

Ejercicio 4

Estructuras cristalinas



UNIVERSIDAD
COMPLUTENSE
MADRID

Proyecto Innova-Docencia

2024-2025

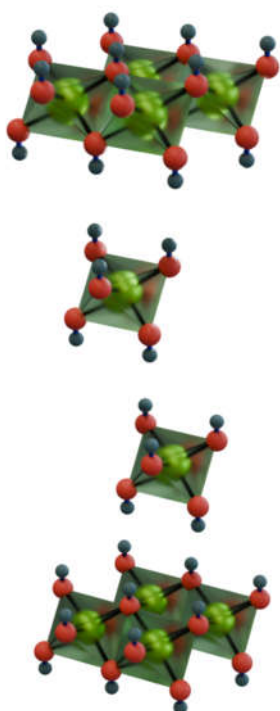
Nº52

PROCEDIMIENTO

Estructuras cristalinas

En las estructuras cristalinas los átomos/iones/moléculas se disponen de manera ordenada y repetitiva. Es común representar a los átomos como esferas y los enlaces covalentes como líneas o cilindros, así como el uso de poliedros para visualizar la coordinación atómica y la geometría de empaquetamiento. En el ejemplo se muestra la estructura representativa de los hidróxidos dobles laminares (LDH), que destacan por su capacidad de intercambio aniónico en procesos de carga y liberación de inhibidores de corrosión.

Estructura de un LDH.



Pasos a realizar

Paso 1. Visualiza el siguiente tutorial:

<https://www.youtube.com/watch?v=LRT31AoqJHD4&t=628s>

Paso 2. Elige un archivo CIF diferente al de la blenda (ZnS). Puedes descargar un archivo CIF desde este enlace:

<https://www.crystallography.net/cod/search.html>

Paso 3. Utiliza un software gratuito como Avogadro o Vesta para trabajar con el archivo CIF y exportarlo a formato PDB o xyz.

Paso 4. Importa el archivo PDB y edítalo a tu gusto en Blender.

Paso 5. Envía la imagen renderizada a tu profesor/a siguiendo sus instrucciones.

Consejos

Recomendable haber practicado con Blender antes de hacer este ejercicio.

Es posible incorporar al modelo de Blender los poliedros mostrados en Vesta. Para ello tendrás que exportar un archivo STL desde Vesta en el que sólo se visualicen los poliedros y luego alinearlos en la escena. Mira el siguiente video para ver cómo se puede hacer: <https://www.youtube.com/watch?v=OG8cFUNqQcs>

¿Qué practicarás con este ejercicio?

Podrás explorar las opciones que te ofrecen otros programas como Avogadro y Vesta para interactuar con Blender. También verás el uso del Addon o extension "Atomic Blender PDB/xyz" y que tendrás que instalar para poder hacer el ejercicio.

