

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/>

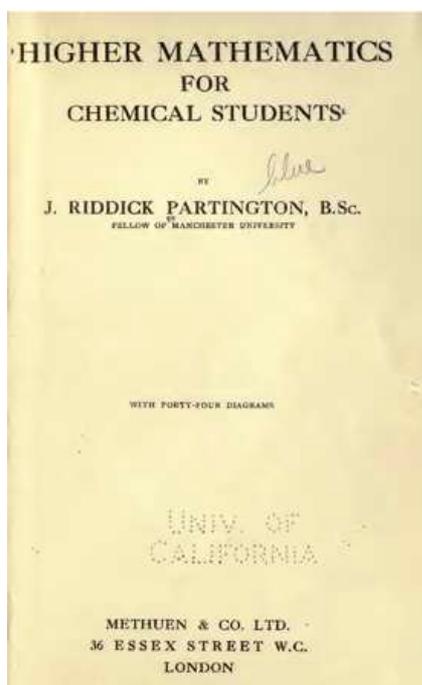
<http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/>

¿Qué enseñan los libros de matemáticas para químicos?



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

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

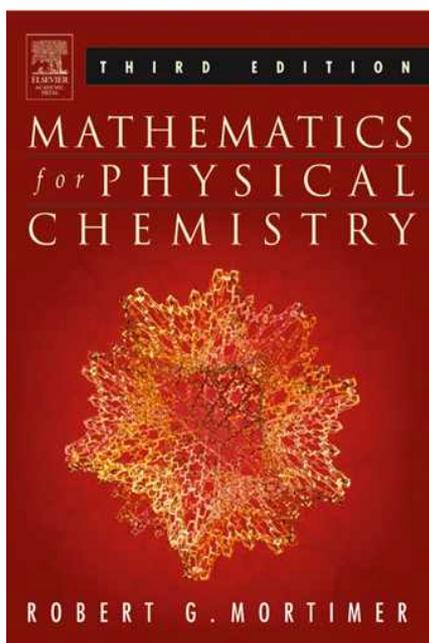


Partington (1911)

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



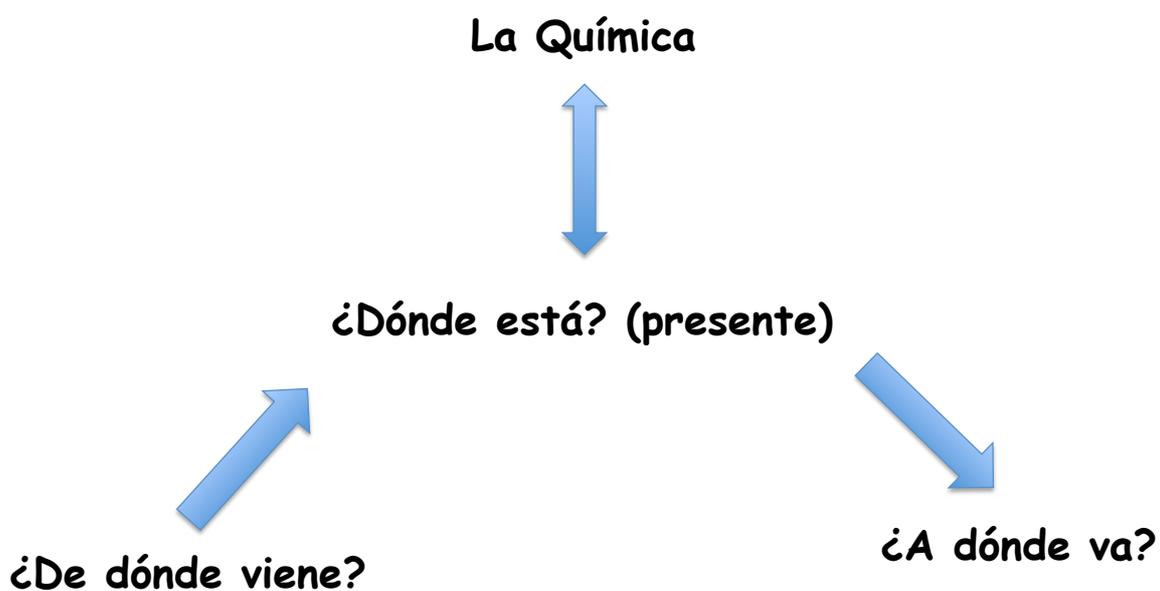
Mortimer (2005)

- 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

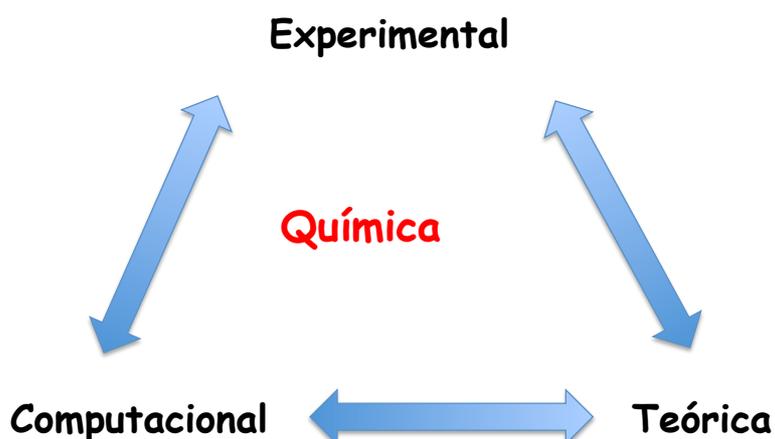


<http://www.losavancesde-la-quimica.com/>
<http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/>

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:

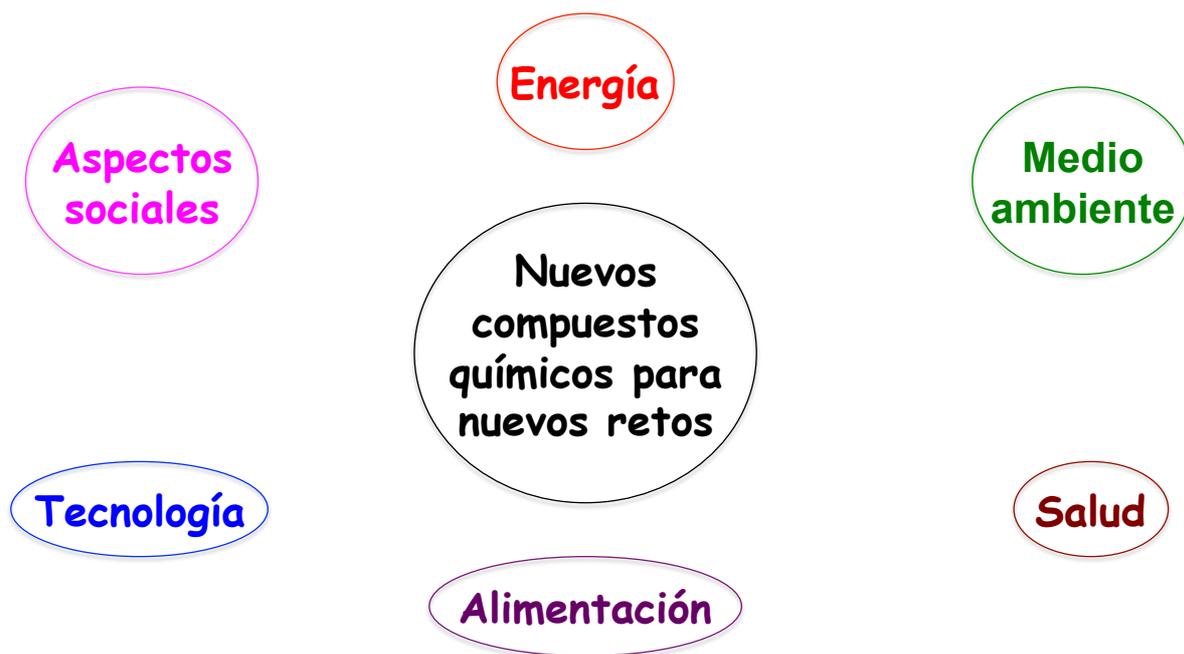
Predecir resultados
Interpretar resultados

**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/>

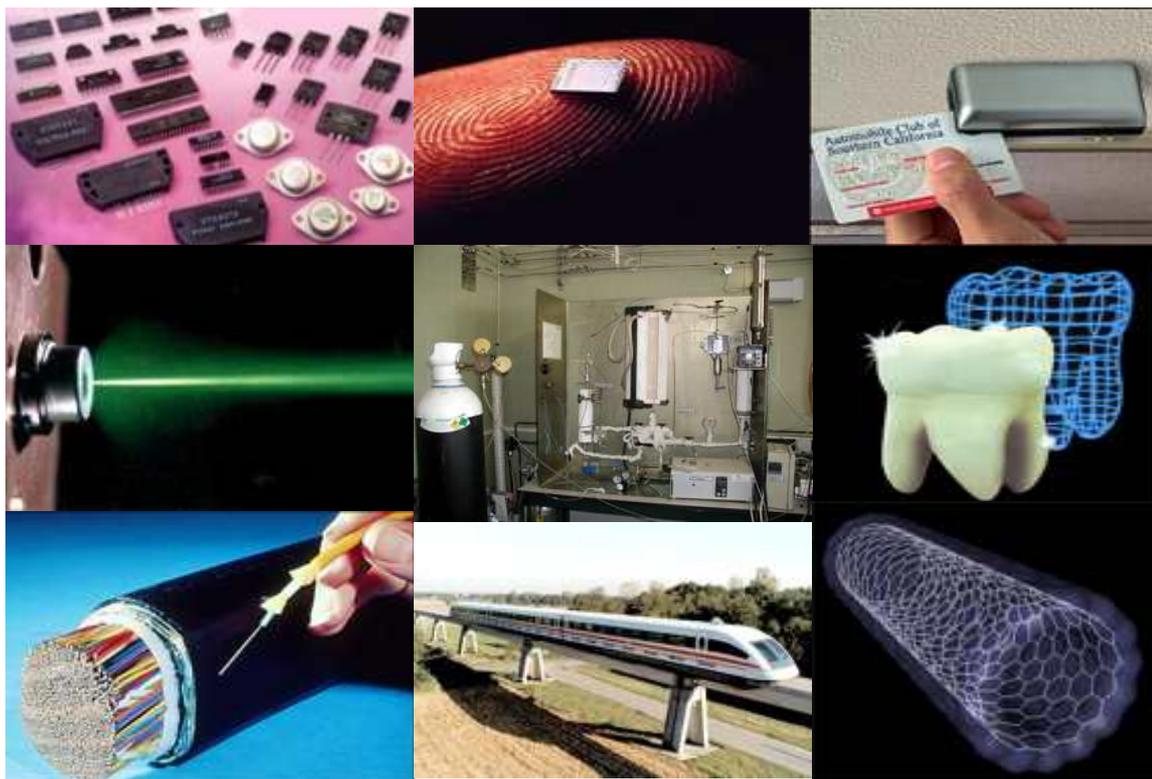
**Dependeremos de procesos y materiales
(formados por moléculas) adecuados**

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/>

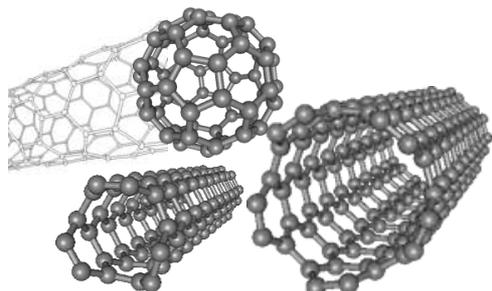
Nanociencia y nanotecnología: Fullerenos y nanotubos de carbono

Propiedades

Eléctricas: Semiconductores o Superconductores

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

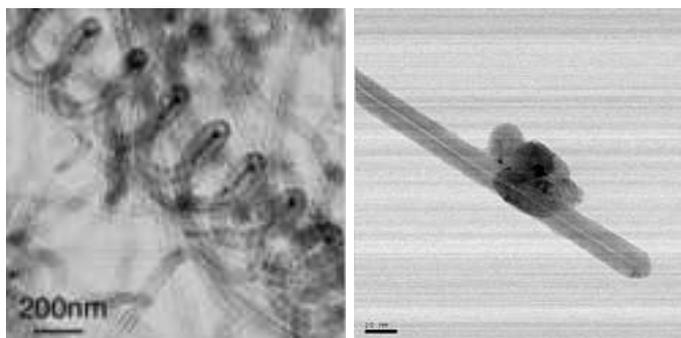
Térmicas: Buenos conductores térmicos a lo largo del tubo y aislantes a través de la pared



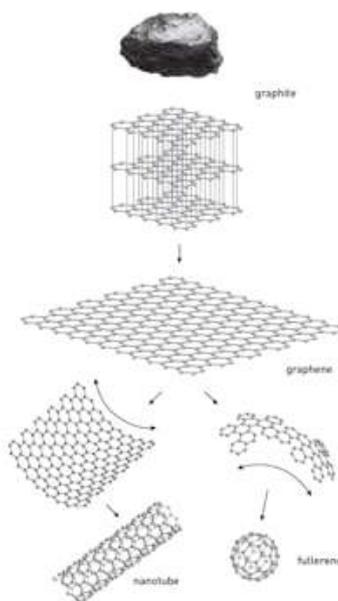
Aplicaciones

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.

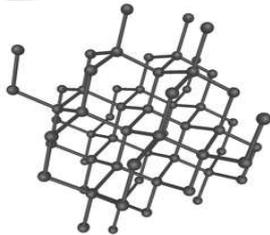
Estado físico: dependiente de las interacciones entre moléculas.

 Carbono (C)

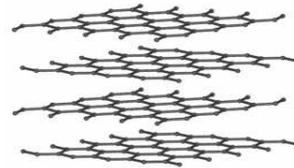
CARBÓN ACTIVO (C)



Diamante



Grafito



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

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

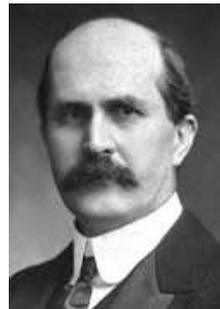
Cristalografía. Difracción de rayos X.



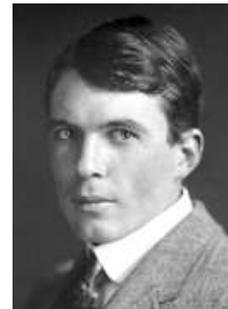
Roentgen
Premio Nobel
Física, 1901



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.

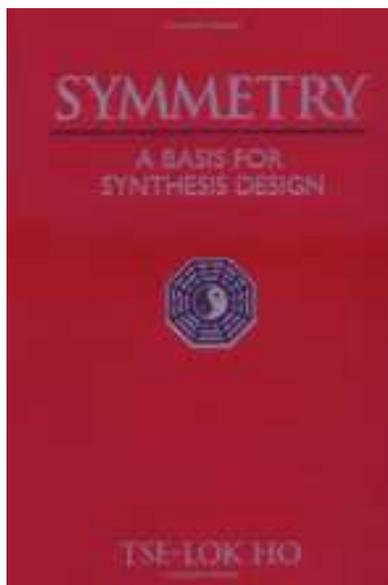
Orbitales

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

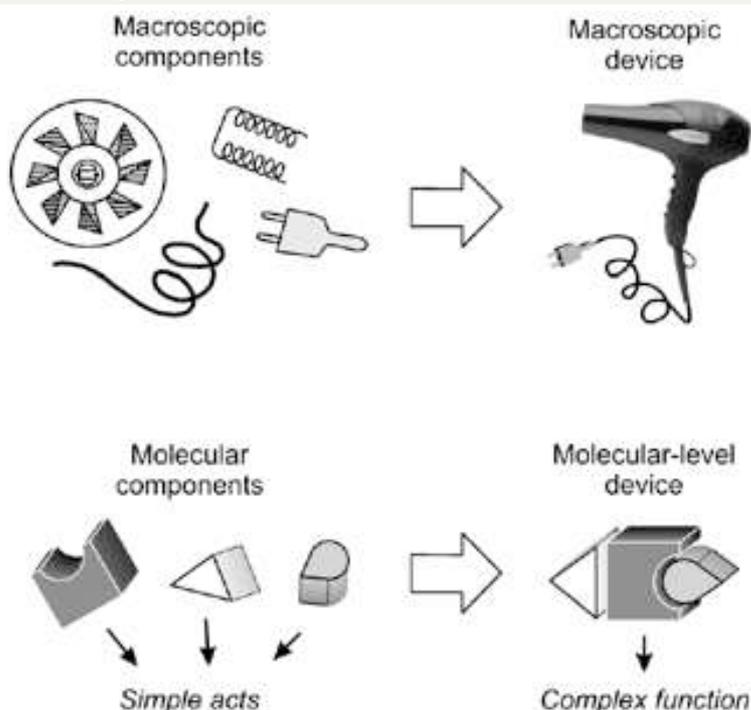
QUÍMICA SUPRAMOLECULAR/RECONOCIMIENTO MOLECULAR:

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.

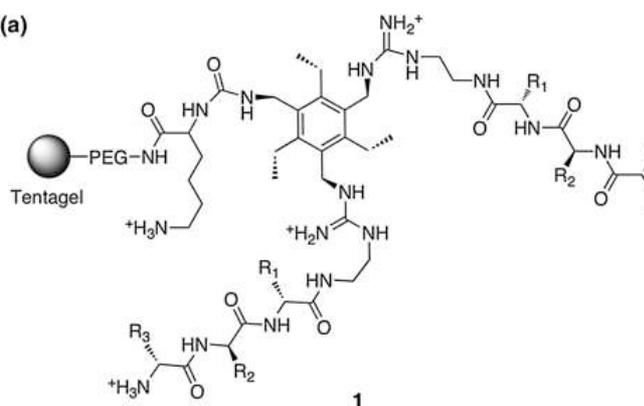
Aplicaciones: bioanalitos, explosivos, drogas, etc.

Current Opinion Chemical Biology 2010, 14, 683

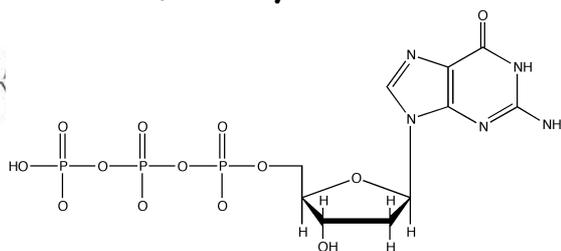


<http://www.losavancesdelaquimica.com/>
<http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/>

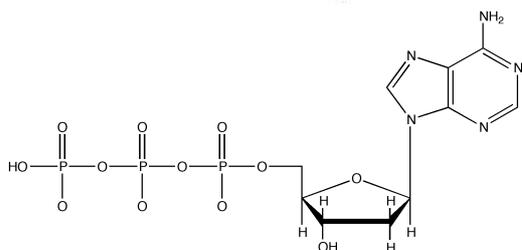
(a)



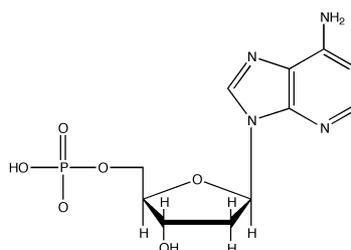
Sensor para diferenciar GTP, ATP y AMP.



GTP



ATP

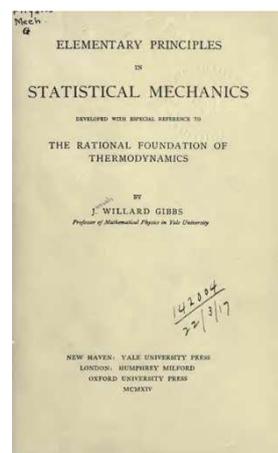
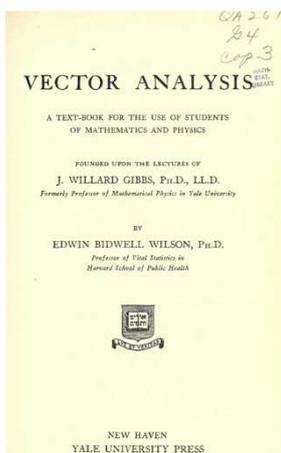


AMP



<http://www.losavancesdequimica.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.losavancesdequimica.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.

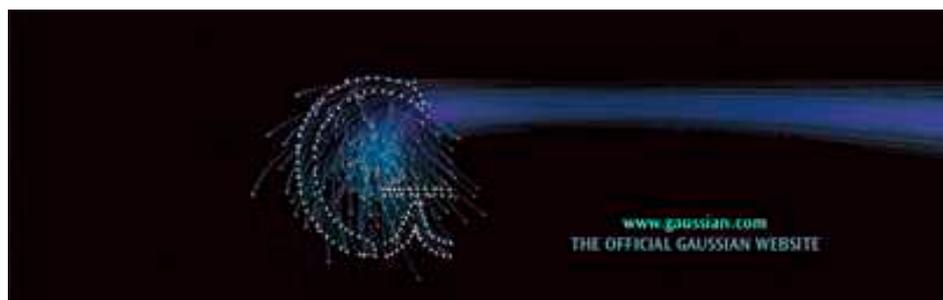
Herramientas de cálculo elemental: estequiometría, rendimientos, etc.



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

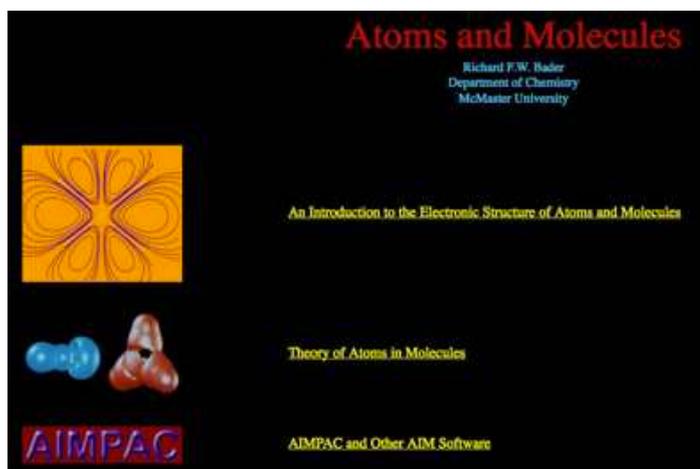


John Pople (1925-2004)
Premio Nobel de Química (1998)
Matemático.
Desarrollos en química cuántica y computacional
Algoritmos de cálculo.
Gaussian



<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.

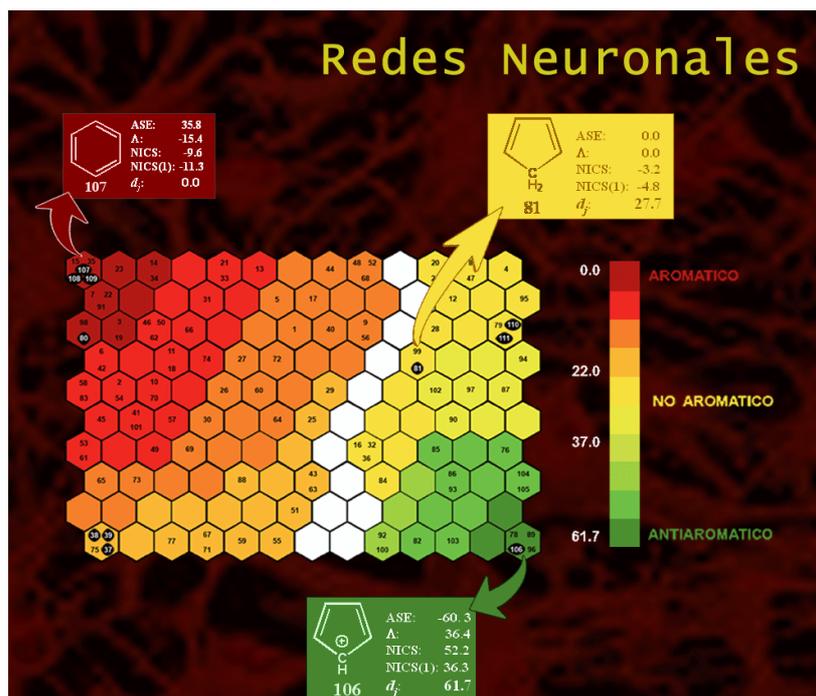
Pueden ser supervisados o no supervisados, según se quieran ajustar los datos a unos resultados o no.

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

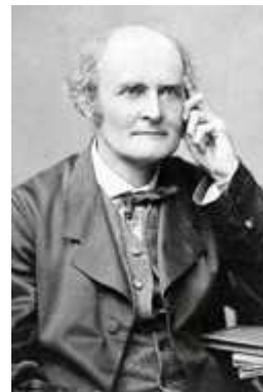
ER BUNYAT

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 structure of individual chemical molecules and corresponding 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 reviewed 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.