

Nuevo Recurso Didáctico para el Aprendizaje de los Grupos Espaciales de Simetría (Programa G.E.S.U.S)

/ AGUSTÍN COTA(1) Y ADOLFO MIRAS(2)

(1)SGI Laboratorio de Rayos-X. Centro de Investigación, Tecnología e Innovación de la Universidad de Sevilla (CITIUS). Av. de Reina Mercedes 4B. 41012-Sevilla (España).

(2)Dpto. Cristalografía, Mineralogía y Q. Agrícola. Facultad de Química. Universidad de Sevilla. Campus de Reina Mercedes. C/ Prof. García González nº 1, 41012-Sevilla (España)

INTRODUCCIÓN

El conocimiento de la estructura cristalina es fundamental para entender las propiedades físicas y químicas de los sólidos. Para la determinación de la estructura de un cristal es necesaria la asignación previa a un Grupo Espacial de Simetría. Por ello es habitual que en los planes de estudio actuales, en los que la materia cristalina sea objeto de estudio (Grados de Química, Física, Doble Grado Química-Materiales, Ciencia de Materiales, Geología, Biología), se incluyan asignaturas de Cristalografía, en las que entre otras cuestiones, se expliquen y describan los principales aspectos de la simetría espacial, como base para la determinación de estructuras.

En general la enseñanza de los Grupos Espaciales de Simetría conlleva numerosas dificultades, debido particularmente a la ausencia de visión espacial de los alumnos y a la complejidad que presentan algunas combinaciones de elementos de simetría con traslaciones.

En internet existen numerosos recursos didácticos dedicados a la Cristalografía: monografías, imágenes, videos, aplicaciones de cálculo online en servidores remotos, bases de datos con herramientas de trabajo y sobre todo numerosos "applet" que muchos autores (Steffen Weber, Kevin Cowtan, Nicolas Schoemi, Gervais Chapuis y muchos más) han preparado para facilitar la comprensión de estos conocimientos. Pero no existe la interacción necesaria para que el alumno comprenda totalmente la deducción de los Grupos Espaciales de Simetría y por ello se justifica la realización de nuestra aplicación G.E.S.U.S.

Los estudiantes actuales muestran

grandes aptitudes en cuanto a la utilización de aplicaciones informáticas, dado que utilizan la red como principal fuente de información y prefieren descargar aplicaciones gratuitas en lugar de caros libros de texto impresos.

Si además la aplicación se asemeja a un juego con su valoración de aptitud correspondiente, y se incentiva la adquisición de conocimiento aplicado de los errores que se detectan, se podrá aprender fácilmente hasta finalizar correctamente los ejercicios.

Este tipo de aplicación puede ser además muy útil para el profesor porque las autocorrecciones y las calificaciones podrían seguirse fácilmente en las plataformas virtuales docentes más comunes (p.e. WebCT, Blackboard Learn, Moodle, etc).

La realización de la aplicación propuesta se basa en la experiencia que se tiene en la Universidad de Sevilla, en la asignatura de Cristalografía de primer curso del Grado en Química y en Doble Grado Química-Materiales.

Las convenciones de simbología, orientación y nomenclatura que se han seguido para elaborar el Programa se basan en las recomendaciones de las Tablas Internacionales de Rayos-X (Henry & Lonsdale, 1965).

OBJETIVOS

El programa G.E.S.U.S. pretende

- Enseñar a reconocer las operaciones de los elementos de simetría y sus combinaciones con las traslaciones de la red, aplicando una visión espacial en 3D para situar los elementos de simetría compatibles con los modelos estructurales que se proponen.
- Reconocer y utilizar la simbología para la representación de elementos de

simetría, según su disposición en el espacio, en representaciones bidimensionales proyectadas sobre el plano de los vectores fundamentales "a-b", y teniendo en cuenta la coordenada según el vector "c" cuando su actuación se realice en valores distintos de cero.

- Identificar el Sistema Cristalográfico, Grupo Puntual de Simetría compatible y Grupo Espacial de Simetría (notación internacional Hermann-Mauguin) a partir de los elementos que se hayan identificado previamente en el modelo.
- Resolver problemas relacionados con diversas orientaciones que por convenio suelen utilizarse (p.e. imposición de un origen, diferentes orientaciones en el Sistema Monoclínico, etc).

La finalidad de este Programa es disponer de una herramienta útil y de fácil manejo para la enseñanza de los Grupos Espaciales de Simetría, dirigida a los alumnos de Cristalografía en un nivel básico, que cuenten con conocimientos elementales sobre los elementos de simetría, redes de Bravais, Grupos Puntuales y Grupos Planos.

RECURSOS PRÁCTICOS

En una primera etapa, el programa G.E.S.U.S. está diseñado para realizar ejercicios de dibujo de Grupos Espaciales de Simetría de los Sistemas Triclínico, Monoclínico (dos orientaciones) y Ortorrómbico. Está escrito en lenguaje de programación C++ para plataformas Windows XP y superiores, utilizando el ID Code::Blocks 12.11 con el compilador GNU GCC y está preparado para ir incrementando sus posibilidades mediante la incorporación de otros Sistemas Cristalográficos y de otros tipos de ejercicios.

Consta de un fichero ejecutable

palabras clave: Grupos Espaciales de Simetría, recurso didáctico.

key words: Space Groups of Symmetry, didactic resource.

(GESUS.exe) que no necesita instalación y de una biblioteca de ficheros encriptados de los Grupos Espaciales de Simetría desde el nº1 al 74, algunos de ellos en dos orientaciones. De esta biblioteca se extraen los ejercicios que deben realizar los alumnos. Cuando se completa un ejercicio. Existe la posibilidad de guardar las imágenes en un fichero .bmp para la realización de informes.

El manejo del programa se basa en un diagrama de flujo (fig. 1) que se sigue fácilmente y que en pocos minutos se aprende a manejar. Hemos intentado facilitar y simplificar su uso puesto que va dirigido a la enseñanza.

CONCLUSIONES

La aplicación libre G.E.S.U.S. (Grupos Espaciales de Simetría Univ. Sevilla) constituye un recurso didáctico muy útil en la enseñanza de los Grupos Espaciales de Simetría para estudiantes de Cristalografía de nivel básico/medio porque a diferencia de otros recursos que pueden encontrarse en la red es totalmente interactivo y autoevaluable.

AGRADECIMIENTOS

Al SGI Laboratorio de rayos-X de la Universidad de Sevilla. Al Dpto. de Cristalografía, Mineralogía y Q. Agrícola de la Universidad de Sevilla.

REFERENCIAS

- Henry, N.F.M. & Lonsdale, K. (1965): *International Tables for X-ray Crystallography. Vol. I. Symmetry Groups. The International Union of Crystallography by The Kynoch Press. England. 558 pp.*
- Weber S.
<http://www.jcrystal.com/steffenweber/>
- Cowtan, K.
<http://www.ysbl.york.ac.uk/~cowtan/>
- Schoeni, N., Hardaker, W., Chapuis, G.
<http://escher.epfl.ch/escher/>

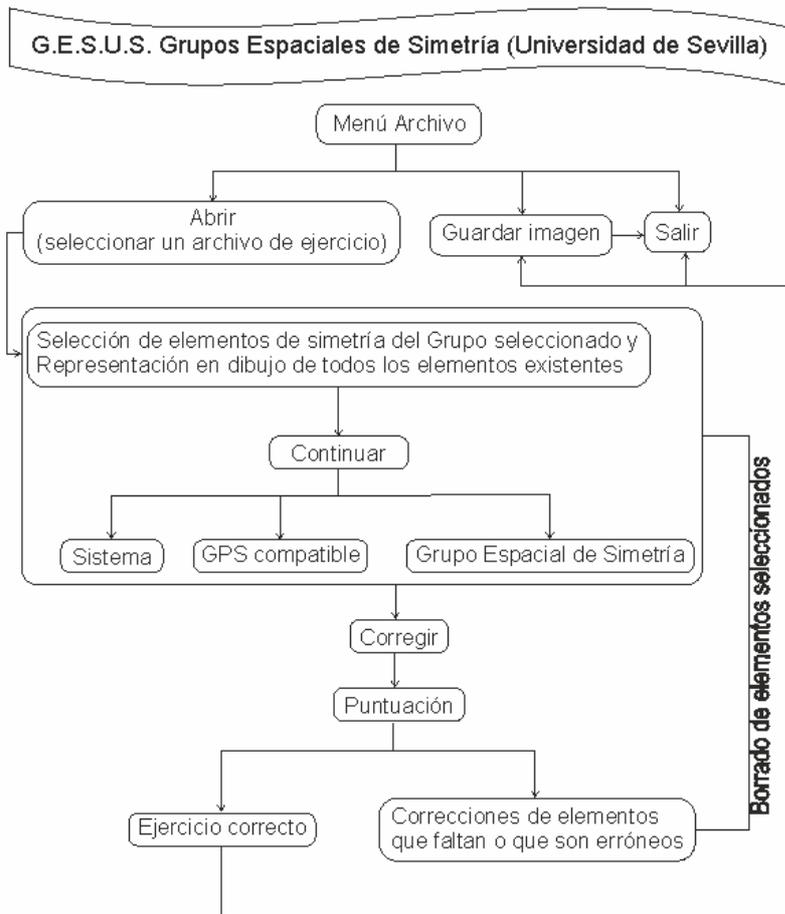


fig 1. Diagrama de flujo del programa G.E.S.U.S.