comparación con la estructura laminar del grafito. Sin embargo, en esta proyección la celda unidad tipo blenda se orienta a lo largo de la diagonal del cubo lo que dificulta de manera extraordinaria reconocer fácilmente este tipo estructural. Estas características no se encuentran en modelos comerciales existentes.

2- Digitalización y parametrización del modelo

Se utilizó el programa OpenSCAD para construir y modificar digitalmente el modelo. Este software permitió ajustar el tamaño de los átomos, las distancias de enlace y dividir el modelo en partes imprimibles, gracias a la posibilidad de parametrizar todos los componentes estructurales.

3- Prototipado y pruebas preliminares

Se realizaron impresiones a escala reducida con un solo filamento (color único) y con doble filamento (dos colores) para resaltar la celda unidad dentro del modelo con el objetivo de: i) verificar proporciones entre átomos y enlaces, ii) evaluar la resistencia de los andamios generados y iii) determinar la orientación óptima de impresión para minimizar soportes y facilitar su retirada.

4- Validación didáctica en el aula

A pesar de ser prototipos, se utilizaron en las clases de Química Inorgánica I con estudiantes de segundo curso del Grado en Química. Si bien facilitaron la visualización de la capas plegadas del C diamante, la utilidad en el aula quedó muy limitada por el tamaño reducido del modelo, que impedía apreciar adecuadamente la celda unidad del C diamante en el interior del modelo.

5- Rediseño y escalado del modelo

A partir de la experiencia anterior, se rediseñaron modelos a mayor escala, formados por varias piezas ensamblables mediante imanes, con el fin de facilitar el montaje, desmontaje y transporte. Para su fabricación se utilizó una impresora 3D de gran formato (400x400 mm).

6- Modelo final funcional

Se alcanzó un diseño final que permite visualizar claramente tanto las capas como la celda unidad del C diamante, superando las limitaciones detectadas en prototipos previos. El modelo final es robusto, funcional, didáctico y desmontable, listo para su implementación en contextos educativos.

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, doctor y colaborador docente del Departamento de Química Inorgánica de la Facultad de Ciencias Químicas de la UCM durante el curso académico en el que se ha desarrollado este proyecto.

5. Desarrollo de las actividades

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

Para facilitar la comprensión de la estructura 3D y la celda unidad de la forma alotrópica diamantina de los elementos del grupo 14, en el proyecto nº 59 de la convocatoria 23/24 se eligió la orientación [111] como la más adecuada. En este modelo la estructura del C diamante se visualiza a lo largo de la diagonal del cubo, es decir, de la dirección [111], figura 2a. En esta proyección la estructura aparece como 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. A los alumnos les resulta realmente complicado visualizar la celda unidad del C diamante (tipo blenda), en el interior de la secuencia de capas (ver figura 2b). Esto nos hizo plantearnos un doble objetivo; por un lado, mostrar las capas plegadas del C diamante y, por otro, visualizar, con el mínimo esfuerzo, la celda unidad en el mismo modelo estructural tridimensional. Como se ha comentado, hasta la fecha, no hay ningún modelo comercial que reúna estas dos características.

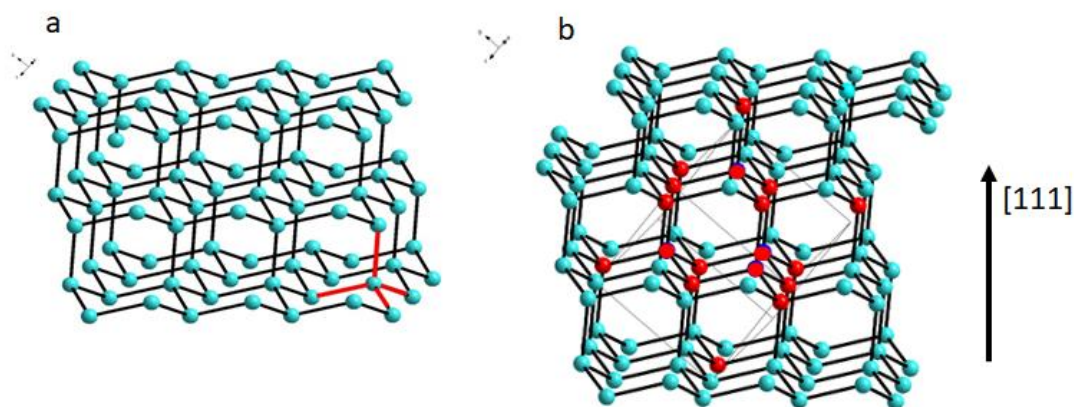


Figura 2. Estructura tridimensional del C_{diamante} a lo largo de la dirección [111] de la celda unidad. Se señala en rojo el entorno tetraédrico del C (a) y la celda unidad tipo blenda (b).

Para realizar una impresión 3D de la estructura mostrada en la figura 2 es necesario llevarla a un programa que nos permita modificar de forma sencilla tanto el tamaño de los átomos como las distancias de los enlaces, así como dividir el modelo en partes según sea necesario para su impresión. En este sentido, el programa **OpenScad** resultó especialmente útil, ya que nos permitió parametrizar la estructura.

Antes de proceder con la impresión definitiva del modelo, fue necesario estudiar su orientación dentro de la impresora con el fin de minimizar la cantidad de soportes necesarios durante la impresión así como ubicarlos en zonas estratégicas lo que facilitará su posterior retirada sin dañar el modelo. Como parte de este proceso preliminar, se imprimieron versiones reducidas del modelo del C diamante. Estas versiones prototipo permitieron verificar que las proporciones entre el tamaño de los átomos y las distancias de enlaces eran adecuadas, y también comprobar la efectividad

de los andamios generados. Gracias a estos prototipos iniciales pudimos obtener las dimensiones óptimas y la mejor orientación del modelo para su impresión final.

La figura 3 muestra los diferentes prototipos impresos. Se realizaron impresiones en un solo color utilizando un filamento (figura 3a) y en dos colores distintos mediante el uso de dos filamentos (figuras 3b y c) para destacar la estructura tipo blenda, representada por esferas de color rojo y dorado en las figuras 3b y c, respectivamente. Este tipo de impresión se ha podido realizar gracias a las impresoras existentes en el laboratorio 3D de la Universidad Autónoma de Madrid.

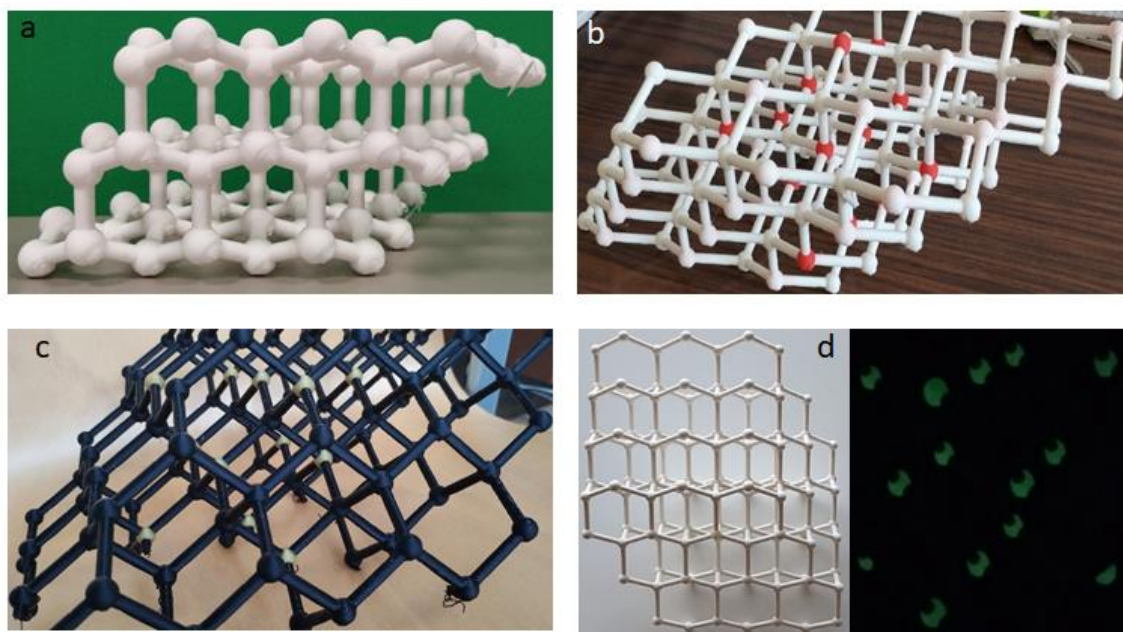


Figura 3. Prototipos impresos de la estructura del C diamante: a) con un solo filamento, b) y c) con dos filamentos de colores distintos y d) con dos filamentos, uno de ellos luminescente para ver la celda unidad en la oscuridad.

A pesar de tratarse de prototipos, se decidió llevarlos al aula durante la impartición de la asignatura de *Química Inorgánica I* del segundo curso del Grado en Química. El modelo facilitó la visualización de las capas en el C diamante, pero su reducido tamaño no permitió visualizar con claridad la celda unidad en el interior del modelo.

Otra de las pruebas realizadas consistió en la impresión del modelo utilizando dos tipos de filamentos, uno normal y otro luminescente, para resaltar los átomos de la celda unidad (figuras 3d). En este modelo se aprecia muy bien la celda unidad, pero presenta como limitación la dificultad de que el aula quede totalmente a oscuras para poder distinguir el material luminescente.

Con esta información, se procedió a modificar los modelos digitales con el fin de diseñar modelos tridimensionales de mayor tamaño, compuestos por diferentes piezas que se pueden ensamblar entre sí. Para la impresión de estos nuevos modelos fue necesario emplear una impresora 3D con una superficie de impresión de 400 x 400 mm. El objetivo es obtener un modelo del C diamante que sea fácilmente ensamblable y desmontable y que facilite al estudiante una visualización clara de la información estructural. La fabricación de este modelo ha implicado numerosas pruebas hasta alcanzar un resultado final funcional y robusto.

El modelo definitivo (figuras 4a-d) consta de varias piezas que se ensamblan entre sí mediante imanes que permiten un montaje y desmontaje sencillo. Dadas las dimensiones del modelo, fue necesario reforzar ciertas zonas así como estudiar dónde y qué tipo de imanes se colocaban para dar la suficiente estabilidad al modelo tridimensional impreso. Este modelo de bloques encajables permite observar claramente la disposición de la celda unidad tipo blanda de este alótropo que quedaría oculta en el interior de un modelo convencional (Figuras 4c y d).

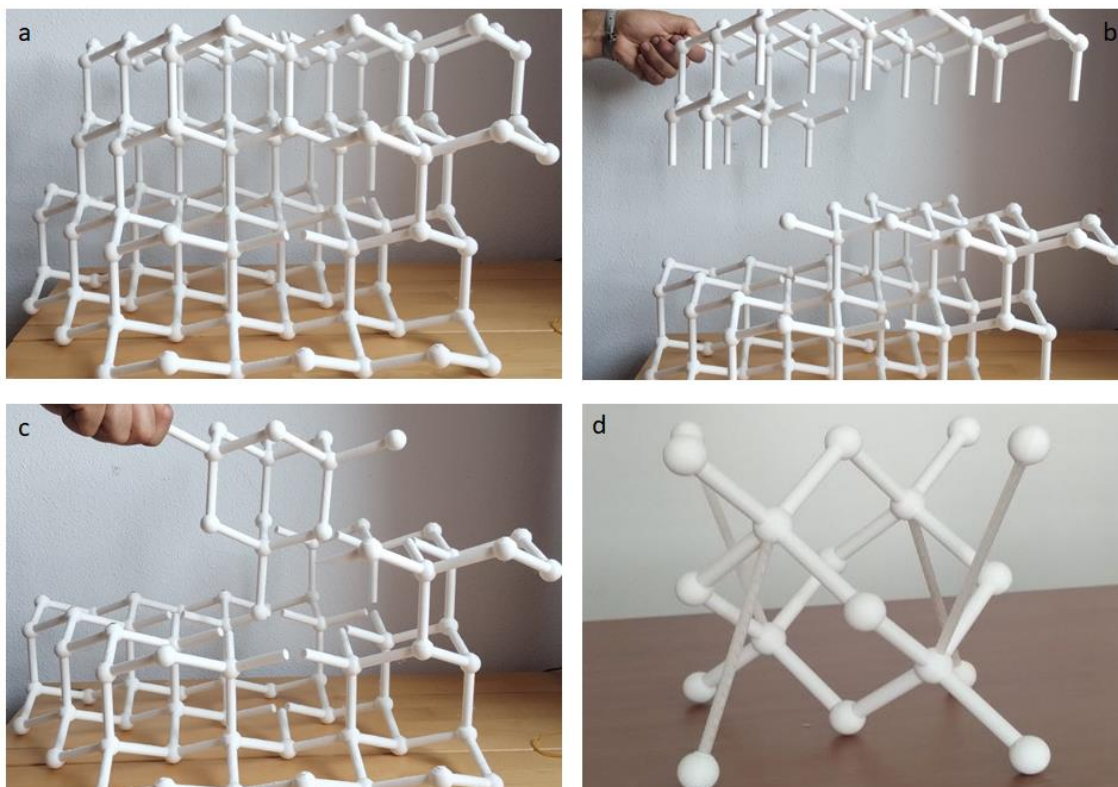


Figura 4. a) Modelo tridimensional del C diamante. Puede apreciarse como se desmonta en las figuras b y c. La celda unidad representada en la figura 4d se extrae del interior en la figura 4c.

Como puede deducirse de lo comentado anteriormente, la fabricación del modelo 3D de la celda del diamante, ha sido muy compleja. El objetivo de este proyecto, abordar el diseño y la impresión de los modelos tridimensionales más adecuados para visualizar las estrechas relaciones estructurales entre los elementos de un mismo grupo y un mismo periodo, ha resultado ser enormemente ambicioso e inalcanzable en el periodo vigente de este proyecto. Por el momento hemos establecido las condiciones óptimas que sirven de punto de partida para modelizar las estructuras de los alótropos de los grupos 15 y 16 y establecer las relaciones estructurales con los elementos del grupo 14. La experiencia adquirida en este proyecto constituirá un punto de partida inestimable para el desarrollo y la generación de modelos digitales similares y su posterior impresión lo que facilitará de forma extraordinaria el aprendizaje del estudiantado en relación a los siguientes aspectos: i) comprensión de las estructuras de las formas alotrópicas de los elementos del bloque p (condiciones ordinarias); ii) las estrechas relaciones estructurales que pueden establecerse entre ellas y iii) el entendimiento de la transición al carácter metálico a través de las características estructurales de estos elementos.