

# La meravellosa efectivitat *Matemàtiques a la química*

Ángel Requena Fraile



## Fruites, poliedres i cristalls

L'any 2011 fou declarat per la UNESCO Any Internacional de la Química, coincidint amb el centenari de la concessió del premi Nobel de Química a Marie Curie. I en aquest any 2011 els matemàtics tenim altres efemèrides a celebrar. Per exemple, es compleixen 400 anys des que el matemàtic i astrònom Johannes Kepler va formular una conjectura aparentment molt simple: Quan un fruiter apila les taronges formant aquelles conegudes piràmides ho està fent de la millor manera possible (la que permet posar més taronges en menys espai). Kepler no estava tan interessat en les taronges com en les bales de canó.

Després de quatre-cents anys i molts intents, l'any 2005 es va acceptar una demostració de la conjectura feta amb un programa d'ordinador. Fixa't que una construcció geomètrica tan familiar va tenir enfeinades a generacions de matemàtics durant gairebé 400 anys. La demostració de la conjectura de Kepler és deguda a Thomas Hales a la qual hi va dedicar 6 anys de la seva vida.

Es pot calcular que el sistema del fruiter omple el 74% de l'espai. Més exactament,  $\pi\sqrt{2}/6$ . Hales va demostrar que no és possible millorar aquest resultat amb una xarxa periòdica.

Un dodecaedre regular d'esferes podria ser la millor solució. En canvi, amb dodecaedres regulars no s'omple l'espai. Necessitem per emplenar l'espai, el dodecaedre ròmbic que has construït a casa teva. Veurem que ocupa el mateix que les piles de taronges habituals.

El més interessant és que el problema del fruiter ja l'havia resolt la naturalesa mitjançant la cristal·lografia.



1

# La meravellosa efectivitat Matemàtiques a la química

Ángel Requena Fraile



*Xarxa cristal·lina cúbica centrada a les cares: octaedre, tetraedre i cub*

Si imaginem que els àtoms són esferes iguals tenim dues xarxes cristal·lines que optimitzen l'ocupació de l'espai: la xarxa cúbica centrada a les cares (FCC) i la xarxa hexagonal compacta (CH). En ambdues xarxes l'ocupació és el 74%. La xarxa hexagonal compacta és exactament el problema del fruiter, el seu poliedre associat és una variant del dodecaedre ròmbic. El dodecaedre ròmbic que has construït a casa correspon al sistema cristal·logràfic *cúbic centrat a les cares*. És a dir, si imaginem que inscrivim a cada dodecaedre ròmbic una esfera (un àtom) tendrem una xarxa on els àtoms ocuparan el 74% de l'espai.

Junta el teu dodecaedre ròmbic amb el dels teus companys: veuràs que els pots encaixar sense deixar espais buits.

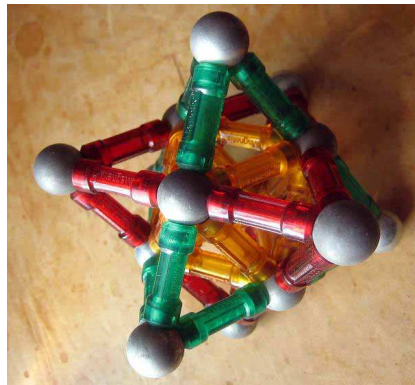
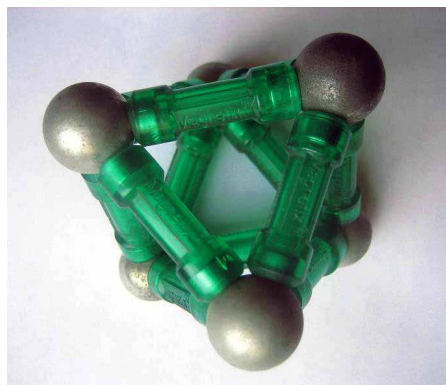
Ens podem imaginar la xarxa que hem construït com a cubs d'un àtom a cada vèrtex més un altre al centre de cadascuna de les seves cares (d'aquí el nom de la xarxa). Intenta-ho.

Veiem ara com la xarxa FCC ( de l'anglès face centered cubic) conté el tetraedre, l'icosaedre i el cub.

Construeix un octaedre regular: 12 arestes i 6 vèrtexos, quatre arestes per cada vèrtex, on les cares són triangles equilàters.

A cadascuna de les cares munta-hi un tetraedre regular: obtindràs un octaedre estrellat. Construeix els tetraedres de forma que alternis dos colors ( a cares consecutives de l'octaedre original hi has de tenir colors diferents). Observa que et pots imaginar l'octaedre estrellat com la intersecció de dos tetraedres on les seves arestes tenen exactament el doble de longitud que les arestes de l'octaedre original.

Fixa't en els vèrtexos d'aquests tetraedres majors: observa que formen els vuit vèrtexos d'un cub. A més, els vèrtexos de l'octaedre estan al centre de les sis cares d'aquest cub. Si cada vèrtex correspongués a un àtom tendríem una xarxa cristal·lina FCC.



# La meravellosa efectivitat *Matemàtiques a la química*

Ángel Requena Fraile



## Activitats 1.1

El model construït permet observar com en una mateixa figura hem unit vuit tetraedres d'aresta unitat, dos d'aresta doble, un octaedre d'aresta unitat i un cub d'aresta que has de calcular.

