

NUEVAS TECNOLOGÍAS EN LA ENSEÑANZA

EL USO DE LA IMPRESIÓN EN 3D EN LA ENSEÑANZA DE LA QUÍMICA

INTRODUCCIÓN

Las impresoras 3D llevan en el mercado desde hace más de 25 años y su uso es cada vez más común en centros de enseñanza media y superior, sobre todo en la enseñanza de las ciencias experimentales [1]. Las impresoras 3D son capaces de crear un objeto real en tres dimensiones construyendo capas sucesivas de un material, que en general es un polímero, pero en otras ocasiones puede ser metal o vidrio, a partir de un modelo diseñado por ordenador. Las impresoras 3D se usan a nivel industrial para fabricar prototipos, en medicina para construir prótesis o modelos para ser usados en cirugía. En educación, sobre todo en disciplinas científicas, pueden ser muy útiles a la hora de asimilar ciertos conceptos y mediante su uso los estudiantes adquieren competencias tales como el diseño asistido por ordenador, CAD (*Computer Aided Design*) y la visualización de objetos en tres dimensiones.

Los distintos métodos de impresión en 3D se diferencian en el modo con el cuál se van depositando las capas de polímero para formar el objeto tridimensional.

Las impresoras 3D que más se utilizan en la actualidad son las que emplean la tecnología FDM (*Fuse Deposition Modeling*), descubierta y protegida bajo patente a finales de los años 80 por Scott Crump en su empresa Stratasys [2].

Consiste en un hilo de polímero se va deshiliando desde una bobina, se funde y pasa a un alimentador con una boquilla capaz de moverse en horizontal y vertical para producir el objeto que se ha diseñado previamente en el ordenador. Otro tipo de tecnología también muy usada es la FFF (*Fuse Fabrication Filament*), muy parecida a la FDM, y cada vez encontramos más ejemplos del uso de este tipo de impresoras en combinación con software educativo. En el campo de la química se pueden

crear modelos moleculares, modelos de proteínas, superficies de energía potencial, cristales y también prototipos para experimentos de laboratorio, como se verá a continuación.

Las técnicas que usan el láser, como la estereolitografía, también se usan en las impresoras 3D. Entre ellas podemos citar la estereolitografía (SLA) y la *Selective Laser Sintering* (SLS). Su mayor ventaja es que la precisión es mayor y el tiempo de impresión es mucho más corto que con las técnicas de deposición. De hecho, estas tecnologías nacieron antes que las de deposición cuando Charles Hull fundó la empresa 3D Systems en 1983 [3].

Las impresoras que usan SLA imprimen capa a capa pero se parte de una base que se va sumergiendo y saliendo de un baño que contiene una resina fotocurable. El láser ultravioleta inicia el proceso de polimerización de esta resina haciendo que se endurezca. La base va desplazándose para imprimir la siguiente capa para que el láser pueda volver a curar la resina en la siguiente capa.

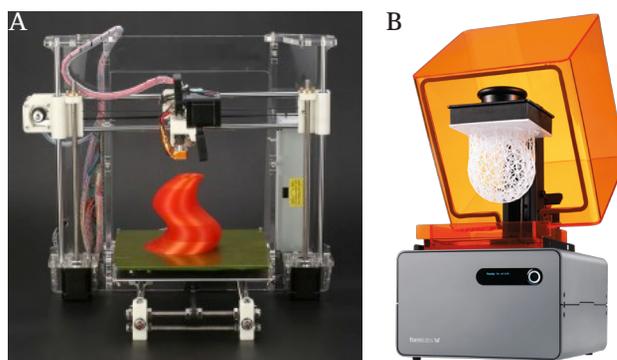


Figura 1. Impresoras 3D: Impresora FDM (A) e impresora SLA (B). Fuente: <http://3dprint.com/82272/what-3d-printing-works> y <https://www.reichelt.de/3D-Drucker/FORM-1-/3/index.html?ACTION=3&GROUPID=6685&ARTICLE=155122>.

Una alternativa a las impresoras SLA y SLS es la propuesta por la empresa Helysis (actualmente Cubic Technologies) [4] que comercializa impresoras con la tecnología LOM (*Laminated Object Manufacturing*) en la que láminas de papel adhesivo, plástico o metal se van pegando sucesivamente y son cortadas después por un láser. La resolución depende del material de partida que hayamos utilizado. Pero normalmente suele ser del espesor de una o dos láminas de papel.

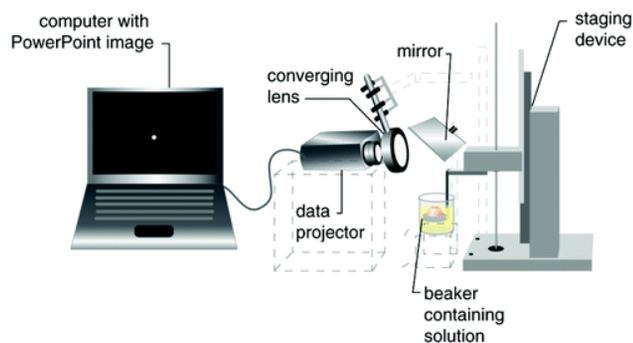


Figura 2. Montaje para Impresión 3D con un proyector. Fuente: Muskin, J., Ragusa, M. & Gelsthorpe, T.: Journal of Chemical Education, 87, 512–514 (2010).

Los polímeros que se suelen usar en impresoras FDM son termoplásticos, de tipo ABS (acrilonitrilo butadieno estireno), PC (policarbonato), PPSF/PPSU (polifenilsulfona) o Nylon, debido a sus propiedades físicas, como la resistencia al impacto y a la degradación.

Para la estereolitografía se utilizan polímeros fotocurables, es decir, el proceso de polimerización se inicia con luz (normalmente ultravioleta); por ello este tipo de impresoras tienen una cabeza de impresión con un láser. Los polímeros utilizados suelen ser también ABS con aditivos añadidos para mejorar las propiedades mecánicas del objeto final.

APLICACIONES EN LA ENSEÑANZA DE LA QUÍMICA

La impresión en 3D puede ser muy útil a la hora de visualizar estructuras complejas dentro del campo de la química. Una de las mayores limitaciones para su uso en las aulas es el coste económico. Es cierto que en la actualidad el precio de las impresoras ha descendido considerablemente pero aún así, para evitar los sobrecostes, Muskin y colaboradores [5] fueron de los primeros en diseñar un impresora 3D con componentes de uso diario para su aplicación en las aulas. Concretamente, el láser



Figura 4. Impresión 3D de la proteína ubiquitina. Fuente: Rossi, S., Benaglia, M., Brenna, D., Porta, R. & Orlandi, M.: Journal of Chemical Education, 92, 1398–1401 (2015).

de la impresora de estereolitografía se sustituyó con la luz de un proyector. La Figura 2 muestra el montaje con la luz de un proyector, un espejo, un vaso de precipitados donde se deposita el monómero, 1,6-hexanodioldiacrilato y el fotoiniciador y la plataforma móvil, todo ello acoplado a un PC que podrá imprimir un objeto 3D desde una imagen de PowerPoint.

Recientemente, Rossi y colaboradores [6] han propuesto un método en el que un fichero de la base de datos de proteínas (.pdb) puede ser impreso usando un software libre (VDM, *Virtual Molecular Dynamic*) y con una impresora usando FFF cuyo coste no supera los mil euros. La Figura 4 muestra un ejemplos de proteína, la ubiquitina, impresa mediante este sistema.

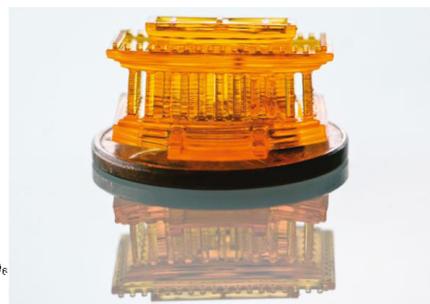
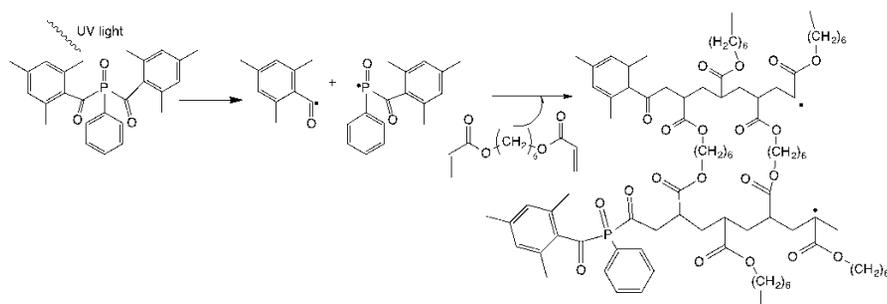


Figura 3. Reacciones de polimerización y prototipo impreso. Fuente: Muskin, J., Ragusa, M. & Gelsthorpe, T.: Journal of Chemical Education, 87, 512–514 (2010).

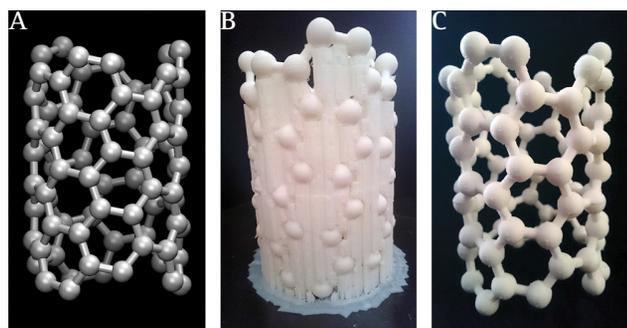


Figura 5. (A) Geometría 3D en VDM. (B) estructura impresa con la metodología FFF con soporte. (C) Estructura después de quitar el soporte. Fuente: Rossi, S., Benaglia, M., Brenna, D., Porta, R. & Orlandi, M.: Journal of Chemical Education, 92, 1398–1401 (2015).

Este método permite modificar los ficheros .pdb o incluso crear ficheros propios para ser impresos posteriormente. Otro ejemplo es la impresión 3D de un nanotubo (Figura 5).

Robertson y Jorgensen [7] han usado la impresión 3D para el estudio de la teoría de orbitales. Muchos fenómenos y transformaciones químicas se pueden explicar de forma razonada usando la teoría de orbitales. En este caso se pueden imprimir ficheros creados con software como Gaussian u ORCA que deben guardarse como ficheros .cube y las coordenadas del orbital en formato .pdb. Estos pueden convertirse a ficheros .stl que pueden ser impresos. Mediante la ayuda de la impresión se puede ayudar a fijar los conceptos de orbitales HOMO y LUMO, que son muy importantes para justificar las reacciones pericíclicas, o el efecto anomérico en química orgánica. En la Figura 6 se pueden ver orbitales impresos de este modo. Este tipo de metodología ha sido incluso utilizada para facilitar el aprendizaje de estudiantes invidentes [8].

Otros ejemplo de la aplicación de la Impresión 3D en química son la impresión de redes cristalográficas a par-

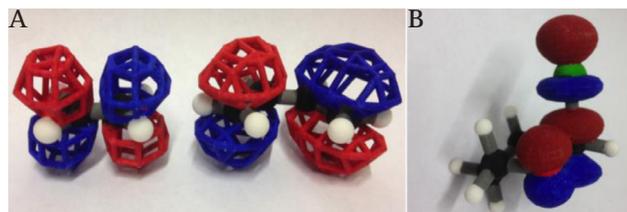


Figura 6. (A) Orbitales HOMO del LUMO del eteno y HOMO del 1,3-butadieno 3D impresos desde un fichero .stl generado en Pymol y transformado en Chimera. (B) Ilustración del efecto anomérico entre el H_2O (HOMO) y el 2-clorotetrahidropirano (LUMO). Fuente: Wedler, H.B., Cohen, S.R., Davis, R.L., Harrison, J.G., Siebert, M.R., Willenbring, D., Hamann, C.S., Shaw, J.T. & Tantillo, D.J.: Journal of Chemical Education, 89, 1400–1404 (2012).

tir de ficheros .cif [9]. Los ficheros .cif pueden obtenerse de la base de datos cristalográficos de Cambridge o pueden ser de un experimento generado al analizar cristales obtenidos experimentalmente. El fichero .cif se puede abrir con el programa VESTA (software libre) y de ahí puede ser exportado como fichero .wrl que puede abrirse con el software Blender y ser convertido en un fichero .stl. De este modo se pueden imprimir celdillas unidad de compuestos y esto puede ayudar a la visualización de la estructura de ciertos materiales y definir sus posibles aplicaciones.

Las superficies de energía potencial en moléculas que en química física se usan para explicar la reactividad química, cinética y dinámica, son difíciles de visualizar en dos dimensiones [10]. Mediante la impresión 3D es mucho más fácil visualizar cambios en toda reacción química cuyos reactivos deben pasar por un estado de transición para llegar a los productos. Las superficies de energía potencial facilitan la visualización del efecto que el cambio de las longitudes de enlaces o ángulos entre moléculas tiene en el producto final de la reacción. Los modelos 3D de estas superficies se obtuvieron de dos modos. Con el software Molpro se obtuvieron los datos de las superficies y, posteriormente, se importaron en el software Mathematica para crear un fichero .stl listo para ser impreso. También se obtuvieron superficies directamente usando Mathematica mediante funciones analíticas de dos variables. Esta aproximación es más adecuada para producir superficies de energía potencial de molécula triatómicas, plegamiento de proteínas o modelos de adsorción en una superficie. Los ficheros .stl se obtuvieron en Mathematica y fueron procesados posteriormente con Blender para refinarlos y poder ser impresos sin anomalías. En la Figura 7 se puede ver una representación bidimensional de la coordenada de la reacción frente a la energía y su equivalente en 3D.

CONCLUSIONES

La impresión en 3D es hoy en día un recurso muy importante tanto en investigación como en la enseñanza de las ciencias experimentales y en particular de la química. El CAD nos permite diseñar nuestro prototipo y almacenarlo en forma de fichero .stl, lo cual nos da la posibilidad de compartirlo con otros laboratorios o centros educativos. En la actualidad, las impresoras 3D son mucho más accesibles desde el punto de vista económico y podemos elegir entre los diferentes tipos que nos ofrece el mercado (SLA, FDM, FFF, SLD o LOM) dependiendo del

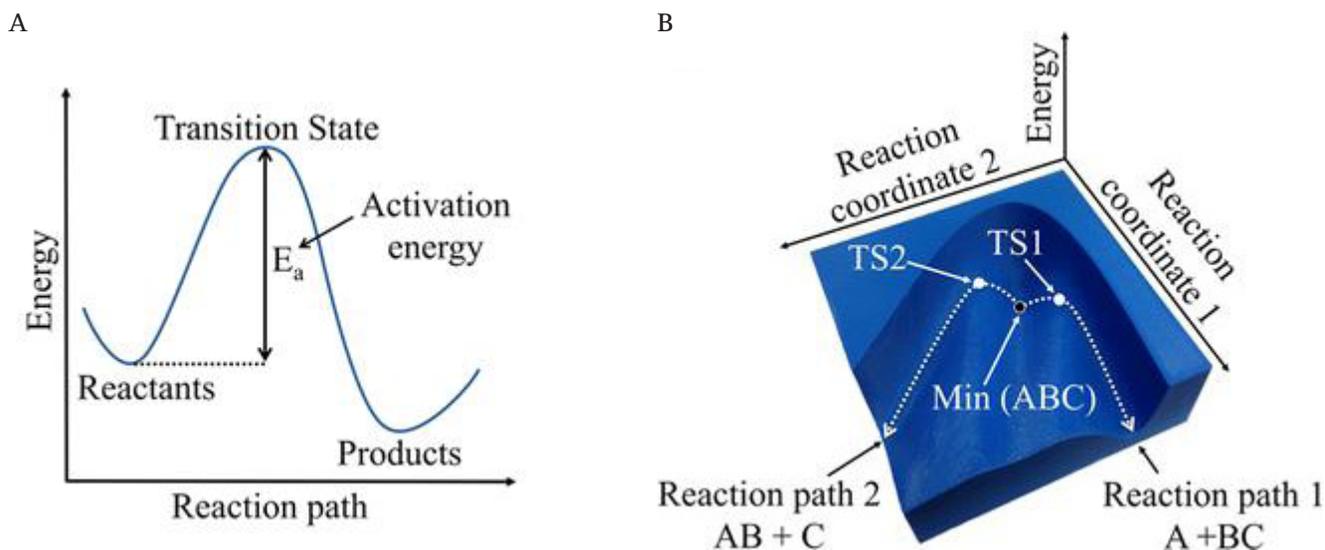


Figura 7. (A) Representación bidimensional de un mecanismo de reacción. (B) Superficie de energía potencial para una molécula triatómica ABC y sus mecanismos de disociación. Fuente: Kaliakin, D.S., Zaari, R.R., Varganov, S.A.: *Journal of Chemical Education*, 92, 2106–2112 (2015).

tipo de impresión que queramos utilizar. En este momento, educadores y científicos buscan continuamente más aplicaciones en este campo y, con toda seguridad, en el futuro próximo la impresión 3D será una de las plataformas de innovación en campos como la química, la física y otras ciencias afines.

REFERENCIAS

- [1] Lipson, H & Kurman, M.: *Fabricated: The new world of 3D printing*. John Wiley and sons, Indianapolis, USA (2013). Barnatt, C.: *3D printing. Second Edition*, 2014.
- [2] Stratasys. <http://www.stratasys.com> (Consultada el 13/03/2106).
- [3] 3D systems. <http://es.3dsystems.com> (Consultada el 13/03/2016).
- [4] <http://www.cubictechnologies.com/Helisis.htm> (Consultada el 22/03/2016).
- [5] Muskin, J., Ragusa, M. & Gelsthorpe, T.: *J. Chem. Educ.*, 87, 512–514 (2010).
- [6] Rossi, S., Benaglia, M., Brenna, D., Porta, R. & Orlandi, M.: *J. Chem. Educ.*, 92, 1398–1401 (2015).
- [7] Robertson, M.J. & Jorgensen, W.L.: *J. Chem. Educ.*, 92, 2113–2116 (2015).
- [8] Wedler, H.B., Cohen, S.R., Davis, R.L., Harrison, J.G., Siebert, M.R., Willenbring, D., Hamann, C.S., Shaw, J.T. & Tantillo, D.J.: *J. Chem. Educ.*, 89, 1400–1404 (2012).
- [9] Rodenbough, P.P., Vanti, W.B. & Chan, S.W.: *J. Chem. Educ.*, 92, 1960–1962 (2015).
- [10] Kaliakin, D.S., Zaari, R.R. & Varganov, S.A.: *J. Chem. Educ.*, 92, 2106–2112 (2015).

María de los Ángeles Farrán Morales
Dpto. de Química Orgánica y Bio-Orgánica