

La relación de la Química y las Matemáticas: un repaso histórico y perspectivas de futuro.

Bernardo Herradón
Instituto de Química Orgánica General
CSIC

Jornada de Matemáticas y Química
Universidad de Sevilla
8 de abril de 2011



Situación actual de la química.

Evolución de la química y su relación con otras ciencias.

La relación de la química y las matemáticas.

La química del futuro: materiales y matematización.



<http://www.losavancesdelaquimica.com/>
<http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/>

¿Qué es la Química?

La Química estudia las transformaciones de la materia. Es decir, como una sustancia se convierte en otra.

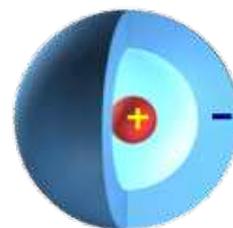
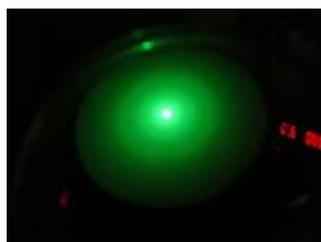
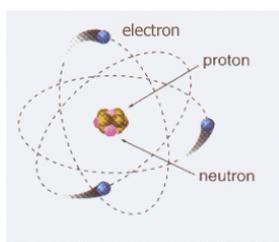
La materia que conocemos está formada por partículas más pequeñas: las moléculas, que están formadas por átomos.

Las moléculas son los componentes básicos de la materia. Por lo tanto, **todo es Química**.



<http://www.losavancesdelaquimica.com/>
<http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/>

Átomo, elemento químico.



Elemento químico: sustancia formada por una única clase de átomos (con el mismo número de protones en el núcleo).

Toda la materia está formada por sólo 90 clases de átomos.

¿La Química empieza en los electrones?

Responsable de los enlaces químicos, que es lo que hace que la materia sea estable.

Enlace químico (interacción entre electrones): la interacción que mantiene a los átomos unidos en la molécula.



<http://www.losavancesdelaquimica.com/>
<http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/>

Mendeleiev
(1834-1907)



ДИМИТРИ ІВАНОВИЧ МЕНДЕЛѢЕВЪ (Тобольск, 1834 - Сан-Петербург, 1907). Químico ruso, creador de la Tabla Periódica de los elementos.

Su investigación principal fue la que dio origen a la enunciación de la ley periódica de los elementos base del sistema periódico que lleva su nombre. En 1869 publicó la mayor de sus obras, "Principios de Química", donde formulaba su famosa Tabla Periódica, traducida a todas las lenguas y que fue libro de texto durante muchos años.

Se considera a Mendeleiev un genio, no sólo por el ingenio que mostró para aplicar todo lo conocido y predecir lo no conocido sobre los elementos químicos, plasmándolo en su tabla periódica, sino por los numerosos trabajos realizados a lo largo de toda su vida en diversos campos científicos y tecnológicos (agricultura, ganadería, industria petroquímica, etc).

Se nombró Mendeleiev (Md) al elemento químico sintético de número atómico 101 en homenaje al ilustre químico ruso. El día 2 de febrero de 2007 se cumplió el centenario de su muerte.

TABLA PERIÓDICA DE LOS ELEMENTOS

Nº atómico

Simbolo

Nombre

12,011

C

Carbono

Exceso de electrones

Electrónica

1	2											13	14	15	16	17	18																																														
1	H											7	N	8	O	9	F	10	Ne																																												
3	Li	4	Be											5	B	6	C	7	N	8	O	9	F	10	Ne																																						
11	Na	12	Mg											13	Al	14	Si	15	P	16	S	17	Cl	18	Ar																																						
19	K	20	Ca	21	Sc	22	Ti	23	V	24	Cr	25	Mn	26	Fe	27	Co	28	Ni	29	Cu	30	Zn	31	Ga	32	Ge	33	As	34	Se	35	Br	36	Kr																												
37	Rb	38	Sr	39	Y	40	Zr	41	Nb	42	Mo	43	Tc	44	Ru	45	Rh	46	Pd	47	Ag	48	Cd	49	In	50	Sn	51	Sb	52	Te	53	I	54	Xe																												
55	Cs	56	Ba	57	La	58	Ce	59	Pr	60	Nd	61	Pm	62	Sm	63	Eu	64	Gd	65	Tb	66	Dy	67	Ho	68	Er	69	Tm	70	Yb	71	Lu	72	Hf	73	Ta	74	W	75	Re	76	Os	77	Ir	78	Pt	79	Au	80	Hg	81	Tl	82	Pb	83	Bi	84	Po	85	At	86	Rn
87	Fr	88	Ra	89	Ac	90	Th	91	Pa	92	U	93	Np	94	Pu	95	Am	96	Cm	97	Bk	98	Cf	99	Es	100	Fm	101	Md	102	No	103	Lr	104	Rf	105	Db	106	Sg	107	Bh	108	Hs	109	Mt	110	Ds	111	Rg	112	Uub	113	Uut	114	Uuq	115	Uup	116	Uuh	117	Uus	118	Uuo

GASEOSOS

SÓLIDOS

LÍQUIDOS (DPV)

SINTÉTICOS

NO-METAL

GASES NOBLES

METALES ALCALINOS

METALES ALCALINO-TERRICOS

SEMICONDUCTOR

METALES DE TRANSICIÓN

LANTANIDOS

ACTINIDOS

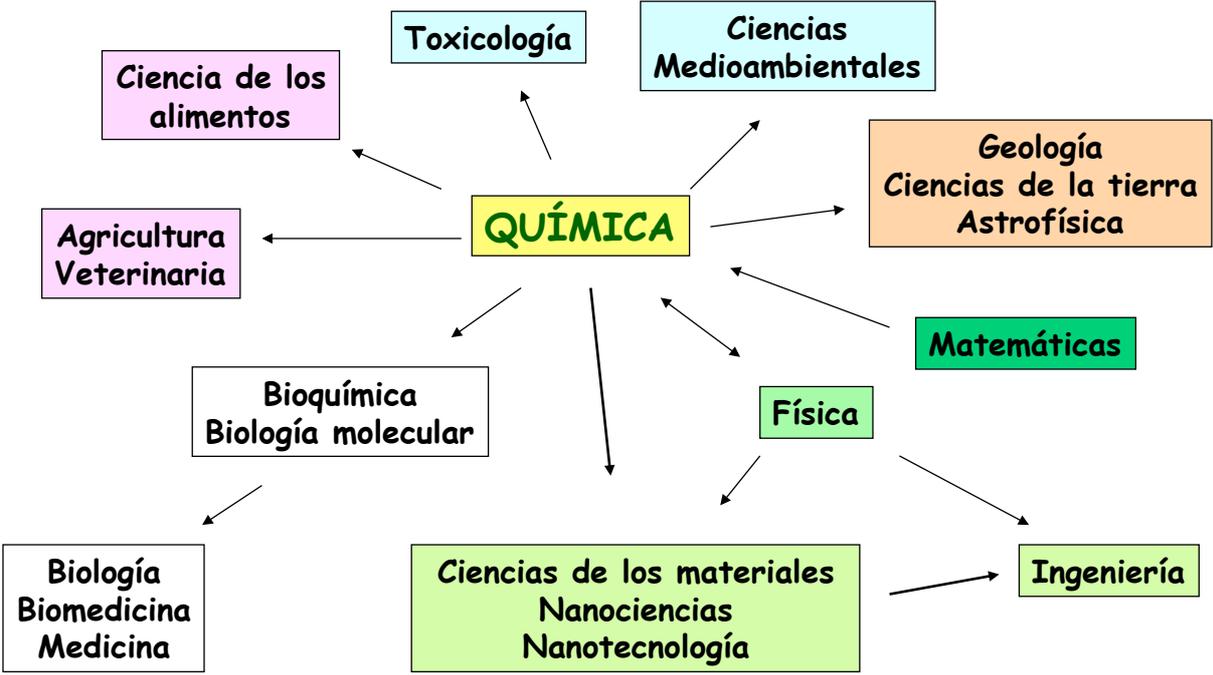
* Los valores entre paréntesis se refieren al isótopo más estable
** Los valores de los elementos gaseosos corresponden al líquida temperatura de ebullición

"Visiones" sobre la Química:

- LA QUÍMICA CREA SU PROPIO OBJETO.
- LA QUÍMICA ENTRE LA FÍSICA Y LA BIOLOGÍA.
- LA QUÍMICA: LA CIENCIA CENTRAL, ÚTIL Y CREATIVA.
- LA QUÍMICA (los químicos), COMO CIENCIA UNIVERSAL.

<http://www.losavancesdelaquimica.com/>
<http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/>

La Química y su relación con otras Ciencias



La Química: la ciencia de lo cotidiano



Podemos verdaderamente decir que el alcance de la Química y sus aplicaciones son interminables (Leo H. Baekeland, 1932)

La Química actual y su relación con otras ciencias:

de **entre la Física y la Biología**

a

entre la Biomedicina y la Ciencia de los Materiales



<http://www.losavancesdelaquimica.com/>
<http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/>

La Química entre la Física y la Biología



¿Qué significa?

- Objeto de estudio
- Métodos de estudio
- Aproximación científica
- Aspectos filosóficos



<http://www.losavancesdelaquimica.com/>
<http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/>



Fundación BBVA

La Química entre la Física y la Biología



¿Puede la Física explicar la Química?

¿Puede la Química explicar la Biología?

Reduccionismo frente a autonomía

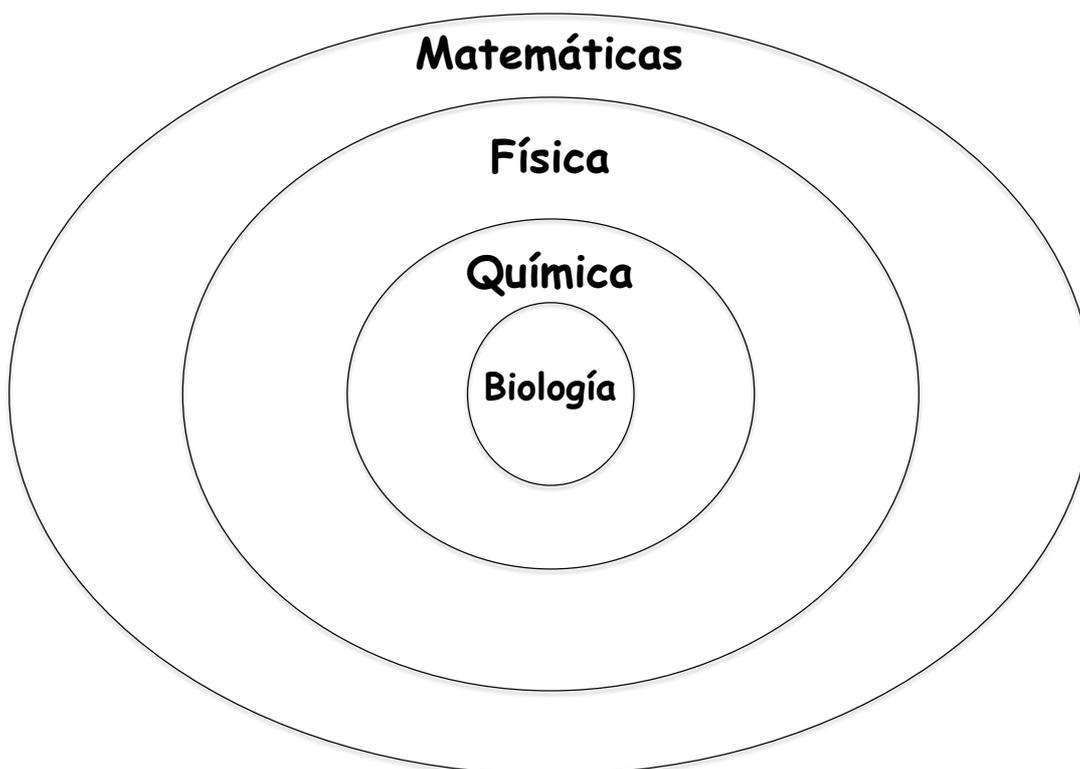


The fundamental laws necessary for the mathematical treatment of a large part of physics and the whole of chemistry are thus completely known, and the difficulty lies only in the fact that application of these laws leads to equations that are too complex to be solved.

Paul Dirac (un matemático)



<http://www.losavancesdelaquimica.com/>
<http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/>



La sensación de los químicos es que las matemáticas han influido poco en la química.

La influencia ha sido a través de la física.



<http://www.losavancesdelaquimica.com/>
<http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/>

Química y Matemáticas

¿Necesitamos los químicos las Matemáticas?

Química Analítica: No

Química Inorgánica: No

Química Orgánica: No

Química Física: a veces

La respuesta global es SI



<http://www.losavancesdelaquimica.com/>
<http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/>



MATEMÁTICAS (Matematización de la Ciencia)

La *matematización* de la Química servirá para:

- Establecer las bases teóricas (fundamentales).
- Interpretar más fácilmente los resultados.
- Aumentar el poder de predicción.

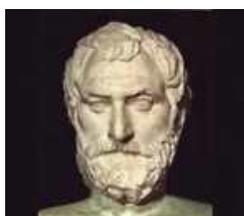
Uno de los retos de la Química del siglo XXI



<http://www.losavancesdelaquimica.com/>
<http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/>

Las relaciones entre la Física (e, indirectamente, las Matemáticas) y la Química a lo largo de la historia

La antigüedad: sólo una ciencia natural (filosofía) y las matemáticas



Thales



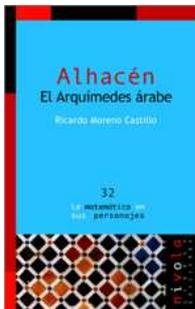
Arquímedes:
"ancestro"
de la Física



Demócrito

Las relaciones entre la Física y la Química a lo largo de la historia

La oscura edad media: los matemáticos árabes e italianos. Paracelso.



Trabajos en óptica

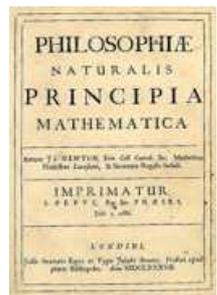


<http://www.losavancesdequimica.com/>

<http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/>

Las relaciones entre la Física y la Química a lo largo de la historia

La época dorada. Nacimiento de la Física



Galileo: método científico.
Patriarca de la Física

Newton: Padre de la Física

Las matemáticas son el alfabeto con el cual Dios ha escrito el Universo.

Otras aportaciones:



Las relaciones entre la Física y la Química a lo largo de la historia

Los fundamentos de la Física

La Física moderna fue creada por los matemáticos



<http://www.losavancesdelaquimica.com/>

<http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/>

Las relaciones entre la Física y la Química a lo largo de la historia

La época dorada. Nacimiento de la Física. ¿Sin noticias de la Química?



Alquimista.
Primer intento de reducir
la Química a la Física.
Sin éxito

Boyle y su escuela (Hooke, Mayow)

Jean Rey (c. 1582/3-c. 1645)

On an Enquiry into the Cause wherefore Tin and Lead Increase in Weight on Calcination

excerpt, originally published as a pamphlet in Bazas, France, 1630 [from Alembic Club reprint #11, *Essays of Jean Rey* (Edinburgh, 1895)]

Las relaciones entre la Física y la Química a lo largo de la historia

El nacimiento de la Química como ciencia moderna

Teoría del Flogisto: Un siglo de retraso conceptual

Lavoisier: rigor en las medidas.



<http://www.losavancesdequimica.com/>
<http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/>

Las relaciones entre la Física y la Química a lo largo de la historia

El nacimiento de la Química como ciencia moderna

La Química: la Ciencia de moda en el siglo XIX.
 Experimentos sensacionales y útiles para la sociedad.
 Poca base teórica.



ELEMENTS		
Hydrogen	1	Stannum
Air	5	Barytes
Carbon	5	Iron
Oxygen	7	Zinc
Phosphorus	9	Copper
Sulphur	10	Lead
Magnesia	12	Silver
Limst	14	Gold
Soda	16	Platina
Brass	18	Mercury



$$N_A = 6,023 \cdot 10^{23}$$

Avogadro's Hypothesis

Equal volumes of all gases at the same temperature and pressure contain the same number of molecules.

One mole of any gas at STP is 22.4 liters.

so:

$$\text{mol} = \frac{\text{Liters}}{22.4 \text{ L/mol}}$$

Las relaciones entre la Física y la Química a lo largo de la historia

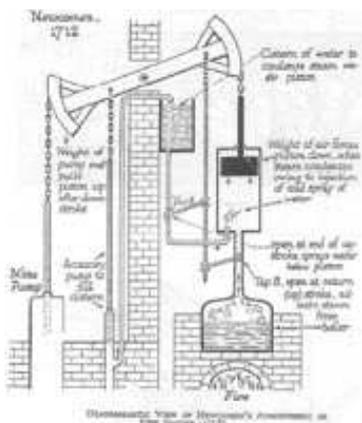
Termodinámica

Utilización de las formas de energía: calor, electricidad, mecánica.

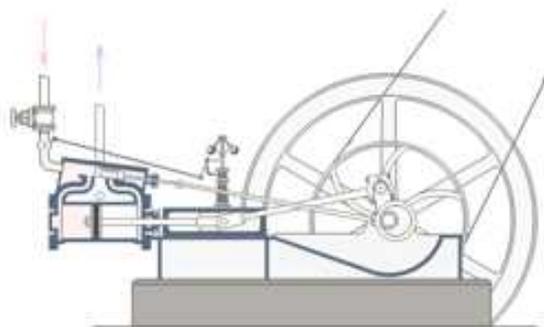
Fuentes de energía: química, solar, eólica, solar, nuclear, mecánica, mareas, etc...

Desarrollo de la Termodinámica: máquina de vapor.

La fuente de energía es el carbón (energía química).



Newcomen (1711)



Watt (1774)

Las relaciones entre la Física y la Química a lo largo de la historia

LA REVOLUCIÓN INDUSTRIAL

LA CIENCIA AL SERVICIO DE LA SOCIEDAD

LA TÉCNICA Y EL DESARROLLO INDUSTRIAL
AL SERVICIO DE LA CIENCIA

EL NACIMIENTO DE LA TERMODINÁMICA
(RELACIÓN DE LA ENERGÍA TÉRMICA Y LA
MATERIA)

El desarrollo de la Termodinámica: La interacción entre la física (los físicos) y la química (los químicos).



Carnot
(1796-1832)



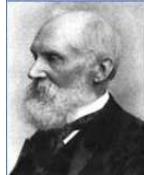
Mayer
(1814-1878)



Joule
(1818-1889)



Clausius
(1822-1888)



Kelvin
(1824-1907)



Maxwell
(1831-1879)



Boltzmann
(1844-1906)

Los principios (leyes) de la termodinámica:

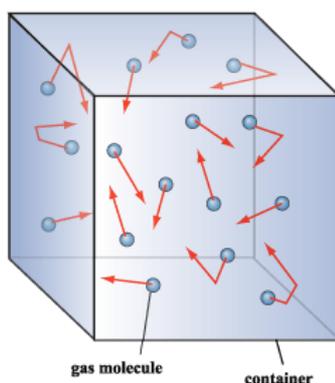
- **Cero:** Definición de temperatura.
- **Primero:** Conservación de la energía.
- **Segundo:** Imposibilidad de usar toda la energía (aumento de la entropía).
- **Tercero:** La entropía de un sólido perfecto a 0 K es 0.



<http://www.losavancesdelaquimica.com/>

<http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/>

El desarrollo de la Termodinámica: La interacción entre la física (los físicos) y la química (los químicos).



$$P = \frac{nm\overline{v^2}}{3}$$

Para los físicos de mediados del siglo XIX, la existencia de moléculas era evidente; algunos químicos dudaron de su existencia hasta el siglo XX.



<http://www.losavancesdelaquimica.com/>

<http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/>

Las relaciones entre la Física y la Química a lo largo de la historia

El nacimiento de la Química física (y Fisicoquímica)



Faraday



Ostwald



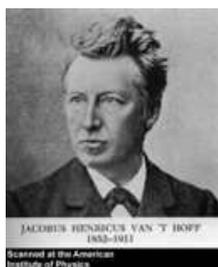
Arrhenius



Van der Waals



Nernst



Química general

Química teórica



<http://www.losavancesdelaquimica.com/>

<http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/>

Las relaciones entre la Física y la Química a lo largo de la historia

Los fundamentos de la Química

we are occupied in amassing a vast collection of receipts for the preparation of different substances... which may be of no more service to the generalizations of the science [of chemistry], whenever our Newton arises, than, I conceive, the bulk of the stars were to the conception of gravitation.

Vernon Harcourt (1875)

Química: ciencia práctica, sin preocuparse de los fundamentos.



<http://www.losavancesdelaquimica.com/>

<http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/>

La ciencia a finales del siglo XIX

- Gravitación
- Electromagnetismo
- Teoría cinética de los gases
- Ecuaciones de la termodinámica
- Leyes de la óptica (naturaleza de la luz)

$$F = G \frac{m_1 m_2}{r^2}$$

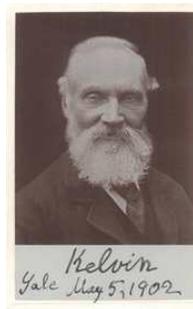
And God said:
 $\nabla \cdot D = \rho$
 $\nabla \cdot B = 0$
 $\nabla \times E = -\frac{\partial B}{\partial t}$
 $\nabla \times H = i + \frac{\partial D}{\partial t}$
 And there was light.

$$U = \left(\frac{\partial U}{\partial S}\right)_{V,N} S + \left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_{S,N} V + \sum_{\alpha=1}^{N_s} \left(\frac{\partial U}{\partial N_{\alpha}}\right)_{S,V,N_{i \neq \alpha}} N_{\alpha}$$

$$\frac{N_j}{N} = \frac{e^{-\epsilon_j/kT}}{\sum_i e^{-\epsilon_i/kT}}$$

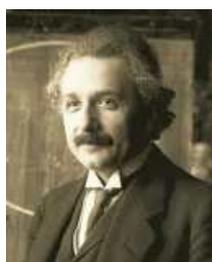
There is nothing new to be discovered in physics now, All that remains is more and more precise measurement.

Lord Kelvin (finales del siglo XIX)



Las relaciones entre la Física y la Química a lo largo de la historia

Los fundamentos de la Química: la mecánica cuántica aplicada a la Química (Química cuántica)



$$\Delta t \cdot \Delta E \geq h$$

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + \left(\frac{8\pi^2 m}{h^2}\right) (E - V) \phi = 0.$$

The Man Who Stumped Einstein



Los fundamentos de la Química

La Química moderna ha sido fundamentada por los físicos

Hay muchos temas pendientes:

Conceptos fundamentales: orbital, enlace, electronegatividad, conjugación, etc.

Estructura

Periodicidad de las propiedades químicas.

¿Existe una "filosofía química"?

Temas de investigación pendientes (para el siglo XXI)



<http://www.losavancesdelaquimica.com/>

<http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/>

La relación entre la Química y las Matemáticas

Química matemática (Mathematical Chemistry)

Matemática química (Chemical Mathematics)

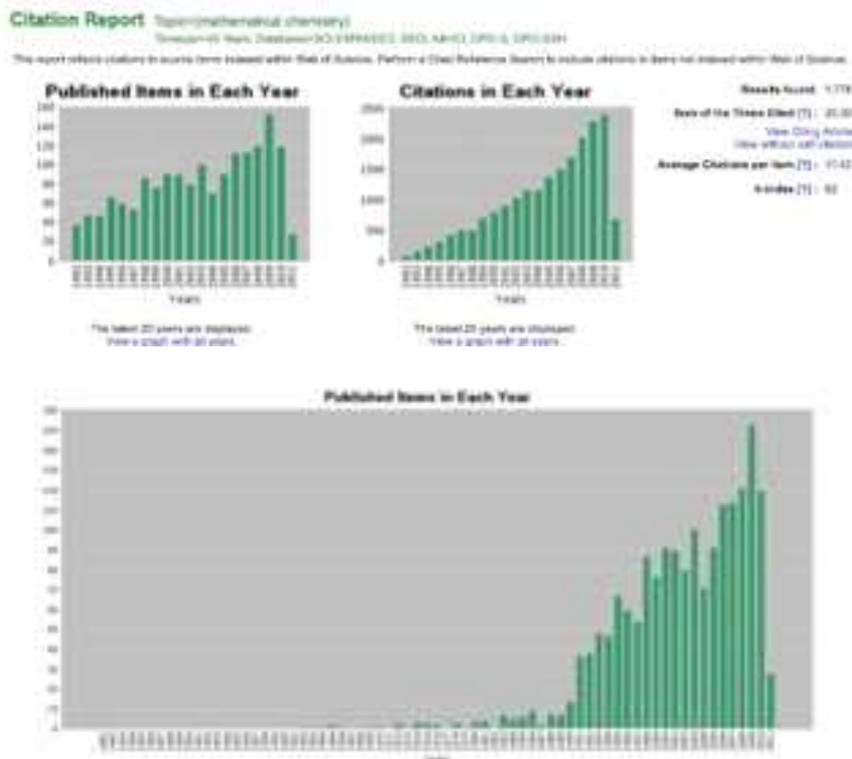
Physical Chemistry/Chemical Physics



<http://www.losavancesdelaquimica.com/>

<http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/>

La química matemática hoy (análisis bibliográfico, 1 de abril de 2011)



La química matemática hoy (análisis bibliográfico)

Artículos (originales) más citados

Tomographic imaging of molecular orbitals

J. Rohrer^{1,2}, J. Lavropoulos¹, B. Loider¹, M. S. Wilson¹, K. Fichtner¹, J. C. Klotter¹, P. S. Cornam¹ & S. M. Wilmsmeyer¹

¹National Research Council of Canada, 120 Sussex Drive, Ottawa, Ontario K1A 0R6, Canada
²University of Ottawa, 145 Jean Jacques, Ottawa, Ontario K1P 6N5, Canada
 Email: jroher@nrc.ca

Nature **2004**, 432, 867
(578 citas)

Single-electron wavefunctions, or orbitals, are the mathematical constructs used to describe the multi-electron wavefunction of molecules. Because the highest-lying orbitals are responsible for chemical properties, they are of particular interest. To observe these orbitals change as bonds are formed and broken is to observe the essence of chemistry. Yet single orbitals are difficult to observe experimentally, and until now, this has been impossible on the timescale of chemical reactions. Here we demonstrate that the full three-dimensional structure of a single orbital can be imaged by a seemingly unlikely technique, using high harmonics generated from intense femtosecond laser pulses focused on aligned molecules. Applying this approach to a series of molecular alcohols, we accomplish a tomographic reconstruction of the highest occupied molecular orbital of N_2 . The method also allows us to follow the ultrafast dynamics of an electron wave packet.

Collisional Breakup in a Quantum System of Three Charged Particles

T. N. Rescigno,¹ M. Baertschy,² W. A. Isaacs,³ C. W. McCurdy^{1,2,3}

Since the invention of quantum mechanics, even the simplest example of the collisional breakup of a system of charged particles, $e^- + H^+ \rightarrow H^+ + e^-$ (where e^- is an electron and H^+ is hydrogen), has resisted solution and is now one of the last unsolved fundamental problems in atomic physics. A complete solution requires calculation of the energies and directions for a final state in which all three particles are moving away from each other. Even with supercomputers, the current mathematical description of this state has proved difficult to apply. A framework for solving ionization problems in many areas of chemistry and physics is finally provided by a mathematical transformation of the Schrödinger equation that makes the final state tractable, providing the key to a numerical solution of this problem that reveals its full dynamics.

Journal of Computer-Aided Molecular Design, 9 (1995) 251-268
 ESCOM

J-CAMD 259

MAB, a generally applicable molecular force field for structure modelling in medicinal chemistry

Paul R. Gerber* and Klaus Müller

Pharmaceutical Research and Development, F. Hoffmann-La Roche AG, CH-4002 Basel, Switzerland

Science **1999**, 286, 2476
(263 citas)

237 citas

La química matemática hoy (análisis bibliográfico)

Temas de investigación (2010-11). Fuente ISI-WoK

Modelos matemáticos (ingeniería química, estadística, análisis de datos, representaciones gráficas, etc): 76%

Química cuántica y computacional: 10%

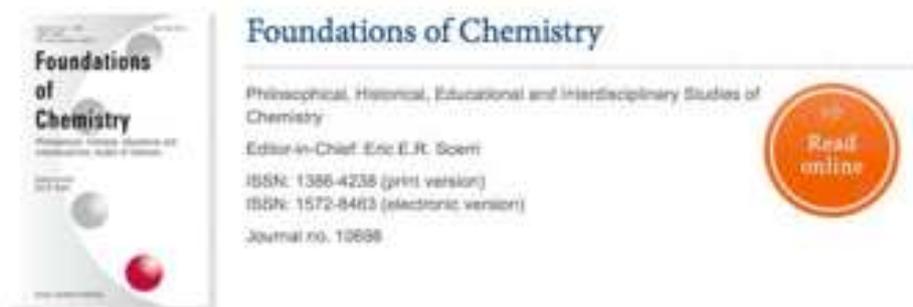
Aspectos fundamentales (topología, teoría de grupos, grafos) aplicados a la estructura, reactividad, etc: 10%

Relaciones estructura-propiedad, cribado virtual, etc: 3%

Cristalografía: 1%



<http://www.losavancesdelaquimica.com/>
<http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/>



<http://www.losavancesdelaquimica.com/>
<http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/>