

Susana Gesari y Alfredo Juan\*

Departamento de Física - Universidad Nacional del Sur - 8000 - Bahía Blanca - Argentina

Recebido em 27/2/96; aceito em 3/4/96

**VIZUALIZATION OF CRYSTAL STRUCTURES USING MOLECULAR MODELLING SOFTWARE.** In this paper we describe the use of molecular modeling software to visualize crystal structures, surfaces and packing. The rotation, projection and modification capabilities of the software are used with atoms and molecules. The DTMM 2.0 Molecular Modeler (Oxford Univ. Press), allows us to show closed packed structures with maximum density in metallic crystals. The equivalence between hexagonal compact packing and the face centered cubic structures is also addressed. Finally a simple method to obtain color slides of the structures is described.

**keywords:** molecular modeling; crystals; computational graphics.

## INTRODUCCIÓN

El conocimiento y la comprensión de las propiedades básicas de la materia han permitido a la humanidad la creación de nuevos y mejores materiales, dotados de nuevas características y nuevas cualidades. A su vez, la producción de estos materiales han generado nuevos medios para la exploración de los fenómenos básicos, provocando así una expansión sin precedentes en los horizontes de la ciencia, la tecnología y sus posibles aplicaciones. Dichas aplicaciones no se restringen en la actualidad a un campo específico sino que han invadido nuestra vida cotidiana.

La ciencia y la tecnología de materiales surgen como disciplinas en los años 50 con el propósito de comprender el comportamiento de aleaciones, cerámicos, y más recientemente, polímeros. En la mayor parte de las aplicaciones, la materia en estado sólido juega un papel preponderante. En particular, existe un interés creciente en la relación estructuras-propiedades. Sin embargo, los estudiantes de ciencias físicas no son expuestos en los cursos introductorios al estudio de estructuras cristalinas.

La visualización tridimensional de estructuras, aún las más simples, ha constituido un problema en la enseñanza y se ha tratado de resolver tanto mediante la utilización de modelos espaciales como de analogías<sup>1</sup>. Los modelos dan una enorme percepción de la disposición espacial de los átomos. Sin embargo, al construirlos con los llamados "kit", las piezas son frecuentemente insuficientes o faltantes. El tiempo empleado en el armado de modelos, mediante bolitas de telgopor u otro material, es otra limitación.

En la actualidad, existe un masivo y creciente uso de computadoras personales en educación, y también se cuenta con software específico para el modelamiento molecular. Dicho software ha superado las limitaciones antes mencionadas. Es posible cambiar los colores, orientaciones y el estilo de este, sin necesidad de desarmarlo y contruir uno nuevo. De esta forma, la simulación y cálculo computacional se han transformado en una nueva forma de abordaje al problema.

Cualquier simulación de un proceso se llama modelado, y la manifestación de tal simulación modelo. Como tal, el modelado molecular intenta simular algunas propiedades moleculares

para entenderlas mejor. Es posible representar en una pantalla estructuras 2D o 3D, manipularlas (rotaciones, superposiciones, cambios de escala o de conformación, etc.), esto es realizado de manera interactiva, permitiendo obtener ángulos de enlace, distancias, analizar superficies y planos cristalográficos.

En este trabajo se presenta el estudio de las estructuras de los metales y la aplicación del software DTMM 2.0 Molecular Modeller (Oxford Univ. Press) para su visualización. Además se describe un método sencillo y práctico para preparar diapositivas y presentaciones dinámicas de las estructuras en estudio.

## ESTRUCTURAS DE EMPAQUETAMIENTO DE MÁXIMA DENSIDAD DE CRISTALES METÁLICOS

Los metales presentan habitualmente disposiciones muy compactas. La mayoría de ellos cristalizan en redes cúbicas centradas en las caras (Al, Ni, Ag, Cu, Au), en redes cúbicas centradas en el cuerpo (Cr, Mo, Na, W) o en redes de empaquetamiento hexagonal compacto (Zn, Cd, Mg).

La disposición más densa de una red se encuentra en el empaquetamiento hexagonal compacto y en el cúbico centrado en las caras. Ambos se forman por el apilado de un plano compacto sobre otro.

El problema del empaquetamiento de esferas en forma de dejar el mínimo de espacio intersticial ha interesado a muchos investigadores. Barlow<sup>2</sup> estableció que existen dos maneras de ordenar esferas equivalentes en el empaquetamiento más compacto, una con simetría cúbica y otra hexagonal.

Existe una sola forma de ordenamiento de esferas en una única capa de empaquetamiento más compacto: cada esfera debe estar en contacto con otras seis, como se puede apreciar en la figura 1.

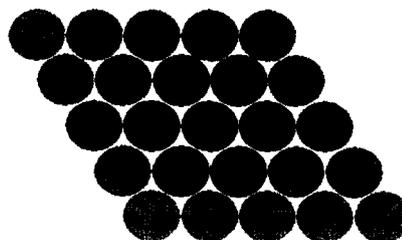


Figura 1. Primer capa del empaquetamiento de máxima densidad.

E-mail: cajuan@criba.edu.ar

Una segunda capa análoga debe superponerse a la primera, de manera que cada esfera esté en contacto con otras tres, de la capa adyacente, como se ve en la figura 2. En esta posición, la distancia entre las capas es la menor.

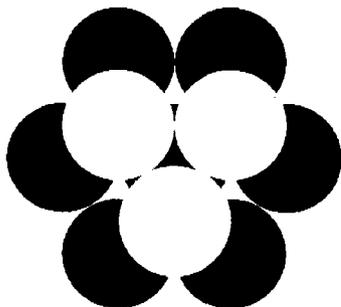


Figura 2. Segunda capa del empaquetamiento de máxima densidad.

Una tercera capa de esferas se agrega en una de las dos diferentes posiciones posibles, esto es, con las esferas directamente encima de las de la primer capa, o encima de los espacios entre las esferas de la primer lámina, no ocupados por la segunda capa, ( ver fig 3). Luego de esta elección, si todas las esferas son equivalentes, queda determinada la estructura.

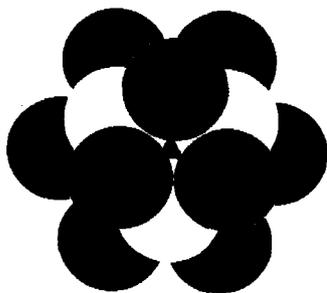


Figura 3. Tercer capa del empaquetamiento cúbico de máxima densidad.

La primera de las estructuras, con simetría hexagonal se representa en la figura 4. Se la llama *empaquetamiento hexagonal de máxima densidad (hcp)*. La segunda estructura, llamada *empaquetamiento cúbico de máxima densidad (ccp)*, se representa en la figura 5.



Figura 4. Empaquetamiento hexagonal de máxima densidad.

Una descripción conveniente de estas estructuras utiliza los símbolos A, B y C para las tres capas de esferas en distinta posición, en los empaquetamientos más compactos. El empaquetamiento hexagonal más compacto corresponde a la secuencia AB AB ..., y el empaquetamiento cúbico más compacto, a ABC ABC ....

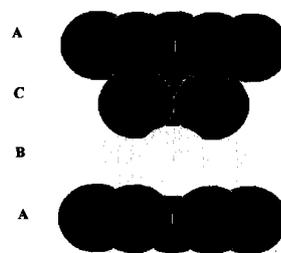
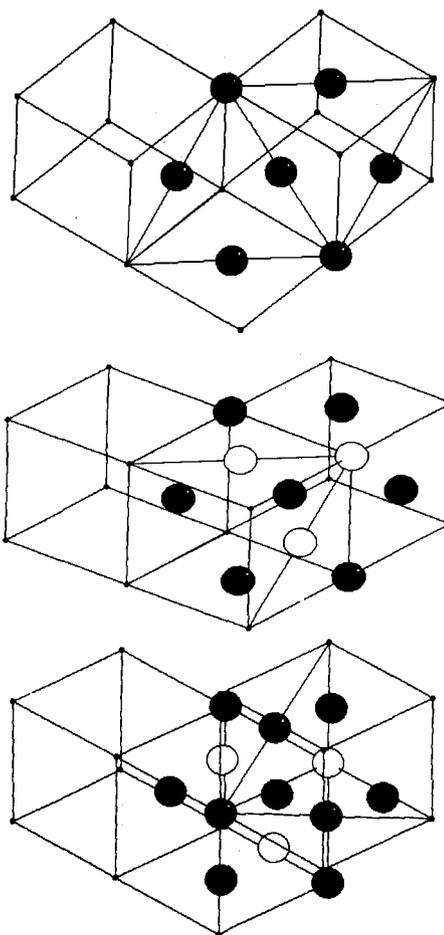


Figura 5. Empaquetamiento cúbico de máxima densidad.

El empaquetamiento cúbico compacto es idéntico a la estructura cúbica centrada en las caras (fcc). La bibliografía se refiere frecuentemente a ello, pero esta equivalencia no es fácil de mostrar. A continuación describimos un método para su visualización espacial.

Se parte de tres celdas con estructura fcc, y se destacan el el dibujo siete puntos de la red, que son los que formarán la primera capa del empaquetamiento cúbico compacto, (ver fig 6).

En las figuras 7 y 8 se representan con otro color o trama los átomos pertenecientes a la estructura fcc, correspondientes a la segunda y tercer capa de la estructura ccp, respectivamente. Esta última figura resulta ser la misma que la figura 3, si se considera el tamaño real de cada átomo.



Figuras 6, 7 y 8. Primera, segunda y tercer capa, respectivamente, del empaquetamiento cúbico compacto y su ubicación en una red fcc.

Otra forma de ver la equivalencia entre la estructura ccp y la fcc es seleccionar algunos de los átomos ordenados según ccp, dándoles distinto color o trama a cada capa, esto es ABCA, y girar la estructura, como se puede ver en la figura 9.

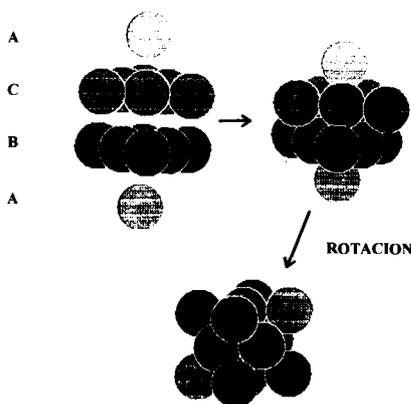


Figura 9. Empaquetamiento cúbico compacto y su transformación en una fcc.

Esta última imagen rotada corresponde a una estructura fcc, la que se puede ver de otra manera en la figura 10.

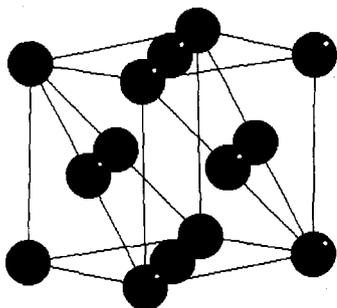


Figura 10. Estructura cúbica centrada en las caras.

#### TÉCNICA PARA LA OBTENCIÓN DE DIAPOSITIVAS DE ESTRUCTURAS

Consiste en usar el software Desktop Molecular Modeller, que requiere al menos una PC tipo AT 286, con 2Mb de RAM y coprocesador matemático. Este software tiene como datos de entrada las coordenadas de los átomos, su número y tipo, y las conexiones entre ellos. Se trata de un archivo ASCII.

El programa permite seleccionar el color de cada átomo, cambiar el estilo, rotar y trasladar la estructura.

Las estructuras así construídas fueron luego fotografiadas con el objeto de preparar diapositivas.

Estas diapositivas se obtienen con una cámara reflex de 35 mm, con objetivo normal de 50 mm f/1.7, usando película Kodak Ektachrome de 200 ASA, sin flash ni luz natural, solo con la luz de la pantalla. Para evitar el problema de fotografía movida se monta la cámara sobre un trípode firme y el obturador se conecta con un cable disparador. La operación fotográfica se esquematiza en la figura 11.

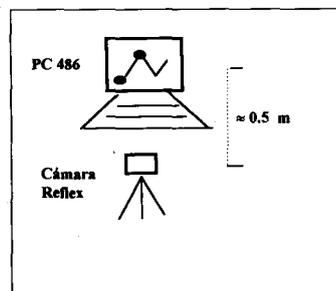


Figura 11. Esquema de la operación de fotografiado.

En todos los casos los dibujos fotografiados fueron con fondo negro, para permitir un mejor resalte del color de los átomos del cristal.

La cámara se graduó, según cada caso:

velocidad del obturador: 1/4 a 1/8 seg.  
 apertura de diafragma: 5.6 - 8.  
 distancia de enfoque: 0.45 - 0.50 m.

El rango de velocidad del obturador y de apertura de diafragma se debe a la diferente luminosidad de la pantalla, según el tamaño y color de la estructura a fotografiar.

El monitor de la computadora es del tipo Samsung SincMaster III o similar.

#### AGRADECIMIENTOS

El presente trabajo fue financiado por el Departamento de Física de la UNS y la Fundación Antorchas. Los autores agradecen al Sr. P. Ocaranza por su colaboración.

#### REFERÊNCIAS

1. Kildahl, N. K.; Berka, L. H.; Bodner, G. M.; *J. Chem. Educ.* **1986**, *63*, 62.
2. Barlow, W.; *Nature* **1983**, *29*, 404.