

APLICACIONES DEL LENGUAJE VRML (VIRTUAL REALITY MODELLING LANGUAGE) A LA CIENCIA DE MATERIALES

P.J. Lobo, Servicio de Informática y J. Gómez-Goñi, Dept. Física Aplicada,
EUIT de Telecomunicación, Ctra. de Valencia, km 7, 28031 Madrid. Spain,

E – mail: goni@euitt.upm.es

Resumen:

El lenguaje VRML (Virtual Reality Modelling Language) permite la visualización y manejo de estructuras en tres dimensiones de forma muy sencilla y compacta, ya que el lenguaje de programación es un lenguaje de texto y se interpreta mediante un visor que se puede instalar como una extensión (*plug-in*) de los navegadores más habituales (Netscape e Internet Explorer).

En la presente comunicación, queremos presentar algunas de las propiedades que hacen de VRML un excelente vehículo para la comprensión de las estructuras cristalinas de los materiales.

Abstract

Virtual reality modelling language (VRML) allows the visualisation and manipulation of three dimensional structures in a very simple and compact form, because it is a text-based language that can be interpreted by a plug-in for the most used browsers, such as Netscape or Internet Explorer.

In this communication, we would like to present some of the properties that make VRML an excellent tool for the comprehension of the crystalline structure of materials.

El lenguaje VRML (Virtual Reality Modelling Language) es un lenguaje abierto de descripción de entornos tridimensionales. Nació en 1994 en Silicon Graphics. En 1995 se publicó la versión 1.0, y en 1996 la 2.0. A finales de 1997, con ligeros cambios respecto a la versión 2.0, el lenguaje VRML97 fue estandarizado por ISO (ISO/IEC 14772-1:1997). Actualmente se halla en proceso de aprobación una reforma de VRML97 para añadir algunas funcionalidades, y la próxima generación del estándar, llamada X3D, está siendo desarrollada por el consorcio Web3D (<http://www.web3d.org>).

La filosofía de VRML es muy similar a la de HTML (HyperText Markup Language). Al ser un estándar abierto no está limitado a ninguna aplicación o plataforma, y existen varios visores gratuitos. Al utilizar un formato de texto plano, no es necesaria ninguna herramienta para crear un *mundo* VRML (aunque existen varias), y es muy sencillo generar mundos VRML dinámicamente desde un programa.

Por otro lado, VRML no se limita a la descripción de escenas estáticas, sino que puede utilizarse también para describir mundos dinámicos en los que el observador puede interactuar con los objetos que ve.

Los campos de aplicación del lenguaje VRML son muy amplias: documentación técnica, arqueología, demostraciones, enseñanza, etc. En el campo que nos ocupa, el uso de VRML permite al alumno visualizar y manipular las estructuras de los sólidos, facilitando enormemente su comprensión.

A modo de ejemplo hemos seleccionado algunas aplicaciones:

1. Redes de Bravais.

Hemos generado todas las redes de Bravais en formato VRML, de modo que se puedan manejar tanto en el aula, como por parte del alumno. Estas figuras están accesibles en la dirección:

<http://www.euitt.upm.es/departamentos/fisica/assignaturas/mit/>.

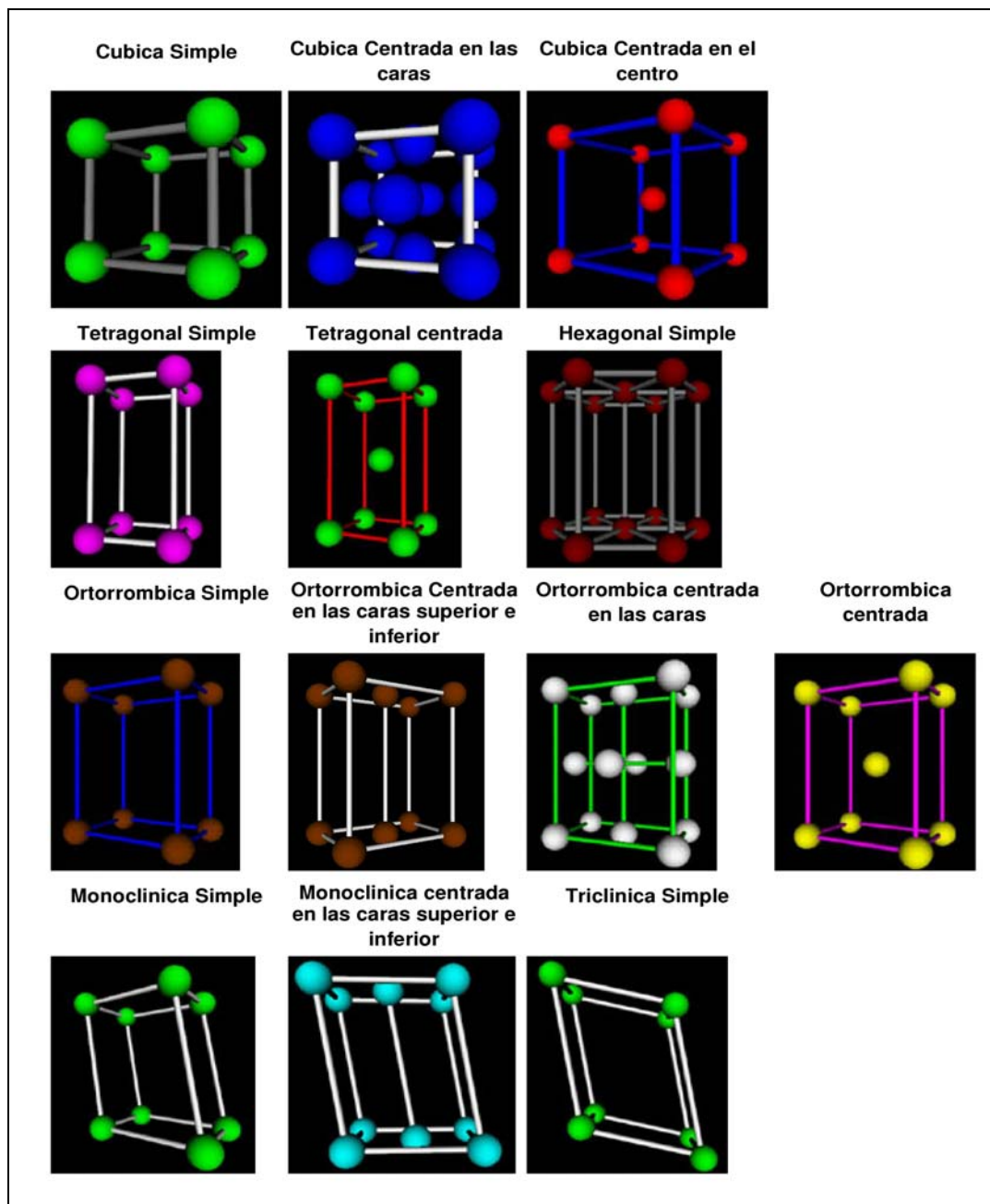


Figura 1: Las 14 redes de Bravais.

2. Otras estructuras cristalinas sencillas.

Igualmente hemos generado estructuras cristalinas especialmente interesantes, como las redes del diamante, de arseniuro de galio o la estructura hexagonal compacta. Para poder ver las estructuras mejor, se incluyen figuras en las que se han representado 8 celdas contiguas, para poder ver mejor la estructura cristalina.

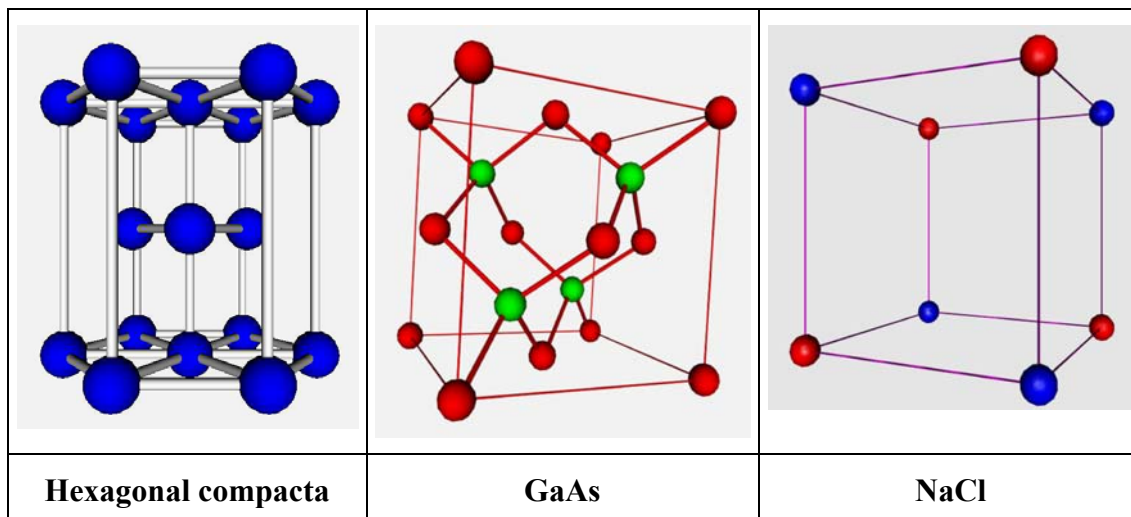


Figura 2: Otras estructuras cristalinas interesantes.

3. Generación de ficheros VRML de estructuras simples.

Hemos creado una aplicación basada en web que permite generar estructuras cristalinas sencillas en formato VRML. El programa permite generar figuras VRML de estructuras cristalinas sencillas, cambiando el tamaño de los átomos, de los enlaces y cambiando los colores de la figura.

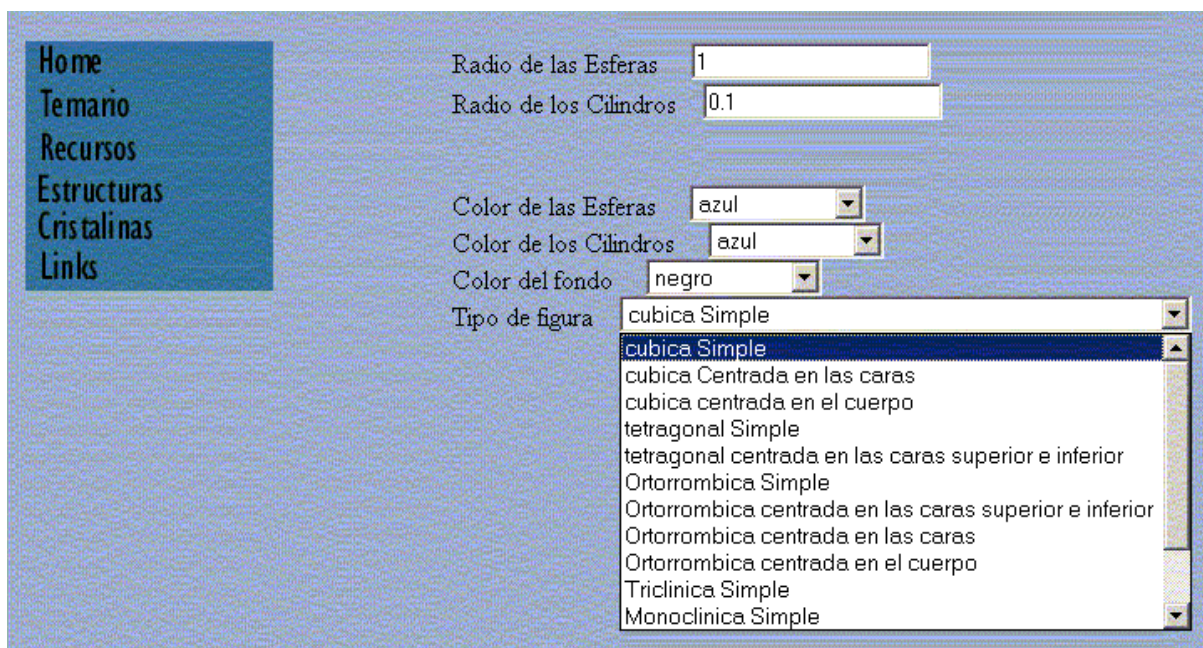


Figura 3: Menú del programa de generación de estructuras cristalinas sencillas en VRML.

4. Utilización de “viewpoints” para visualizar las superficies cristalinas.

A los ficheros VRML puede dotárseles de “viewpoints” de modo que haya perspectivas de las estructuras en puntos que se consideren especialmente interesantes. Concretamente, hemos generado figuras en los que es posible ver la estructura desde las direcciones [100], [110] y [111]. Como ejemplo podemos ver la estructura del arseniuro de galio desde dichas direcciones.

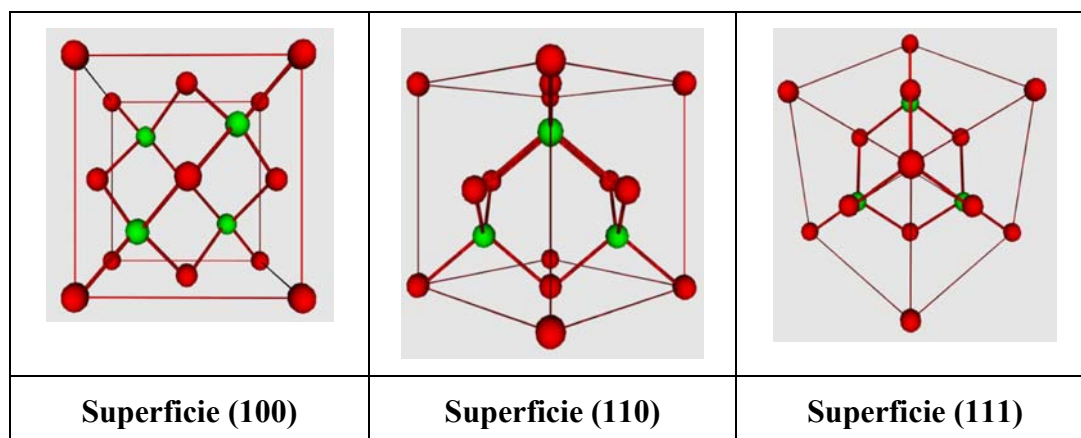


Figura 4: Estructura cristalina del arseniuro de galio desde las direcciones [100], [110] y [111].

5. Generación de ficheros VRML a partir de imágenes de microscopía de efecto túnel.

Hemos realizado un programa que genera ficheros VRML a partir de imágenes obtenidas mediante microscopía de efecto túnel, de tal manera que pueden visualizarse los detalles de las superficies (escalones, átomos adsorbidos, etc.) de un modo muy directo. Podemos ver varios ejemplos obtenidos en el Laboratorio de Física de Superficies de la Universidad Autónoma de Madrid.

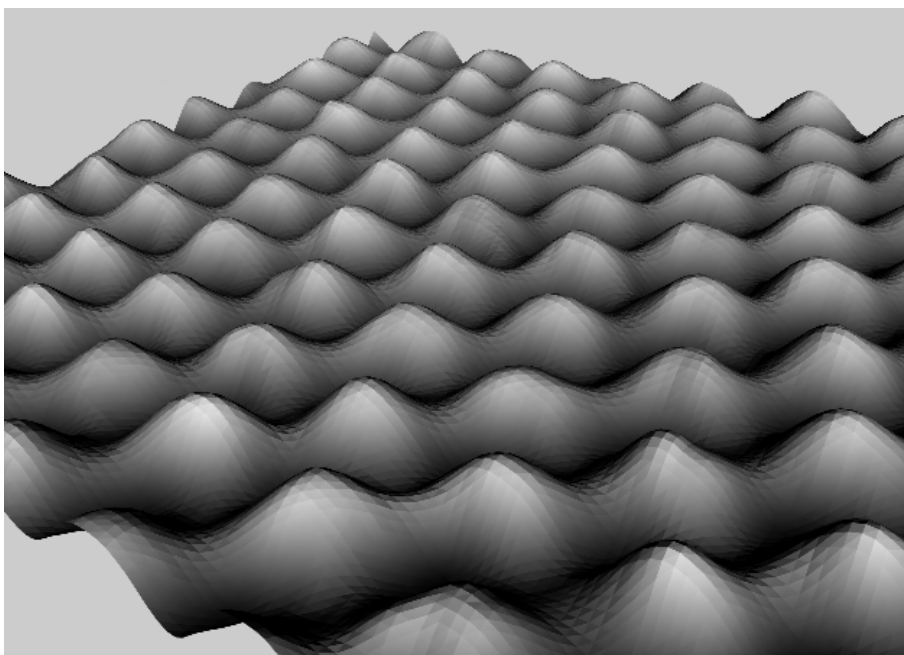


Figura 5: Superficie del Cu (111).

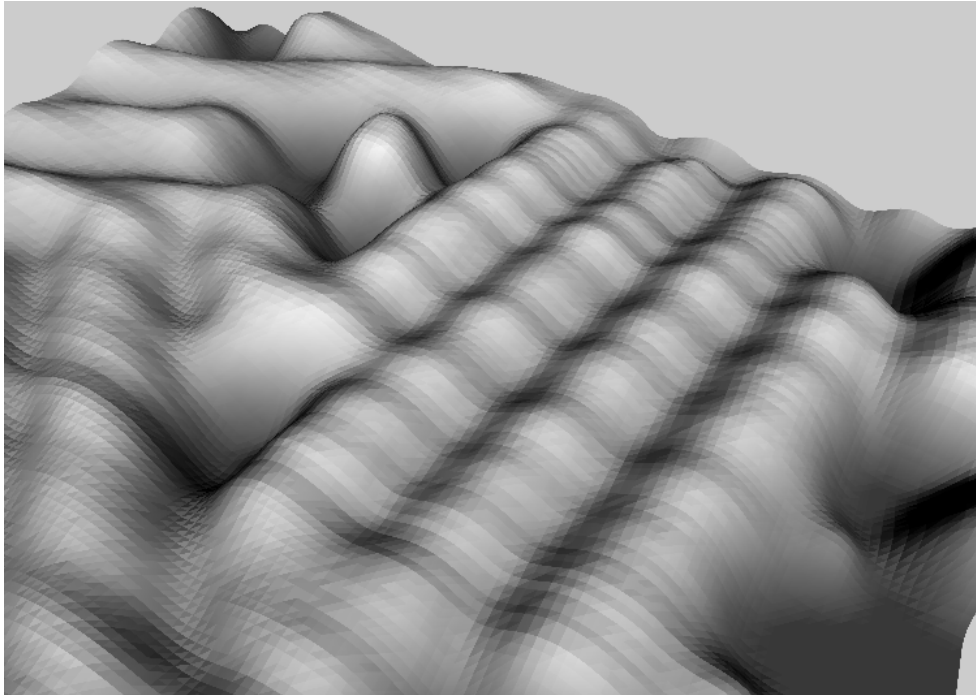


Figura 6: Superficie 2×1 de O₂ sobre Ru (0001).

Las figuras 5 y 6 muestran dos ejemplos de imágenes de STM. La primera imagen es de la superficie (111) del cobre y la segunda corresponde a oxígeno sobre rutenio (0001).

Conclusiones

Hemos visto algunas de las aplicaciones que el formato VRML puede tener a la hora de visualizar estructuras tridimensionales en la docencia en Ciencia e Ingeniería de Materiales. Hemos presentado las estructuras más sencillas (las redes de Bravais) y algunas de las estructuras más comunes (hcp, GaAs, NaCl). Hemos creado un programa que permite generar estas estructuras sencillas desde una aplicación web.

Hemos visto como podemos utilizar “viewpoints” para poder visualizar la estructura desde un punto determinado.

Por último, hemos creado un programa que permite generar representaciones VRML de una imagen obtenida mediante microscopía tunel.

Agradecimientos

Agradecemos especialmente la colaboración del Laboratorio de Física de Superficies de la Universidad Autónoma de Madrid por la cesión de imágenes de microscopía tunel.

Referencias:

1. Web 3D consortium, <http://www.web3d.org/>
2. Navegador Cortona, <http://www.parallelgraphics.com/products/cortona/>
3. Instituto Laue-Langevin, <http://www.ill.fr/dif/3D-crystals/index.html>