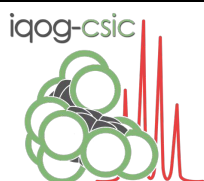


La relación de la Química y las Matemáticas: un repaso histórico y perspectivas de futuro.

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.

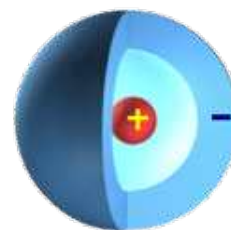
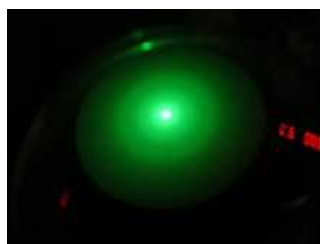
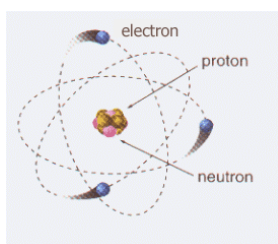
La materia que conocemos está formada por partículas más pequeñas: las moléculas, que están formadas por átomos.

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?

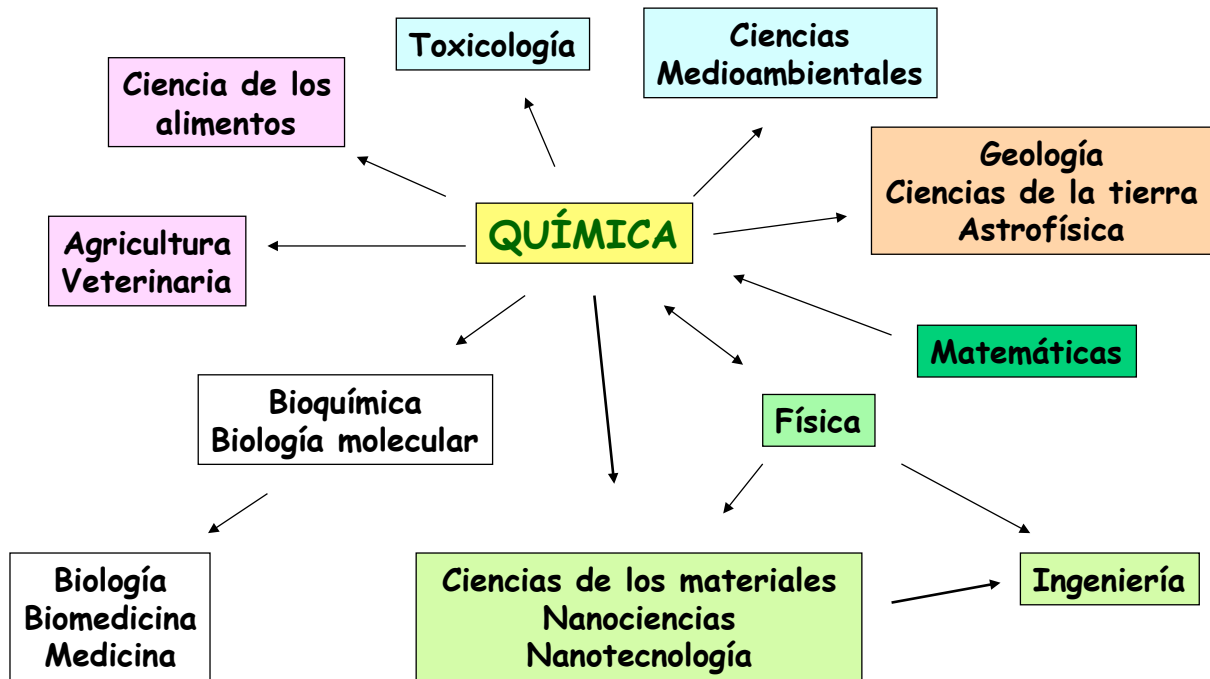
Responsable de los enlaces químicos, que es lo que hace que la materia sea estable.

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/>

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**

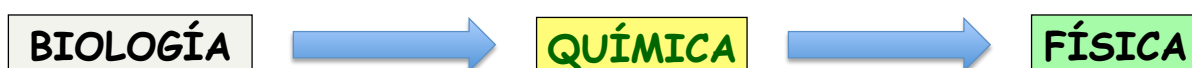
a

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

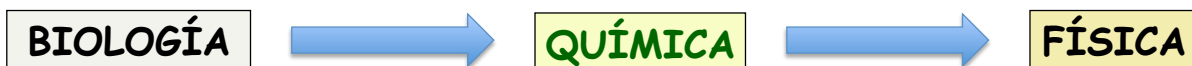


<http://www.losavancesdelaquimica.com/>
<http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/>



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

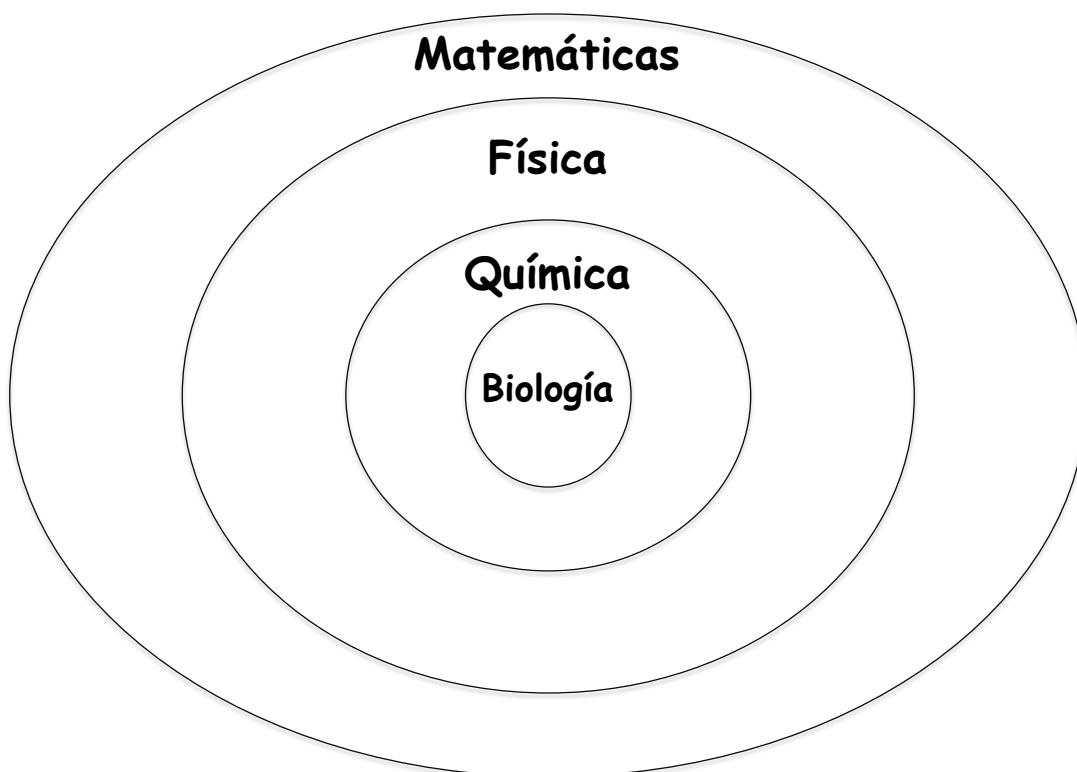


The fundamental laws necessary for the mathematical treatment of a large part of physics and the whole of chemistry are thus completely known, and the difficulty lies only in the fact that application of these laws leads to equations that are too complex to be solved.

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

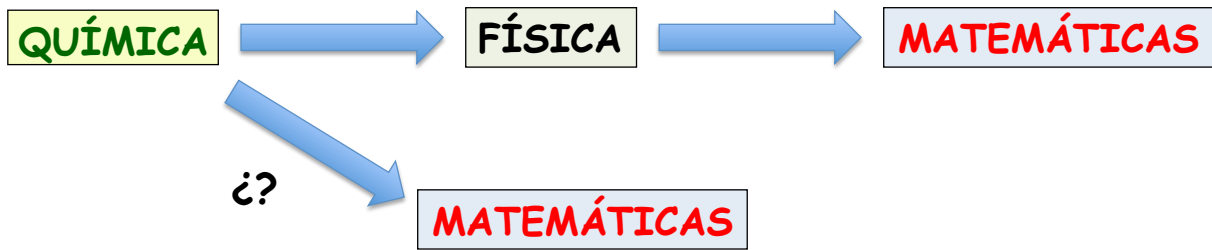
Química Orgánica: No

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.

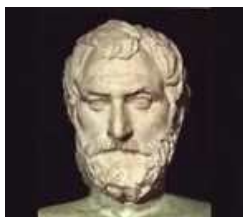
Uno de los retos de la Química del siglo XXI



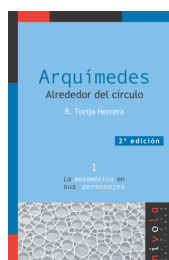
<http://www.losavancesdelaquimica.com/>
<http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/>

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



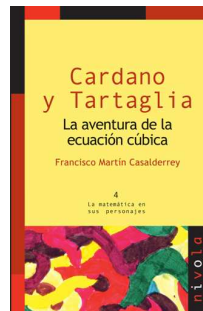
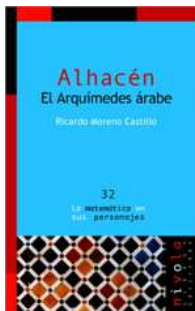
Arquímedes:
"ancestro"
de la Física



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

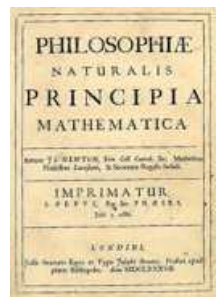


<http://www.losavancesdequimica.com/>

<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.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 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 | 86 |
| Air | 5 | Barium | 56 |
| Carbon | 5 | Iron | 56 |
| Oxygen | 7 | Zinc | 65 |
| Phosphorus | 9 | Copper | 63 |
| Sulphur | 16 | Lead | 207 |
| Magnesium | 24 | Silver | 216 |
| Lim | 24 | Gold | 197 |
| Soda | 24 | Platina | 197 |
| Bron | 24 | Mercury | 200 |



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

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

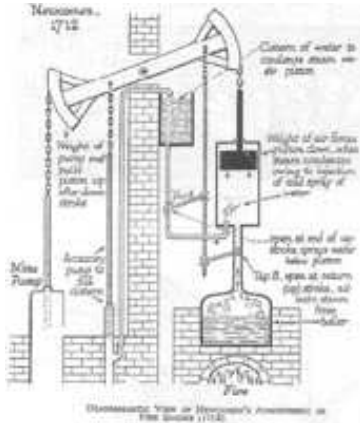
Termodinámica

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

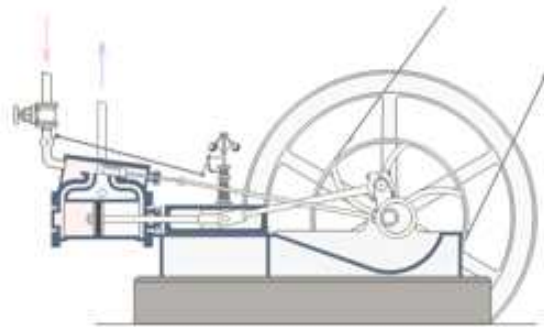
Fuentes de energía: química, solar, eólica, solar, nuclear, mecánica, mareas, etc...

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)



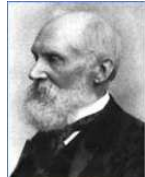
Mayer
(1814-1878)



Joule
(1818-1889)



Clausius
(1822-1888)



Kelvin
(1824-1907)



Maxwell
(1831-1879)



Boltzmann
(1844-1906)

Los principios (leyes) de la termodinámica:

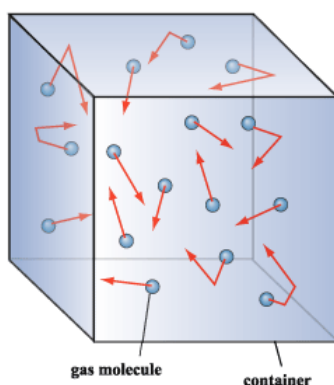
- **Cero:** Definición de temperatura.
- **Primero:** Conservación de la energía.
- **Segundo:** Imposibilidad de usar toda la energía (aumento de la entropía).
- **Tercero:** La entropía de un sólido perfecto a 0 K es 0.



<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)



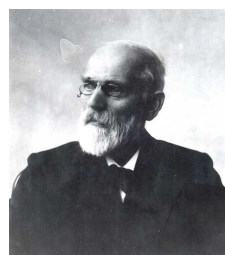
Faraday



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)

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

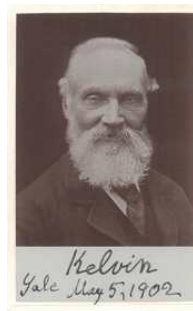
And God said:
 $\nabla \cdot D = \rho$
 $\nabla \cdot B = 0$
 $\nabla \times E = -\frac{\partial B}{\partial t}$
 $\nabla \times H = i + \frac{\partial D}{\partial t}$
 And there was light.

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

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

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)

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/>