

**Auguste Comte (1798-1857)**

**"La química es una ciencia no-matemática"**

(también pronosticó que la astronomía era una ciencia que ya había alcanzado su límite)



**Jeremias B. Richter (1762-1807)**

**"La química pertenece, en su mayor parte, a las matemáticas aplicadas"**

(Ley de las proporciones equivalentes)



**Libro de química general (1792) con introducción matemática:**

aritmética

álgebra elemental

progresiones (aritméticas/geométricas)



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

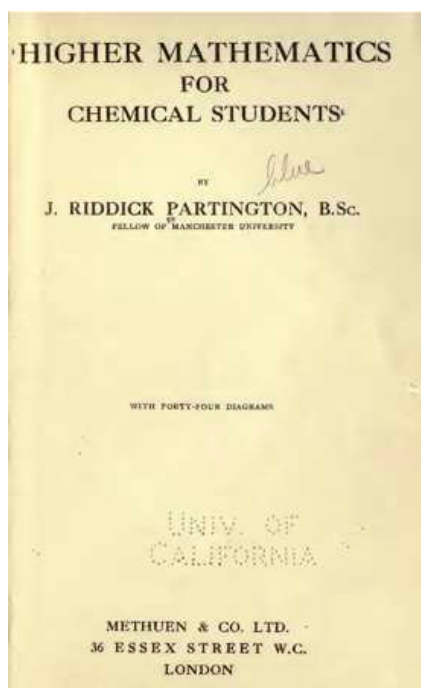
<http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/>

**¿Qué enseñan los libros de matemáticas para químicos?**



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

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

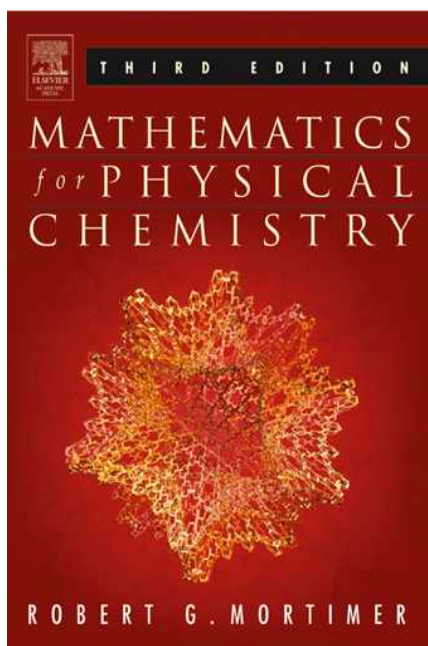


## Partington (1911)

- Funciones y límites
- Diferenciación
- Máximos y mínimos
- Funciones exponenciales y logarítmicas
- Diferenciación parcial
- Interpolación y extrapolación
- Integrales
- Ecuaciones diferenciales
- Aplicaciones:
  - Ecuaciones cuadráticas
  - Sistemas de ecuaciones (determinantes)
  - Fórmulas de aproximación



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



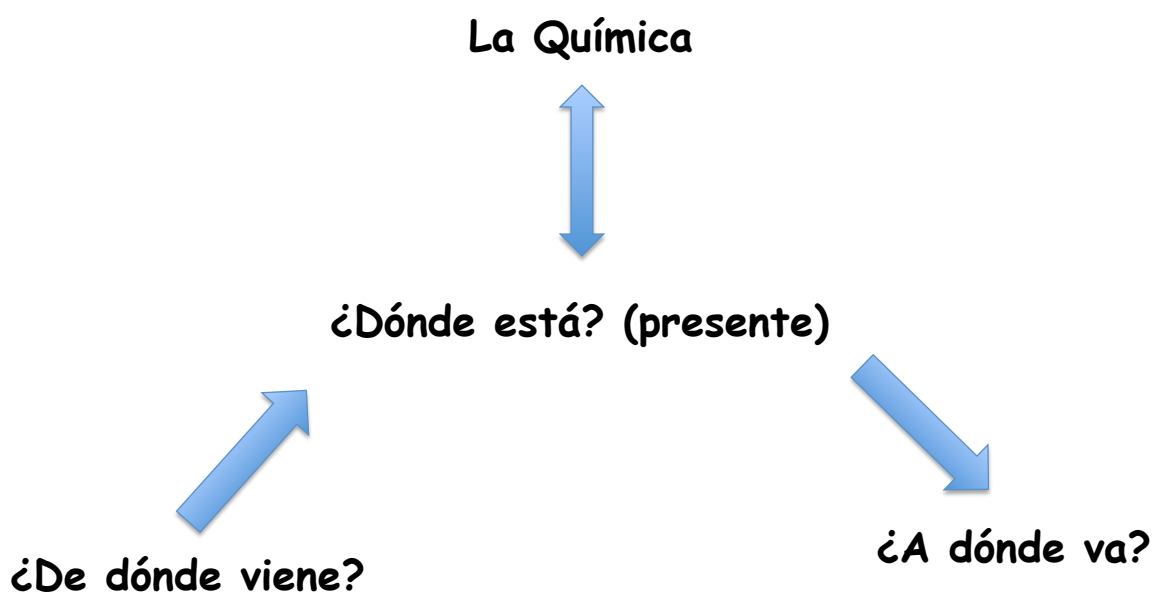
## Mortimer (2005)

- Números y medidas
- Simbolismo y funciones
- Ecuaciones algebraicas
- Funciones y cálculo diferencial
- Cálculo integral
- Series y transformadas
- Cálculo de varias variables
- Ecuaciones diferenciales
- Operadores, matrices y teoría de grupos
- Sistemas de ecuaciones algebraicas
- Tratamiento de datos experimentales

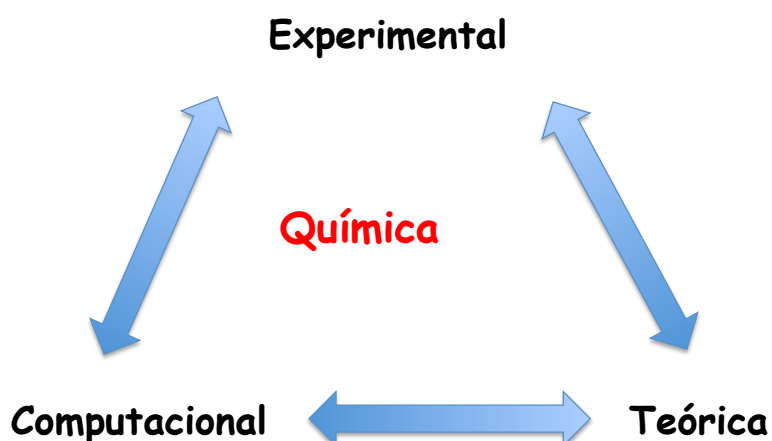


<http://www.losavancesdelaquimica.com/>  
<http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/>

# La Química del futuro



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



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

## La Química actual: de *entre la Física y la Biología* a *entre la Biomedicina y la Ciencia de los Materiales*.

La Química del futuro:

- Los fundamentos de la Química.
- Desarrollos en investigación básica.
- Procesos químicos más eficientes, más verdes/sostenibles.
- Satisfacer las necesidades de la sociedad.
- Oportunidades de investigación en Química.



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

Para alcanzar estos objetivos necesitaremos  
herramientas teóricas que permitan:

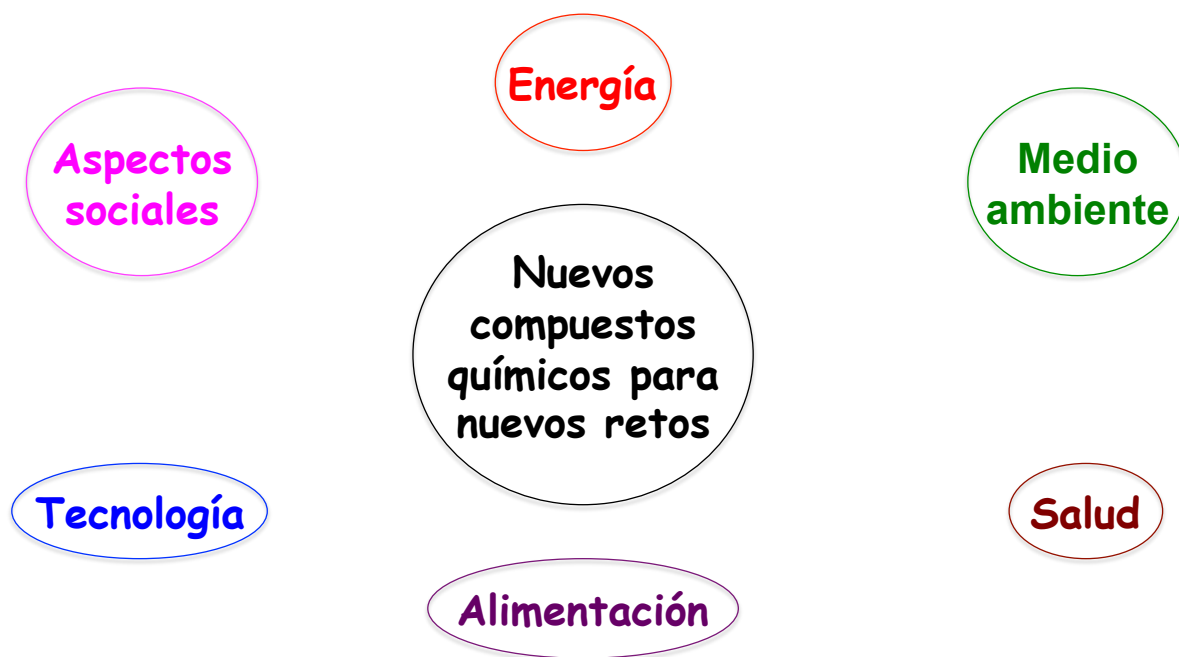
Predecir resultados  
Interpretar resultados

**EL PAPEL DE LAS MATEMÁTICAS SERÁ  
FUNDAMENTAL**



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

# La Química del futuro



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

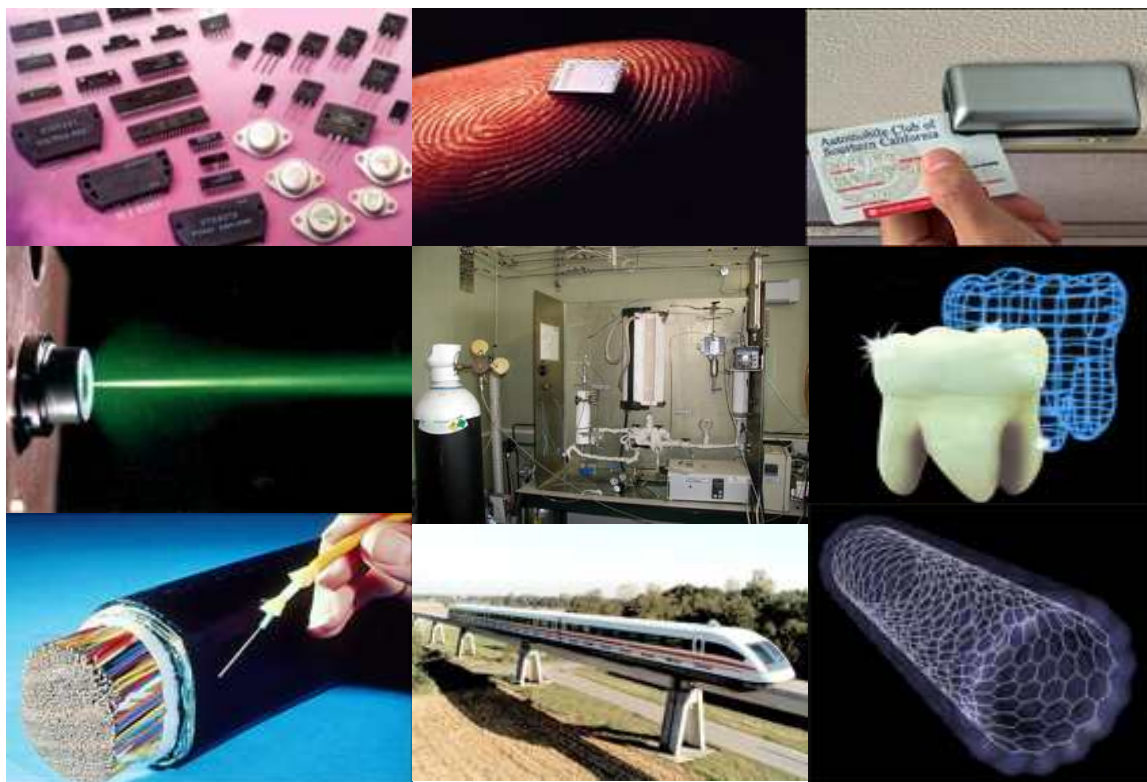
**Dependeremos de procesos y materiales  
(formados por moléculas) adecuados**

**LA QUÍMICA Y LOS MATERIALES DEL "FUTURO"**



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

## Nuevos Materiales (s. XXI)



### Aportaciones de la Química a la ciencia de los materiales. El futuro ya está aquí.

- Máquinas moleculares
- Nanociencia/nanotecnología
- Equipos pequeños para monitorización (ambiental, salud, etc.)
- Electrónica molecular
- Interruptores moleculares (en electrónica o en computación)
- Ordenadores moleculares
- Nanocápsulas para transporte de fármacos
- Biomateriales: inertes biológicamente o que se integren en el tejido (funcionales)
- Purificación y potabilización de agua



## **Aportaciones de la Química a la ciencia de los materiales. El futuro ya está aquí.**

- Cristales líquidos
  - Materiales con óptica no lineal
  - Diodos emisores de luz
  - Antenas de luz (conversión de energía lumínica en química, centros fotosintéticos artificiales)
  - Materiales quimioluminiscentes
  - Almacenamiento y transporte de hidrógeno
  - Almacenamiento de energía eléctrica
  - Producción eficiente de energía (con el menor impacto medioambiental)
  - Convertidores de energía (química/lumínica/eléctrica).
- ..... y miles de aplicaciones más



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

## **Aportaciones de la Química a la ciencia de los materiales. El futuro ya está aquí.**

**Y todo esto, de manera eficaz:**

**Con el mínimo impacto ambiental**

**Con el mayor aprovechamiento energético**

**Lo más barato posible**

**Química verde/Química sostenible**



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

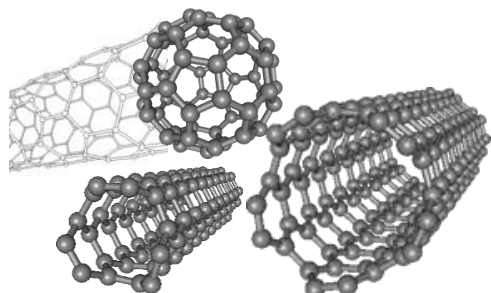
# Nanociencia y nanotecnología: Fullerenos y nanotubos de carbono

## Propiedades

**Eléctricas:** Semiconductores o Superconductores

**Mecánicas:** Son muy resistentes a la tensión y presentan una elevada elasticidad

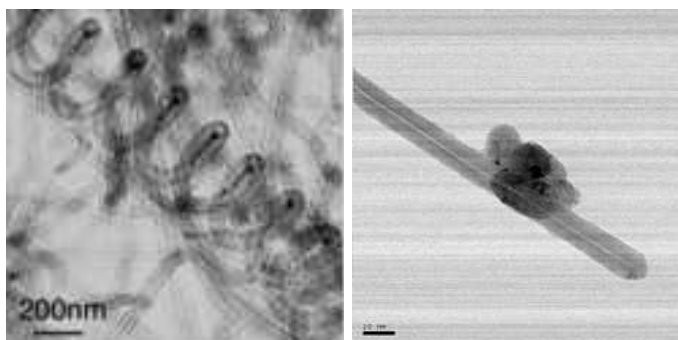
**Térmicas:** Buenos conductores térmicos a lo largo del tubo y aislantes a través de la pared



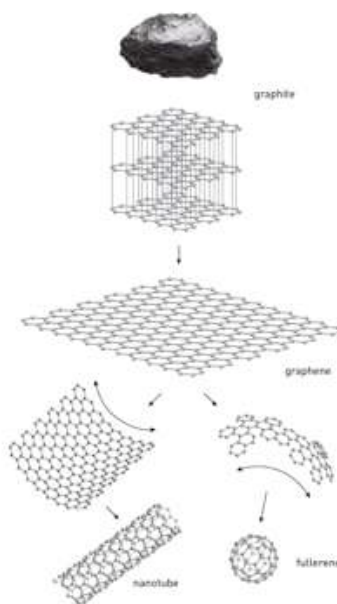
## Aplicaciones

Supercondensadores  
Células solares  
Almacenamiento de hidrógeno  
Electrónica  
Biomedicina  
Industria aeroespacial  
Agentes adsorbentes,...

Vista de nanotubos al microscopio electrónico



## PRODUCCIÓN DE GRAFENO Y RELACIÓN CON LOS NANOTUBOS DE CARBONO Y LOS FULLERENOS





## GRAFENO: CARÁCTERÍSTICAS Y APLICACIONES.

### Características:

- Alta resistencia mecánica (superior al acero)
- Alta conductividad eléctrica (superior al silicio)
- Alta conductividad térmica
- Ligereza
- Interacción con otras moléculas

### Aplicaciones:

- Fuselaje de aviones
- Procesadores para ordenadores
- Material electrónico
- Detectores de gases

Se están produciendo láminas de grafeno de tamaño macroscópico.

Investigación futura: explorar la reactividad química del grafeno para obtener derivados con otras propiedades y aplicaciones.

## Fullerenos



### Fullereno ( $C_{60}$ )

Molécula formada por átomos de carbono en la que los átomos están dispuestos sobre una esfera formada por pentágonos y hexágonos; por lo tanto,  $C_{60}$  tiene exactamente 12 pentágonos.

Propiedades de los fullerenos: ¿Aromaticidad? ¿Grado de aromaticidad?, curvatura/planaridad, orbitales, reactividad.

Derivados de fullerenos: síntesis, reactividad.

### Generalización:

¿Qué fullerenos son posibles si un fullereno es un mapa finito con vértices trivalentes con solo caras pentagonales y hexagonales incrustadas en cualquier superficie? ¿Qué propiedades tendrán?

Problemas de topología a resolver por los matemáticos.

Aplicables a otras nanoformas del carbono.

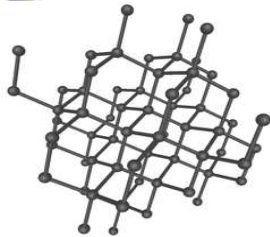
Estado físico: dependiente de las interacciones entre moléculas.

● Carbono (C)

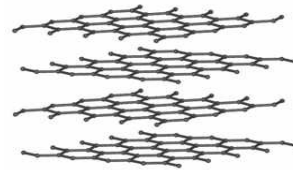
**CARBÓN ACTIVO (C)**



**Diamante**



**Grafito**



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

## Cristalografía. Difracción de rayos X.



**Roentgen**  
Premio Nobel  
Física, 1901



**von Laue**  
Premio Nobel  
Física, 1914



**W. H. Bragg**  
Premio Nobel  
Física, 1915



**W. L. Bragg**  
Premio Nobel  
Física, 1915

**Transformada de Fourier**  
**Simetría**  
**Teoría de grupos**



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

## Cristalografía



Herbert A. Hauptman

Premio Nobel de Química (1985)

Desarrollo de métodos directos para resolver estructuras cristalinas.

Matemático.

Colaboración con Jerome Karle (químico físico).



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

## Simetría

Cristalografía

Química cuántica y computacional

Espectroscopía

Estructura química

Complejos de metales de transición. Teoría del campo cristalino.

Orbitales

Síntesis orgánica



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

La simetría: un concepto útil en Química orgánica ('el mundo de lo asimétrico') y poco explotado.



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

## LA QUÍMICA DEL FUTURO: DESARROLLOS EN INVESTIGACIÓN BÁSICA

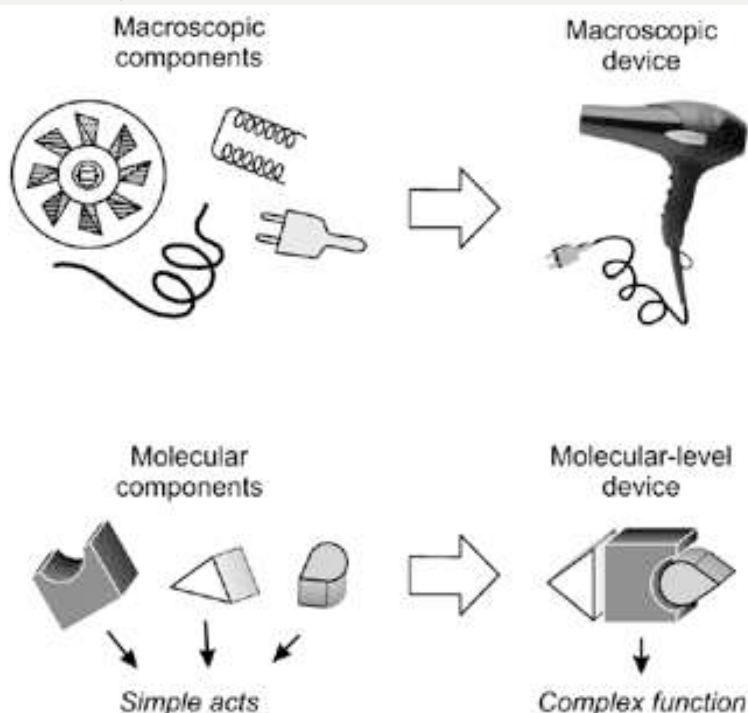
### QUÍMICA SUPRAMOLECULAR/RECONOCIMIENTO MOLECULAR:

Cómo las moléculas interaccionan entre sí para dar lugar a la materia, y las implicaciones que tienen en las propiedades de la materia.



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

## Química supramolecular/reconocimiento molecular



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

### Sensores diferenciales

Inspirados por los sentidos del olfato y del gusto de los mamíferos.

Narices y lenguas electrónicas

Polímeros, *composites*, nanopartículas, complejos metálicos, péptidos.

Fundamental: conceptos en química supramolecular/reconocimiento molecular.

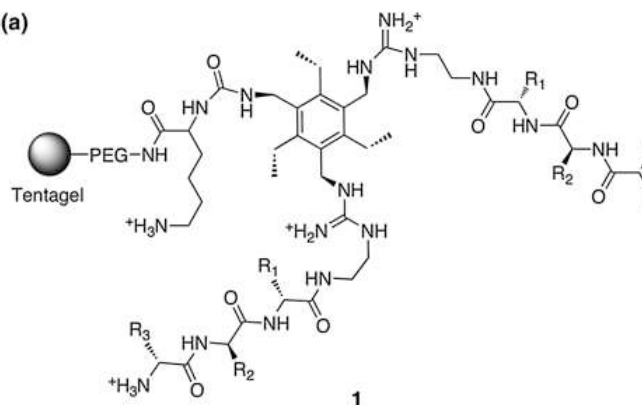
Aplicaciones: bioanalitos, explosivos, drogas, etc.

*Current Opinion Chemical Biology* 2010, 14, 683

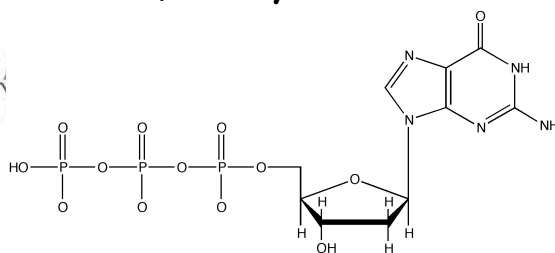


<http://www.losavancesdelaquimica.com/>  
<http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/>

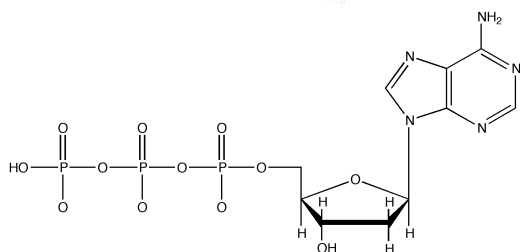
(a)



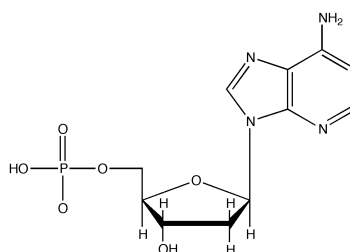
Sensor para diferenciar GTP, ATP y AMP.



GTP



ATP

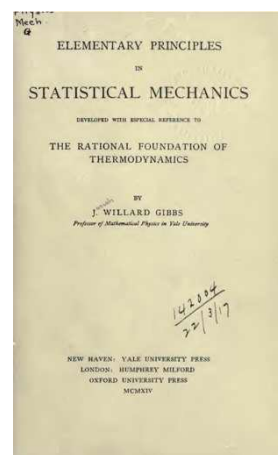
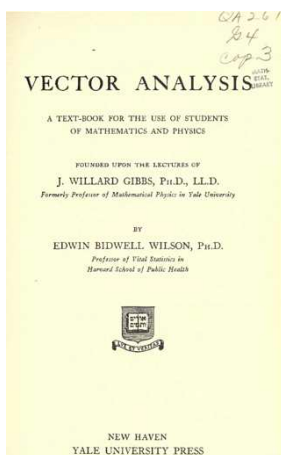


AMP



<http://www.losavancesde-la-quimica.com/>  
<http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/>

## Josiah Willard Gibbs (1839-1903): Un ejemplo de las aplicaciones de las matemáticas



$$\left(\frac{\partial(G/T)}{\partial T}\right)_p = -\frac{H}{T^2}$$

Matemático, inventor del análisis vectorial (simultáneo a Heaviside), fundamentos de la termodinámica química y de la química física.



<http://www.losavancesde-la-quimica.com/>  
<http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/>



## Aportaciones esperables de las matemáticas a la química

**Química cuántica.** **Conceptos fundamentales:**  
Orbitales, enlace, cargas (densidad electrónica), aromaticidad, efectos relativistas, electronegatividad, otras propiedades periódicas.

**Química computacional** **Quimioinformática, química modelo (Model chemistry), estructura, propiedades:**  
Relaciones estructura-propiedad, cribado virtual, diseño de materiales, dinámica de reacciones, similitud (semejanza) molecular.

**Estructura:** Simbolismo, representación (fórmulas y reactividad), simetría, relaciones topológicas, teoría de grupos, grafos, cristalografía, espectroscopía, etc.

**Modelización de comportamiento químico:** Cinética, ingeniería, medio ambiente, química analítica, análisis de datos, etc.

**Herramientas de cálculo elemental:** estequiometría, rendimientos, etc.



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

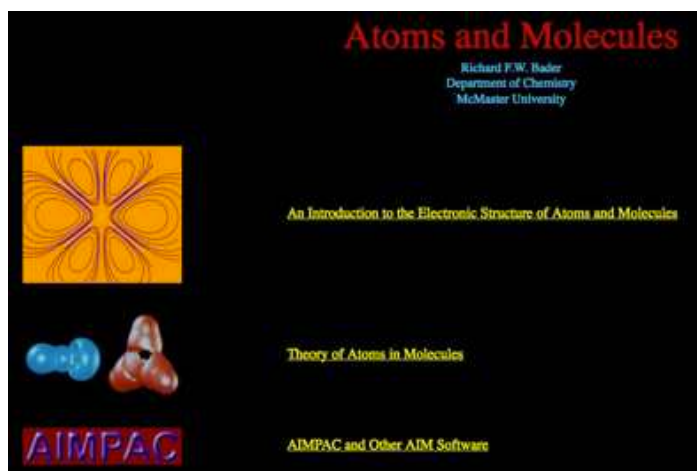


**John Pople (1925-2004)**  
**Premio Nobel de Química (1998)**  
**Matemático.**  
**Desarrollos en química cuántica y computacional**  
**Algoritmos de cálculo.**  
**Gaussian**



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

Richard Bader  
AIM



Análisis de la topología de la distribución de carga de una molécula. Conceptos químicos: átomo en una molécula, enlace, grupo funcional (Bader).

Extensión (matemática) de la teoría VSEPR (*valence shell electron pair repulsion*) que permite predecir la forma de las moléculas a partir del análisis de la minimización de la repulsión electrónica en una molécula (Gillespie)

<http://www.chemistry.mcmaster.ca/aim/>

## Redes neuronales

Algoritmos matemáticos que permiten analizar y clasificar gran número de datos, identificando patrones; a través de un proceso de aprendizaje que imita el funcionamiento del cerebro.

No es necesario establecer un modelo *a priori* como ocurre con otros métodos estadísticos o de relación estructura-propiedad.

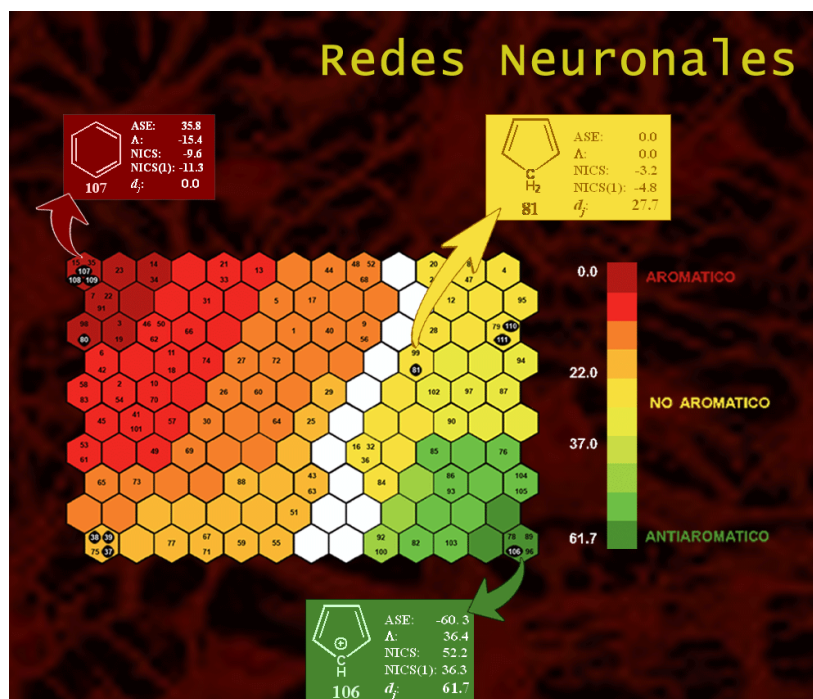
Pueden ser supervisados o no supervisados, según se quieran ajustar los datos a unos resultados o no.

Se puede variar la arquitectura y topología de la red.

Aplicaciones: ingeniería, meteorología, ciencias sociales, etc. Aún poco uso en Química.

La mayoría de los químicos lo usamos como una *caja negra*.

## Aromaticidad a través de redes neuronales



Alonso y Herradón (IQOG-CSIC)

Hacia la *matematización* de la estructura química:

Conectividad  
Geometría  
Conformaciones  
Estereoquímica

Teoría de grupos  
Grafos  
Topología  
Fractales  
Álgebra  
Lógica difusa

## THE PIONEERING CONTRIBUTIONS OF CAYLEY AND SYLVESTER TO THE MATHEMATICAL DESCRIPTION OF CHEMICAL STRUCTURE

ER BUNYAT

Department of Chemistry, University of Georgia, Athens, GA 30602 U.S.A.

(Received 12 June 1987)

### ABSTRACT

The foundations of modern chemical graph theory were laid by the pioneering work of the mathematicians Arthur Cayley (1821-95) and James Sylvester (1814-97). In attempting to characterize chemical structures in purely mathematical terms, they established that an isomorphism exists between the structures of individual chemical molecules and nonisomorphic graphs. They thereby first demonstrated the relevance of the graph to the chemical context. Cayley made use of graphs in the enumeration of constitutional isomers for the alkanes and other homologous series, whereas Sylvester employed graphs for both the depiction of molecules and the derivation of polynomial expressions thought to be characteristic of chemical structures. The long-term impact of their work is yet seen to have been substantial. In particular, recent papers have witnessed a dramatic growth in the various applications of chemical graph theory. Papers exploring the concepts of the chemical graph are currently appearing at the rate of almost 100 per annum.



<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**

Para explicar mejor los resultados pasados  
y predecir los futuros

¿Necesitan los matemáticos la química?  
¿Puede la Química proporcionar problemas interesantes  
para las Matemáticas?

Se deben reforzar los vínculos entre Química  
y Matemáticas, desde la época universitaria.