

# La maravillosa efectividad *Matemáticas en la química*

Ángel Requena Fraile



## Frutas, poliedros y cristales

El año 2011 fue declarado por la UNESCO Año Internacional de la Química, coincidiendo con el centenario de la concesión del premio Nobel de Química a Marie Curie. Y en este año 2011 los matemáticos tenemos otras efemérides a celebrar. Por ejemplo, se cumplen cuatrocientos años desde que el matemático y astrónomo Johannes Kepler formuló una conjetura aparentemente muy simple: Cuando un frutero apila las naranjas formando sus conocidas pirámides lo está haciendo de la mejor manera posible (la que permite poner más naranjas en menos espacio). Kepler no estaba interesado tanto en las frutas como en otro objeto menos comestible: las balas de cañón.

Tras cuatrocientos años y muchos intentos en el 2005 se aceptó una demostración de la conjetura hecha con un programa de ordenador. Fíjate que una construcción geométrica tan familiar mantuvo atareados a generaciones de matemáticos durante casi 400 años. La demostración de la conjetura de Kepler se debe a Thomas Hales, a la que dedicó más de seis años.

Se puede calcular que el sistema del frutero llena el 74% del espacio. Más exactamente,  $\pi\sqrt{2}/6$ . Hales demostró que no es posible mejorar este resultado con una red periódica.

Un dodecaedro regular de esferas podría ser mejor solución. Sin embargo, con dodecaedros regulares no se rellena el espacio. Necesitamos para rellenar el espacio el dodecaedro rómbico, que has construido en tu casa. Veremos que ocupa lo mismo que las pilas de naranjas habituales.



Lo interesante es que el problema del frutero ya lo había resuelto la naturaleza mediante la cristalografía.

# La maravillosa efectividad *Matemáticas en la química*

Ángel Requena Fraile



## *Red cristalina cúbica centrada en las caras: octaedro, tetraedro y cubo*

Si imaginamos que los átomos son esferas iguales tenemos dos redes cristalinas que optimizan la ocupación del espacio: la red cúbica centrada en las caras (FCC) y la red hexagonal compacta (CH). En ambas redes la ocupación es el 74%. La red hexagonal compacta es exactamente el problema del frutero, su poliedro asociado es una variante del dodecaedro rómbico. El dodecaedro rómbico que has construido en casa corresponde al sistema cristalográfico *cúbico centrado en las caras*. Es decir, si imaginamos que inscribimos en cada dodecaedro rómbico una esfera (un átomo) tendremos una red donde los átomos ocuparan el 74% del espacio.

Junta tu dodecaedro rómbico con el de tus compañeros: verás que puedes encajarlos sin dejar espacios vacíos.

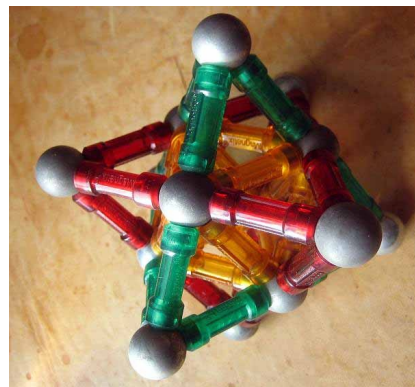
Nos podemos imaginar la red que hemos construido como cubos con un átomo en cada vértice más otro en el centro de cada una de sus caras (de ahí el nombre de la red). Inténtalo.

Ahora veamos como la red FCC (del inglés *face centered cubic*) contiene al tetraedro, al icosaedro y al cubo.

Construye un octaedro regular: 12 aristas y 6 vértices, cuatro aristas por cada vértice, donde las caras son triángulos equiláteros.

En cada una de las caras monta un tetraedro regular: obtendrás un octaedro estrellado. Construye los tetraedros de forma que alternes dos colores (en caras consecutivas del octaedro original debes tener colores diferentes). Observa que puedes imaginarte el octaedro estrellado como la intersección de dos tetraedros donde sus aristas tienen exactamente el doble de longitud que las aristas del octaedro original.

Fíjate que los vértices de estos tetraedros mayores: observa que forman los ocho vértices de un cubo. Además, los vértices del octaedro están en el centro de las seis caras de este cubo. Si cada vértice correspondiera a un átomo tendríamos una red cristalina FCC.



# La maravillosa efectividad *Matemáticas en la química*

Ángel Requena Fraile



El modelo construido permite observar como en una misma figura hemos ensamblado ocho tetraedros de arista unidad, dos de arista doble, un octaedro de arista unidad y un cubo de arista que debes calcular.

