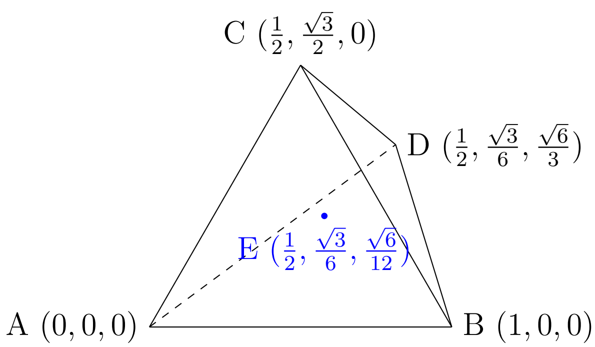
Cálculo del ángulo diédrico de un tetraedro regular

Ibai Zubillaga

7 de mayo de 2021



Planteamiento del problema

En química, cuando se da la geometría de las moléculas, se aprende que ciertas especies químicas tienen estructura tetraédrica (CH_4, CCl_4, ${SO_4}^{2-}$, etc.). Se dice que el ángulo entre los enlaces es de $109,47°$, sin explicar el porqué matemático. Mirando en internet se encuentra fácilmente que ese ángulo es $\arccos(-\frac{1}{3})$, sin embargo, esto no da ninguna explicación.

Una vez sabiendo cuál es el resultado que hay que obtener, he resuelto el problema a través de la geometría analítica.

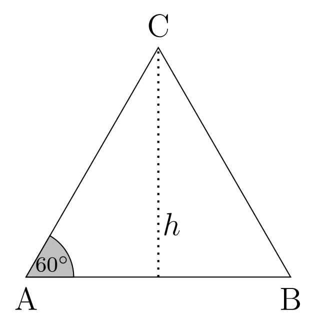
Resolución del problema

Coordenadas de los vértices del tetraedro

Antes de calcular nada, tenemos que describir el tetraedro en el espacio. Un tetraedro regular, por definición, tiene cuatro caras. Estas caras las forman triángulos equiláteros similares y del mismo tamaño. Lo primero que haremos será calcular los tres puntos de una de esas caras.

Los tres puntos de una cara del tetraedro están colocados en un plano bidimensional. El primer punto será A(0,0,0). Vamos a establecer también la longitud de las aristas del tetraedro como 1. Este número es arbitrario, pues el ángulo no variaría si fuera otro.

Una vez tenemos un primer punto y la longitud de los vértices, estamos autorizados a decir que otro punto es B(1,0,0). Para calcular el último punto del triángulo usaremos la trigonometría.



Como es un triángulo equilátero, $\widehat{CAB} = 60°$. La altura (h) es desconocida, pero sabemos que el valor de la coordenada horizontal es un medio. Por tanto:

$$\tan(60°) = \frac{h}{0{,}5}$$
$$\tan(60°) = \sqrt{3}$$
$$\Downarrow$$
$$h = \frac{\sqrt{3}}{2}$$

Como todos los puntos que forman el triángulo están en un mismo plano, sus terceras coordenadas son 0. Teniendo en cuenta todo esto, podemos decir que $(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0)$ son las coordenadas del punto C.

Tenemos las coordenadas del triángulo $\overset{\triangle}{ABC}$. Para conseguir el tetraedro, nos faltaría el punto D. Como este punto tiene profundidad, su tercera coordenada no será cero.

Sea el punto D(i, j, k), eso implica que:

$$\overrightarrow{DA} = (-i, -j, -k)$$
$$\overrightarrow{DB} = (1 - i, -j, -k)$$
$$\overrightarrow{DC} = (\tfrac{1}{2} - i, \tfrac{\sqrt{3}}{2} - j, -k)$$

Sabemos que la longitud de los tres vectores es la misma:

$$\mid \overrightarrow{DA} \mid = \mid \overrightarrow{DB} \mid = \mid \overrightarrow{DC} \mid = 1$$

$$\sqrt{i^2 + j^2 + k^2} = \sqrt{(1-i)^2 + j^2 + k^2} = \sqrt{(\tfrac{1}{2} - i)^2 + (\tfrac{\sqrt{3}}{2} - j)^2 + k^2} = 1$$

Partiendo de aquí, se pueden conseguir fácilmente las tres coordenadas. Empecemos con la primera.

$$i^2 \cancel{+ j^2 + k^2} = (1-i)^2 \cancel{+ j^2 + k^2}$$
$$i^2 = 1 - 2i + i^2$$
$$0 = 1 - 2i \Longrightarrow \boxed{i = \tfrac{1}{2}}$$

Una vez sabemos la primera coordenada, para conseguir la segunda:

$$(\tfrac{1}{2} - i)^2 + (\tfrac{\sqrt{3}}{2} - j)^2 + k^2 = i^2 + j^2 + k^2$$
$$\cancel{(\tfrac{1}{2} - \tfrac{1}{2})^2} + (\tfrac{\sqrt{3}}{2} - j)^2 \cancel{+ k^2} = (\tfrac{1}{2})^2 + j^2 \cancel{+ k^2}$$
$$\tfrac{3}{4} - \sqrt{3}j + j^2 = \tfrac{1}{4} + j^2$$
$$\tfrac{3}{4} - \sqrt{3}j + \cancel{j^2} = \tfrac{1}{4} + \cancel{j^2}$$
$$\tfrac{2}{4} = \sqrt{3}j \Longrightarrow \boxed{j = \frac{\sqrt{3}}{6}}$$

En la última coordenada deberían salir dos valores. Podemos imaginar como una recta a los puntos equidistantes a los tres del triángulo. Si esa distancia es 1, solo habrá dos puntos que cumplan ambas condiciones. Uno será el simétrico del otro con respecto al plano que forma el triángulo $\overset{\triangle}{ABC}$.

$$i^2 + j^2 + k^2 = 1$$
$$(\tfrac{1}{2})^2 + (\tfrac{\sqrt{3}}{2})^2 + k^2 = 1$$
$$\tfrac{1}{4} + \tfrac{3}{36} + k^2 = 1$$
$$k^2 = \tfrac{2}{3} \Longrightarrow \boxed{k = \pm\sqrt{\frac{2}{3}}}$$

Vamos a definir la profundidad como positiva, por lo que tomaremos el valor positivo del resultado de k: $k = \frac{\sqrt{6}}{3}$.

Coordenadas del punto E

Definamos el punto E de la siguiente manera: el centro de la esfera circunscrita del tetraedro. Dicho de otro modo, el punto equidistante a los cuatro vértices. Por poner un ejemplo de química, en la molécula de CCl_4, los átomos de cloro serían los vértices, y el átomo de carbono el punto E. Por lo tanto, el punto E es el siguiente:

$$E := d(E,A) = d(E,B) = d(E,C) = d(E,D)$$

Para calcular el punto, de la misma manera que hemos hecho con el punto D, usaremos vectores. Sea el punto E(x, y, z):

$$\begin{aligned}
\overrightarrow{EA} &= (-x, -y, -z)\\
\overrightarrow{EB} &= (1-x, -y, -z)\\
\overrightarrow{EC} &= (\tfrac{1}{2} - x, \tfrac{\sqrt{3}}{2} - y, -z)\\
\overrightarrow{ED} &= (\tfrac{1}{2} - x, \tfrac{\sqrt{3}}{6} - y, \tfrac{\sqrt{6}}{3} - z)
\end{aligned}$$

La propiedad de este punto es que la suma de los vectores que forma es el vector $\vec{0} = (0, 0, 0)$. Gracias a esta propiedad se justifica, por ejemplo, la apolaridad de la mencionada molécula CCl_4. Los vectores que hemos definido son el análogo matemático al momento dipolar ($\overrightarrow{\mu}$). Si la suma del momento dipolar no da $\vec{0}$, entonces la molécula es polar.

Teniendo todo esto en cuenta, calculemos las coordenadas del punto E.

$$\sum_{M=\{A,B,C,D\}} \overrightarrow{EM} = \overrightarrow{0}$$

$$\begin{aligned}
x \Longrightarrow -x + 1 - x + \tfrac{1}{2} - x + \tfrac{1}{2} - x &= 0\\
2 - 4x &= 0\\
4x = 2 \Longrightarrow &\boxed{x = \frac{1}{2}}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
y \Longrightarrow -y - y + \tfrac{\sqrt{3}}{2} - y + \tfrac{\sqrt{3}}{6} - y &= 0\\
-4y + \tfrac{2\sqrt{3}}{3} &= 0\\
4y = \tfrac{2\sqrt{3}}{3} \Longrightarrow &\boxed{y = \frac{\sqrt{3}}{6}}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
z \Longrightarrow -z - z - z + \tfrac{\sqrt{6}}{3} - z &= 0\\
-4z + \tfrac{\sqrt{6}}{3} &= 0\\
4z = \tfrac{\sqrt{6}}{3} \Longrightarrow &\boxed{z = \frac{\sqrt{6}}{12}}
\end{aligned}$$

Hemos calculado entonces el punto E$(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{6}, \frac{\sqrt{6}}{12})$. Ya tenemos todos los puntos que necesitamos para obtener el ángulo.

Ángulo diédrico del tetraedro

El ángulo mencionado en química, el ángulo entre los enlaces, y el ángulo diédrico del tetraedro son el mismo, al cual llamaremos α.

Para obtener ese ángulo, calcularemos los vectores que forma el punto E con dos vértices que estén conectados. Dicho de una forma más entendible:

$$\alpha = \widehat{\overrightarrow{EA}\,\overrightarrow{EC}}$$

Los vértices que hemos elegido son A y C. Calculemos los dos vectores correspondientes:

$$\begin{aligned}
\overrightarrow{EA}(-\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{6}, -\frac{\sqrt{6}}{12})\\
\overrightarrow{EC}(0, \frac{\sqrt{3}}{3}, -\frac{\sqrt{6}}{12})
\end{aligned}$$

Los módulos de sendos vectores, por definición del punto E, tienen que ser los mismos.

$$\mid \overrightarrow{EA} \mid = \mid \overrightarrow{EC} \mid = \frac{\sqrt{6}}{4}$$

Finalmente, para conseguir nuestro ángulo, usaremos el producto escalar.

$$\overrightarrow{EA} \cdot \overrightarrow{EC} = \mid \overrightarrow{EA} \mid \cdot \mid \overrightarrow{EC} \mid \cdot \cos(\alpha)$$

$$\Downarrow$$

$$\cos(\alpha) = \frac{\overrightarrow{EA} \cdot \overrightarrow{EC}}{\mid \overrightarrow{EA} \mid \cdot \mid \overrightarrow{EC} \mid} = \frac{\frac{-1}{\cancel{8}}}{\frac{3}{\cancel{8}}}$$

$$\boxed{\cos(\alpha) = -\frac{1}{3}}$$

Aplicando la función inversa del coseno conseguimos el resultado esperado:

$$\boxed{\alpha = \arccos\left(-\frac{1}{3}\right) \simeq 109,47^\circ}$$

$\blacksquare$