

## Introducción

Desde el origen de la cristalografía, su relación con las matemáticas es muy estrecha. Las técnicas que han permitido descifrar la estructura cristalina de la materia y han dotado a la cristalografía de métodos para convertirse en la importante ciencia que es hoy en día están fundamentadas en las matemáticas; por otro lado, el estudio de la naturaleza de los cristales ha inspirado la creación de nuevos conceptos matemáticos a lo largo de la historia. A este camino de ida y vuelta se dedica este libro.

Uno de los principales puntos de conexión es la simetría, de capital importancia en las matemáticas y la cristalografía, y que ha servido de puente de unión entre ambos campos. La cristalografía es el estudio de los cristales —sólidos, cuyos átomos están alineados y organizados según patrones repetitivos—. Este ordenamiento se manifiesta en una estructura que permite estudiar las simetrías correspondientes, fijando unos ejes de referencia (los ejes cristalográficos) y midiendo los ángulos que forman las caras del cristal con estos ejes. La simetría

marcó uno de los hitos de la historia de la cristalografía: en 1611, Kepler observó fascinado la regularidad de los copos de nieve y decidió investigar el motivo de su singular disposición, usando matemáticas para ello.

La simetría es un concepto fundamental en las matemáticas, especialmente en la geometría y en el álgebra. Es la base de uno de los objetos algebraicos más sencillos: el grupo. Un tipo especial de grupos, los grupos cristalográficos, aparece al estudiar los movimientos (es decir, las transformaciones rígidas) del plano que dejan invariante una figura dada, es decir, las transformaciones de simetría. Para establecer las categorías de clasificación de los grupos cristalográficos planos, el matemático y cristalógrafo ruso Evgraf Fedorov utilizó sus observaciones de crecimiento de cristales. Pero el concepto general de grupo tiene otro origen en la búsqueda de las soluciones de las ecuaciones algebraicas.

En la cristalografía moderna encontramos otra relación entre las dos disciplinas: la difracción, que es el fenómeno que permitió estudiar de manera rigurosa los cristales; se asienta teóricamente en la transformada de Fourier, un desarrollo muy importante del análisis matemático del siglo XIX.

El objetivo de este libro es resaltar esta hermandad, que tiene un largo recorrido histórico, pues, aunque la química, la biología y la física también tienen fuertes lazos con la cristalografía, al final son las matemáticas las que están detrás de esta ciencia tan importante y útil. En su relación con la sociedad, también hay un paralelismo entre ambas: impregnan nuestras vidas y a veces no somos capaces de percibir las.

Esta intensa relación entre ambas disciplinas fue también destacada en el pasado Año Internacional de la Cristalografía en 2014, declarado por la Organización de

las Naciones Unidas (ONU). Se conmemoraba, por un lado, el 400 aniversario de la observación por Johannes Kepler en 1611 de la forma simétrica hexagonal de los cristales de hielo, en su obra *Strena seu de nive sexángula* (Kepler, 1611), que dio comienzo al estudio del papel de las simetrías en la materia. Por otro, el centenario del descubrimiento de la difracción de rayos X, que permitió el estudio de los materiales cristalinos. Los rayos X fueron descubiertos en 1895 por Wilhelm Röntgen (premio Nobel en 1901). La importancia de este descubrimiento para la cristalografía fue mayúscula, como muestra, entre muchas otras cosas, la lista de premios Nobel obtenidos con relación a ella. En 1914 fue otorgado a Max von Laue por el descubrimiento de un curioso fenómeno: al traspasar un cristal, el haz de rayos X generaba un patrón de difracción. Con sus experimentos de cristales de sulfato de cobre logró también confirmar su longitud de onda. Más tarde, sir William Henry Bragg y su hijo William (premios Nobel en 1915) formularon de manera sencilla cómo se difractan los rayos X en los cristales (por la denominada ley de Bragg) y fueron capaces de determinar la estructura cristalina de muchos minerales.