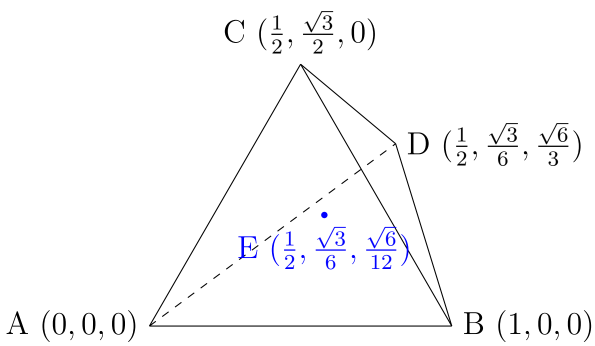
Tetraedro erregular baten angelu diedrikoaren kalkulua

Ibai Zubillaga

2021eko maiatzaren 7a



Problemaren aurkezpena

Kimikan, molekulen geometria ikusterakoan, hainbat espezie kimikok egitura tetraedrikoa dutela ikasten da (CH_4, CCl_4, $SO_4{}^{2-}$, etab.). Loturen arteko angelua $109,47°$-koa dela esaten da, zergati matematikoa azaldu gabe. Interneten begiratuz gero, emaitza hori $\arccos(-\frac{1}{3})$ dela aurkitzen da erraz. Honek, ordea, ez du gehiegi azaltzen.

Behin jakinda zein emaitzara iritsi behar naizen, problema geometria analitikoaren bitartez ebatzi dut.

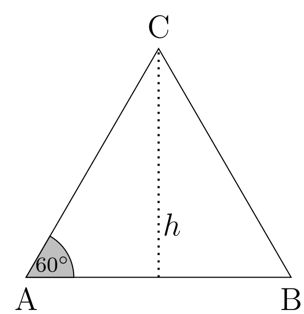
Problemaren ebazpena

Tetraedroaren erpinen koordenatuak

Ezer kalkulatu baino lehen, tetraedro bat zehaztu behar dugu espazioan. Tetraedro erregular bat, definizioz, lau aurpegi ditu. Aurpegi horiek, antzeko eta tamaina berekoak diren triangelu aldeberdinak dira. Hortaz, lehenik alde batek dituen hiru puntuen koordenatuak lortuko ditugu.

Tetraedroaren aurpegi bateko hiru puntuak plano bidimentsional batean kokaturik daude. Lehenengo puntua A(0,0,0) gisa kokatuko dugu. Tetraedroaren aldeen luzera 1 dela esango dugu. Hartzen dugun zenbaki honek ez du garrantzirik, beste bat hartuz gero angelua ez bailitzateke aldatuko.

Lehenengo puntua izanik eta aldeen luzera ere bai, hurrengo puntua B(1,0,0) dela esan genezake. Azkeneko triangeluaren koordenatuak kalkulatzeko, trigonometria erabili beharko dugu.



Triangelu aldeberdina denez, $\widehat{CAB} = 60°$ izango da. Altuera (h) ezezaguna da, baina badakigu koordenatu horizontalaren balioa erdia izango dela. Hortaz:

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

Triangelua osatzen duten puntu guztiak plano berean daudenez, haien hirugarren koordenatua 0 da. Hau guztia kontuan hartuta, esan dezakegu C puntuaren koordenatuak $(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0)$ direla.

$\overset{\triangle}{ABC}$ triangeluaren erpinen koordenatuak ditugu. Tetraedroa lortzeko, D puntua faltako litzaiguke. Puntu honek sakontasuna duenez, bere hirugarren koordenatua ez da zero izango.

Izan bitez D(i, j, k) puntua. Horrek esan nahi du:

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

Badakigu ere hiru bektoreen luzera berdina dela:

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

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

Hemendik abiatuta, erraz lor daitezke hiru koordenatuak. Has gaitezen lehenengoarekin.

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

Bigarren koordenatua lortzeko, behin lehenengoa jakinda:

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

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

$$\tfrac{3}{4} - \sqrt{3}j + j^2 = \tfrac{1}{4} + j^2$$

$$\tfrac{3}{4} - \sqrt{3}j + \cancel{j^2} = \tfrac{1}{4} + \cancel{j^2}$$

$$\tfrac{2}{4} = \sqrt{3}j \Longrightarrow \boxed{j = \frac{\sqrt{3}}{6}}$$

Azkeneko koordenatuan bi emaitza atera behar dira. Lehen hiru puntuetatik ekidistante dauden puntuak zuzen bat gisa ikus ditzakegu. Distantzia hori 1 bada, bi puntu egongo dira bakarrik bi baldintzak betetzen dituztenak. Bata bestearen simetrikoa izango da $\overset{\triangle}{ABC}$ triangeluak osatzen duen planoarekiko.

$$i^2 + j^2 + k^2 = 1$$

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

$$\tfrac{1}{4} + \tfrac{3}{36} + k^2 = 1$$

$$k^2 = \tfrac{2}{3} \Longrightarrow \boxed{k = \pm\sqrt{\frac{2}{3}}}$$

Sakontasuna positibo gisa definituko dugu, hortaz, k balioaren emaitza positiboa hartuko dugu: $k = \frac{\sqrt{6}}{3}$.

E puntuaren koordenatuak

E puntua honela definituko dugu: tetraedroaren esfera zirkunskrituaren erdigunea. Beste era batean esanda, lau erpinekiko ekidistantea den puntua. Kimikako adibide bat jarriz, CCl_4 molekulan, kloro atomoak erpinak izango lirateke, eta karbono atomoa E puntua. Hortaz, E puntua honakoa da:

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

Puntua kalkulatzeko, D puntuarekin bezalaxe, bektoreak erabiliko ditugu. Izan bitez E(x, y, z) puntua:

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

Puntu honen propietatea da, osatzen dituen bektoreen batuketa bektorialak $\vec{0} = (0, 0, 0)$ bektorea ematen duela. Ezaugarri honi esker justifikatzen da adibidez aipatutako CCl_4 molekularen apolartasuna. Definitu ditugun bektore hauek kimikako momentu dipolarraren ($\overrightarrow{\mu}$) analogo matematikoak dira. Momentu dipolarren batuketak ez badu $\vec{0}$ ematen, orduan molekula polarra da.

Hau guztia kontuan izanda, kalula ditzagun E puntuaren koordenatuak.

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

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

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

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

Kalkulatu dugu orduan E$(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{6}, \frac{\sqrt{6}}{12})$ puntua. Angeluaren balioa ateratzeko behar ditugun puntuak ditugu orain.

Tetraedroaren angelu diedrikoa

Kimikan aipatutako angelua, loturen arteko angelua alegia, eta tetraedroaren angelu diedrikoa angelu bera dira, α deituko duguna.

Angelu hori lortzeko, E puntuak lotuta dauden bi erpinekin osatzen dituen bi bektoreek osatzen duten angelua kalkulatuko dugu. Era ulergarriago batean esanda:

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

Aukeratu ditugun erpinak A eta C dira. Kalkula ditzagun bi bektore horiek:

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

Bi bektore horien moduluak, E puntuaren definizioz berdinak izan behar dira.

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

Bukatzeko, gure angelu α lortzeko, bi bektore horien arteko biderkadura eskalarra erabiliko dugu.

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

$$\Downarrow$$

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

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

Hortaz, kosinuaren alderantzizko funtzioa aplikatuz gero, lortzen dugu espero genuen emaitza:

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

■